

三维过阻尼系统中布朗粒子的扩散问题研究

肖立东, 王春阳

(鲁东大学 物理与光电工程学院, 山东 烟台 264039)

摘要: 借助于三维广义朗之万方程, 本文对过阻尼情况下布朗粒子在三维势能面上的扩散问题进行了细致研究。通过分析稳态鞍点通过几率随着各张量非对角项的变化情况, 考察了不同自由度之间的耦合对粒子扩散过程的影响程度。研究发现, 三维过阻尼系统中, 粒子的扩散明显受到各种耦合因素的影响, 在它们的综合作用下会形成一条最适宜的扩散路径, 使得粒子获得更高的稳态鞍点通过几率。

关键词: 过阻尼系统; 非对角项; 鞍点通过几率; 扩散问题

中图分类号: O414.2 **文献标志码:** A **文章编号:** 1673-8020(2021) 02-0125-06

扩散是热力学理论研究中一个重要而又基本的问题。自二十世纪初著名物理学家爱因斯坦建立了布朗运动的扩散理论以来^[1], 人们对相关问题的研究越来越深入和完善。不但明确了一般热力学扩散过程的内在物理机制, 还发现了广泛存在于各种热力学耗散系统中的反常扩散、莱维飞行和分数布朗运动等奇异现象, 并揭示了其中的反常扩散机制^[2-5], 使得人们对物理、化学以及生命系统中的一些异常复杂问题有了比较清楚的认识和了解。但迄今为止, 尚有一些问题没有完全明晰, 粒子在多维势能面上的扩散就是其中一个非常重要的研究课题。

近年来, 随着科学技术的进步和计算能力的提高, 人们对多维系统中的扩散问题给予了更多的关注^[6-10]。例如, 日本的 Abe 教授课题组^[11]就曾提出使用 N 维朗之万方程计算布朗粒子的鞍点通过几率, 并将所得结果用以讨论重离子的熔合问题; 但在计算过程中, 忽略了各个参量矩阵中的非对角项, 极大地削弱了所得结果的物理意义。我们注意到了这一问题, 并在后来的二维研究中实现了改进^[12-14], 对二维情况下粒子的最佳扩散方向给出了清晰的定义。目前, 人们对于布朗粒子在势能面上的扩散研究主要集中在低维, 如一维、二维势能面, 对于更高维度如三维势能面

的研究相对较少。

因此, 本文从过阻尼情况出发, 对布朗粒子在三维势能面上的扩散问题进行详细探讨。通过理论推导和数值计算, 研究稳态鞍点通过几率随着各张量非对角项的变化情况, 分析不同自由度之间的耦合对粒子扩散过程的影响, 并讨论粒子扩散路径的优化选择问题。

1 理论模型和公式推导

三维情况下, 粒子在势能面上的扩散过程可以用广义朗之万方程组进行描述:

$$m_{ij}\ddot{x}_j + \beta_{ij}\dot{x}_j + \omega_{ij}x_j = \xi_i(t), \quad (1)$$

其中, m_{ij} 、 β_{ij} 、 ω_{ij} 分别表示粒子的质量、粘滞系数和势频率 3 种系统参量。为了简化, 在广义朗之万方程的写法上使用了爱因斯坦求和规则^[15]。 $\xi_i(t)$ 为系统中的噪声或随机力, 在一般情况下, 由于方程是线性的, $\xi_i(t)$ 的取值满足高斯分布, 并且其二阶矩满足久保第二涨落耗散定理 $\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = m_{ij}k_B T \beta_{ik} \delta_{kj}(t - t')$ ^[15]。在这里, 已将粒子的观测点选为势能鞍点处, 并在其附近将势能的形式近似表达为

$$U(x_1, x_2, x_3) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \omega_{ij} x_i x_j,$$

收稿日期: 2020-12-18; 修回日期: 2021-03-01

基金项目: 国家自然科学基金(11505103); 山东省自然科学基金(ZR2020MA092)

