Dynamika stochastyczna w jednodołkowych studniach potencjału

Bartłomiej Dybiec
bartek@th.if.uj.edu.pl

Zakład Fizyki Statystycznej,
Instytut Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego

Sympozjum Zakładów Licznych Instytutu Fizyki – SZLIF

Kraków, 21 kwietnia 2017

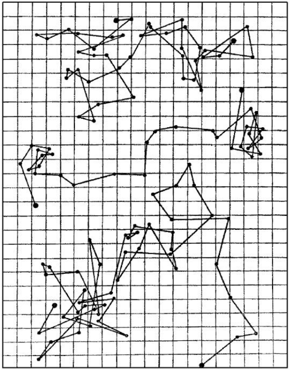
Współpraca:

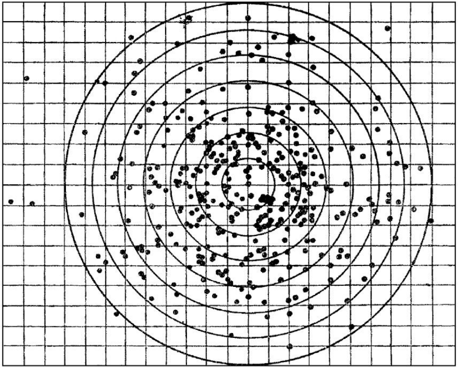
- Aleksei V. Chechkin (Poczdam)
- Alexander A. Dubkov (Niżny Nowogród)
- Werner Ebeling (Berlin)
- Ewa Gudowska-Nowak (Kraków)
- Igor M. Sokolov (Berlin)
- Krzysztof Szczepaniec (Kraków)

Motywacja

Motywacja

Skomplikowane oddziaływanie badanej cząsteczki z otoczeniem może zostać opisane przy pomocy szum. Dlatego szum wpływa na dynamikę układów.





R. Metzler and J. Klafter, Phys. Rep **339**, 1 (2000) za J. Perrin, Ann. chim. et d. phys. VIII **18**, 5 (1909).

Opis układów zaburzanych szumami

Równanie Langevina (równanie Newtona z szumem):

$$\ddot{x}(t) = -\gamma \dot{x}(t) - V'(x) + \xi(t),$$

może zostać zapisane jako

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} & = & v \\ \frac{dv}{dt} & = & -\gamma v - V'(x) + \xi(t) \end{cases}.$$

Równanie Kramersa

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -v\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v}\left\{\left[V'(x) + \gamma v\right] P\right\} + D_2 \frac{\partial^2 P}{\partial v^2},$$

gdzie

$$P = P(x, v, t | x_0, v_0, t_0).$$

Opis układów zaburzanych szumami

W przypadku przetłumionym (duże γ) prędkość szybko osiąga swoją wartość równowagową

$$\frac{dv}{dt} = 0.$$

Wtedy z równania

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v - V'(x) + \xi(t)$$

dostajemy

$$\frac{dx}{dt} = \frac{-V'(x)}{\gamma} + \xi(t)/\gamma.$$

Ewolucję gęstości prawdopodobieństwa $P(x, t|x_0, t_0)$ opisuje równanie Smoluchowskiego

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial x} V'(x,t) + D_2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] P(x,t).$$

Stany stacjonarne

Dla równania Smoluchowskiego

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial x} V'(x,t) + D_2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] P(x,t)$$

stan stacjonarny istnieje dla każdego $V(x)$ takiego, że $V(x) \to \infty$ dla $|x| \to \infty$. Jest on typu Boltzmanna-Gibbsa

$$P(x) \propto \exp\left[-\frac{V(x)}{D_2} \right].$$

1D zmienne α-stabilne

→ Zmienna losowa X jest stabilna jeśli

$$AX^{(1)} + BX^{(2)} \stackrel{\mathrm{d}}{=} CX + D.$$

→ Jeśli $D = 0$ zmienna losowa X jest ściśle stabilna.
→ Zmienna losowa X jest symetryczna jeśli

$$\mathrm{Prob}\{X\} = \mathrm{Prob}\{-X\}.$$

→ Zmienna losowa jest α-stabilna jeśli $C = (A^\alpha + B^\alpha)^{1/\alpha}$, gdzie $0 < \alpha \leqslant 2$.

