Fizyka statystyczna Ruchy Browna

P.F.Góra http://th-www.if.uj.edu.pl/zfs/gora/

2020

Odkrycie ruchów Browna



While examining the form of these particles immersed in water, I observed many of them very evidently in motion... These motions were such as to satisfy me, after frequently repeated observations, that they arose neither from currents in the fluid, nor from its gradual evaporation [konwekcja], but belonged to the particle itself.

Robert Brown (1773–1858) botanik szkocki

Brown odkrył te ruchy w 1827, ale nie był pierwszy — już przed nim obserwowano mikroskopowe ruchy cząsteczek organicznych, ale przypisywano je jakiejś *sile życiowej*.

Brown obserwował ruchy żywych pyłków, obumarłych pyłków i zawiesiny nieorganicznej.

Dziwny charakter ruchów Browna

- Ruch bardzo nieregularny
- Trajektoria w różnych skalach czasowych wygląda podobnie





- Trajektoria nie zależy od historii
- Próby opisu w języku prędkości zawiodły.

Dwie prace, które wszystko wyjaśniły



A. Einstein, Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen, Ann. Phys. 17, 549–560 (1905).

Albert Einstein (1879–1955)



M. von Smoluchowski, *Zur kinetischen Theorie der Brownschen Molekularbewegung und der Suspensionen*, Ann. Phys. 21, 756–780 (1906).

Marian Smoluchowski (1872–1917)

Mechanizm mikroskopowy

- Ruch wywołany jest zderzeniami z cząsteczkami rozpuszczalnika ruchy Browna są obserwowalną manifestacją ruchów cieplnych
- Dlaczego efekty zderzeń "z lewej" i "z prawej" nie znoszą się? Znoszą się *statystycz-nie*, ale w każdej chwili występują *fluktuacje*, statystyczne odchylenia od średniej.
- Pomiędzy każdymi kolejnymi zarejstrowanymi położeniami nastapiło *bardzo wiele* zderzeń elementarnych
- Proces zderzeń można (w dobrym przybliżeniu) opisywać jako ciągły w czasie
- Trajektorie są nieróżniczkowalne w żadnym punkcie
 - Ruchu nie da się scharakteryzować poprzez prędkość!

- Druga zasada dynamiki
$$\left(\frac{d^2\vec{x}}{dt^2} = \frac{1}{m}\vec{F}(\vec{x},t)\right)$$
 nie obowiązuje!

- Heurystyczne wyprowadzenie równania dyfuzji
- $\langle x \rangle = 0, \langle x^2 \rangle = 2Dt$

Cząstka w kąpieli cieplnej

Rozpatrujemy^{*} cząstkę o hamiltonianie $H_0 = p^2/(2m) + \phi(q)$, oddziałującą harmonicznie z wielką liczbą oscylatorów harmonicznych, stanowiących rodzaj kąpieli cieplnej; same oscylatory ze sobą nie oddziałują. Hamiltonian całego układu ma postać

$$H = \frac{p^2}{2m} + \phi(q) + \sum_{\alpha} \left[\frac{p_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} + m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2 \left(x + \frac{g_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2} q \right)^2 \right],$$
(1)

gdzie g_{α} jest stałą sprzężenia z oscylatorem o indeksie α (pozostałe oznaczenia są oczywiste). Z (1) otrzymujemy równania ruchu

*Patrz tutaj

$$\dot{q} = \frac{p}{m}$$
(2a)

$$\dot{p} = -\frac{d\phi}{dq} - \sum_{\alpha} g_{\alpha} x_{\alpha} - \sum_{\alpha} \frac{g_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} q$$
 (2b)

$$\dot{q}_{\alpha} = rac{p_{\alpha}}{m_{\alpha}}$$
 (2c)

$$\dot{p}_{\alpha} = -m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2 - g_{\alpha}q$$
 (2d)

lub w postaci alternatywnej

$$m\ddot{q} = -\frac{d\phi}{dq} - \sum_{\alpha} g_{\alpha} x_{\alpha} - \sum_{\alpha} \frac{g_{\alpha}^2}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} q , \qquad (3a)$$

$$m_{\alpha}\ddot{x}_{\alpha} = -m_{\alpha}\omega_{\alpha}^2 - g_{\alpha}q.$$
(3b)

Równania na x_{α} są "proste". Są to liniowe równania niejednorodne. Rozwiążemy je, a rozwiązania wstawimy do pierwszego z równań (3). W celu skorzystamy z transformaty