第一作者简介: 肖立东(1995—), 男, 山东威海人, 硕士研究生, 研究方向为统计物理与复杂系统。E-mail: 614757308@qq.com

通信作者简介: 王春阳(1980—), 男, 山东临沂人, 副教授, 硕士研究生导师, 博士, 研究方向为统计物理与复杂系统。E-mail: wchyl

@foxmail.com

其中 $i, j = 1, 2, 3$ 。

在一般情况下,由于广义朗之万方程(1)中存在较多的非对角元素,若直接进行数学求解,往往难以获得比较理想的结果。因此,人们常常会做一些简化处理,如文献[11]把各个非对角项的取值设为零;但这样做又走向了另一个极端,即完全忽略掉了多维情况下不同自由度之间的相互作用,显然是不合适的。因此,在本文中选择先从较为简单的过阻尼情况出发进行研究。这时,广义朗之万方程(1)简化为

$$\beta_{ij}\dot{x}_j + \omega_{ij}x_j = \xi_i(t) \quad (2)$$

假定 x_1 为粒子运动的主方向,即 $\omega_{11} < 0$,通过写出粒子在相空间的分布函数,并将其中的 x_2 、 x_3 两个变量积分消去,得到系统的约化分布函数为

$$W(x_1, t; x_{10}, x_{20}, x_{30}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{x_1}(t)} \exp\left(-\frac{(x_1 - \langle x_1(t) \rangle)^2}{2\sigma_{x_1}^2(t)}\right) \quad (3)$$

对该函数中的 x_1 从 0 到 ∞ 进行积分,即可以得到粒子鞍点通过几率的表达式为

$$P(t; x_{10}, x_{20}, x_{30}) = \int_0^\infty W(x_1, t; x_{10}, x_{20}, x_{30}) dx_1 =$$

