

А.Д. Терець^{1,2}, В.О. Машира^{2,3}, Т.Є. Корочкова²

МОДЕЛЮВАННЯ РЕТЧЕТ-ЕФЕКТУ МЕТОДОМ ТЕОРІЇ ІГОР ПРИ СТОХАСТИЧНИХ ФЛУКТУАЦІЯХ ДВОЯМНОГО ПОТЕНЦІАЛУ

¹ Фізичний факультет, Київський національний університет імені Тараса Шевченка
просп. Академіка Глушкова, 4, Київ, 03127, Україна

² Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна, E-mail: tais.crust@gmail.com

³ Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича Національної академії наук України
вул. Кржижановського, 3, Київ, 03142, Україна

Ретчет-ефект – феномен виникнення направлених потоків наночастинок за допомогою введення в систему з просторовою та (або) часовою асиметрією нерівноважних флуктуацій. Він використовується як один із способів створення керованого нанотранспорту і є основою теорії броунівських моторів. Моделювання флуктуаційного руху – це перспективний спосіб чисельних розрахунків основних характеристик броунівських моторів, він дозволяє уникнути складних обчислень і швидко отримати прогнози щодо можливості або неможливості генерації направлено руху в конкретно обраній моделі. При моделюванні зазвичай нерівноважні флуктуації вводяться в систему за допомогою дихотомного процесу, який переключає два періодичні асиметричні потенціальні профілі через певні фіксовані проміжки часу (детерміністичний процес) або випадково, із середніми часами життя потенціалів (стохастичний процес). В даній роботі досліджується моделювання процесу виникнення ретчет-ефекту в рамках стрибкової моделі броунівського мотора методом парадоксальних ігор Паррондо для стохастичного дихотомного процесу і проводиться порівняння з аналогічним детерміністичним процесом. Запропоновано методику розрахунку основних характеристик мотора для стохастичного дихотомного процесу і показано, що вона у граничних випадках відповідає аналітичному опису цієї моделі. Показано, що стохастичність процесу безпосередньо впливає на характеристики ретчет-ефекту: поведінка траєкторій середніх зміщень наночастинок набуває принципово іншого характеру, ніж в детерміністичному описі, причому значима відмінність у цих процесах проявляється при малих значеннях часів життя станів. Проведено дослідження несиметричних дихотомних процесів для різних температурних режимів роботи мотора, що дозволило проаналізувати особливості виникнення направлено руху на рівні одиничних стрибків, а також сформулювати рекомендації щодо можливого покращення ефективності роботи мотора для різних температур: для високотемпературного режиму роботи доцільно скорочувати час життя стану з включеним потенціалом, а для низькотемпературного режиму його, навпаки, потрібно збільшувати.

Ключові слова: ретчет-ефект, метод теорії ігор, парадоксальні ігри Паррондо, нерівноважні флуктуації, просторова асиметрія, часова асиметрія, стохастичний дихотомний процес, стрибкова модель, броунівський мотор, дифузійний нанотранспорт

ВСТУП

Дослідження направлено керованого транспорту наночастинок вздовж періодичних структур – актуальний напрямок сучасної нерівноважної статистичної фізики [1–5], який використовується для широкого спектру наукових задач, наприклад, при створенні нанорозмірних механізмів різного призначення і складності [6–8], при дослідженні внутрішньоклітинних транспортних систем [9, 10], при маніпулюванні зарядженими елементами мембрани та окремими структурами клітини [11, 12].

Окремо відзначимо ретчет-ефект – феномен виникнення направлених потоків наночастинок за допомогою введення в систему з просторовою та (або) часовою асиметрією нерівноважних флуктуацій, що виводять її зі стану термодинамічної рівноваги. Цей метод – один із способів створення керованого транспорту на нанорівні, він є основою теорії броунівських моторів і описаний для великої кількості моделей у різних наближеннях [1–3].

Динаміка руху броунівської частинки в полі дії флуктуючого просторово періодичного

потенціалу заданої форми в загальному випадку описується за допомогою рівняння Клейна-Крамєрса [13] або рівняння Смолюховського (у випадку, якщо рух відбувається в рідкій фазі і масою частинок, що вивчаються, можна знехтувати) [1] для функції розподілу частинки, доповненого умовами періодичності та нормування. Альтернативою розгляду дифузійної динаміки може бути кінетичний опис, в якому замість розгляду неперервного руху наночастинки в полі дії періодичного потенціалу вздовж вибраної вісі можна перейти до розгляду стрибкового руху частинки у кількох вибраних точках (дискретних «вузлах») на просторовому періоді потенціалу [14].

