
Konstruktywna rola fluktuacji w układach dynamicznych

Bartłomiej Dybiec, Ewa Gudowska-Nowak

Streszczenie

Fluktuacje (lub szумы środowiskowe) uważane są zwykle za szkodliwe zakłócenia. Jednakże w wielu zjawiskach ich obecność może mieć kreatywny charakter i wymuszać pojawianie się stanów i struktur o wysokim stopniu uporządkowania. W artykule przedstawione są podstawowe narzędzia teorii procesów stochastycznych znajdujące zastosowanie do opisu oddziaływań losowych oraz relaksacji do stanów stacjonarnych układów dynamicznych pobudzanych przypadkowymi siłami. W oparciu o wybrane przykłady, omówiona jest rola szumów w przyspieszaniu kinetyki chemicznej (aktywacja rezonansowa) oraz detekcji sygnału (rezonans stochastyczny).

1.1. Wstęp

Chaotyczne ruchy cząsteczek w płynie, wywołane nieustannymi zderzeniami zawiesziny z molekułami ośrodka, po raz pierwszy zostały zauważone przez holenderskiego fizjologa i botanika Jana Ingenhousza w 1785 roku. Obserwacje Ingenhousza dotyczyły ruchu pyłu węglowego na powierzchni alkoholu. Ponad pół wieku później podobne zjawisko badane było także przez szkockiego botanika Roberta Browna, który oglądając pod mikroskopem zawieszinę pyłków roślinnych oraz drobin nieorganicznych zaobserwował ich spontaniczny nieregularny ruch. Teoretyczne uzasadnienie tzw. ruchów Browna zostało podane z początkiem XX wieku przez Alberta Einsteina oraz niezależnie, przez Mariana Smoluchowskiego – polskiego fizyka, profesora Uniwersytetu Jagiellońskiego, twórcę fundamentalnych koncepcji w teorii fluktuacji i współczesnej fizyki statystycznej. To właśnie oryginalność podejścia Smoluchowskiego, w którym

opis dynamiczny ruchów Browna zastąpiony został opisem probabilistycznym, stanowiła o wielkim powodzeniu teorii kinetyczno-molekularnej oraz zastosowaniu teorii procesów stochastycznych w analizie różnorodnych zjawisk, w których fluktuacje odgrywają istotną rolę [3, 6]. Podstawą tego podejścia jest założenie, że materia składa się z drobin (molekuł), które podlegają stałym ruchom nawet w stanach równowagi termodynamicznej, kiedy intensywność dopuszczalnego ruchu poszczególnych molekuł wokół ich położenia równowagowych zależy od temperatury całego układu.

Dynamikę cząstki oddziałującej z dużą liczbą innych cząsteczek stanowiących „tło” lub „kąpiel cieplną” dla jej ruchu można opisać równaniem

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = m\ddot{x}(t) = F_{det}(x, t) + F_{dys}(x, t) + F_{flukt}(x, t), \quad (1.1)$$

gdzie $x(t)$ jest położeniem cząstki, m jej masą, zaś prawa strona równania opisuje składowe siły działające na cząstkę, zawierające przyczynki pochodzące od tłumienia ruchu związanego z lepkością ośrodka (F_{dys}), siłę deterministyczną (F_{det}) oraz siłę stochastyczną (F_{flukt}), pochodzącą od losowych zderzeń z innymi cząstkami otoczenia. Dla uproszczenia założono, że ruch jest ruchem jednowymiarowym. W sytuacji, gdy dyssypacja energii ruchu oraz siły losowe pochodzą z tego samego źródła, siłę tłumiącą można przedstawić jako $F_{dys} = -m\lambda\dot{x}(t)$ ze współczynnikiem tłumienia λ powiązany z temperaturą układu T poprzez relację Smoluchowskiego-Einsteina (relację fluktuacyjno-dyssypacyjną) [37], wyrażoną przez korelację

$$\langle F_{flukt}(x, t) F_{flukt}(x, t') \rangle = 2m\lambda k_B T \delta(t - t') \quad (1.2)$$

i gwarantującą spełnienie zasady ekwipartycji energii. Czynnikiem $\sqrt{2m\lambda k_B T}$ ze stałą Boltzmanna k_B określa wówczas intensywność siły losowej w równaniu (1.1). W dalszej części równanie to rozważane będzie w postaci podanej przez Langevina

$$m\ddot{x}(t) = -m\lambda\dot{x}(t) + F(x, t) + \sqrt{2m\lambda k_B T} \xi(t), \quad (1.3)$$

gdzie oddziaływania z otoczeniem są opisane poprzez człon losowy $F_{flukt} = \sqrt{2m\lambda k_B T} \xi(t)$, w którym $\xi(t)$ jest tzw. białym szumem Gaussa o znikającej średniej i czasowej funkcji korelacji zadanej deltą Diraca.¹

Dla dużych wartości współczynnika λ , w równaniu (1.3) można dokonać adiabaticznej eliminacji prędkości $v(t) = \dot{x}(t)$ [15] otrzymując tzw. przetłumione równanie Langevina

$$\lambda\dot{x}(t) = -\frac{F(x, t)}{m} + \frac{1}{m} \sqrt{2m\lambda k_B T} \xi(t), \quad (1.4)$$

¹Biały szum Gaussowski odpowiada formalnie pochodnej czasowej z przyrostów położenia cząstki opisywanego matematycznym procesem Wienera [37]. Statystyczna niezależność przyrostów wyraża brak korelacji czasowych w sile przypadkowej F_{flukt} , zaś Gaussowski charakter F_{flukt} wynika z założenia o rozkładzie siły losowej będącej sumą wielu niezależnych zmiennych losowych spełniających warunki centralnego twierdzenia granicznego.

w którym „stan” cząstki jest opisany wyłącznie przez jej położenie.

Ogólnie, przy rozwiązywaniu stochastycznego równania różniczkowego typu Langevina wymagane jest dookreślenie sposobu interpretowania odpowiedniej całki stochastycznej $\int g(x(s), s) \xi(s) ds \equiv \int g(x(s), s) dW_s$, [14, 15], gdzie dW_s jest przyrostem w procesie Wienera.² W dalszym ciągu pracy zastosowano interpretację Ito, która w przypadku addytywnego charakteru szumu $\xi(t)$ w równaniu Langevina, równoważna jest nieco odmiennie interpretacji Stratonowicza [15].

Równanie (1.4) można dalej uprościć poprzez przejście do zmiennych bezwymiarowych oraz uwzględnienie zależności od temperatury w wariancji szumu $\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \sigma^2 \delta(t - t')$, gdzie $\sigma^2 = 2k_B T/m$. Ostatecznie przetłumione równanie Langevina i infinitezymalne przyrosty położenia w ruchu przyjmują postać

$$\frac{dx(t)}{dt} = F(x, t) + \xi(t) \quad \Leftrightarrow \quad dx(t) = F(x, t)dt + dW_t, \quad (1.5)$$

gdzie $\xi(t)$ jest białym szumem Gaussowskim o zerowej średniej $\langle \xi(t) \rangle = 0$ a $F(x, t)$ jest deterministyczną siłą, mogącą jawnie zależeć od czasu.

Dla najprostszych postaci równania Langevina, przez wprowadzenie prawdopodobieństwa warunkowego $P(x, t | x_0, t_0) \equiv \langle \delta(x - x(t) | x(t_0) = x_0) \rangle_\xi$ znalezienia cząstki w punkcie x w chwili t , jeżeli w chwili t_0 znajdowała się ona w punkcie x_0 , można skonstruować odpowiadające im równania Smoluchowskiego-Fokkera-Plancka [16, 19, 37]. Nieprzetłumione równanie Langevina (1.3) jest stowarzyszone z następującym równaniem Smoluchowskiego-Fokkera-Plancka opisującym ewolucję gęstości prawdopodobieństwa procesu $x(t)$ ($v(t) = \dot{x}(t)$)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x, v, t | x_0, v_0, t_0)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x} v P(x, v, t | x_0, v_0, t_0) \\ &+ \frac{\partial}{\partial v} \left[\lambda v - \frac{F(x, t)}{m} \right] P(x, v, t | x_0, v_0, t_0) \\ &+ \lambda \frac{k_B T}{m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} P(x, v, t | x_0, v_0, t_0). \end{aligned} \quad (1.6)$$

Analogicznie, można dowieść, że przetłumione równanie Langevina (1.5) jest związane z następującym równaniem Smoluchowskiego-Fokkera-Plancka

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x, t | x_0, t_0)}{\partial t} &= \left[-\frac{\partial}{\partial x} F(x, t) + \frac{k_B T}{m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] P(x, t | x_0, t_0) \\ &= \left[-\frac{\partial}{\partial x} F(x, t) + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] P(x, t | x_0, t_0). \end{aligned} \quad (1.7)$$

²Na mocy niezależności przyrostów oraz faktu, że wartość oczekiwana $\langle W_s \rangle = 0$, kowariancja w procesie Wienera wynosi $\text{Cov}[W_s, W_t] \equiv \langle W_s W_t \rangle = \sigma^2 \min\{s, t\}$, gdzie σ jest parametrem skalującym.