Funkcja charakterystyczna α-stabilnych zmiennych losowych

$$\phi(k) = \mathbb{E}\left[e^{ikX}\right] = \begin{cases} \exp\left[-\sigma^\alpha |k|^\alpha \left(1 - i\beta \mathrm{sign} k \,\mathrm{tg}\, \frac{\pi\alpha}{2}\right) + i\mu k\right] \\ \qquad \text{jeśli} \quad \alpha \neq 1, \\ \exp\left[-\sigma|k| \left(1 + i\beta\frac{2}{\pi}\mathrm{sign} k \ln|k|\right) + i\mu k\right] \\ \qquad \text{jeśli} \quad \alpha = 1, \end{cases}$$

gzie $\alpha \in (0, 2]$, $\beta \in [-1, 1]$, $\sigma > 0$ and $\mu \in \mathbb{R}$.

G. Samorodnitsky and M. S. Taqqu, *Stable Non–Gaussian Random Processes*, (Chapman & Hall 1994).

1D zmienne α-stabilne

Funkcja charakterystyczna

$$\phi(k) = \begin{cases} \exp\left[-\sigma^{\alpha}|k|^{\alpha}\left(1 - i\beta \operatorname{sign}k \operatorname{tg}\frac{\pi\alpha}{2}\right) + i\mu k\right], & \text{for } \alpha \neq 1, \\ \exp\left[-\sigma|k|\left(1 + i\beta\frac{2}{\pi}\operatorname{sign}k \ln|k|\right) + i\mu k\right], & \text{for } \alpha = 1, \end{cases}$$

- asymptotyka $P(x) \propto |x|^{-(\alpha+1)}$ $(\alpha < 2)$,
- rozkład normalny $(\alpha = 2, \beta = 0)$

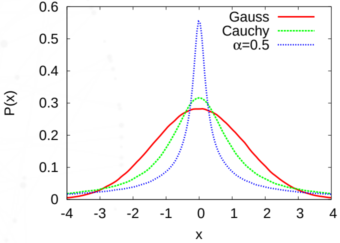
$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right],$$

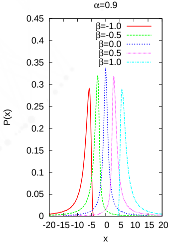
- rozkład Cauchy'ego $(\alpha = 1, \beta = 0)$

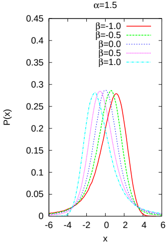
$$\frac{\sigma}{\pi}\frac{1}{(x-\mu)^2 + \sigma^2},$$

- rozkład Lévy'ego-Smirnoff'a (kompletnie skośny, $\alpha = \frac{1}{2}, \beta = 1$)

$$\left(\frac{\sigma}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(x-\mu)^{-\frac{3}{2}}\exp\left[-\frac{\sigma}{2(x-\mu)}\right].$$







Opis układów zaburzanych szumami

Pojedyncze trajektorie:

- równanie Langevina

$$\dot{x}(t) = -V'(x,t) + \zeta(t) \quad \Rightarrow P(x,t).$$

Gęstość prawdopodobieństwa:

- równanie Smoluchowskiego ($\alpha = 2$)

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial x} V'(x,t) + D_2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] P(x,t),$$

- ułamkowe równanie Smoluchowskiego ($0 < \alpha < 2$)

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[V'(x)P(x,t)\right] + D_\alpha \frac{\partial^\alpha P(x,t)}{\partial |x|^\alpha}, \text{ gdzie}$$

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial |x|^\alpha} f(x) = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-ikx} |k|^\alpha \hat{f}(k).$$

V. V. Yanovsky, A. V. Chechkin, D. Schertzer and A. V. Tur, Physica A **282**, 13 (2000).
D. Schertzer, M. Larchevêque, J. Duan, V. V. Yanowsky and S. Lovejoy, J. Math. Phys. **42**, 200 (2001).

