Детерминированный хаос

Изв.вузов «ПНД», т.3, № 3, 1995 УДК 519.217

ДИНАМИЧЕСКИЙ ХАОС В СИСТЕМЕ С МАРКОВСКИМИ ОТОБРАЖЕНИЯМИ И ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫЙ ХАРАКТЕР ВЫХОДА ИЗ МЕТАСТАБИЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ

Р.Л. Стратонович

Рассмотрена динамическая теория флуктуационного выхода из метастабильного состояния, которую можно противопоставить известной диффузионной теории, основанной на марковской теории достижения границ. Динамическая теория применима в том случае, когда случайные воздействия не входят в динамические уравнения, но уравнения таковы, что имеется динамический хаос (если отсутствует утечка фазовых точек). Показано, что закон выхода из метастабильного состояния является экспоненциальным. Найдено среднее время жизни и квазистационарное распределение вероятности. В качестве примера рассмотрен осциллятор с отрицательным затуханием и демпфирующими толчками. Значения параметров взяты такими, что имеет место долгоживущее метастабильное состояние.

В пионерской работе Крамерса [1] самопроизвольный распад молекулы трактуется как обусловленный флуктуациями выход из потенциальной ямы. При этом флуктуационные воздействия $\xi_\alpha(t)$ в стохастических уравнениях

$$\dot{x}_\alpha = f_\alpha(x) + \xi_\alpha(t), \qquad \alpha=1,\dots, r \tag{1}$$

считаются дельта-коррелированными. В этом приближении процесс является диффузионным марковским, а к процессу выхода из потенциальной ямы применима марковская теория достижения границ [2, 3]. В этой теории удается доказать экспоненциальный характер самопроизвольного распада.

Нужно отметить, однако, что применение уравнения (1) к проблеме самопроизвольного распада сложной молекулы вызывает сомнения. Неясно, чем порождены случайные воздействия $\xi_\alpha(t)$. Если они являются следствием взаимодействия выделенной молекулы с окружающими молекулами, то ее распад не является самопроизвольным. Если $\xi_\alpha(t)$ порождены прочими степенями свободы $y_1,\dots,y_m$ молекулы, то, строго говоря, вместо (1) имеем

$$\dot{x}_\alpha = f_\alpha(x) + \xi_\alpha(x(t), y(t)), \tag{2}$$

$$\dot{y}_\sigma = F_\sigma(x, y). \tag{3}$$

Уединенная молекула имеет конечное число степеней свободы и поэтому ξ_a не могут быть строго дельта-коррелированными [4]. Кроме того, случайные воздействия ξ_α не могут быть инновационными. Строго говоря, при этом следовало бы рассматривать совместную систему уравнений (2), (3), определяющую процесс $\{x(t), y(t)\}$. Уравнения же (1) недостаточно.

В данной работе мы рассмотрим механизм экспоненциального распада, не основанный на внешних случайных воздействиях. В нашей теории существенно, что достаточно небольшой модификации метастабильной системы, из которой возможен выход, чтобы получить стабильную систему и наоборот. При такой модификации приобретение или потеря свойства стабильности происходит без резкого изменения уравнений движения. Мы предполагаем уравнения движения такими, что в стабильной системе имеется динамический хаос. Тогда в соответствующей метастабильной системе возможен экспоненциальный распад или хотя бы процесс, имитирующий таковой, если время жизни достаточно велико по сравнению с постоянной времени установления квазистационарного распределения (или стационарного в соответствующей системе без утечки фазовых точек). Условие большого времени жизни, то есть малой утечки фазовых точек аналогично известному условию большой высоты потенциального барьера по сравнению с kT в теории Крамерса.

Отметим, что при уравнениях движения, не дающих динамический хаос, нет экспоненциального распада метастабильного состояния. Только при динамическом хаосе в случае, описываемом уравнениями (2), (3), к конечной системе приближенно применимы результаты статистической физики, определяющие статистические свойства случайных воздействий $\xi_\alpha(t)$ в (1). Иначе теория Крамерса становится неприменимой.