Równania (1.6) oraz (1.7) są równaniami na ewolucję propagatora wyrażającego prawdopodobieństwo warunkowe znalezienia cząstki w położeniu x w chwili czasu t , przy założeniu początkowego położenia x_0 i mogą być otrzymane wprost z równania Chapmana-Kołmogorowa bilansu prawdopodobieństwa dla procesów Markowa³ Obustronne przemnożenie równania Smoluchowskiego-Fokkera-Plancka (1.7) przez prawdopodobieństwo warunku i wyciągnięcie po x_0 prowadzi do analogicznego równania na prawdopodobieństwo $P(x, t)$.

Równanie Langevina (1.5) oraz stowarzyszone z nim równanie Smoluchowskiego-Fokkera-Plancka (1.7) będą stanowiły główny obiekt badań zaprezentowanych w niniejszym artykule. W zależności od postaci siły deterministycznej $F(x, t)$ możliwe jest opisanie bardzo wielu modeli, demonstrujących konstruktywną rolę szumów. Różne formy $F(x, t)$ pozwalają na zbadanie nie tylko znaczenia szumu, ale także roli pełniejszej przez deterministyczną siłę.

Układy stochastyczne pomimo swojej prostoty mogą wykazywać wiele intrygujących właściwości. Już w najprostszym przypadku $F(x, t) \equiv 0$, jeśli tylko intensywność szumu σ jest większa od zera, cząstka może poruszać się i $x(t) \neq \text{const}$. Kinetyka cząstki uruchamiana jest siłą stochastyczną $\xi(t)$, która może np. prowadzić do ucieczki cząstki ze skończonych przedziałów. Analizując tę kinetykę można poszukiwać pierwszego średniego czasu przejścia lub prawdopodobieństwa ucieczki przez lewą lub prawą granicę przedziału. Założenie, że siła $F(x, t) \equiv F(x)$ jest statyczna pozwala na badanie problemu ucieczki cząstki z minimów potencjału (problem Kramersa [18, 24]). Dlatego, z jednej strony – dzięki obecności szumu, minima potencjału przestają być stabilne. Natomiast z drugiej strony, szum może prowadzić do „ustabilizowania” stanów, które podczas jego braku są (deterministycznie) niestabilne (*noise enhanced stability* [1, 19]). Jeśli deterministyczna siła F_{det} działająca na cząstkę zależy w sposób jawny od czasu, obserwowane mogą być kolejne efekty wywołane obecnością szumów. Pośród nich należy wymienić aktywację rezonansową [7], rezonans stochastyczny [2, 14, 30] oraz tzw. efekty zapadkowe (*ratchet effect*) [13, 28, 36] polegające na synchronicznym ukierunkowaniu ruchu molekularnego pod wpływem fluktuacji. Aktywacja rezonansowa jest rozszerzeniem tzw. zagadnienia Kramersa, w którym badana cząstka opuszcza minimum potencjału przechodząc ponad zmienną (deterministycznie lub stochastycznie) barierą potencjału. Modułacja wysokości bariery prowadzi do optymalizacji czasu ucieczki cząstki z jamy potencjału i tym samym opisywać może najefektywniejszą kinetykę pomiędzy populacjami reagentów i produktów. Z kolei obserwowane zjawisko rezonansu stochastycznego dowodzi, że słabe podprogowe periodyczne sygnały mogą zostać wzmocnione dzięki obecności szumu.

³Proces Markowa jest procesem dla którego wielopunktowe prawdopodobieństwo warunkowe redukuje się do postaci $P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; x_{n-2}, t_{n-2}; \dots; x_0, t_0) = P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1})$ ($t_n \geq t_{n-1} \geq \dots \geq t_0$), co oznacza „brak pamięci” [15]. [15, 16, 19].

Podobnie, wspomniany powyżej efekt zapadkowy jest przykładem, jak w układach ze złamaną symetrią przestrzenną obecność szumu i periodycznej modulacji prowadzi może do uporządkowania ruchu cząsteczek i powstania makroskopowego prądu.

1.2. Wybrane zjawiska indukowane szumami

1.2.1. Średni pierwszy czas przejścia

Wielkością charakteryzującą efektywność ucieczki cząstki jest pierwszy czas przejścia

$$\tau(x_0) = \min \{t > 0 : x_0 \in \Sigma \text{ oraz } x(t) \notin \Sigma\}, \quad (1.8)$$

gdzie Σ jest obszarem ruchu a x_0 punktem z którego cząstka rozpoczęła swój ruch. Pierwszy czas przejścia jest czasem potrzebnym na opuszczenie Σ po raz pierwszy. Średni pierwszy czas przejścia $\mathcal{T}(x_0)$ (*mean first passage time*) jest średnią pierwszych czasów przejścia $\tau(x_0)$, t.j. $\mathcal{T}(x_0) = \langle \tau(x_0) \rangle$. Jeśli siła działająca na cząstkę nie zależy od czasu, wygodnie jest założyć, że ruch odbywa się w zewnętrznym potencjale $V(x)$ takim, że $F(x) = -\frac{dV(x)}{dx} = -V'(x)$.

Dynamika cząstki opisana jest przez przetłumione równanie Langevina oraz związane z nim równanie Smoluchowskiego-Fokkera-Plancka (dla uproszczenia notacji zakładamy $x_0 = y$ oraz $t_0 = 0$)

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t|y, 0) = \hat{\Gamma} P(x, t|y, 0), \quad (1.9)$$

gdzie $\hat{\Gamma}$ jest operatorem Smoluchowskiego-Fokkera-Plancka $\hat{\Gamma} = \frac{\partial}{\partial x} V'(x) + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Średni pierwszy czas przejścia może zostać wyznaczony jako charakterystyczny czas zaniku prawdopodobieństwa przeżycia cząstki w badanym przedziale:

$$\mathcal{T}(x_0 = y) = \int_0^\infty dt \int_\Sigma P(x, t|y, 0) dx = \int_0^\infty G(y, t) dt, \quad (1.10)$$

gdzie $G(y, t) \equiv \int_\Sigma P(x, t|y, 0) dx$ jest prawdopodobieństwem, że cząstka która rozpoczęła swój ruch w $x_0 = y$, po czasie t jest nadal obecna w układzie, tzn. $x(t) \in \Sigma$. Prawdopodobieństwo przeżycia $G(y, t)$ jest powiązane z dystrybuantą $F_\tau(y, t)$ rozkładu pierwszych czasów przejścia (czasów ucieczki z Σ) związkiem

$$G(y, t) = 1 - F_\tau(y, t) \equiv 1 - \int_0^t f_\tau(y, s) ds = \int_t^\infty f_\tau(y, s) ds, \quad (1.11)$$

gdzie $f_\tau(y, t)$ jest gęstością rozkładu pierwszych czasów przejścia. Wyższe momenty ($n \geq 1$) tego rozkładu można otrzymać rekurencyjnie [15]:

$$\begin{aligned}
 M_n(x_0 = y) &= \int_0^\infty t^n f_\tau(y, t) dt = \int_0^\infty t^n \left(-\frac{dG(y, t)}{dt} \right) dt \\
 &= -t^n G(y, t) \Big|_0^\infty + \int_0^\infty n t^{n-1} G(y, t) dt \\
 &= n \int_0^\infty t^{n-1} G(y, t) dt,
 \end{aligned} \tag{1.12}$$

przy czym $\mathcal{T}(x_0 = y) = \langle \tau(x_0 = y) \rangle = M_1(x_0 = y)$.