Ułamkowe równanie Smoluchowskiego

Równanie Smoluchowskiego

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial V(x)}{\partial x} P(x,t)\right] + \frac{\partial^\alpha}{\partial |x|^\alpha} P(x,t),$$

gdzie

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial |x|^\alpha} f(x) = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-ikx} |k|^\alpha \hat{f}(k).$$

Transformata Fouriera równania Smoluchowskiego

$$\frac{\partial \hat{P}(k,t)}{\partial t} = \hat{\mathbf{V}} \hat{P}(k,t) - |k|^\alpha \hat{P}(k,t).$$

P. D. Ditlevsen, Phys. Rev. E **60** 172 (1999).
D. Schertzer and M. Larchevêque, J. Duan, V. V. Yanowsky, S. Lovejoy, J. Math. Phys. **42** 200 (2001).

Stany stacjonarne

Potencjał paraboliczny

$$V(x) = \frac{x^2}{2} \longrightarrow \hat{\mathbf{V}} = -k\frac{\partial}{\partial k}$$

$$\frac{\partial \hat{P}}{\partial k} = -\mathrm{sgn} k |k|^{\alpha-1} \hat{P} \longrightarrow \hat{P} = \exp\left(-\frac{|k|^\alpha}{\alpha}\right).$$

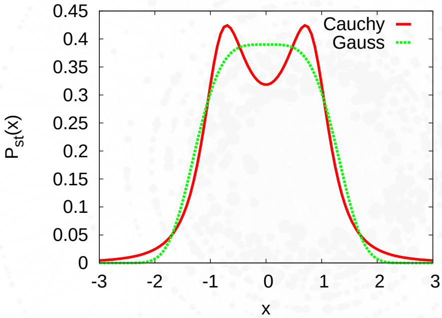
Stan stacjonarny jest symetryczną gęstością α-stabilną.
Potencjał czwartego stopnia

$$V(x) = \frac{x^4}{4} \longrightarrow \hat{\mathbf{V}} = k\frac{\partial^3}{\partial k^3}$$

$$P_{\alpha=1}(x) = \frac{1}{\pi(1 - x^2 + x^4)}.$$

A. V. Chechkin, J. Klafter, V. Yu. Gonchar, R. Metzler and L. V. Tanatarov, Chem. Phys. **284** 233 (2002); Phys. Rev. E **67**, 010102 (2003).

Stany stacjonarne ($V(x) = x^4/4$)



A. V. Chechkin, J. Klafter, V. Yu. Gonchar, R. Metzler and L. V. Tanatarov, Chem. Phys. **284** 233 (2002); Phys. Rev. E **67**, 010102 (2003).

Dla $\alpha = 2$ stan stacjonarny jest typu Boltzmanna-Gibbsa: $P(x) \propto \exp[-V(x)]$.

$$P_2(x) = \frac{\sqrt{2}}{\Gamma(\frac{1}{4})} \exp\left[-\frac{x^4}{4}\right]$$

Dla $0 < \alpha < 2$ stany stacjonarne nie są typu Boltzmanna-Gibbsa. W szczególności dla $\alpha = 1$

$$P_1(x) = \frac{1}{\pi(x^4 - x^2 + 1)}$$

Jednodołkowe studnie potencjału ($V(x) = |x|^c$)

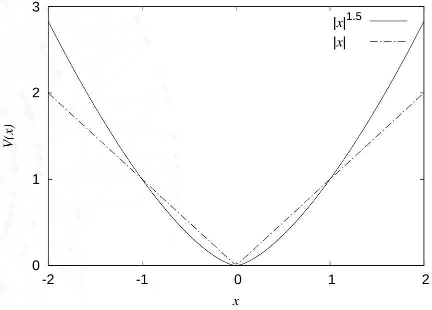
Dla $V(x) = |x|^c$ z $\alpha < 2$:

$\longrightarrow$ stany stacjonarne istnieją dla $c > 2 - \alpha$,

$\longrightarrow$ asymptotycznie: $P(x) \propto \frac{1}{|x|^{\alpha+c-1}}$,

$\longrightarrow$ dla $c > 4 - \alpha$ stany stacjonarne są scharakteryzowane skończoną wariancją,

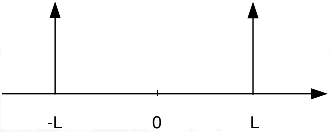
$\longrightarrow$ przejście pomiędzy jednomodalnymi i dwumodalnymi stanami stacjonarnymi zachodzi dla $c > 2$.

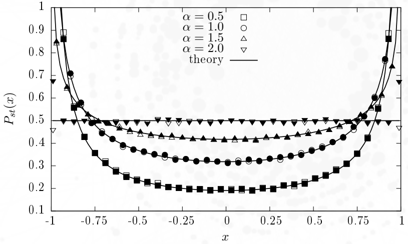


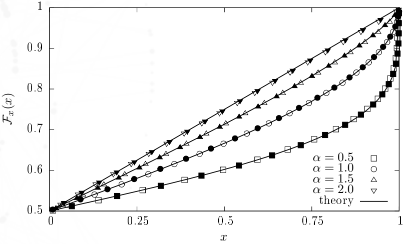
A. V. Chechkin, J. Klafter, V. Yu. Gonchar, R. Metzler, L. V. Tanatarov, Phys. Rev E **67**, 010102(R) (2003); J. Stat. Phys. **115**, 1505 (2003).
B. Dybiec, I. M. Sokolov, A. V. Chechkin, J. Stat. Mech. P07008 (2010).

Prostokątne studnie potencjału

Dla prostokątnej studni potencjału (będącej granicą $V_n(x) = \frac{|x|^n}{L^n}$ przy $n \to \infty$)







$$P_{st}(x) = \frac{\Gamma(\alpha)(2L)^{1-\alpha}(L^2 - x^2)^{\alpha/2-1}}{\Gamma^2(\alpha/2)}.$$

S. I. Denisov, W. Horsthemke and P. Hänggi, Phys. Rev. E 77, 061112 (2008).
B. Dybiec, E. Gudowska-Nowak, E. Barkai and A. A. Dubkov, Phys. Rev. E (2017).

2^{+}D zmienne α-stabilne

$\rightarrow$ Wektor losowy $\boldsymbol{X} = (X_1, \dots, X_d) \in \mathbb{R}^d$ jest stabilny jeśli dla każdego $A > 0$ i $B > 0$ istnieje $C > 0$ i wektor $\boldsymbol{D}$ taki, że

$$A\boldsymbol{X}^{(1)} + B\boldsymbol{X}^{(2)} \stackrel{\mathrm{d}}{=} C\boldsymbol{X} + \boldsymbol{D},$$

gdzie $\boldsymbol{X}^{(1)}$ i $\boldsymbol{X}^{(2)}$ są niezależnymi kopiami $\boldsymbol{X}$.
$\rightarrow$ Dla $\boldsymbol{D} = \mathbf{0}$ wektor jest ściśle stabilny.
$\rightarrow$ Wektor $\boldsymbol{X}$ jest symetryczny jeśli

$$\mathrm{Prob}\{\boldsymbol{X} \in A\} = \mathrm{Prob}\{-\boldsymbol{X} \in A\}$$

dla każdego zbioru Borela A w $\mathbb{R}^d$.
$\rightarrow$ Wektor jest α-stabilny jeśli $C = (A^{\alpha} + B^{\alpha})^{1/\alpha}$ gdzie $0 < \alpha \leqslant 2$.