Чтобы показать теоретически возможность экспоненциального распада при отсутствии случайных воздействий извне, рассмотрим негамильтонов случай. Пусть движение в фазовом пространстве таково, что за время T_0 имеет место марковское кусочно-линейное отображение

$$x' = F(x) \tag{4}$$

пространства состояний в себя. Здесь $x = (x_1, ..., x_r)$, $x = x(t)$, $x' = x(t+T_0)$.

Начнем с того случая, когда распад отсутствует, то есть отсутствует выход изображающей точки за область $\mathfrak{R}$ стабильных состояний. Предположим, что (4) осуществляет марковское кусочно-линейное отображение области $\mathfrak{R}$ в себя. Это значит, что область стабильности $\mathfrak{R}$ можно разбить на подобласти $\{\mathfrak{R}_j\}$ таким образом, что при отображении каждая подобласть $\mathfrak{R}_j$ переходит в одну или несколько подобластей $\mathfrak{R}_{\alpha_{j1}}, ..., \mathfrak{R}_{\alpha_{jnj}}$ $(n_j \geq 1)$, причем это отображение

$$\mathfrak{R}_j \to \mathfrak{R}_j' = \Sigma_{i=1}^{n_j} \mathfrak{R}_{\alpha_{j\,i}} \tag{5}$$

происходит линейно. Вводя матрицу $d_{kj} = \Sigma_i \delta_{k,\alpha_{ji}}$, элементы которой равны нулю или единице ($d_{kj} = 1$, если переход из $\mathfrak{R}_j$ в $\mathfrak{R}_k$ возможен, и $d_{kj} = 0$ в противном случае), правую часть формулы (5) при любом j можно записать $\Sigma_k \mathfrak{R}_k d_{kj}$.

Обозначим через $V_j = |\mathfrak{R}_j|$ объем области $\mathfrak{R}_j$. В силу линейности отображения (5) нетрудно найти вероятности перехода $\mathrm{P}[\mathfrak{R}_{\alpha_{ji}} | \mathfrak{R}_j]$ из $\mathfrak{R}_j$ в каждую из подобластей $\mathfrak{R}_{\alpha_{j1}},...,\mathfrak{R}_{\alpha_{jnj}}$. При условии, что распределение в $\mathfrak{R}_j$ было равномерным, имеем

$$\mathrm{P}\,[\mathfrak{R}_{\alpha_{ji}} | \mathfrak{R}_j] = V_{a_{ji}} / \Sigma_{l=1}^{n_j} V_{\alpha_{jl}} \quad , \tag{6}$$

здесь j любое и i=1,...,n_j. Используя матрицу d_{kj}, формуле (6) можно придать вид

$$p_{kj} = \mathrm{P}[\mathfrak{R}_k \mid \mathfrak{R}_j] V_k d_{kj} / \Sigma_l V_l d_{lj}, \tag{7}$$

где k уже любое.

Пусть плотность вероятности в $\mathfrak{R}$ является кусочно-постоянной: $w(x)=p_j/V_j$ при $x \in \mathfrak{R}_j$. Здесь p_j - вероятность попадания в $\mathfrak{R}_j$. Преобразование распределения вероятности за время T_0 определяется формулой обычного вида

$$p_k[l+1] = \Sigma_j \, p_{kj} p_j[l], \tag{8}$$

где $p_j[l] = p_j[lT_0 + t_0]$ При этом условие стационарности распределения выражается уравнением