Średni pierwszy czas przejścia może zostać wyznaczony z równania (1.10). Wymaga to jednak wcześniejszego wyznaczenia $P(x, t|y, 0)$. Możliwe jest także bezpośrednie wyznaczenie średniego pierwszego czasu przejścia wprost z równania Langevina (1.5). W tym celu wystarczy zauważyć, że dla zmiany położenia w krótkim przedziale czasowym Δt z y na $y + \Delta y$, wartość oczekiwana $\langle \tau(y + \Delta y) \rangle = \mathcal{T}(y) - \Delta t$. Jednocześnie z (1.5) i przy wykorzystaniu własności przyrostów w procesie Wienera, oszacowanie $\langle \Delta y \rangle$ daje $\langle \Delta y \rangle = \langle F(y, t) \Delta t \rangle$ i odpowiednio (z dokładnością do wielkości rzędu liniowego w Δt) $\langle \Delta y^2 \rangle = \langle (F(y, t) \Delta t + dW_t)^2 \rangle = (F(y, t) \Delta t)^2 + \langle dW_t^2 \rangle \approx \sigma^2 \Delta t$. Z drugiej strony rozwinięcie $\tau(y + \Delta y)$ dla małych Δy daje $\tau(y + \Delta y) \approx \tau(y) + \Delta y \tau'(y) + \frac{1}{2} (\Delta y)^2 \tau''(y) + \dots$. Z uśrednienia tego rozwinięcia ($\langle \tau(y) \rangle = \mathcal{T}(y)$), po wprowadzeniu wartości na $\langle \Delta y^2 \rangle$ i podzieleniu przez Δt dostajemy dla $\Delta t \rightarrow 0$ równanie

$$-1 = \frac{\sigma^2}{2} \mathcal{T}''(y) + F(y, t) \mathcal{T}'(y). \tag{1.13}$$

Formalne wyprowadzenie powyższego równania można znaleźć w [16]. Natomiast w [18] przedstawiono inne, niezwykle intuicyjne rozumowanie prowadzące do równania (1.13): Średni pierwszy czas przejścia jest średnim czasem po jakim cząstka opuszcza obszar ruchu Σ po raz pierwszy. Dla każdego $t' \in [0, t]$ cząstka znajduje się w Σ . Bez utraty ogólności można założyć, że całe zewnątrz Σ jest absorbujące

$$P(x, t|y, 0) \equiv 0, \quad \forall x \notin \Sigma. \tag{1.14}$$

co wyklucza powroty do Σ . Dla procesu o ciągłych trajektoriach wystarczy założyć, że brzeg $\partial \Sigma$ obszaru Σ jest absorbujący

$$P(x, t|y, 0) \equiv 0, \quad \forall x \in \partial \Sigma. \tag{1.15}$$

$P(x, t|y, 0)$ jako warunkowe prawdopodobieństwo dla procesu Markowa [15, 16] spełnia cofnięte równanie Smoluchowskiego-Fokkera-Plancka

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t|y, 0) = \hat{\Gamma}^\dagger P(x, t|y, 0), \quad x \in \Sigma, \tag{1.16}$$

gdzie $\hat{\Gamma}^\dagger$ jest cofniętym operatorem Smoluchowskiego-Fokkera-Plancka działającym na zależność od y („warunku początkowego”) prawdopodobieństwa $P(x, t|y, 0)$

$$\hat{\Gamma}^\dagger = -V'(y) \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} = F(y, t) \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \quad (1.17)$$

Zgodnie z definicją średni pierwszy czas przejścia jest równy

$$\mathcal{T}(y) = \int_0^\infty dt \int_\Sigma P(x, t|y, 0) dx, \quad (1.18)$$

gdzie

$$\int_\Sigma P(x, t|y, 0) dx = G(t|x(t=0) = y) = G(y, t), \quad (1.19)$$

jest prawdopodobieństwem przeżycia. Całkując równanie (1.16) $\int_0^\infty dt \int_\Sigma dx$ otrzymujemy

$$\int_\Sigma [P(x, \infty|y, 0) - P(x, 0|y, 0)] dx = \hat{\Gamma}^\dagger \mathcal{T}(y). \quad (1.20)$$

Ze względu na granicę absorbującą dla $t = \infty$ cząstka na pewno opuści układ. Ostatecznie otrzymujemy równanie spełniane przez średni pierwszy czas przejścia

$$-1 = \hat{\Gamma}^\dagger \mathcal{T}(y). \quad (1.21)$$

Mnożąc równanie (1.16) przez t^n i całkując $\int_0^\infty dt \int_\Sigma dx$ otrzymujemy równania rekurencyjne na wyższe momenty pierwszego czasu przejścia

$$-n \mathcal{T}^{n-1}(y) = \hat{\Gamma}^\dagger \mathcal{T}^n(y). \quad (1.22)$$

Prawdopodobieństwo przeżycia $G(y, t)$ spełnia cofnięte równanie Smoluchowskiego-Fokkera-Plancka $\frac{\partial}{\partial t} G(y, t) = \hat{\Gamma}^\dagger G(y, t)$, co widać całkując $\int_\Sigma dx$ równanie (1.16).

1.2.2. Ucieczka ze skończonych przedziałów oraz problem Kramersa

Ogólne rozwiązanie równania (1.21) dla $\hat{\Gamma}^\dagger = -V'(y) \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2}$, $y \in [A, B]$, zależy od rodzaju granic A, B [15, 16]. Klasyfikacja możliwych warunków brzegowych jest przedstawiona w [15] a odpowiadające im rozwiązania w [16]. Jeśli A jest odbijająca a B absorbująca [15] to

$$\mathcal{T}(x_0 \rightarrow B) = \frac{2}{\sigma^2} \int_{x_0}^B dx' \exp \left[\frac{2V(x')}{\sigma^2} \right] \int_A^{x'} \exp \left[-\frac{2V(x'')}{\sigma^2} \right] dx''. \quad (1.23)$$

Równanie (1.23) pozwala także na wyznaczenie średniego pierwszego czasu ucieczki ze skończonych przedziałów. W takim przypadku $V(x) \equiv 0$, A jest granicą odbijającą a B absorbującą ($A < x_0 < B$)

$$\mathcal{T}(x_0) = \frac{(B - x_0)(B - 2A + x_0)}{\sigma^2}. \quad (1.24)$$

Jeśli A jest granicą absorbującą a B odbijającą ($A < x_0 < B$)

$$\mathcal{T}(x_0) = \frac{(A - x_0)(A - 2B + x_0)}{\sigma^2}. \quad (1.25)$$

Natomiast dla ucieczki z przedziału ograniczonego dwiema granicami absorbującymi ($A < x_0 < B$)

$$\mathcal{T}(x_0) = -\frac{(x_0 - A)(x_0 - B)}{\sigma^2}. \quad (1.26)$$

Wzór (1.24) może zostać wyprowadzony ze wzoru (1.26) dzięki obserwacji, że ucieczka z przedziału ograniczonego granicą odbijającą i absorbującą jest równoważna ucieczce z dwa razy szerszego przedziału ograniczonego dwiema granicami absorbującymi. Dlatego dokonując zamiany $A \rightarrow 2A - B$ wzór (1.26) przechodzi w (1.24). Analogicznie zamiana $B \rightarrow 2B - A$ przekształca (1.26) w (1.25).