$$\begin{aligned} P(s) &= (s^2(\beta_{13}\beta_{23} - \beta_{12}\beta_{33}) + s(-\beta_{23}\omega_{12} + \beta_{23}\omega_{13} + \beta_{13}\omega_{23} - \beta_{12}\omega_{33}) + \omega_{13}\omega_{23} - \omega_{12}\omega_{33}) + \\ &\quad (s\beta_{23} + \omega_{23})(s\beta_{33} + \omega_{33})(-s^2(\beta_{13}\beta_{22} - \beta_{12}\beta_{23}) + \omega_{13}\omega_{22} - \omega_{12}\omega_{23} + \\ &\quad s(-\beta_{23}\omega_{12} + \beta_{22}\omega_{13} + \beta_{13}\omega_{22} - \beta_{12}\omega_{23})) (s^2(\beta_{13}^2 - \beta_{11}\beta_{33}) + \omega_{13}^2 - \omega_{11}\omega_{33} - s(\beta_{33}\omega_{11} - 2\beta_{13}\omega_{13} + \beta_{11}\omega_{33})) + \\ &\quad (s^2(\beta_{13}\beta_{21} - \beta_{11}\beta_{23}) + \omega_{13}\omega_{21} - \omega_{11}\omega_{23} + s(-\beta_{23}\omega_{11} + \beta_{21}\omega_{13} + \beta_{13}\omega_{21} - \beta_{11}\omega_{23})), \\ F_1(s) &= (s\beta_{23} + \omega_{23})(s\beta_{33} + \omega_{33})(-s^2(\beta_{13}\beta_{22} - \beta_{12}\beta_{23}) + \omega_{13}\omega_{22} - \omega_{12}\omega_{23} + s(-\beta_{23}\omega_{12} + \beta_{22}\omega_{13} + \\ &\quad \beta_{13}\omega_{22} - \beta_{12}\omega_{23}))(s(\beta_{13}^2 - \beta_{11}\beta_{33}) + \beta_{31}\omega_{13} - \beta_{11}\omega_{33}) + (s\beta_{13}\beta_{21} - s\beta_{11}\beta_{23} + \beta_{21}\omega_{13} - \beta_{11}\omega_{23}) \times \\ &\quad (\omega_{13}\omega_{23} - \omega_{12}\omega_{33} + s^2(\beta_{13}\beta_{23} - \beta_{12}\beta_{33}) + s(-\beta_{33}\omega_{12} + \beta_{23}\omega_{13} + \beta_{13}\omega_{23} - \beta_{12}\omega_{33})), \\ F_2(s) &= (s^2(\beta_{13}\beta_{22} - \beta_{12}\beta_{23}) + s(\beta_{22}\omega_{13} + \beta_{13}\omega_{22} - \beta_{23}\omega_{12} - \beta_{12}\omega_{23}) + \omega_{13}\omega_{22} - \omega_{12}\omega_{23}) \times \\ &\quad (s\beta_{33} + \omega_{33})(s^2\beta_{23}(-\beta_{13}\beta_{23} + \beta_{12}\beta_{33}) - \beta_{32}\omega_{13}\omega_{23} + \beta_{12}\omega_{23}\omega_{33} + \\ &\quad s(-\beta_{23}^2\omega_{13} - \beta_{13}\beta_{32}\omega_{23} + \beta_{12}\beta_{33}\omega_{23} + \beta_{12}\beta_{23}\omega_{33})) - (s\beta_{23} + \omega_{23})(s^2(\beta_{13}\beta_{23} - \beta_{12}\beta_{33}) + \omega_{13}\omega_{23} - \omega_{12}\omega_{33} + \\ &\quad s(-\beta_{33}\omega_{12} + \beta_{23}\omega_{13} + \beta_{13}\omega_{23} - \beta_{12}\omega_{33}))(s^2(\beta_{12} - \beta_{13})\beta_{23}\beta_{33} - \beta_{22}\omega_{13}\omega_{33} + \beta_{12}\omega_{23}\omega_{33} + \\ &\quad s(-\beta_{22}(\beta_{33}\omega_{13} + \beta_{13}\omega_{33}) + \beta_{12}(\beta_{33}\omega_{23} + \beta_{23}\omega_{33}))), \\ F_3(s) &= (s\beta_{13} + \omega_{13})(s\beta_{23} + \omega_{23})(s\beta_{33} + \omega_{33})(-\beta_{33}\omega_{13}\omega_{22} + \beta_{33}\omega_{12}\omega_{23} + \beta_{23}\omega_{13}\omega_{23} - \beta_{13}\omega_{23}^2 - \beta_{23}\omega_{12}\omega_{33} + \\ &\quad \beta_{13}\omega_{22}\omega_{33} + s(\beta_{23}^2\omega_{13} - \beta_{22}\beta_{33}\omega_{13} + \beta_{12}\beta_{33}\omega_{23} + \beta_{13}\beta_{22}\omega_{33} - \beta_{23}(\beta_{13}\omega_{23} + \beta_{12}\omega_{33}))), \\ F_4(s) &= (s\beta_{13} + \omega_{13})(s\beta_{23} + \omega_{23})(s\beta_{33} + \omega_{33})(s^2(-\beta_{23}^2 + \beta_{22}\beta_{33}) - \\ &\quad \omega_{23}^2 + \omega_{22}\omega_{33} + s(\beta_{33}\omega_{22} - 2\beta_{23}\omega_{23} + \beta_{22}\omega_{33})), \\ F_5(s) &= (s\beta_{13} + \omega_{13})(s\beta_{23} + \omega_{23})(s\beta_{33} + \omega_{33})(s^2(\beta_{13}\beta_{23} - \beta_{12}\beta_{33}) + \\ &\quad \omega_{13}\omega_{23} - \omega_{12}\omega_{33} + s(-\beta_{33}\omega_{12} + \beta_{23}\omega_{13} + \beta_{13}\omega_{23} - \beta_{12}\omega_{33})), \\ F_6(s) &= -(s\beta_{13} + \omega_{13})(s\beta_{23} + \omega_{23})(s\beta_{33} + \omega_{33})(s^2(\beta_{13}\beta_{22} - \beta_{12}\beta_{23}) + \\ &\quad \omega_{13}\omega_{22} - \omega_{12}\omega_{23} + s(-\beta_{23}\omega_{12} + \beta_{22}\omega_{13} + \beta_{13}\omega_{22} - \beta_{12}\omega_{23})). \end{aligned}$$

$$\frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(-\frac{\langle x_1(t) \rangle}{\sqrt{2}\sigma_{x_1}(t)}\right) \quad (4)$$