$$p_k^{\rm st} = \Sigma_j \, p_{kj} p_j^{\rm st}. \tag{9}$$

Пусть теперь возможен выход из области состояний $\mathfrak{R}$, причем вышедшая точка уже не возвращается в нее. Предположим, что каждая подобласть $\mathfrak{R}_j$ области $\mathfrak{R}$ линейно преобразуется в области $\mathfrak{R}_{\alpha_{j1}}{}^0,\ldots,\mathfrak{R}_{\alpha_{jn_j}}{}^0$, которые уже не обязаны целиком лежать в $\mathfrak{R}$. При этом та часть области $\mathfrak{R}_{\alpha_{ji}}{}^0$, которая находится в $\mathfrak{R}$, обозначается $\mathfrak{R}_{\alpha_{ji}}$, то есть $\mathfrak{R}_k = \mathfrak{R}_k{}^0 \cap \mathfrak{R}$. Далее пусть $V_k{}^0 = |\mathfrak{R}_k{}^0|$, $V_k = |\mathfrak{R}_k|$. Теперь будем иметь вместо (7)

$$p_{kj} = {\rm P}[\mathfrak{R}_k|\mathfrak{R}_j] = V_k d_{kj} / \Sigma_l \, V_l{}^0 d_{lj} \le V_k{}^0 d_{kj} / \Sigma_l \, V_l{}^0 d_{lj}\,.$$

Очевидно, что теперь

$$\Sigma_k \, p_{kj} \le 1, \tag{9a}$$

то есть условие сохранения вероятности $\Sigma_k p_{kj}=1$ не обязательно удовлетворяется при всех j. Поэтому из (9) уже не вытекает условие $\Sigma_k p_k{}^{\rm st} = 1$, если в (9а) имеет место знак «< » хотя бы при одном значении j, то есть стационарное распределение невозможно. Однако, вместо стационарного распределения теперь можно найти распределение вероятности $p_j{}^0$, сохраняющее форму при экспоненциальном убывании суммарной вероятности. Положив

$$p_j[l] = \Lambda^l p_j{}^0 = {\rm e}^{-\lambda l} p_j{}^0, \qquad \lambda = -\ln\Lambda \tag{10}$$

при $\Sigma_j p_j{}^0 = 1$, из уравнения (8) получаем

$$\Sigma_j p_{kj} p_j{}^0 = \Lambda p_k{}^0. \tag{11}$$

Отсюда можно найти Λ и $p_k{}^0$. Значение Λ_1 определяется как максимальное значение (только для максимального значения все $p_k{}^0 \ge 0$), при котором детерминант матрицы $\| \, p_{kj} - \Lambda\delta_{kj} \, \|$ обращается в нуль, то есть возможно нетривиальное решение $\{p_k{}^0\}$ уравнения (11). Проводя суммирование в (11) по k и учитывая, что $\Sigma_k p_k{}^0 = 1$, находим

$$\Lambda_1 = \Sigma_{kj} \, p_{kj} p_j{}^0 \le 1.$$

Эта величина меньше единицы, если хотя бы для одной подобласти $\mathfrak{R}_j$, имеющей ненулевую вероятность $p_j{}^0$, справедливо строгое неравенство $\Sigma_k \, p_{kj} < 1$. В этом случае, действительно, имеет место нестабильность.

Нетрудно понять, что среднее время жизни в рассмотренном случае определяется формулой

$$\tau_{\rm av} = T_0 / \ln(1/\Lambda_1). \tag{12}$$

Заметим также, что в случае стабильной системы средний коэффициент экспоненциального увеличения объема, рассчитанный на единицу времени, равен

$$\alpha_0 = \frac{1}{T_0} \Sigma_j p_j^{st} \ln(V_j^{-1} \Sigma_k V_k d_{kj}).$$

При этом можно показать, что коэффициент растяжения α не меньше этой величины. Он совпадает с α_0 для одномерного фазового пространства.