Dla szczególnie prostych potencjałów jawne wyrażenie na średni pierwszy czas przejścia może zostać wyliczone ze wzoru (1.23). Granica odbijająca jest zlokalizowana w $x = 0$ podczas gdy granica absorbująca jest w $x = 1$. Dla liniowego potencjału $V(x) = Hx$

$$\mathcal{T}(0 \rightarrow 1) = -\frac{1}{H} + \frac{\sigma^2}{2H^2} \exp\left[\frac{2H}{\sigma^2}\right] - \frac{\sigma^2}{2H^2}. \quad (1.27)$$

Natomiast dla potencjału parabolicznego $V(x) = Hx^2$

$$\mathcal{T}(0 \rightarrow 1) = \sqrt{\frac{\pi}{2\sigma^2 H}} \int_0^1 \exp\left[\frac{2Hs^2}{\sigma^2}\right] \operatorname{erf}\left[\sqrt{\frac{2H}{\sigma^2}}s\right] ds, \quad (1.28)$$

gdzie $\operatorname{erf}(x)$ jest funkcją błędu (dystrybuanta rozkładu normalnego) $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-s^2} ds$.

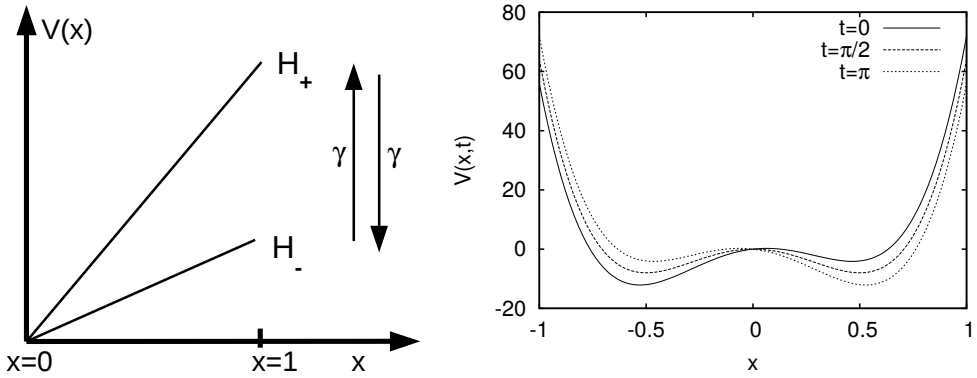
Dla równania (1.23) można przyjąć naturalne założenie $\lim_{x \rightarrow -\infty} V(x)$ odpowiadające umieszczeniu w minus nieskończoności granicy odbijającej. Dla ogólnego potencjału $V(x)$ zastosowanie przybliżenia punktu siodłowego [15] prowadzi do

$$\mathcal{T} \propto \exp\left[\frac{\Delta V}{\sigma^2}\right], \quad (1.29)$$

co oznacza, że średni pierwszy czas przejścia rośnie wykładniczo wraz z wysokością bariery potencjału $\Delta V = V(x_b) - V(x_{min})$.

1.2.3. Aktywacja rezonansowa

Zjawisko aktywacji rezonansowej występuje w układzie w którym cząsteczka ucieka przez modulowaną barierę potencjału. Bariera potencjału może być modulowana



Rysunek 1.1: Liniowa bariera potencjału dychotomicznie przełączająca się pomiędzy dwiema konfiguracjami o wysokościach H_{\pm} (lewa kolumna) oraz generyczny potencjał z dwoma minimami $V(x,t) = -\frac{a}{2}x^2 + \frac{b}{4}x^4 + A_0x \cos \Omega t$ z $a = 128$, $b = 512$, $A_0 = 8$, $\Omega = 1$ dla $t = \{0, \frac{\pi}{2}, \pi\}$ (prawa kolumna).

w sposób deterministyczny lub stochastyczny. Periodyczna modulacja bariery potencjału [22, 33] prowadzi do optymalizacji czasu ucieczki. Istnieje taka częstość periodycznej modulacji dla której czas ucieczki staje się minimalny. Tutaj jednak założymy, że potencjał przełącza się dychotomicznie pomiędzy dwiema liniowymi konfiguracjami o różnej wysokości H_{\pm} [7, 8, 11, 21]. Ruch cząstki brownowskiej jest opisany przy pomocy równania

$$\frac{dx(t)}{dt} = -V'(x) + \eta(t)g(x) + \xi(t), \quad (1.30)$$

gdzie $\eta(t)$ jest markowowskim szumem dychotomicznym przyjmującym wartości a_{\pm} a γ jest szybkością przełączania się procesu między stanami

$$\begin{array}{ccc} & a_+ & \\ \gamma \uparrow & & \downarrow \gamma \\ & a_- & \end{array} \quad (1.31)$$

Dla powyższego szumu dychotomicznego wartość średnia jest równa

$$\langle \eta(t) \rangle = \frac{1}{2}(a_+ + a_-) \quad (1.32)$$

zaś autokorelacja wynosi

$$\langle [\eta(t) - \langle \eta(t) \rangle][\eta(t') - \langle \eta(t') \rangle] \rangle = \frac{1}{4}(a_+ - a_-)^2 e^{-2\gamma|t-t'|}. \quad (1.33)$$

Szum $\xi(t)$ jest biały gaussowski ($\langle \xi(t) \rangle = 0$, $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \sigma^2 \delta(t-t')$). Szum dychotomiczny jest odpowiedzialny za modulację kształtu bariery potencjału (wysokości), podczas gdy biały szum gaussowski opisuje losowe oddziaływania badanej cząsteczki z kąpielą cieplną. Oba szумы występujące w (1.30) są statystycznie niezależne

$$\langle \eta(t)\xi(t') \rangle = 0. \quad (1.34)$$

Siła działająca na cząstkę jest równa

$$-V'_\pm(x) = -[V'(x) - a_\pm g(x)]. \quad (1.35)$$

Stacyczna część potencjału $V(x)$ oraz funkcja $g(x)$ są tak dobrane, aby dla ustalonych wartości procesu dychotomicznego a_\pm lewa strona równania (1.35) odpowiadała zakładanej sile. Przełączający się liniowy potencjał $V_\pm(x)$ jest schematycznie zaprezentowany w lewej kolumnie rysunku 1.1. Warunek (1.35) zwykle można spełnić na więcej niż jeden sposób. Badaną wielkością jest średni pierwszy czas przejścia \mathcal{T} dla procesu określonego równaniem (1.30).

W przypadku, gdy szum dychotomiczny i termiczny są statystycznie niezależne (równanie (1.34)), ewolucja prawdopodobieństwa w obu szumach rozsprzęga się. W konsekwencji, każde z równań składa się z dwóch części opisujących ruch cząstki oraz przełączanie się bariery. W równaniu (1.36) człony proporcjonalne do γ opisują przełączanie się gęstości prawdopodobieństwa pomiędzy $P_\pm(x, t|y, 0)$. Części z $V'(x) - a_\pm g(x)$ opisują ewolucję gęstości prawdopodobieństwa w przestrzeni. Dla tego równanie (1.30) jest równoważne układowi równań

$$\begin{cases} \partial_t P_+(x, t|y, 0) &= \partial_x \left[V'(x) - a_+ g(x) + \frac{\sigma^2}{2} \partial_x \right] P_+(x, t|y, 0) \\ &\quad - \gamma P_+(x, t|y, 0) + \gamma P_-(x, t|y, 0) \\ \partial_t P_-(x, t|y, 0) &= \partial_x \left[V'(x) - a_- g(x) + \frac{\sigma^2}{2} \partial_x \right] P_-(x, t|y, 0) \\ &\quad + \gamma P_+(x, t|y, 0) - \gamma P_-(x, t|y, 0). \end{cases} \quad (1.36)$$