Laplace'a:

$$\tilde{q}(s) = \int_{0}^{\infty} e^{-st} q(t) dt$$

$$\tilde{x}_{\alpha}(s) = \int_{0}^{\infty} e^{-st} x_{\alpha}(t) dt$$
(4a)
(4b)

gdzie $s \in \mathbb{C}$. Z własności transformaty Laplace'a

$$\int_{0}^{\infty} e^{-st} \ddot{x}_{\alpha}(t) = s^{2} \tilde{x}_{\alpha} - s x_{\alpha}(0) - \dot{x}_{\alpha}(0).$$
(5)

Zatem

$$\tilde{x}(s) = \frac{s}{s^2 + \omega_{\alpha}^2} x_{\alpha}(0) + \frac{1}{s^2 + \omega_{\alpha}^2} \dot{x}_{\alpha}(0) - \frac{g_{\alpha}}{m_{\alpha}} \frac{1}{s^2 + \omega_{\alpha}^2} \tilde{q}(s).$$
(6)

Aby teraz znaleźć $x_{\alpha}(t)$, należy znaleźć transformatę odwrotną prawej strony równania (6). Pierwszy człon daje $\cos \omega_{\alpha} t$, drugi $(1/\omega_{\alpha}) \sin \omega_{\alpha} t$. Trzeci człon zawiera iloczyn transformaty sinusa i transformaty q(t), a zatem jest *splotem* tych dwu funkcji. Ostatecznie

$$x_{\alpha}(t) = x_{\alpha}(0) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{\dot{x}_{\alpha}(0)}{\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t - \frac{g_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \int_{0}^{t} q(\tau) \sin \omega_{\alpha} (t-\tau) d\tau.$$
(7)

Okazuje się, że ostatni człon wygodnie jest przedstawić w innej postaci całkując przez części:

$$-\frac{g_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}}\int_{0}^{t}q(\tau)\sin\omega_{\alpha}(t-\tau)\,d\tau = \frac{g_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^{2}}\int_{0}^{t}\dot{q}(\tau)\cos\omega_{\alpha}(t-\tau)\,d\tau.$$
$$-\frac{g_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^{2}}\left[q(t)-q(0)\cos\omega_{\alpha}t\right]$$
(8)

Zauważmy też, że $\dot{x}_{\alpha}(0) = p_{\alpha}(0)/m_{\alpha}$.

Zbierając wszystkie człony i podstawiając wyrażenie na $x_{\alpha}(t)$ do pierwszego z równań (3) otrzymujemy

$$m\ddot{q} = -\frac{d\phi}{dq} - \sum_{\alpha} g_{\alpha} \left[\left(x_{\alpha}(0) + \frac{g_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^{2}} q(0) \right) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{p_{\alpha}(0)}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t \right] - \sum_{\alpha} \frac{g_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^{2}} \int_{0}^{t} \dot{q}(\tau) \cos \omega_{\alpha} (t-\tau) d\tau.$$
(9)

Zauważmy, że dzięki trickowi z całkowaniem przez części (8), pozbyliśmy się członu liniowego w q. Zmieńmy teraz kolejność całkowania i sumowania.

Definiujemy jądro pamięci:

$$\Gamma(t) = \sum_{\alpha} \frac{g_{\alpha}}{m_{\alpha} \omega_{\alpha}^2} \cos \omega_{\alpha} t$$
(10)

oraz siłę stochastyczną[†]:

$$\xi(t) = -\sum_{\alpha} g_{\alpha} \left[\left(x_{\alpha}(0) + \frac{g_{\alpha}}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}^{2}} q(0) \right) \cos \omega_{\alpha} t + \frac{p_{\alpha}(0)}{m_{\alpha}\omega_{\alpha}} \sin \omega_{\alpha} t \right]$$
(11)

[†]Na tym etapie "siła stochastyczna" jest w pełni deterministyczna ©

W tej notacji równanie (9) przybiera postać

$$m\ddot{q} = -\frac{d\phi}{dq} - \int_{0}^{t} \Gamma(t-\tau) \,\dot{q}(\tau) \,d\tau + \xi(t) \,. \tag{12}$$

Równanie (12) nosi nazwę uogólnionego równania Langevina (Generalized Langevin Equation, GLE).

Równanie (12) jest równaniem różniczkowo-całkowym. Opisuje ruch w potencjale $\phi(q)$, z nielokalnym (w czasie) członem tłumiącym oraz pod wpływem *zewnętrznej*, zależnej od czasu siły $\xi(t)$.

