01;03

Эффект ускорения диффузии броуновских частиц вдоль короткопериодного в пространстве быстрого случайного поля

© *А.Н. Малахов*

Нижегородский государственный университет

Поступило в Редакцию 21 апреля 1998 г.

Показано, что быстро флуктуирующее около нуля периодическое в пространстве случайное поле с достаточно малым пространственным периодом может существенно ускорить процесс диффузии броуновских частиц вдоль этого поля.

Общеизвестно диффузионное расплывание среднего квадрата координаты $x(t)$ броуновской частицы $\langle x^2 \rangle = 2Dt$ при свободной диффузии в вязкой среде вдоль оси x и при нулевых начальных условиях. Коэффициент диффузии D определяет скорость расплывания во времени гауссовой плотности вероятности $W(x,t)$ с нулевым средним значением и дисперсией $\langle x^2 \rangle$. Соответствующее уравнение Ланжевена имеет вид $dx(t)/dt = \xi(t)$, где $\xi(t)$ — белый стационарный гауссов шум с $\langle \xi(t) \rangle = 0$ и $\langle \xi(t)\xi(t+\tau) \rangle = 2D\delta(\tau)$.

Коэффициент диффузии $D = kT/h$, где k — постоянная Больцмана, определяется эквивалентными температурой T и вязкостью h среды.

Пусть теперь расплывание броуновских частиц от начального распределения $W(x,0) = \delta(x)$ происходит в той же среде под действием дополнительных сил, обязанных случайному потенциальному полю $\Phi(x)\zeta(t)$, где $\zeta(t)$ — безразмерный гауссов дельта-коррелированный процесс с $\langle \zeta(t) \rangle = 0$, $\langle \zeta(t)\zeta(t+\tau) \rangle = 2D_\zeta \delta(\tau)$, статистически независимый от теплового шума $\xi(t)$. В этом случае уравнение Ланжевена записывается как

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\frac{d\Phi(x)}{hdx}\zeta(t) + \xi(t) = -D\frac{d\varphi(x)}{dx}\zeta(t) + \xi(t), \tag{1}$$

где введен безразмерный потенциальный профиль $\varphi(x) = \Phi(x)/kT$. Заметим, что случайный процесс $x(t)$ является непрерывным марковским процессом.

Уравнение Фоккер–Планка для $W(x,t)$ имеет стандартную форму (см., например, [1]):

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\Big[K_1(x,t)W(x,t)\Big] + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Big[K_2(x,t)W(x,t)\Big], \qquad (2)$$

где $K_1(x,t)$ и $K_2(x,t)$ — коэффициенты сноса и диффузии, которые можно отыскать из уравнения Ланжевена.

Общие уравнения эволюции первых двух моментов непрерывного марковского случайного процесса $x(t)$ имеют вид ([2], § 10.6)

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \langle K_1(x,t)\rangle, \quad \frac{d\langle x^2\rangle}{dt} = 2\langle xK_1(x,t)\rangle + \langle K_2(x,t)\rangle, \qquad (3)$$

где статистическое усреднение происходит по плотности вероятности $W(x,t)$, определяемой уравнением Фоккера–Планка (2).

Нетрудно найти (см., например, [1] и [2], с. 367) следующие значения коэффициентов сноса и диффузии, соответствующих уравнению Ланжевена (1):

$$K_1(x) = \frac{D^2D_\zeta}{2l^2}\frac{d}{dx}\psi^2(x), \quad K_2(x) = 2D\left[1 + \frac{DD_\zeta}{l^2}\psi^2(x)\right]. \qquad (4)$$

Здесь введена безразмерная функция $\psi(x) = ld\varphi(x)/dx$, где l — некоторый масштаб. Тем самым для произвольного профиля $\varphi(x)$ уравнения эволюции моментов принимают вид

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{D^2D_\zeta}{2l^2}\left\langle\frac{d}{dx}\varphi^2(x)\right\rangle,$$

$$\frac{d\langle x^2\rangle}{dt} = \frac{D^2D_\zeta}{l^2}\left\langle x\frac{d\varphi^2(x)}{dx}\right\rangle + 2D\left[1 + \frac{DD_\zeta}{l^2}\langle\varphi^2(x)\rangle\right]. \qquad (5)$$

Если потенциальная функция $\varphi(x)$ является четной, то из-за симметрии ситуации плотность вероятности также есть четная функция $W(-x,t) = W(x,t)$. В этом случае $K_1(x) = 0$ (следовательно, $\langle x\rangle \equiv 0$) и остается только второе уравнение (5) для среднего квадрата координат броуновских частиц.