2^+D zmienne α-stabilne

Funkcja charakterystyczna d-wymiarowej zmiennej α-stabilnej $\phi(\boldsymbol{k}) = \mathbb{E}\left[e^{i\langle \boldsymbol{k},\boldsymbol{X}\rangle}\right]$ gdzie $\boldsymbol{X} = (X_1, \dots, X_d) \in \mathbb{R}^d$

$$\phi(\boldsymbol{k}) = \begin{cases} \exp\left\{-\int_{S_d} |\langle \boldsymbol{k}, \boldsymbol{s}\rangle|^\alpha \left[1 - i\,\mathrm{sign}(\langle \boldsymbol{k}, \boldsymbol{s}\rangle)\,\mathrm{tg}\,\frac{\pi\alpha}{2}\right]\Gamma(d\boldsymbol{s}) + i\langle \boldsymbol{k}, \boldsymbol{\mu}^0\rangle\right\} \\ \quad \text{for} \quad \alpha \neq 1, \\ \exp\left\{-\int_{S_d} |\langle \boldsymbol{k}, \boldsymbol{s}\rangle|^\alpha \left[1 + i\frac{2}{\pi}\mathrm{sign}(\langle \boldsymbol{k}, \boldsymbol{s}\rangle)\ln(\langle \boldsymbol{k}, \boldsymbol{s}\rangle)\right]\Gamma(d\boldsymbol{s}) + i\langle \boldsymbol{k}, \boldsymbol{\mu}^0\rangle \right. \\ \quad \text{for} \quad \alpha = 1, \end{cases}$$

gdzie S_d jest hipersferą jednostkową w $\mathbb{R}^d$, $\Gamma(\cdot)$ jest miarą spektralną.

G. Samorodnitsky and M. S. Taqqu, *Stable Non–Gaussian Random Processes*, (Chapman & Hall 1994).

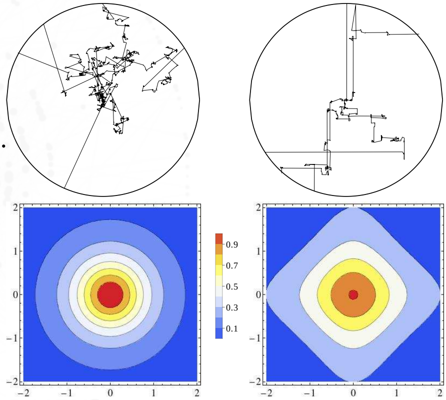
Rozkład Cauchy'ego (α=1) w 2D

Dyskretna, jednorodna miara spektralna skoncentrowana na przecięciach osi z okręgiem S_2

$$P(x,y) = \frac{1}{\pi}\frac{\sigma}{(x^2+\sigma^2)} \times \frac{1}{\pi}\frac{\sigma}{(y^2+\sigma^2)}.$$

Ciągła jednorodna miara spektralna

$$P(x,y) = \frac{1}{2\pi}\frac{\sigma}{(x^2+y^2+\sigma^2)^{3/2}}.$$



Równania w 2D

2D równanie Langevin'a

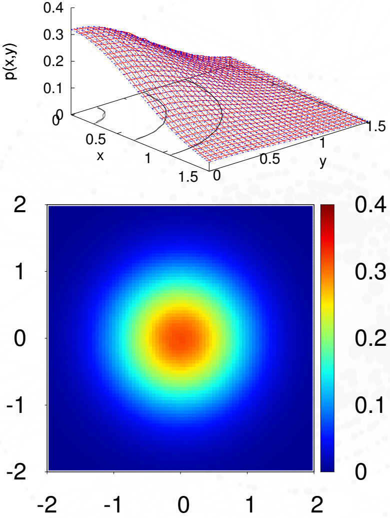
$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = -\nabla V(\boldsymbol{r}) + \sigma \zeta_\alpha(t),$$

$$d\boldsymbol{r} = -\nabla V(\boldsymbol{r})dt + \sigma d\boldsymbol{L}_\alpha(t).$$