Nasze dotychczasowe rozważania są ścisłe, dokładne: nie dokonywaliśmy żadnych przybliżeń, nie przyjmowaliśmy żadnych założeń upraszczających. *Teoretycznie*, znając wszystkie masy i częstości oscylatorów kąpieli, stałe sprzężenia i warunki początkowe, moglibyśmy próbować rozwiązywać — choćby numerycznie — równanie (12) tak, jak zostało ono sformułowane. Byłoby to jednak skrajnie niepraktyczne.

Siła stochastyczna

Zamiast rozpatrywać jakieś *konkretne*, niemożliwe do ustalenia warunki początkowe oscylatorów kąpieli cieplnej, będziemy uśredniać po zbiorze takich warunków. Niech symbol $\langle \cdots \rangle$ oznacza taką średnią. Z samej postaci $\xi(t)$ (11) widać, że

$$\langle \dot{q}(0)\xi(t)\rangle = 0, \qquad (13)$$

a dla licznych potencjałów — w szczególności dla takich, które nie zależą od nieparzystych potęgq — zachodzi także

$$\langle q(0)\xi(t)\rangle = 0. \tag{14}$$

W ten sposób "siła stochastyczna" (11) *statystycznie* nie zależy od warunków początkowych dla cząstki. Ponieważ nie chcemy, nie potrafimy śledzić wszystkich mikroskopowych stanów kąpieli cieplnej, deterministyczną, jak dotąd, siłę stochastyczną zastępujemy procesem stochastycznym o zadanych własnościach. Ponieważ z analizy rozkładu kanonicznego wiemy, że odchylenia od średniej dla układu pozostającego w stanie równowagi[‡] mają charakter gaussowski, przyjmujemy, że $\xi(t)$ są gaussowskimi zmiennymi losowymi. Trzeba jeszcze określić funkcję korelacji takiego procesu.

[‡]Wyobraźmy sobie, że rozważana kąpiel cieplna sama jest w kontakcie z jakimś większym termostatem, który ustala jej temperaturę.

Jądro pamięci

Obecność w GLE, równanie (12), nielokalnego w czasie jądra pamięci odzwierciedla fakt, że kąpiel cieplna potrzebuje skończonego czasu na dostosowanie się do fluktuacji zmiennej dynamicznej *q*: Efektywna siła, z jaką kąpiel działa na układ, odzwierciedla *przeszłe* zachowania układu. Spodziewamy się jednak, że zachowania w **bardzo** odległej przeszłości nie będą wpływać na jego teraźniejsze zachowanie. Innymi słowy, "fizyczne" jądra pamięci powinny zanikać dla bardzo dużych czasów.

Średniując po warunkach początkowych, można pokazać, że

$$\langle \xi(0)\xi(t)\rangle = \sigma^2 \Gamma(t) \tag{15}$$

gdzie σ^2 jest pewną stałą, którą spróbujemy określić za chwilę. Istotą równania (15) jest stwierdzenie, że siła stochastyczna i jądro pamięci nie są dowolne, w tym sensie, że są ze sobą powiązane. Funkcja korelacji siły stochastycznej jest, z dokładnością do stałej multiplikatywnej, równa jądru pamięci. Postulujemy, że ta zależność musi być zachowana, gdy siłę stochastyczną zastąpimy gaussowskim procesem stochastycznym.

Powolna relaksacja

Przypuśćmy, że kąpiel cieplna bardzo wolno reaguje na fluktuacje w położeniu cząstki, q. Tak się może zdarzyć, gdy cząsteczki kąpieli są bardzo masywne w porównaniu z obserwowaną cząstką, $m \ll m_{\alpha}$. Wówczas, dla krótkich czasów, $\Gamma(t) \simeq \Gamma_0 = \text{const}$ i GLE przybiera postać

$$m\ddot{q} \simeq -\frac{d\phi}{dq} - \int_{0}^{t} \Gamma_{0} \dot{q}(\tau) d\tau + \xi(t) = -\frac{d\phi}{dq} - \Gamma_{0}(q(t) - q(0)) + \xi(t)$$
$$= -\frac{d}{dq} \left(\phi + \frac{1}{2} \Gamma_{0}(q - q(0))^{2} \right) + \xi(t) .$$
(16)

W tym przypadku obecność pamięci (i tarcia) przejawia się jak obecność dodatkowego potencjału harmonicznego, mogącego uwięzić cząstki w pobliżu ich położeń początko-wych.