Dla uproszczenia zakładamy, że ruch odbywa się w przedziale $[0, 1]$. W $x = 0$ jest granica odbijająca a w $x = 1$ absorbująca. W chwili $t = 0$ cząstka znajduje się w granicy odbijającej a potencjał z prawdopodobieństwem $\frac{1}{2}$ w każdej z konfiguracji $V_\pm(x)$. W granicy absorbującej znika prawdopodobieństwo znalezienia cząstki

$$P_\pm(x, t|y, 0)|_{x=1} = 0. \quad (1.37)$$

W granicy odbijającej znika natomiast prąd prawdopodobieństwa

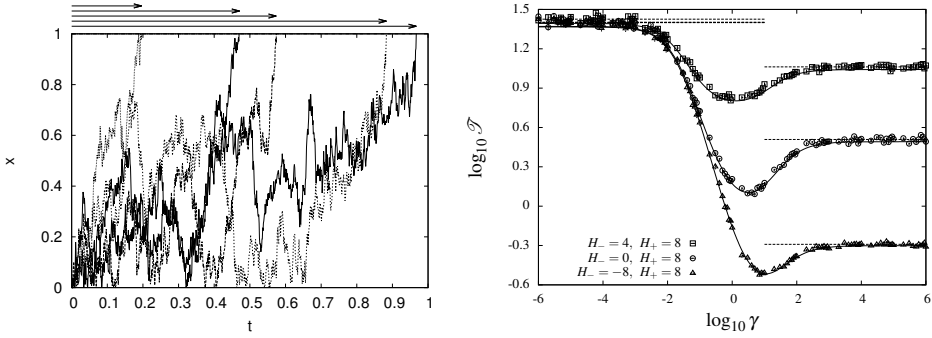
$$j_\pm(x, t|y, 0)|_{x=0} = - \left[V'(x) - a_\pm g(x) + \frac{\sigma^2}{2} \partial_x \right] P_\pm(x, t|y, 0)|_{x=0} = 0. \quad (1.38)$$

Jeśli cząstka zaczyna swój ruch w granicy odbijającej to

$$P_{\pm}(x, t|y, 0)|_{t=0} = \frac{1}{2}\delta(x). \quad (1.39)$$

Znalezienie $P_{\pm}(x, t|y, 0)$ pozwala na wyznaczenie średniego pierwszego czasu przejścia

$$\mathcal{T}(x_0 = y) = \int_0^{\infty} dt \int_0^1 [P_{-}(x, t|y, 0) + P_{+}(x, t|y, 0)] dx. \quad (1.40)$$



Rysunek 1.2: Przykładowe realizacje równania (1.30) (lewa kolumna) i zależność średniego pierwszego czasu przejścia od szybkości przełączania liniowej bariery potencjału (prawa kolumna). Różne krzywe odpowiadają różnym wysokościami bariery potencjału H_{\pm} . Średni pierwszy czas przejścia został wyznaczony poprzez symulację równania Langevina (1.30) (punkty), zaś linie przedstawiają numeryczne rozwiązania równania (1.41).

Średni pierwszy czas przejścia $\mathcal{T}(x_0 = y)$ można wyznaczyć także za pomocą cofniętego równania Smoluchowskiego-Fokkera-Plancka (1.16)

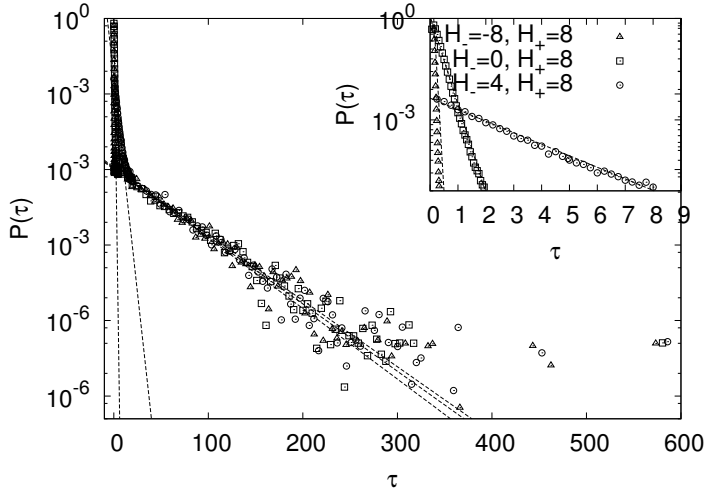
$$\begin{cases} -\frac{1}{2} = -\frac{dV_{+}(y)}{dy} \frac{d\mathcal{T}_{+}(y)}{dy} + \frac{\sigma^2}{2} \frac{d^2 \mathcal{T}_{+}(y)}{dy^2} - \gamma \mathcal{T}_{+}(y) + \gamma \mathcal{T}_{-}(y) \\ -\frac{1}{2} = -\frac{dV_{-}(y)}{dy} \frac{d\mathcal{T}_{-}(y)}{dy} + \frac{\sigma^2}{2} \frac{d^2 \mathcal{T}_{-}(y)}{dy^2} + \gamma \mathcal{T}_{+}(y) - \gamma \mathcal{T}_{-}(y) \end{cases}. \quad (1.41)$$

$\mathcal{T}_{\pm}(y)$ oznaczają średnie pierwsze czasy przejścia dla obu konfiguracji potencjału $V_{\pm}(x)$. Czynniki $-\frac{1}{2}$ w powyższym równaniu wynika z warunku początkowego (1.39). Poszukiwany średni pierwszy czas przejścia jest równy

$$\mathcal{T}(x_0 = y) = \mathcal{T}_{+}(y) + \mathcal{T}_{-}(y). \quad (1.42)$$

Równanie (1.41) jest związane z następującymi warunkami brzegowymi [11, 16]

$$\begin{cases} \frac{d\mathcal{T}_{+}(y)}{dy} \Big|_{y=0} = 0 \\ \frac{d\mathcal{T}_{-}(y)}{dy} \Big|_{y=0} = 0 \end{cases} \quad \text{oraz} \quad \begin{cases} \mathcal{T}_{+}(y) \Big|_{y=1} = 0 \\ \mathcal{T}_{-}(y) \Big|_{y=1} = 0 \end{cases}. \quad (1.43)$$



Rysunek 1.3: Rozkład pierwszych czasów przejścia dla liniowej bariery potencjału dla małych częstości przełączania się bariery, tzn. $\gamma \rightarrow 0$.

Równanie (1.41) ze względu na fakt, że warunki na funkcje zadane są w prawym brzegu przedziału a na pochodne w lewym jest dwupunktowym problemem brzegowym, który może zostać rozwiązany numerycznie a w najprostszich przypadkach także analitycznie. Dla liniowej bariery potencjału przełączającej się pomiędzy $V_{\pm}(x) = \pm Hx$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{S}(0) &= \left[T [H^4 + 2\gamma H^2 [\gamma - T] + 4\gamma^3 T] \cosh \left[\frac{\sqrt{H^2 + 2\gamma T}}{T} \right] \right. & (1.44) \\
 &- H^2 \left[H^2 T + 2\gamma^2 T + \gamma [H^2 - 2T^2] \right. \\
 &- \left. \left. 4\gamma T \sqrt{H^2 + 2\gamma T} \sinh \left[\frac{\sqrt{H^2 + 2\gamma T}}{T} \right] \right] \right] \\
 &/ \left[[H^2 + 2\gamma T]^2 \left[H^2 + 2\gamma T \cosh \left[\frac{\sqrt{H^2 + 2\gamma T}}{T} \right] \right] \right],
 \end{aligned}$$

gdzie $T = \frac{\sigma^2}{2}$.

Rozwiązania numeryczne mogą być skonstruowane także przy pomocy metod Monte Carlo [31] zastosowanych do równania (1.30). W takim przypadku warunki brzegowe zadane są na poziomie pojedynczych trajektorii. Ze względu na granicę odbijającą $x(t)$ nie może być mniejsze od zera. Cząstka jest natychmiastowo usunięta

z układu jeśli $x(t) \geq 1$ (absorbcja w granicy absorbującej). Prawa kolumna rysunku 1.2 pokazuje pięć przykładowych trajektorii $x(t)$. Strzałki nad wykresem wskazują pierwsze czasy przejścia τ odpowiadające trajektoriom z dolnej części rysunku.

Rysunek 1.2 pokazuje zależność średniego pierwszego czasu przejścia dla liniowej bariery potencjału przełączającej się między dwoma konfiguracjami $V_{\pm}(x) = H_{\pm}x$ scharakteryzowanymi różnymi wysokościami H_{\pm} . Rysunek pokazuje dokładne wyniki uzyskane poprzez numeryczne rozwiązanie układu (1.41) przy pomocy [29] oraz wyniki symulacji Monte Carlo równania (1.30). Wyniki uzyskane obiema metodami doskonale się zgadzają.