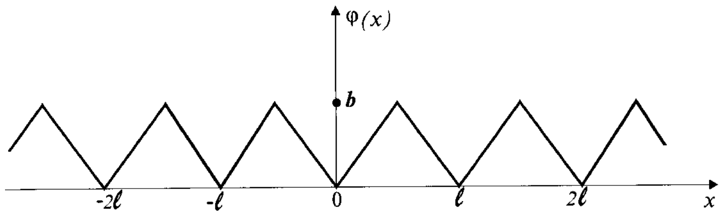

Рис. 1. Вид пилообразного потенциального профиля.

Рассмотрим в качестве первого примера четный пилообразный потенциальный профиль $\varphi(x)$ с пространственным периодом l, показанный на рис. 1. Легко видеть, что $\varphi(x) = 2bx/l$ для $0 \leqslant x \leqslant l/2$, и убедиться, что $\psi^2(x) = 4b^2$ для всех x.

Тем самым получаем $K_2(x) = 2D[1 + 4DD_\zeta(b/l)^2]$. Следовательно, при нулевых начальных условиях закон расплывания среднего квадрата координаты броуновских частиц принимает диффузионный вид $\langle x^2 \rangle = 2D_{eff}t$, где эффективный коэффициент диффузии равен

$$D_{eff} = D\left[1 + 4DD_\zeta\left(\frac{b}{l}\right)^2\right] > D. \tag{6}$$

Заметим, что этот результат является точным. Если флуктуирующего поля нет ($D_\zeta = 0$), то мы, как и должно быть, приходим к $D_{eff} = D$. Отметим также, что $W(x,t)$ для пилообразного поля, как и для свободной диффузии, является строго гауссовой плотностью вероятности.

Таким образом, периодическое пилообразное быстро флуктуирующее случайное поле, действующее на броуновские часитцы, ускоряет их диффузию и тем больше, чем больше b/l, т. е. чем больше по абсолютной величине крутизна поля на периоде.

Поскольку рассмотренный потенциальный профиль $\varphi(x)$ является четным и диффузия идет симметрично в обоих направлениях, то поток вероятности в точке $x = 0$ равен нулю и поэтому в этой точке можно поместить отражающую границу и рассматривать диффузию от отражающей границы только в сторону положительных x. Полученный результат (6) не изменится. Отсюда следует возможность убыстрения диффузии в одностороннем направлении (от отражающей границы).

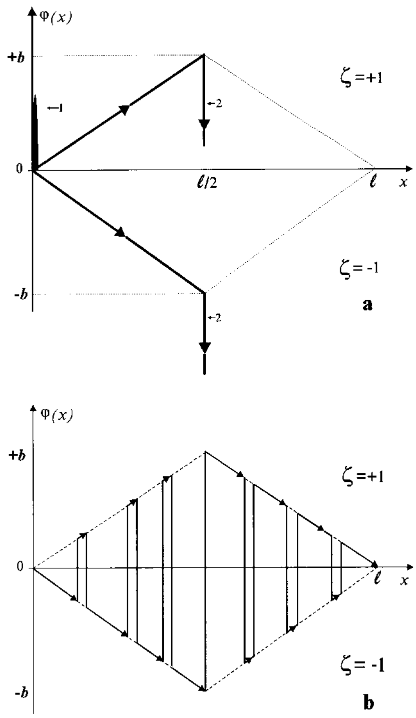

Рис. 2. Диффузионное движение броуновских частиц от начального вероятностного распределения: *a* — медленное движение вверх по склону и быстрое движение вниз по склону: *1* — начальное распределение, *2* — поглощающие границы; *b* — общий характер движения броуновских частиц на периоде поля.

Обсудим физический механизм ускорения диффузии, ограничившись анализом движения броуновских частиц на одном периоде поля в сторону возрастающих x. Профиль поля изобразим для простоты для двух случаев: $\zeta = +1$ и $\zeta = -1$ (рис. $2, a$).

Если $\zeta = +1$, диффузионное движение частиц идет вверх по склону и это движение происходит медленнее, чем по горизонтальной оси. Оценим это время, расположив в точке $l/2$ поглощающую границу (потенциал, который идет вертикально вниз). В этом случае броуновские частицы должны преодолеть потенциальный барьер высотою b. Можно показать, что время преодоления барьера (см., например, [3]), т. е. время продвижения частиц на расстояние $l/2$ вверх по склону равно

$$T_{up} = \frac{l^2}{4Db^2}\left(e^b - 1 - b\right). \tag{7}$$

Если $\zeta = -1$, диффузионное движение частиц идет вниз по склону и время продвижения частиц на расстояние $l/2$ равно

$$T_{down} = \frac{l^2}{4Db^2}\left(e^{-b} - 1 + b\right) < T_{up}. \tag{8}$$

Из этих формул следует, что при $b = 0.5$ скорость диффузии броуновских частиц вниз по склону в полтора раза больше скорости диффузии вверх, при $b = 2$ она больше почти в четыре раза, а при $b \leqslant 4$ отношение скоростей равно $e^b/b \gg 1$.