由此可以看出,粒子扩散翻越势能鞍点的通过几率仅取决于两个因素,即粒子输运的平均位移 $\langle x_1(t) \rangle$ 和位移的均方差 $\sigma_{x_1}(t)$ 。通过使用拉普拉斯变换求解方法对广义朗之万方程进行求解,可得,

$$x_1(t) = \langle x_1(t) \rangle + \sum_{i=1}^3 \int_0^t H_i(t-t') \xi_i(t') dt' \quad (5)$$

$$\sigma_{x_1}^2(t) = \int_0^t dt_1 H_i(t-t_1) \times$$

$$\int_0^{t_1} dt_2 \langle \xi_i(t_1) \xi_j(t_2) \rangle H_j(t-t_2) \quad (6)$$

在本文所考虑的情况下,

$$\langle x_1(t) \rangle = \sum_{i=1}^3 [C_i(t) x_{i0}], \quad (7)$$

其中 $C_i(t) = L^{-1}[F_i(s)/P(s)]$, 为一系列时间相关的函数表达式,分别为各 x_{i0} 的系数, $H_1(t) = L^{-1}[F_4(s)/P(s)]$, $H_2(t) = L^{-1}[F_5(s)/P(s)]$ 和 $H_3(t) = L^{-1}[F_6(s)/P(s)]$ 称作响应函数,其表达式分别取决于下列各个函数相关的拉普拉斯逆变换:

2 计算结果与讨论

在研究过程中,为了计算上的方便,先对各个系统参量进行无量纲化处理,并假设 $k_B T = 1$ 。定义粒子扩散通过三维势能鞍点的通过几率在 $t \rightarrow \infty$ 时的稳定值为: 稳态鞍点通过几率,即,

$$P_{st} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[- \langle x_1(t) \rangle / \sqrt{2} \sigma_{x_1}(t) \right].$$

为了对三维过阻尼情况下粒子在势能面上的扩散

过程有比较深入和全面的了解,对稳态鞍点通过几率 P_{st} 随各个矩阵(张量)非对角项的变化情况进行了逐一计算和分析,所得结果如图 1 所示。

图 1 描述了系统中只存在某类非对角项时稳态鞍点通过几率 P_{st} 的单一变化情况。在计算各个子图的数据时,已假定 $m_{ij} = m_{ji}, \beta_{ij} = \beta_{ji}, \omega_{ij} = \omega_{ji}$, 并以其中一项作为代表性变量进行画图;除了图中显示的非对角项数据对以外,其他非对角项的数值均取为零。