Dla małych γ bariera potencjału długo znajduje się w każdym ze stanów. Dlatego średni pierwszy czas przejścia jest średnią czasów przejścia przez obie konfiguracje potencjału

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \mathcal{T}(\gamma) = \frac{1}{2} [\mathcal{T}(V_-) + \mathcal{T}(V_+)] = \frac{1}{2} [\mathcal{T}_- + \mathcal{T}_+]. \quad (1.45)$$

W granicy dużych γ potencjał przełącza się bardzo szybko. Cząstka widzi zatem średni potencjał i dlatego średni pierwszy czas przejścia jest średnim pierwszym czasem przejścia dla średniej konfiguracji bariery

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \mathcal{T}(\gamma) = \mathcal{T} \left[\frac{1}{2}(V_- + V_+) \right]. \quad (1.46)$$

Powyzsza asymptotyka (równania (1.45) oraz (1.46)) jest pokazana na rysunku 1.2. Zauważmy, że dla pośrednich wartości γ obserwowane jest minimum zależności $\mathcal{T}(\gamma)$. Dzieje się tak, gdy czas skorelowania szumu bariery przybiera wartości bliskie czasowi potrzebnemu do wspięcia się cząstki na barierę (lub czasowi relaksacji cząstki z tego położenia). W konsekwencji, fluktuacje stwarzają optymalne warunki wspomagające proces pokonywania bariery [7, 8, 11, 20, 21]. Należy przy tym zaznaczyć, że również kształt bariery ma znaczenie w obserwowanym zjawisku: rezonansowa aktywacja jest najlepiej widoczna dla potencjału o trójkątnej barierze i zanika dla wypłaszczonej się bariery o kształcie schodka [8, 11].

Wraz ze wzrostem intensywności szumu wartości średniego pierwszego czasu maleją. Jest to naturalną konsekwencją faktu, że silniejsze fluktuacje przyspieszają ucieczkę i czynią ją mniej zależną od dokładnego kształtu i konfiguracji bariery potencjału.

Rysunek 1.3 przedstawia gęstości prawdopodobieństwa pierwszych czasów przejścia τ dla małych wartości γ . Dla małych γ rozkłady pierwszych czasów przejścia są niewykładnicze i dwie skale czasowe odpowiadające przejściom przez niską ($V_-(x)$) i wysoką ($V_+(x)$) barierę są doskonale widoczne. Dla dużych wartości γ rozkłady pierwszych czasów przejścia są wykładnicze, co jest typową własnością procesów Markowa.

1.2.4. Rezonans stochastyczny

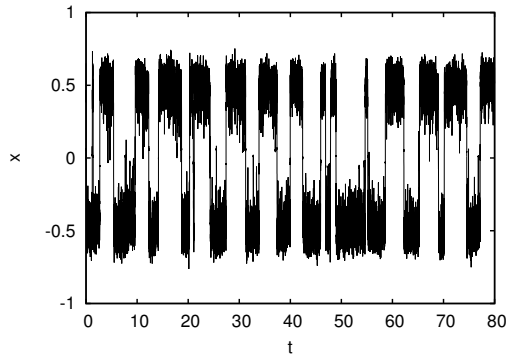
Rezonans stochastyczny jest przykładem kolejnego efektu demonstrującego konstruktywną rolę szumów. Rezonans stochastyczny prowadzi do wzmocnienia podprogowych sygnałów dzięki połączonej obecności słabej periodycznej modulacji i odpowiedniego poziomu szumu. Modelowy układ [14] w którym bada się rezonans stochastyczny opisany jest przy pomocy następującego równania Langevina

$$\frac{dx(t)}{dt} = -V'(x,t) + \xi(t), \quad (1.47)$$

gdzie $\xi(t)$ jest białym szumem gaussowskim, a $V(x,t)$ jest periodycznie modulowanym generycznym potencjałem z dwoma minimami

$$V(x,t) = -\frac{a}{2}x^2 + \frac{b}{4}x^4 + A_0x \cos \Omega t, \quad (1.48)$$

z $a = 128$, $b = 512$, $A_0 = 8$ oraz częstotścią modulacji $\Omega = 1$. Prawa kolumna rysunku 1.1 przedstawia periodycznie modulowany generyczny potencjał (1.48) dla wybranych wartości t .



Rysunek 1.4: Przykładowa trajektoria procesu (1.47) dla $\sigma = 2$. Zmiana intensywności szumu modyfikuje statystyki przeskoków między stanami.

Cząstka poruszająca się w periodycznie modulowanym potencjale z dwoma minimami dzięki obecności szumu przechodzi między stanami (minimami potencjału). Dzięki temu w układzie (1.47) pojawiają się dwie skale czasowe. Jedną z nich określa okres modulacji $T_\Omega = \frac{2\pi}{\Omega}$. Druga skala czasowa związana jest z procesem indukowanym szumem przejść między stanami (minimami potencjału (1.48)). Rezonans stochastyczny ma miejsce wtedy, gdy obie wymienione skale czasowe są równe.

Ze względu na fakt, że okres modulacji T_Ω jest ustalony w rezonansie stochastycznym własności układu są optymalizowane ze względu na intensywność szumu. Dla małych intensywności szumu średni czas przejścia między stanami jest dużo większy niż T_Ω . Natomiast dla dużych intensywności szumu czas przejścia między stanami jest krótki a sam proces przeskoków między stanami nie jest czuły na wysokość bariery potencjału. Wskazuje to na istnienie optymalnego poziomu szumu prowadzącego do najbardziej „regularnego” zachowania układu (1.47).

Badanie rezonansu stochastycznego wymaga zastosowania odpowiednich miar [10, 14, 42]. Najczęściej stosowanymi są: odpowiedź periodyczna (*periodic response*), wzmocnienie spektralne (*spectral power amplification*), stosunek sygnału do szumu (*signal to noise ratio*), pole pod pierwszym pikiem rozkładu czasów pobytu lub prawdopodobieństwo określonej liczby przejść pomiędzy stanami na okres siły wymuszającej T_Ω . Miary te oparte są na badaniu własności trajektorii (realizacji) procesu $x(t)$ określonego równaniem (1.47). Detekcja rezonansu stochastycznego odpowiada znalezieniu takiej intensywności szumu σ dla której miary rezonansu stochastycznego przyjmują wartość maksymalną.

Asymptotycznie dla $t \rightarrow \infty$ proces $x(t)$ opisany równaniem (1.47) traci informację o warunku początkowym i $\langle x(t)|x(t_0) = x_0 \rangle$ staje się periodyczną funkcją czasu [2, 14]

$$\langle x(t) \rangle_{as} = \bar{x} \cos(\Omega t - \bar{\varphi}). \quad (1.49)$$

Amplituda \bar{x} i przesunięcie fazowe $\bar{\varphi}$ zależą od intensywności szumu σ i częstości modulacji Ω . Typowo amplituda \bar{x} jest niemonotoniczną funkcją intensywności szumu z dobrze określonym maksimum odpowiadającym rezonansowi stochastycznemu.

Widmo mocy jest zdefiniowane jako transformata Fouriera funkcji autokorelacji

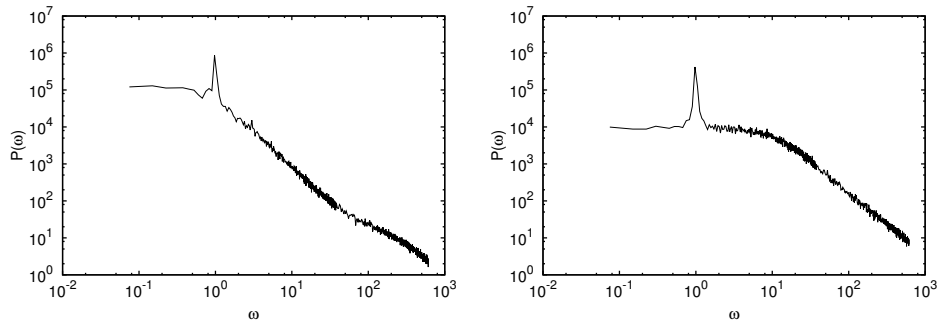
$$S(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega\tau} \langle x(t+\tau)x(t) \rangle d\tau. \quad (1.50)$$