Нужно отметить, что в рассматриваемом случае при $\alpha_0 > 1$, когда имеется динамический хаос, отображение (4) не исключает возможности пересечения фазовых траекторий. Поэтому динамический хаос возможен в подобных системах при размерности фазового пространства меньше трех. Чтобы это пересечение было возможным, дифференциальные динамические уравнения движения должны быть нетрадиционными, скажем, содержать запаздывание

$$\dot{x}_\alpha(t) = f_\alpha(x(t-\Delta)), \ \Delta>0.$$

В качестве простого конкретного примера рассмотрим осциллятор с отрицательным затуханием и с демпфирующими толчками [5,6]. Его поведение описывается уравнением

$$\ddot{y} - 2\delta\dot{y} + (\omega_0^2 + \delta^2)y = -h\vartheta(\dot{y}_{-\varepsilon} - b)\dot{y}\delta(y), \tag{13}$$

где $\vartheta(z) = (1+\mathrm{sgn}\, z)/2$, $\dot{y}_{-\varepsilon} = \dot{y}(t - \varepsilon)$ обозначает запаздывание на весьма малую величину ε. Уравнение (13) означает, что справедливо уравнение

$$\ddot{y} - 2\delta\dot{y} + (\omega_0^2 + \delta^2)y = 0,$$

если $\dot{y} < b$. Если же $\dot{y} > b > 0$, то в момент прохождения точки $y = 0$ маятник испытывает толчок навстречу движению, который приводит к мгновенному уменьшению скорости $\dot{y}$ на $h > 0$, то есть к преобразованию $\dot{y} \to \dot{y} - h$.

При отсутствии толчков амплитуда колебаний экспоненциально увеличивается, причем за период $T_0 = 2\pi/\omega_0$ происходит увеличение амплитуды в $\gamma = e^{\delta T_0}$ раз. При наличии толчка имеет место такое отображение за период

$$x' = \begin{cases} \gamma x & \text{при } x < b/\gamma, \\ \gamma x - h & \text{при } x > b/\gamma, \end{cases} \tag{14}$$

где x и x' - значения скорости $\dot{y}$ немедленно после пересечения полупрямой $\dot{y} > 0$, $y = 0$, то есть после толчка, если он есть.

Разумеется, в случае преобразования (14) не при всех значениях параметров γ и h/b имеет место марковское отображение. Простейший марковский случай (им и ограничимся) мы получим, если положим $\gamma = \gamma_0 = (1+5^{1/2})/2$ (то есть $\gamma_0^2 - \gamma_0 - 1 = 0$) и $h/b = \gamma_0 - 1$. Тогда стационарная плотность вероятности $w(y,\dot{y})$ сосредоточена в области, которая заштрихована на рис. 1. В этой области происходит хаотическое осцилляционное движение. Стационарное же распределение переменной x сосредоточено на интервале (a,b), где $a = b - h$. Последний состоит из двух подинтервалов $\mathfrak{R}_1 = (a, \gamma_0 a)$ и $\mathfrak{R}_2 = (\gamma_0 a, b)$. При отображении (14) интервал $\mathfrak{R}_1$ переходит в $\mathfrak{R}_2$, а $\mathfrak{R}_2$ в $\mathfrak{R}_1 + \mathfrak{R}_2$ (рис.2).При этом интервал $\mathfrak{R}_2' = \mathfrak{R}$ разделяется на $\mathfrak{R}_1$ и $\mathfrak{R}_2$ в соотношении $1/\gamma_0$. Это позволяет без труда определить матрицу вероятности перехода (7)

$$p_{11}=0, \ p_{21}=1, \quad p_{12}=(\gamma_0+1)^{-1}=2-\gamma_0, \quad p_{22}=\gamma_0-1. \tag{15}$$

Произведем теперь малую деформацию с тем, чтобы появилась

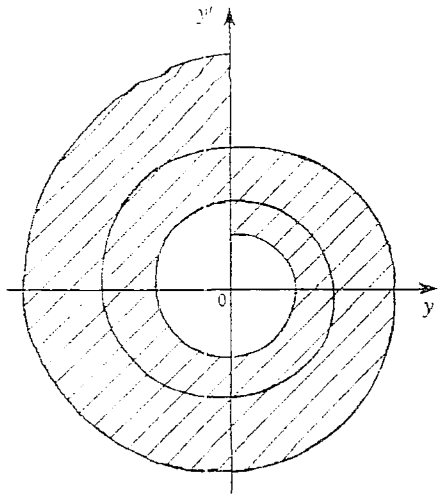


Рис. 1. Область фазового пространства, в которой лежат хаотические фазовые траектории ($\gamma=\gamma_0$)