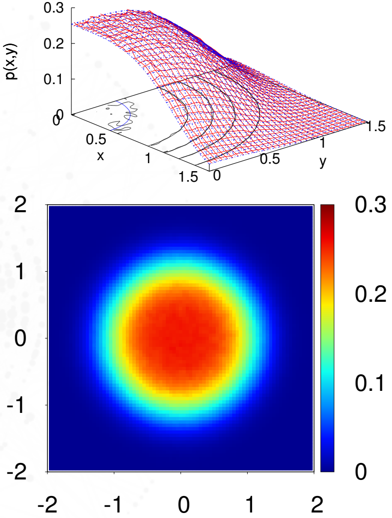
Szczególnie interesujące potencjały:

- harmoniczny: $V(x, y) = \frac{1}{2}r^2 = \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$,
- czwartego stopnia: $V(x, y) = \frac{1}{4}r^4 = \frac{1}{4}(x^2 + y^2)^2$.

2D biały gaussowski



$$V(x,y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$$



$$V(x,y) = \frac{1}{4}(x^2 + y^2)^2$$

Równanie Smoluchowskiego

$$\frac{\partial P(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \nabla \cdot [\nabla V(\boldsymbol{r}) P(\boldsymbol{r},t)] + \sigma^{\alpha} \boldsymbol{\Xi} P(\boldsymbol{r},t),$$

gdzie $\boldsymbol{\Xi}$ jest ułamkowym operatorem różniczkowym, $\nabla \cdot [\nabla V(\boldsymbol{r}) P(\boldsymbol{r},t)]$ pochodzi od siły deterministycznej $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}) = -\nabla V(\boldsymbol{r})$ działającej na cząsteczkę.

Dwuwymiarowy szum α-stabilny z jednorodną ciągłą miarą spektralną

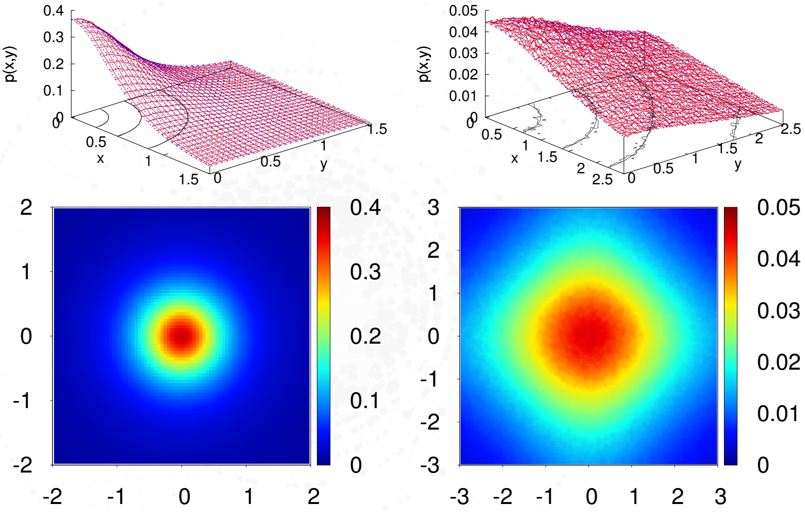
$$\boldsymbol{\Xi} = -(-\Delta)^{\alpha/2}.$$

Dwuwymiarowy szum α-stabilny z symetryczną, dyskretną miarą spektralną (skupioną na przecięciu S_2 z osiami układu)

$$\boldsymbol{\Xi} = \frac{\partial^{\alpha}}{\partial |x|^{\alpha}} + \frac{\partial^{\alpha}}{\partial |y|^{\alpha}}.$$

S. G. Samko, A. A. Kilbas and O. I. Marichev, *Fractional Integrals and Derivatives. Theory and Applications* (Gordon and Breach, Yverdon, 1993).
A. V. Chechkin, V. Y. Gonchar and M. Szydlowski, Phys. Plasmas **9**, 78 (2002).