Dla badanego układu poddanego słabemu zaburzeniu periodycznemu widmo mocy składa się z dwóch komponent $S(\omega) = S_P(\sigma)[\delta(\omega - \Omega) + \delta(\omega + \Omega)] + S_N(\omega)$, $S_N(\omega)$ jest tłem a S_P określa wzmocnienie spektralne, które jest wysokością piku w widmie mocy odpowiadającego częstości wymuszenia Ω . Stosunek sygnału do szumu (SNR) jest określony jako [14]

$$SNR = 2 \left[\lim_{\Delta\omega \rightarrow 0} \int_{\Omega-\Delta\omega}^{\Omega+\Delta\omega} S(\omega) d\omega \right] / S_N(\Omega). \quad (1.51)$$

W równaniu (1.51) $\lim_{\Delta\omega \rightarrow 0} \int_{\Omega-\Delta\omega}^{\Omega+\Delta\omega} S(\omega) d\omega$ oznacza moc niesioną przez sygnał podczas gdy $S_N(\Omega)$ estymuje poziom szumu tła. Stosunek sygnału do szumu określa jak dobrze sygnał odseparowany jest od zaszumionego tła, natomiast wzmocnienie spektralne mówi jak silna jest odpowiedź układu na zaburzenie periodyczne. Widmo mocy

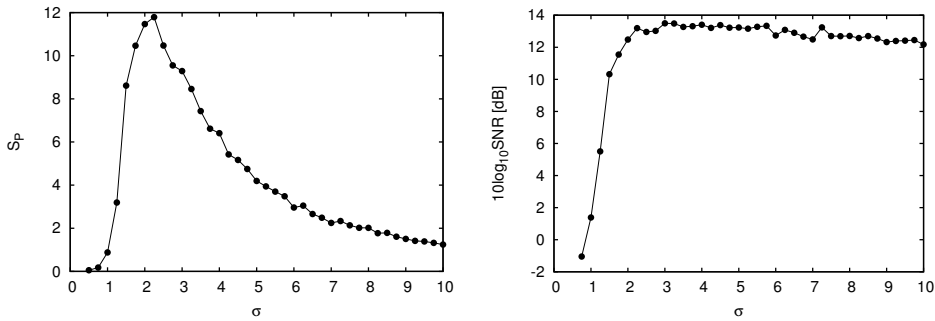
$S(\omega)$ oraz wzmocnienie spektralne S_P mają wymiar $[x]^2[t]$, czyli jednostki są wyznaczone przez jednostki położenia x oraz czasu t .



Rysunek 1.5: Widma mocy dla modelu (1.47) oraz różnych intensywności szumu: $\sigma = 1.5$ (lewa kolumna) oraz $\sigma = 5.0$ (prawa kolumna).

Rysunek 1.4 przedstawia przykładową trajektorię procesu (1.47) dla $\sigma = 2$, częstości zewnętrznego wymuszenia $\Omega = 1$ oraz generycznego potencjału z dwoma minimum dla $a = 128$, $b = 512$. Amplituda periodycznej modulacji wynosi $A_0 = 8$. Na podstawie szeregu podobnych trajektorii odpowiadających różnym intensywnościom szumu oszacowano widma mocy a następnie wzmocnienie spektralne i stosunek sygnału do szumu. Rysunek 1.5 przedstawia przykładowe widma mocy a rysunek 1.6 zastosowane miary rezonansu stochastycznego.

Analiza miar rezonansu stochastycznego potwierdza pojawienie się rezonansu stochastycznego w badanym układzie. Zarówno wzmocnienie spektralne (S_P) jak i stosunek sygnału do szumu (SNR) pokazane na rynku 1.6 zachowują się w sposób charakterystyczny dla tego zjawiska. Zależność wzmocnienia spektralnego (lewa kolumna) od intensywności szumu ma kształt krzywej dzwonowej z wyraźnie określonym maksimum wskazującym wystąpienie rezonansu stochastycznego. Dla małych intensywności szumu sygnał nie jest odseparowany od zaszumionego tła. Wraz z wzrastającą intensywnością szumu sygnał staje się dobrze odseparowany od poziomu tła. Analiza rysunku 1.6 pokazuje, że wzmocnienie spektralne jest bardziej czułe na zmiany intensywności szumu i precyzyjniej określa optymalną intensywność szumu. Spadek wzmocnienia spektralnego wskazuje, że sygnał wejściowy jest gorzej odtworzony przez sygnał wyjściowy $x(t)$. Stosunek sygnału do szumu pokazuje, że pomimo gorszego odtworzenia sygnału wejściowego sygnał wyjściowy jest dobrze odseparowany od tła.



Rysunek 1.6: Wzmocnienie spektralne S_P w jednostkach umownych (lewa kolumna) oraz stosunek sygnału do szumu SNR w decybelach (dB) (prawa kolumna) dla generycznego potencjału z dwoma minimami i białego szumu gaussowskiego. Parametry potencjału jak na rysunku 1.1.

1.3. Podsumowanie

Na kilku wybranych przykładach staraliśmy się pokazać, jak obecność „losowych szumów” prowadzić może do wystąpienia zjawisk, które byłyby niemożliwe do zaobserwowania w układach ściśle deterministycznych. Omówionymi tutaj przykładami takich zjawisk są 1) ucieczka ze studni potencjału, 2) aktywacja rezonansowa i 3) rezonans stochastyczny. Te koncepcyjnie proste modele kinetyki stochastycznej pozwalają na zrozumienie fundamentalnej roli, jaką odgrywają szумы środowiskowe i fluktuacje termiczne w dynamice molekularnej.

Niedynamiczny rezonans stochastyczny [5] może odpowiadać za wzmocnienie słabych sygnałów neurofizjologicznych w układach biologicznych [38, 43]. W szczególności prowadzi on do poprawy detekcji i odpowiedzi układów na bodźce wizualne [39] i akustyczne [44]. Dynamiczny rezonans stochastyczny tłumaczy wzmocnienie sygnałów w układach, w których obserwowane jest „przejście” ponad barierą potencjału. Mechanizm tego typu, w którym obserwuje się wzmocnioną czułość układu dynamicznego na słabe perturbacje periodyczne może tłumaczyć pojawianie się epok lodowcowych [4, 32]. Obok analogowych układów elektronicznych [27, 45], szczególnie interesujące są też medyczo-terapeutyczne zastosowania rezonansu stochastycznego w rehabilitacji poudarowej [40] i w chorobie Parkinsona [23], gdzie omawiane zjawisko odpowiedzialne jest za poprawę funkcji sensorycznych i motorycznych pacjentów [34, 35]. Z kolei dyskutowane powyżej – aktywacja rezonansowa i ucieczka ze studni potencjału są podstawowymi elementami analizy i optymalizacji warunków zachodzenia reakcji chemicznych [17, 26], modelowania kinetyki chemicznej i transferu ładunkowego w białkach [11], jak również transportu jonowego przez błony [13, 25].

Badane przez nas modelowe klasyczne układy dynamiczne, w których występują zjawiska indukowane szumami, mogą być z powodzeniem rozszerzane na układy kwantowe i uogólniane na inne klasy szumów. W szczególności można osłabić założenie dotyczące szumu rozpatrując jako źródła zaburzeń bardziej ogólne tzw. α -stabilne fluktuacje Lévy'ego [9, 12] lub niemarkowowskie szумы kolorowe. Opisane tutaj konstruktywne zjawiska porządkujące wymuszane obecnością fluktuacji występują także w wyżej wymiarowych układach [41].

Podziękowania

Symulacje komputerowe przeprowadzono w Akademickim Centrum Komputerowym Cyfronet AGH Kraków oraz w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego. Wyniki omawianych badań były w części wsparte funduszami grantu NCN2014/13/B/ST2/02014.