Znacznie ważniejsza jest przeciwna granica.

Szybka relaksacja

Jeśli kąpiel cieplna jest w stanie **bardzo** szybko, w granicy nieskończenie szybko, odpowiadać na fluktuacje zmiennej q, układ "nie pamięta" swoich przeszłych stanów. Dzieje się tak na przykład, gdy $m \gg m_{\alpha}$, jak to ma miejsce w przypadku cząstek brownowskich. Wówczas

$$\Gamma(t) = 2\gamma\delta(t), \qquad (17)$$

a GLE przybiera postać

$$m\ddot{q} = -\frac{d\phi}{dq} - 2\gamma \int_{0}^{t} \dot{q}(\tau)\delta(\tau)\,d\tau + \xi(t) = -\frac{d\phi}{dq} - \gamma\dot{q} + \xi(t)\,. \tag{18}$$

Odzyskaliśmy zwykłe, Stokesowskie tłumienie (siła tłumiąca jest proporcjonalna do prędkości). Oczywiście z uwagi na zależność (15), jeśli w układzie nie ma pamięci (czyli jeśli mamy do czynienia ze zwykłym, zlokalizowanym w czasie tłumieniem), także siła stochastyczna musi być δ -skorelowana, a zatem musi być białym szumem:

$$\langle \xi(0)\xi(t)\rangle = \sigma^2 \delta(t)$$
 (19)

Copyright © 2020 P. F. Góra

Przypadek przetłumiony

Bardzo często relaksacja jest ultra-szybka z uwagi na dużą wartość współczynnika tłumienia, γ . Taki przypadek jest uznawany za typowy, normalny. W takim wypadku zachodzi

$$|m\ddot{q}| \ll |\gamma\dot{q}| \tag{20}$$

Taki przypadek nazywamy *przetłumionym*. Wobec (20) człon inercyjny możemy zaniedbać i *uogólnione* równanie Langevina (18) przechodzi w

$$\dot{q} = -\frac{1}{\gamma} \frac{d\phi}{dq} + \frac{1}{\gamma} \xi(t) \,. \tag{21}$$

(21) nosi nazwę równanie Langevina.

Równanie Fokkera-Plancka

Równaniu Langevina (21) odpowiada równanie Fokkera-Plancka

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{1}{\gamma} \frac{d\phi}{dq} P \right) + \frac{\sigma^2}{\gamma^2} \frac{\partial^2 P}{\partial q^2}.$$
 (22)

 σ^2 jest tą samą stałą, która występuje w (19) i określa intensywność szumu. Rozwiązanie stacjonarne tego równania, jeśli istnieje[§], czyli jeśli jest normalizowalne, ma postać

$$P(q) = \mathcal{N} \exp\left(-\frac{\gamma}{\sigma^2}\phi(q)\right).$$
(23)

Oczekujemy, że jeśli układ jest w równowadze z kąpielą cieplną o temperaturze T, rozkład ten będzie mieć charakter Boltzmannowski, $P \sim \exp(-\phi/k_B T)$. W takim wypadku musi zachodzić

[§]To znaczy, jeśli potencjał jest dostatecznie wiążący; już potencjał harmoniczny ma tę własność.

$$\sigma^2 = \frac{k_B T}{\gamma}.$$
 (24)

Związek (24) nosi nazwę relacji Einsteina-Smoluchowskiego. Wiąże on temperaturę, natężenie fluktuacji i współczynnik tłumienia. Jego fizyczną treścią jest, że *nie ma dyssypacji bez szumu i nie ma szumu bez dyssypacji*.

Twierdzenie fluktuacyjno-dyssypacyjne

Spróbujmy uogólnić relację Einsteina-Smoluchowskiego. Tak zależność (15), jak i jej szczególna postać (19), wzięte dla t=0, określają intensywność szumu. Nie zależy ona od pamięci szumu, czyli od czasowej zależności funkcji korelacji. To, co uzyskaliśmy dla szumu białego, możemy uogólnić na szum z dowolną pamięcią. W miejsce zależności (15) otrzymamy wówczas

$$\langle \xi(0)\xi(t)\rangle = k_B T\left(\frac{1}{\gamma}\Gamma(t)\right)$$
 (25)

Czynnik $1/\gamma$ możemy włączyć do jądra pamięci. Wyrażenie (25) nosi nazwę twierdzenia fluktuacyjno-dyssypacyjnego, a przedstawione wyżej rozważania służyły do jego heury-stycznego (bo, mimo wszystko, nie ścisłego) uzasadnienia.