Поскольку среднее значение случайной функции $\zeta(t)$ равно нулю, ее знак все время меняется и половину времени частицы движутся вверх по склону, а половину — вниз. Разница в скоростях приводит к тому, что бóльшая часть пути от $x = 0$ до $x = l/2$ частицы проходят в состоянии "вниз по склону" и тем бóльшую, чем больше b/l. Движение броуновских частиц от $l/2$ до l происходит совершенно аналогично, с той лишь разницей, что теперь вниз по склону они движутся при $\zeta(t) > 0$, а вверх по склону при $\zeta(t) < 0$.

Таким образом, перемены знака $\zeta(t)$ дают возможность броуновским частицам бóльшую часть пути проходить в состоянии "вниз по склону" (рис. 2, b) и, следовательно, двигаться быстрее вдоль оси x, чем при свободной диффузии, что и приводит к ускорению процесса диффузии в соответствии с полученным эффективным коэффициентом диффузии (6).

Рассмотрим второй пример с гармоническим четным полем $\varphi(x) = b\cos(2\pi x/l)/$ с тем же периодом l. В этом случае $\varphi^2(x) = 4\pi^2 b^2 \sin^2(2\pi x/l)$. Однако второе уравнение (5) точно решить не удается из-за негауссовости $W(x,t)$. Используя гауссово приближение для $W(x,t)$ с нулевым средним значением и неизвестной дисперсией, из второго уравнения (5) можно найти следующее нелинейное уравнение для $\langle x^2 \rangle$:

$$\frac{d\langle x^2\rangle}{dt} = 4D^2 D_\zeta \left(\frac{b}{l}\right)^2 a\langle x^2\rangle \exp\bigl(-a\langle x^2\rangle\bigr) + 2D\left\{1 + 2\pi^2 D D_\zeta \left(\frac{b}{l}\right)^2 \Bigl[1 - \exp\bigl(-a\langle x^2\rangle\bigr)\Bigr]\right\}, \qquad (9)$$

где $a = 8\pi^2/l^2$. Анализ этого нелинейного уравнения показывает, что для времен, на которых $\langle x^2\rangle^{1/2}$ уже превышает полупериод поля ($a\langle x^2\rangle \gg 1$):

$$\langle x^2\rangle = 2D_{eff}t, \quad D_{eff} = D\left[1 + 2\pi^2 D D_\zeta \left(\frac{b}{l}\right)^2\right]. \qquad (10)$$

Итак, для косинусоидального флуктуирующего поля полученный приближенно эффективный коэффициент диффузии имеет тот же порядок величины, что и для пилообразного (6), сохраняя эффект ускорения диффузии тем бóльший, чем больше b/l.

Анализ показывает, что вышеописанный эффект ускорения диффузии не связан именно с пилообразной или косинусоидальной формой быстро флуктуирующего около нуля поля. Он будет, по-видимому, иметь место для любого периодического или непериодического поля, состоящего из достаточно крутых элементов "склон вверх", "склон вниз" произвольной формы.

В последние годы усиленно изучается механизм так называемого молекулярного мотора или "stochastic ratchets" (см., например, работы [4–8] и цитированную в них литературу). Суть этого явления заключается в существовании направленного диффузионного потока броуновских частиц, обязанного образованию асимметричных условий диффузии за счет той или иной модуляции периодического (асимметричного) поля с частотой, определяемой временем диффузии на масштабах периода поля. Предложенный выше эффект ускорения диффузии лишь внешне похож на эффект молекулярного мотора. Отличие заключается в том, что в случае молекулярного мотора наблюдается общий направленный перенос вещества, а в нашем случае возникает увеличение эффективного коэффициента "обычной" диффузии за счет быстрой модуляции поля, не связанной с временны́ми характеристиками расплывания плотности вероятности на масштабах периода поля.

Данная работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 96–02–16772–а и № 96–15–96718).

Список литературы

[1] *Risken H.* // The Fokker-Planck Equation. / Berlin: Springer-Verlag, 1989. 472 p.
[2] *Малахов А.Н.* // Кумулянтный анализ случайных негауссовых процессов и их преобразований. М.: Сов. радио, 1978. 376 с.
[3] *Агудов Н.В., Малахов А.Н.* // Изв. вузов. Радиофизика. 1993. Т. 36. В. 2. С. 148–166.
[4] *Никитин А.П., Постнов Д.Э.* // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24. В. 2. С. 47–53.
[5] *Постнов Д.Э., Никитин А.П., Анищенко В.С.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. В. 9. С. 24–29.
[6] *Bier M., Astumian R.D.* // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 76. N 22. P. 4277–4280.
[7] *Bier M.* // Phys. Rev. Lett. A. 1996. V. A211. P. 12–18.
[8] *Luczka J., Bartussek R., Hänggi P.* // Europhys. Lett. 1995. V. 31. N 8. P. 431–436.