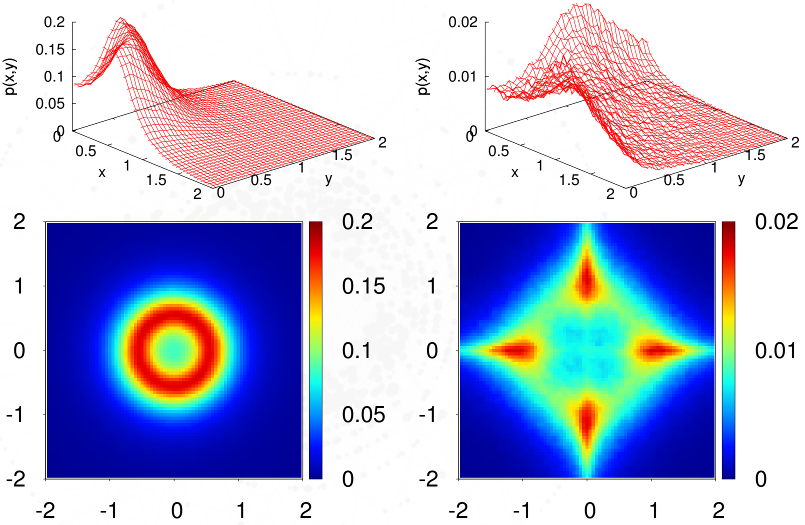
2D Cauchy – potencjał paraboliczny



$V(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2)$ oraz szum Cauchy'ego ($\alpha = 1$).

K. Szczepaniec and B. Dybiec, Phys. Rev. E **90**, 032128 (2014).

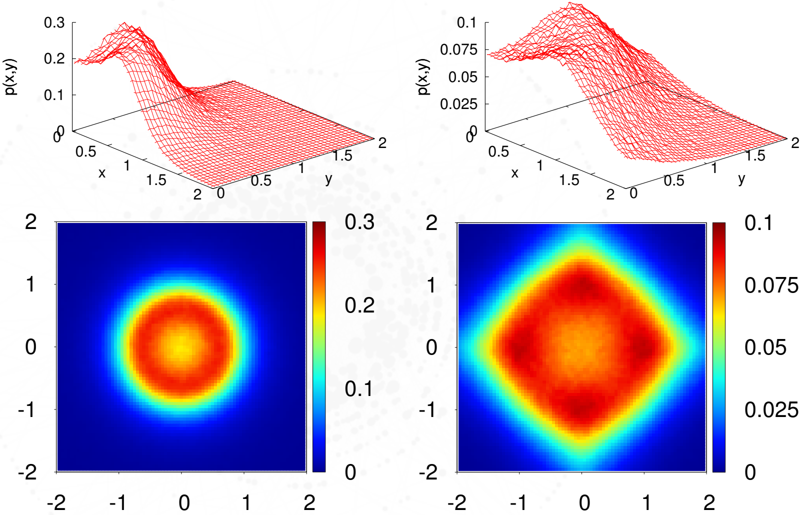
$\alpha = 0.5$ – potencjał czwartego stopnia.



$V(x, y) = \frac{1}{4}(x^2 + y^2)^2$ oraz szum α-stabilny z $\alpha = 0.5$.

K. Szczepaniec and B. Dybiec, Phys. Rev. E **90**, 032128 (2014).

2D Cauchy – potencjał czwartego stopnia



$V(x,y) = \frac{1}{4}(x^2 + y^2)^2$ oraz szum α-stabilny z $\alpha = 1$.

K. Szczepaniec and B. Dybiec, Phys. Rev. E **90**, 032128 (2014).

„Zaszumiony” równowagowy oscylator harmoniczny

Stochastyczne równanie różniczkowe

$$\ddot{x}(t) = -\gamma \dot{x}(t) - V'(x) + \xi(t)$$

odpowiada równaniu Kramersa

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -v\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v}\left\{\left[V'(x) + \gamma v\right] P\right\} + D_2 \frac{\partial^2 P}{\partial v^2},$$

gdzie

$$P = P(x, v, t | x_0, v_0, t_0).$$

Stacjonarnym rozwiązaniem równania Kramersa jest

$$P(x, v) \propto \exp\left[-\frac{V(x)}{k_B T} - \frac{mv^2}{2k_B T}\right]$$

z którego widać, że x i v są niezależnymi zmiennymi losowymi. Dodatkowo, dla $V(x) \propto x^2$ spełniona jest zasada ekwipartycji energii.