Uwagi

- 1. Powyższe rozważania są słuszne dla kąpieli cieplnej złożonej z nieoddziałujących oscylatorów harmonicznych, sprzężonych harmonicznie do obserwowanej cząstki. Ważne, że uzyskane wyniki uogólnione równanie Langevina, równanie Langevina, twierdzenie fluktuacyjno-dyssypacyjne nie zależą od charakteru potencjału $\phi(q)$, opisującego cząstkę odsprzęgniętą od kąpieli: formalny kształt tych wyrażeń jest taki sam dla (prawie) dowolnego, fizycznie sensownego potencjału. Na ogół przemilcza się założenie o charakterze kąpieli i przyjmuje się, że na cząstkę działa gaussowski szum o korelacjach czasowych odpowiadających jądru pamięci. Można *próbować* rozważać inne postacie kąpieli cieplnej, ale jest to bardzo trudne i analitycznie niewykonalne (trzeba robić pewne dodatkowe przybliżenia). W takich przypadkach twierdzenie fluktuacyjno-dyssypacyjne może mieć inną postać, chociaż oczekujemy, że w granicy powinno dążyć do postaci (25).
- Podejście to można uogólnić na przypadek wielowymiarowy, gdzie zamiast jednej zmiennej q mamy wektor q, a zamiast siły deterministycznej -dφ/dq mamy -∇Φ(q). W takim wypadku szum (siła stochastyczna) także musi mieć charakter wektorowy, jądro pamięci jest pewną macierzą, a twierdzenie fluktuacyjno-dyssypacyjne dotyczy macierzy kowariancji szumu.

Problem Kramersa

Rozważmy ruch termiczny cząstek w potencjale U(x) o kształcie jak na rysunku poniżej:



Zakładamy, że głębokość metastabilnej studni potencjału jest większa od energii termicznej

$$|U_0| \gg k_B T \,. \tag{26}$$

Początkowo cząstki uwięzione są w studni. Pytamy, czy (i kiedy) szum termiczny wyrzuci je z tej studni, tak, że będą mogły przejść do jakiegoś innego stanu (niezaznaczonego na

wykresie). Jest to problem reakcji aktywowanych termicznie. Rozważamy zatem problem średniego czasu pierwszego przejścia (Mean First Passage Time, MFPT) przez barierę o wysokości U_0 .

Problem ten rozwiązał Henrik Kramers w 1940.

Załóżmy, że zależna od pędu, położenia i czasu gęstość prawdopodobieństwa ma postać

$$P(p, x, t) = P(p, x) \exp(-t/\tau)$$
(27)

gdzie τ jest charakterystycznym czasem życia w studni. Problem polega na tym, że gęstość prawdopodobieństwa P(p, x) jest nienormalizowalna (cząsteczki mogą uciec do $+\infty$ — dla dużych x układ zachowuje się tak, jakby podlegał dyfuzji swobodnej). Gęstość prawdopodobieństwa może mieć postać (27) tylko wewnątrz studni i w bezpośrednim sąsiedztwie bariery potencjału, więc uzyskane rozwiązanie będzie mieć charakter przybliżony.

W pobliżu minimum (przyjmijmy, że jest zlokalizowane w x=0), potencjał ma w przybliżeniu postać harmoniczną

$$U(x) \simeq -U_0 + \frac{1}{2}m\Omega^2 x^2$$
 (28)

a z kolei w pobliżu maksimum leżącego w x_{max} ma postać

$$U(x) \simeq -\frac{1}{2}m\omega^2 (x - x_{\max})^2$$
. (29)

Zależna od czasu liczba cząstek uwięzionych w studni dana jest przez

$$N(t) = \int_{-\infty}^{0} dp \int_{-\infty}^{\infty} dx P(p, x, t) \sim \exp(-t/\tau), \qquad (30)$$

natomiast strumień przez barierę to

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p}{m} P(p, x, t) dp.$$
(31)

Liczba cząstek musi być zachowana

$$\frac{dN}{dt} = -J \Rightarrow \frac{J}{N} = \frac{1}{\tau}.$$
(32)

Jeśli współczynnik tarcia, γ , jest duży oraz spełniony jest warunek (26), interesujące są tylko okolice maksimum bariery. Kramers pokazał, że stacjonarne równanie Fokkera-Plancka przybiera wówczas postać przybliżoną

$$\frac{p}{m}\frac{\partial P}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial p}\left[-m\omega^2 xP + \gamma\left(pP + k_B T \frac{\partial P}{\partial p}\right)\right] = 0.$$
(33)