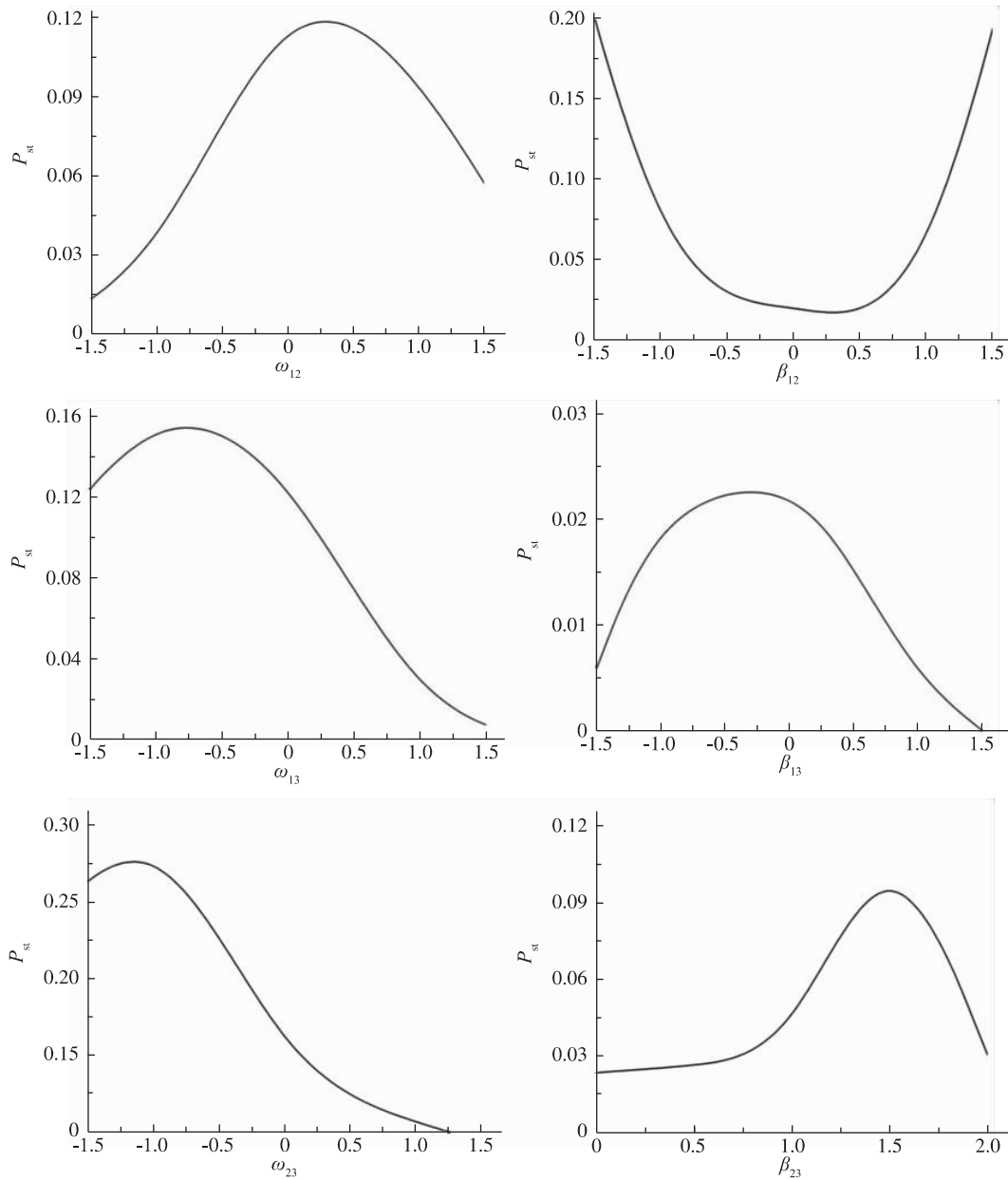


图 1 稳态鞍点通过几率随各粘滞张量和势频率张量非对角项的变化

Fig.1 Variation of the steady-state pass probability as the change of the non-diagonal components of potential frequency and viscous tensors

从图 1 可以看出,相对于各非对角项取值为零时, β_{12} 项的存在会使得 P_{st} 明显变大,而其他非对角项的存在则很可能会使 P_{st} 变小。其中, β_{12} 和 ω_{12} 的影响程度最大,而 β_{13} 的影响程度最小。不同图形中 P_{st} 的变化情况都表明:各非对角项的存在,确实会对粒子的扩散过程有明显的影响。而各非对角项在物理上代表系统中不同自由度之间的耦合(或称作相互作用),这说明,不同自由度之间的耦合会对粒子的扩散过程产生不可忽视

的影响。在这些影响的综合作用下,有可能会形成一条最适宜的扩散路径,使粒子获得相对更高的鞍点通过几率。

为了进行更深入的分析,图 2 ~ 4 给出了在其它非对角项同时存在的情况下稳态鞍点通过几率 P_{st} 随着某一类非对角项的变化情况。在计算各个子图的数据时,仍然假定 $m_{ij} = m_{ji}, \beta_{ij} = \beta_{ji}, \omega_{ij} = \omega_{ji}$, 并以其中一项作为代表性变量进行画图,各个非对角项的取值分别标记在相应的图中。

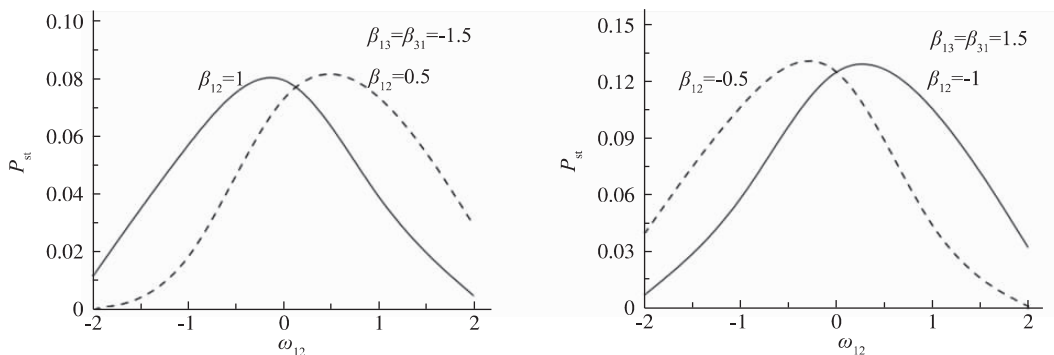


图 2 不同 β_{12} 情况下稳态鞍点通过几率随着 ω_{12} 的变化

Fig.2 Variation of the steady-state pass probability as the change of ω_{12} under different β_{12}