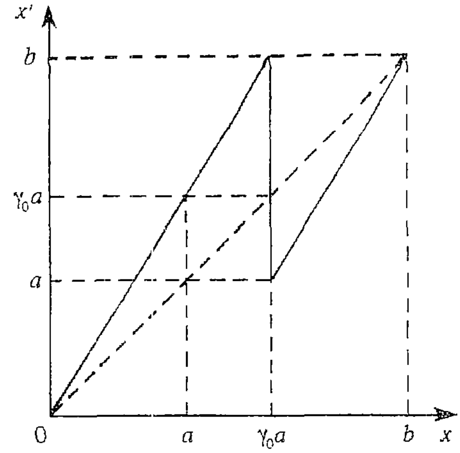


Рис. 2. Простой пример марковского отображения

нестабильность. Возьмем несколько большее значение δ и $\gamma=\gamma_0+\varepsilon$ ($\varepsilon>0$). При этом положим $h=(1-\gamma^{-2})b$, так что отображение за период будет иметь вид

$$x'=\begin{cases}\gamma x & \text{при } x<b/\gamma,\\ \gamma x-(1-\gamma^{-2})b & \text{при } x>b/\gamma.\end{cases}$$

Это отображение при $\gamma=\gamma_0+\varepsilon$ показано на рис. 3. Оно переводит интервал $\mathfrak{R}_1=(b/\gamma^3, b/\gamma)$ в $\mathfrak{R}_2=(b/\gamma, b)$, а интервал $\mathfrak{R}_2$ в $\mathfrak{R}_1+\mathfrak{R}_2^0$, где $\mathfrak{R}_2^0=(b/\gamma, (\gamma+\gamma^{-2}-1)b)$. Точки, попавшие на интервал $(b, (\gamma+\gamma^{-2}-1)b)$, уже не возвращаются, а уходят в бесконечность. Здесь $\gamma+\gamma^{-2}-1 = 1+(7-4\gamma_0)\varepsilon+O(\varepsilon^2) = 1+(5-20^{1/2})\varepsilon+O(\varepsilon^2)$. Теперь в отличие от (15) будем иметь

$$p_{11}=0,\ p_{21}=1,\ p_{12}=\gamma^{-2}=2-\gamma_0-2\gamma_0^{-3}\varepsilon+O(\varepsilon^2),$$

$$p_{22}=\gamma^{-1}=\gamma_0^{-1}-\gamma_0^{-2}\varepsilon+O(\varepsilon^2).$$

Тогда максимальный корень Λ_1 уравнения $\|p_{kj}-\Lambda\delta_{kj}\|$ будет таков:

$$\Lambda_1=1-(\gamma_0-1)\varepsilon+O(\varepsilon^2).$$

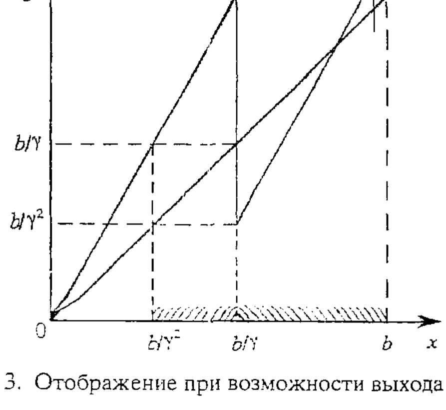


Рис. 3. Отображение при возможности выхода

Учитывая также второй корень Λ_2, распределение $p_j[l]$ можно записать

$$p_j[l]=\Lambda_1^l p_j^0+\Lambda_2^l\tilde{p}_j^0.$$

Когда второй член в правой части практически исчезнет по сравнению с первым, получим простую экспоненциальную зависимость (10). Тем самым в данном примере экспоненциальный распад действительно имеет место, причем согласно (12) среднее время жизни равно $\tau_{av}=\gamma_0 T_0/\varepsilon$.