Autorzy

Bartłomiej Dybiec

Zakład Fizyki Statystycznej,
Instytut Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego,
ul. prof. S. Łojasiewicza 11, 30-048 Kraków,
bartek@th.if.uj.edu.pl

Ewa Gudowska-Nowak

Zakład Fizyki Statystycznej,
Instytut Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego,
ul. prof. S. Łojasiewicza 11, 30-048 Kraków,
gudowska@th.if.uj.edu.pl

Bibliografia

- [1] N. V. Agudov and B. Spagnolo, *Noise-enhanced stability of periodically driven metastable states*, Phys. Rev. E, 64:035102-1–4(R), 2001.
- [2] V. S. Anishchenko, A. B. Neiman, F. Moss, and L. Schimansky-Geier, *Stochastic resonance: Noise-enhanced order*, Sov. Phys. Usp., 42:7–36, 1999.
- [3] R. D. Astumian and F. Moss. *Overview: The constructive role of noise in fluctuation driven transport and stochastic resonance*, Chaos, 8:533–538, 1998.
- [4] R. Benzi, G. Parisi, A. Sutera, and A. Vulpiani. *Stochastic resonance in climatic change*, Tellus, 34:10–16, 1982.

- [5] S. M. Bezrukov and I. Vodyanoy. *Stochastic resonance in non-dynamical systems without response thresholds*, Nature (London), 385:319–321, 1997.
- [6] S. Chandrasekhar. *Stochastic problems in physics and astronomy*, Rev. Mod. Phys., 15:1–89, 1943.
- [7] C. R. Doering and J. C. Gadoua. *Resonant activation over a fluctuating barrier*, Phys. Rev. Lett., 69:2318–2321, 1992.
- [8] B. Dybiec and E. Gudowska-Nowak. *Influence of the barrier shape on resonant activation*, Phys. Rev. E, 66:026123-1–6, 2002.
- [9] B. Dybiec and E. Gudowska-Nowak. *Resonant activation in the presence of nonequilibrated baths*, Phys. Rev. E, 69:016105-1–7, 2004.
- [10] B. Dybiec and E. Gudowska-Nowak. *Quantifying noise induced effects in the generic double-well potential*, Acta Phys. Pol. B, 38:1759–1773, 2007.
- [11] B. Dybiec, E. Gudowska-Nowak, and P. F. Góra. *Implication of the barrier fluctuations on rate of weakly adiabatic electron transfer*, Int. J. Mod. Phys. C, 13:1211–1222, 2002.
- [12] B. Dybiec, E. Gudowska-Nowak, and P. Hänggi. *Escape driven by α -stable white noises*, Phys. Rev. E, 75:021109-1–8, 2007.
- [13] A. Fuliński and P. F. Góra. *Constructive role of noise in signal transmissions by biomembrane proteins*, Phys. Rev. E, 64:011905-1–11, 2001.
- [14] L. Gammaitoni, P. Hänggi, P. Jung, and F. Marchesoni. *Stochastic resonance*, Rev. Mod. Phys., 70:223–287, 1998.
- [15] C. W. Gardiner. *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and natural sciences*, Springer Verlag, Berlin, 2009.
- [16] N. S. Goel and N. Richter-Dyn. *Stochastic models in biology*, Academic Press, New York, 1974.
- [17] E. Gudowska-Nowak. *Dynamic effects in non-adiabatic kinetic rate*, Chem. Phys., 212: 115–119, 1996.
- [18] P. Hänggi, P. Talkner, and M. Borkovec. *Reaction-rate theory: Fifty years after Kramers*, Rev. Mod. Phys., 62:251–341, 1990.
- [19] W. Horsthemke and R. Lefever. *Noise-induced transitions. theory and applications in physics, chemistry, and biology*, Springer Verlag, Berlin, 1984.
- [20] J. Iwaniszewski. *Relaksacja ze stanu metastabilnego przez fluktuującą barierę potencjału*, Wydawnictwo Uniwersytetu Toruńskiego, Toruń, 2002
- [21] J. Iwaniszewski. *Escape over a fluctuating barrier: Limits of small and large correlation times*, Phys. Rev. E, 54:3173–3184, 1996.

- [22] J. Juraszek, B. Dybiec, and E. Gudowska-Nowak. *Hysteresis and synchronization in a two-level system driven by external noise*, *Fluct. Noise Lett.*, 5:L259–L266, 2005.
- [23] O. Kaut, N. Allert, C. Coch, S. Paus, A. Grzeska, M. Minnerop, and U. Wüllner. *Stochastic resonance therapy in Parkinson’s disease*, *NeuroRehabilitation*, 28:353–358, 2011.
- [24] H. A. Kramers. *Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reaction*, *Physica (Utrecht)*, 7:284–304, 1940.
- [25] K. Lee and W. Sung. *Effects of non equilibrium fluctuations on ionic transport through biomembranes*, *Phys. Rev. E*, 60:4681–4686, 1999.
- [26] J. Lehmann, P. Reimann, P. Hänggi. *Surmounting oscillating barriers: Path-integral approach for weak noise*, *Phys. Rev. E*, 62:6282–6303, 2000.
- [27] D. G. Luchinsky, R. Mannella, P. V. McClintock, and N. G. Stocks. *Stochastic resonance in electrical circuits – I: Conventional stochastic resonance*, *IEEE Trans. Circuits Syst. II, Analog Digit. Signal. Process.*, 46:1205–1214, 1999.
- [28] J. Łuczka, T. Czernik, and P. Hänggi. *Symmetric white noise can induce directed current in ratchets*, *Phys. Rev. E*, 56:3968–3975, 1997.
- [29] R. M. M. Mattheij and G. W. M. Staarink. MUS a package for solving two-point boundary value problems, <http://www.netlib.org>, 2005.
- [30] B. McNamara and K. Wiesenfeld. *Theory of stochastic resonance*, *Phys. Rev. A*, 39:4854–4869, 1989.
- [31] M. E. J. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo methods in statistical physics*. Clarendon Press, Oxford, 1999.
- [32] C. Nicolis. *Solar variability and stochastic effects on climate*, *Sol. Phys.*, 74:473–478, 1981.
- [33] A. L. Pankratov and M. Salerno. *Resonant activation in overdamped systems with noise subjected to strong periodic driving*, *Phys. Lett. A*, 273:162–166, 2000.
- [34] A. A. Priplata, J. Niemi, M. Salen, J. Harry, L. A. Lipsitz, and J. J. Collins. *Noise-enhanced human balance control*, *Phys. Rev. Lett.*, 89:238101-1–4, 2002.
- [35] A. A. Priplata, J. B. Niemi, J. D. Harry, L. A. Lipsitz, and J. J. Collins. *Vibrating insoles and balance control in elderly people*, *The Lancet*, 362:1123–1124, 2003.
- [36] P. Reimann. *Brownian motors: Noisy transport far from equilibrium*, *Phys. Rep.*, 361:57–265, 2002.

- [37] H. Risken. *The Fokker-Planck equation. Methods of solution and application*, Springer Verlag, Berlin, 1984.
- [38] D. F. Russell, L. A. Wilkens, and F. Moss. *Use of behavioural stochastic resonance by paddle fish for feeding*, *Nature*, 402:291–294, 1999.
- [39] E. Simonotto, M. Riani, C. Seife, M. Roberts, J. Twitty, and F. Moss. *Visual perception of stochastic resonance*, *Phys. Rev. Lett.*, 78:1186–1189, 1997.
- [40] J. Stein, R. Hughes, S. D’Andrea, B. Therrien, J. Niemi, K. Krebs, L. Langoine, and J. Harry. *Stochastic resonance stimulation for upper limb rehabilitation poststroke*, *Am. J. Phys. Med. Rehabil.*, 89:697–705, 2010.
- [41] K. Szczepaniec and B. Dybiec. *Resonant activation in 2d and 3d systems driven by multi-variate Lévy noises*, *J. Stat. Mech.*, 2014:P09022-1–13, 2014.
- [42] P. Talkner, L. Machura, M. Schindler, P. Hänggi, and J. Łuczka. *Statistics of transition times, phase diffusion and synchronization in periodically driven bistable systems*. *New J. Phys.*, 7:14-1–16, 2005.
- [43] L. M. Ward, A. Neiman, and F. Moss. *Stochastic resonance in psychophysics and in animal behavior*, *Biol. Cybern.*, 87:91–101, 2002.
- [44] F.-G. Zeng, Q.-J. Fu, and R. Morse. *Human hearing enhanced by noise*, *Brain Res.*, 869:251–255, 2000.
- [45] T. Zhou and F. Moss. *Analog simulations of stochastic resonance*, *Phys. Rev. A*, 41:4255–4264, 1990.