Ostatecznie, korzystając z podanych wyżej warunków na strumień, można pokazać, że

$$\frac{1}{\tau} \simeq \frac{\Omega}{2\pi} \left[\sqrt{1 + \frac{\gamma^2}{4\omega^2}} - \frac{\gamma}{2\omega} \right] \exp\left(-\frac{U_0}{k_B T}\right).$$
(34)

Czynnik wykładniczy we wzorze (34) nazywa się niekiedy *czynnikiem Arrheniusa*, na cześć szwedzkiego chemika Svante Arrheniusa (Nagroda Nobla z chemii, 1903), który pierwszy jakościowo opracował teorię reakcji aktywowanych termicznie. Zasługą Kramersa było wyliczenie współczynnika oraz wyjaśnienie mikroskopowego charakteru mechanizmu takich reakcji.

Rezonans stochastyczny

Szum termiczny zazwyczaj kojarzy się z zakłóceniami. Jako manifestacja ruchów cieplnych, oznacza przekaz energii w sposób "nieuporządkowany". Niekiedy jedkak szu może działać konstruktywnie: w problemie Kramersa, szum, destabilizując lokalne, metastabilne minim potencjału, pozwala układowi wyrwać się z pułapki. Możliwe są także przypadki, w których szum *wzmacnia* pewien sygnał zewnętrzny. Dzieje się to w mechanizmie rezonansu stochastycznego.

Pierwsza propozycja: wyjaśnienie periodyczności epok lodowcowych na Ziemi — nutacja osi Ziemi sprzężona z zabużeniami stochastycznymi: R. Benzi, G. Parisi, A. Sutera, A. Vulpiani, *Stochastic resonance in climatic change*, Tellus **34**, 10 (1982). Niedynamiczny rezonans stochastyczny — detekcja sygnału podprogowego

$$x(t) = A\sin(\omega t + \phi) + \sigma\xi(t), |A| < 1$$
(35a)

$$y(t) = \begin{cases} 1 & x(t) \ge 1\\ 0 & x(t) < 1 \end{cases}$$
(35b)



Copyright © 2020 P. F. Góra



Dynamiczny rezonans stochastyczny

$$\dot{x} = -\frac{dU(x)}{dx} + A\sin(2\pi f_0 t + \phi) + \sigma\xi(t)$$
(37)

U(x) jest potencjałem o dwóch minimach:



Opis teoretyczny dynamicznego rezonansu stochastycznego w studni potencjału o dwóch minimach podano w pracy Bruce McNamara, Kurt Wiesenfeld, *Theory of stochastic resonance*, Phys. Rev. A **39**, 4854 (1989). Układ ciągły zamieniono tam na układ dwustanowy: Jeśli przez x' oznaczymy położenie bariery pomiędzy dwoma minimami, a gęstość prawdopodobieństwa oznaczymy przez p(x,t), można zdefiniować obsadzenia lewego i prawego stanu n_{\pm} :

$$n_{-}(t) = 1 - n_{+}(t) = \int_{-\infty}^{x'} p(x, t) dx$$
(38)

a następnie badać równanie master

$$\frac{dn_{+}}{dt} = -\frac{dn_{-}}{dt} = W_{-}(t)n_{-} - W_{+}(t)n_{+} = W_{-}(t) - [W_{-}(t) + W_{+}(t)]n_{+}, \quad (39)$$

gdzie W_{\pm} są prawdopodobieństwami wyjścia z odpowiedniego stanu (prawdopodobieństwami przejścia przez barierę). Rozkład prawdopodobieństwa przybliżamy przez

$$p(x,t) = n_{-}(t)\delta(x - x_{-}) + n_{+}(t)\delta(x - x_{+})$$
(40)

gdzie z kolei x_{\pm} są jakimiś położeniami wewnątrz odpowiednich studni (można je dobrać "eksperymentalnie"). Kontynuując te rozważania, autorzy uzyskali analityczne wyrażenie na widmo mocy i SNR, w pełni zgodne z symulacjami przedstawionymi powyżej.

Rezonans stochastyczny dzisiaj

- Reakcje biochemiczne (np. ATP-aza)
- Modele klimatu (epoki lodowcowe, El Niño,...)
- Detektory naturalne i sztuczne
- Zastosowania biomedyczne (korektory postawy, otoskleroza,...)
- Modele populacyjne i społeczne
- itd