В заключение нужно отметить, что марковские преобразования (8) для вероятностей, дающие экспоненциальный закон распада, можно получить и в гамильтоновом случае как приближенные, если дискретизировать время и разбить фазовое пространство на элементарные ячейки $\{\mathfrak{R}_j\}$. При этом вероятности перехода p_{kj} по-прежнему определяются как та доля фазового объема, которая при преобразовании (4) попадает в $\mathfrak{R}_k$, то есть $p_{kj} = |\mathfrak{R}_k \cap \mathfrak{R}_j'| / |\mathfrak{R}_j'|$. Здесь $\mathfrak{R}_j' = T\mathfrak{R}_j$ - область, в которую переходит $\mathfrak{R}_j$ за один шаг.

Данное исследование частично финансировано грантом ND 1000 Международного научного фонда и грантом ND 1300 Международного научного фонда и Российского правительства.

Библиографический список

1. *Kramers H.A.* Brownian motion in the field of the force and the diffusional model of chemical reactions // Physica. 1940.Vol. 7. P. 284.
2. *Понтрягин А., Андронов А., Витт А.* О статистическом рассмотрении динамических систем // ЖЭТФ. 1933. Т. 3. С. 165.
3. *Стратонович Р.Л.* Избранные вопросы теории флуктуаций в радиотехнике. М.: Сов.Радио, 1961. С.76.
4. *Stratonovich R.L.* From Microscopic Reversibility to Macroscopic Irreversibility // Z.Phys. Chem. 1991. Vol. 170. P. 207.
5. *Неймарк Ю.И., Ланда П.С.* Стохастические и хаотические колебания. М.: Наука, 1987. С. 69.
6. *Стратонович Р.Л., Рузмайкина А.А., Чичигина О.А.* Динамический хаос в осцилляторе с отрицательным трением. Аномальный режим // Изв. вузов. Радиофизика. 1993. Т. 36. С. 892.

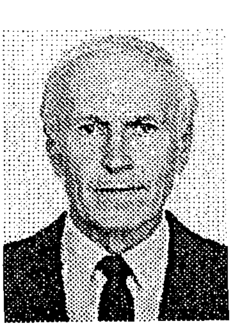
Московский государственный университет

Поступила в редакцию 02.02.95
после переработки 25.07.95

THE DYNAMIC CHAOS IN A SYSTEM WITH THE MARKOV MAPPING AND THE EXPONENTIAL LAW OF EXIT FROM METASTABLE STATE

R.L. Stratonovich

The special kind of the metastable state and the fluctuational exit from it are considered. The process in the system is near to the auto-stochastic process (the dynamic chaos) described by extending the Markov mapping if life-time of the state is great. It is shown that the exit law is exponential. Thus the process of the metastable state exit is another example of the exponential exit along with the potential well exit considered in the diffusional Markov exit theory.



Стратонович Руслан Леонтьевич - родился в 1930 году в Москве. Окончил физический факультет Московского государственного университета (1953). После окончания аспирантуры при физическом факультете МГУ работает там же. Защитил диссертацию на соискание звания кандидата физико-математических наук в области теории флуктуаций (1956), а также докторскую диссертацию (1965), посвященную условным марковским процессам и оптимальной нелинейной фильтрации. Автор монографий «Избранные вопросы теории флуктуаций в радиотехнике», «Условные марковские процессы и их применение к теории оптимального управления», «Принципы адаптивного приема», «Теория информации» и «Нелинейная неравновесная термодинамика». Опубликовал большое число научных статей по вышеуказанным направлениям. Лауреат Ломоносовской премии МГУ, Лауреат Государственной премии СССР, Заслуженный профессор МГУ.