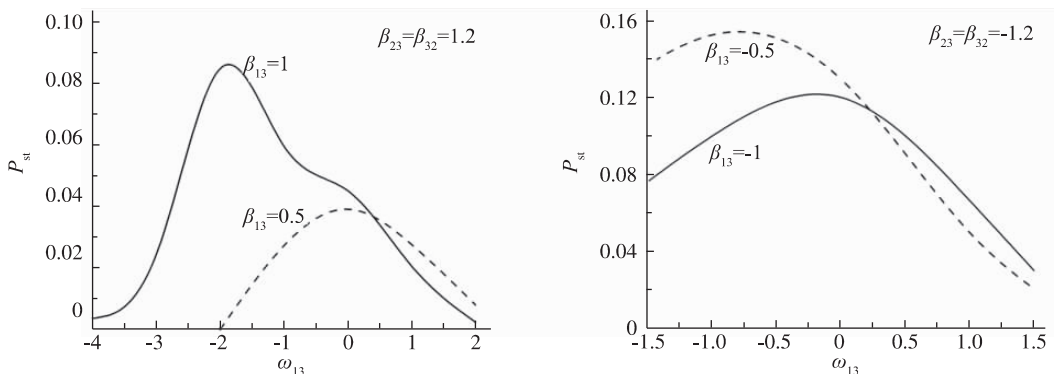


图 3 不同 β_{13} 情况下稳态鞍点通过几率随着 ω_{13} 的变化

Fig.3 Variation of the steady-state pass probability as the change of ω_{13} under different β_{13}

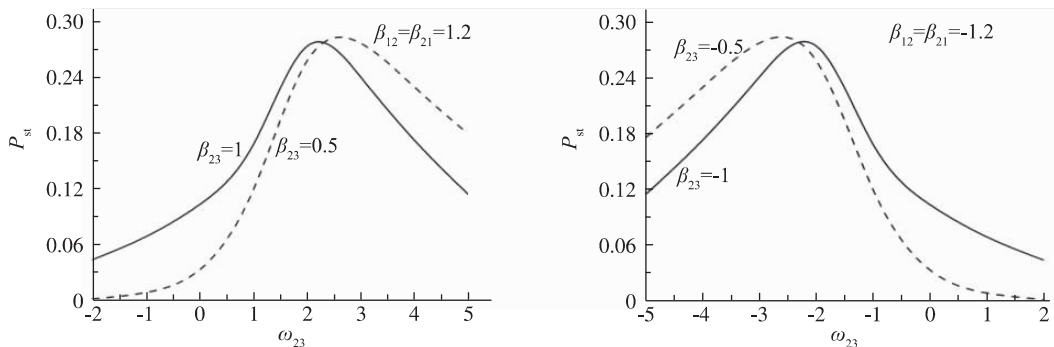


图 4 不同 β_{23} 情况下稳态鞍点通过几率随着 ω_{23} 的变化

Fig.4 Variation of the steady-state pass probability as the change of ω_{23} under different β_{23}

从图中可以看出,当各非对角项同时存在时,即在不同自由度之间的耦合所产生的影响的综合作用下,稳态鞍点通过几率 P_{st} 的极大值明显偏离了各非对角项等于零的位置。在大多数情况下, P_{st} 的极大值都明显地高于各非对角项为零时的取值。这说明,在不同自由度之间的耦合作用下,在三维势能面上扩散的布朗粒子预期能获得一条最适宜的路径,并以最大的概率翻越势能位垒。

3 结语

借助于求解三维过阻尼情况下的广义朗之万方程,本文对三维势能面上布朗粒子的扩散问题进行了细致的研究和分析。通过计算稳态鞍点通过几率随着各系统参量(张量)矩阵非对角项的变化情况,分析了不同自由度之间的耦合对粒子扩散过程的影响程度。研究发现,三维过阻尼系统中,粒子的扩散明显地受到各种耦合因素的影响,在它们的综合作用下会形成一条最佳扩散路径,使得粒子获得更高的稳态鞍点通过几率。本文所得结论预期能为核物理相关的实验研究提供一定的参考。

参考文献:

- [1] EINSTEIN A. On the theory of Brownian movement [J]. *Annals of Physics* 1906, 19: 371-381.
- [2] 常福宣,陈进,黄薇.反常扩散与分数阶对流-扩散方程[J].*物理学报*,2005,54(3):1113-1117.
- [3] KRAMERS H A. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions [J]. *Physica* VII, 1940, 7(4): 284-304.
- [4] BOILLEY D, ABE Y, BAO J D. Inverse Kramers formula and fusion dynamics of heavy ions [J]. *European Physics Journal A*, 2003, 18(4): 627-631.
- [5] BAO J D, BOILLEY D. Quantum propagator approach to heavy-ion fusion [J]. *Nuclear Physics A*, 2002, 707(1/2): 47-55.
- [6] METZLER R, KLAFTER J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach [J]. *Physics Report*, 2000, 339(1): 1-77.
- [7] BAO J D, ZHUO Y Z. Investigation on anomalous diffusion for nuclear fusion reactions [J]. *Physical Review C*, 2003, 67(6): 064606.
- [8] MORTON C R, BERRIMAN A C, BUTT R D, et al. Influence of higher-order deformations in the $^{34}\text{S} + ^{168}\text{Er}$ fusion reaction [J]. *Physical Review C*, 2001, 64(3): 034604.
- [9] GONTCHAR I L, DASGUPTA M, HINDE D J, et al. Importance of geometrical corrections to fusion barrier calculations for deformed nuclei [J]. *Physics Review C*, 2002, 65(3): 034610.
- [10] GONTCHAR I I, HINDE D J, DASGUPTA M, et al. Semi-microscopic calculations of the fusion barrier distributions for reactions involving deformed target nuclei [J]. *Physics Review C*, 2006, 73(3): 034610.
- [11] ABE Y, BOILLEY D, GIRAUD B G, et al. Diffusion over a saddle with a Langevin equation [J]. *Physics Review E*, 2000, 61(2): 1125-1133.
- [12] WANG C Y, JIA YING, BAO J D. Optimal path of diffusion over the saddle point and fusion of massive nuclei [J]. *Physics Review C*, 2008, 77(2): 024603.
- [13] WANG C Y, ZONG X M, ZHANG H, et al. Fractional entropy decay and the third law of thermodynamics [J]. *Physics Review E*, 2014, 90(2): 022126.
- [14] WANG C Y, SUN C F, ZHANG H, et al. Anomalous diffusion resulted from fractional damping [J]. *Chaos, Solitons & Fractals*, 2017, 105: 176-179.
- [15] WEISS U. *Quantum dissipative systems* [M]. 2nd ed. Singapore: World Scientific, 1999.

The Diffusion of Brownian Particles on the Three-dimensional Over-damped System

XIAO Lidong, WANG Chunyang

(School of Physics and Optoelectronic Engineering, Ludong University, Yantai 264039, China)

Abstract: The diffusion of Brownian particles passing over the saddle point of a three-dimensional potential energy surface was studied through analytically solving the generalized Langevin equation in the over-damped case. In order to analysis the influence of the coupling between different degree of freedom on the diffusion, the variation of the stationary passing probability as the change of each non-diagonal elements of the tensors was investigated thoroughly. The results show that the diffusion of the particles was obviously affected by various kinds of couplings, and under the combination of these influences, there exists an optimal diffusion path for the particles to obtain a maximum probability to overpass the barrier.

Keywords: over-damped system; non-diagonal elements; barrier passing probability; diffusion problem

(责任编辑 李秀芳)

(上接第124页)

Abstract ID: 1673-8020(2021)02-0121-EA

Numerical Study on Diffusing Passing over the Saddle Point of a Fluctuation Barrier

MA Haijun, WANG Chunyang

(School of Physics and Optoelectronic Engineering, Ludong University, Yantai 264039, China)

Abstract: The diffusion of Brownian particles passing over the saddle point of a fluctuation barrier was studied by using the method of Mento Carlo simulation. The steady-state barrier passing probability was calculated via introducing into the Langevin equation a fluctuation function and modulating on the factors of amplitude, initial phase and fluctuation frequency. All the results were compared with the over damped case. It is shown that compared with the overdamped case the particle diffusion in the general damped case is more affected by the fluctuation of potential energy such as the initial phase and the steady-state saddle point passing probability of the particle is also higher.

Keywords: fluctuation; general damping; Langevin equation

(责任编辑 李秀芳)