Stochastyczne równanie różniczkowe

$$\ddot{x}(t) = -\gamma\dot{x}(t) - V'(x) + \zeta(t),$$

które może zostać zapisane jako

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} & = & v \\ \frac{dv}{dt} & = & -\gamma v - V'(x) + \zeta(t) \end{cases}$$

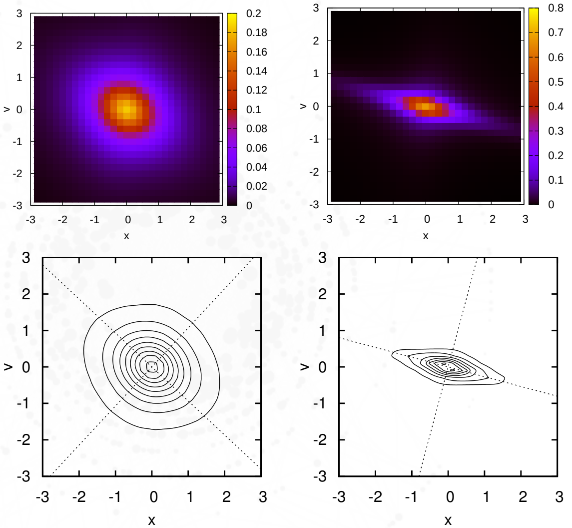
jest powiązane z ułamkowym równaniem Kramersa

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -v\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v}\left\{\left[V'(x) + \gamma v\right] P\right\} + D_\alpha \frac{\partial^\alpha P}{\partial |v|^\alpha},$$

gdzie

$$P = P(x, v, t|x_0, v_0, t_0).$$

„Zaszumiony” nierównowagowy oscylator harmoniczny



$\gamma = 1$ $\qquad$ $\gamma = 4$

I. M. Sokolov, B. Dybiec and W. Ebeling, Phys. Rev. E 83, 041118 (2011).

Ze względu na liniowość siły ($F(x) = -V'(x) = -kx$) dwuwymiarowa zmienna losowa (x, v) podlega dwuwymiarowemu rozkładowi α-stabilnemu, ale teraz:

- dla $0 < \alpha < 2$ zmienne x i v są zależne,
- nie jest spełniona zasada ekwipartycji energii.

PodΣumowanie

- dla białego szumu gaussowskiego:
  - stany stacjonarne są stanami BG,
  - w stanie stacjonarnym położenie i prędkość są niezależne,
  - dla potencjału parabolicznego spełniona jest zasada ekwipartycji energii.
- dla białego szumu α-stabilnego:
  - stany stacjonarne nie są stanami BG i istnieją dla dostatecznie stromych studni potencjałów,
  - w stanie stacjonarnym położenie i prędkość nie są niezależne,
  - nie jest spełniona zasada ekwipartycji energii.

Dziękuję bardzo za uwagę!

Referencje:

- B. Dybiec, I. M. Sokolov, A. V. Chechkin, *Stationary states in single-well potentials under symmetric Lévy noises*, J. Stat. Mech. P07008 (2010).
- I. M. Sokolov, B. Dybiec and W. Ebeling, *Harmonic oscillator under Lévy noise: Unexpected properties in the phase space*, Phys. Rev. E 83, 041118 (2011).
- K. Szczepaniec and B. Dybiec, *Stationary states in 2D systems driven by bi-variate Lévy noises*, Phys. Rev. E **90**, 032128 (2014).
- B. Dybiec, E. Gudowska-Nowak, E. Barkai and A. A. Dubkov, *Lévy flights versus Lévy walks in bounded domains*, Phys. Rev. E (2017).
- B. Dybiec, E. Gudowska-Nowak, *Underdamped stochastic harmonic oscillator*, arXiv:1855719.