Перерозподіл заселеностей вузлів при введенні флуктуацій в систему, тобто, фіксацію направленої стрибкового руху, що виникає, дозволяє розрахувати кінетичне рівняння Паулі [15]. При цьому кількість вузлів зазвичай відповідає кількості ям на періоді потенціального профілю, в полі якого відбувається рух, а характеристики бар'єрів та їхніх положень задаються через константи швидкостей переходів між вузлами. Стрибкові моделі дифузійних процесів зручні також тим, що дають можливість моделювати процес виникнення ретчет-ефекту, наприклад, методом парадоксальних ігор Паррондо [16].

При моделюванні ретчет-ефекту зазвичай нерівноважні флуктуації вводяться в систему за допомогою дихотомного процесу, який переключує два періодичні асиметричні потенціальні профілі (два стани A і B) через певні фіксовані проміжки часу (детерміністичний процес) або випадково, із середніми часами життя потенціалів (стохастичний процес).

Перший спосіб є більш характерним для штучно створюваних наномашин (як, наприклад, у приладах для сепарації частинок, що використовують ретчет-ефект [17]), другий, більш численний, – для різноманітних білкових моторів, що існують у природі, в яких флуктуації ефективного потенціального профілю відбуваються внаслідок циклічного перебігу хімічної реакції гідролізу АТФ [9, 10, 18], або для штучно створюваних наномеханізмів, у яких для переключення станів використовується генератор випадкових чисел, циклічні хімічні реакції або накачка лазерним випромінюванням (як, наприклад, у

фотомоторах [19]). Згідно з попереднім дослідженням високо-температурних ретчетів [20], за інших рівних умов спосіб переключення потенціалів значно впливає на результуючий ретчет-ефект: у випадку детерміністичних флуктуацій він має більшу величину (більшу максимальну швидкість), але менший діапазон частоти флуктуацій, на якому його можна спостерігати, порівняно зі способом стохастичного регулювання.

У попередніх роботах методом теорії ігор нами було проведено моделювання стрибкового руху детерміністичного броунівського мотора з двоїмним потенціалом. При цьому було вивчено умови, що дозволяють контролювати напрямок створюваного потоку наночастинок [21, 22]. Вміння моделювати стохастичний дихотомний процес для дискретного часового параметра (що використовується в методі теорії ігор) доповнить та розширить цей метод у чисельних розрахунках характеристик броунівських моторів. Його можна використовувати як альтернативний спосіб швидкого розрахунку середньої швидкості мотора, уникаючи складних обчислень, в тих випадках, для яких достатньо кінетичного опису. До того ж, моделювання флуктуаційного руху є перспективним прогностичним інструментом для багатьох експериментальних і теоретичних задач, тому що дозволяє розширити розуміння механізмів генерації направленої руху на рівні елементарних актів дифузії.

В даній роботі розглядається теорія стохастичного дихотомного процесу з дискретною часовою змінною і наводяться співвідношення для середньої швидкості стрибкового броунівського мотора з асиметричним двоїмним потенціалом у детерміністичному та стохастичному підходах (2 розділ), представлена методика (3 розділ) та результати моделювання роботи броунівського мотора (4 розділ), а також аналіз та обговорення отриманих результатів (5 розділ).

ТЕОРІЯ СТОХАСТИЧНОГО ДИХОТОМНОГО ПРОЦЕСУ ТА СТРИБКОВОЇ МОДЕЛІ БРОУНІВСЬКОГО МОТОРА З ДВОІМНИМ ПОТЕНЦІАЛОМ

Розглянемо систему, в якій два стани A і B переключаються між собою випадковим чином (див. рис. 1). Часову дискретну змінну представимо у вигляді добутку $t = \kappa \Delta t$, де

Δt – часовий крок, а змінна k набуває цілих значень $0, 1, 2 \dots$. Вважатимемо, що в початковий момент часу $t = 0$ ($k = 0$) система перебувала в стані A , а в довільний момент часу ймовірності знайти систему в станах A і B дорівнюють $P_A(t)$ і $P_B(t)$, відповідно, причому $P_A(t) + P_B(t) = 1$ і $P_A(0) = 1$. Позначимо ймовірності переходів зі стану A в стан B і зі стану B у стан A як $P_{A \rightarrow B}$ і $P_{B \rightarrow A}$. Тоді ймовірності залишатися в цих станах будуть дорівнювати $(1 - P_{A \rightarrow B})$ і $(1 - P_{B \rightarrow A})$. Запишемо рівняння для ймовірності знайти систему в стані A в момент $t + \Delta t$:

$$P_A(t + \Delta t) = P_{B \rightarrow A} P_B(t) + (1 - P_{A \rightarrow B}) P_A(t). \quad (1)$$

Рівняння (1) можна представити як рекурентне рівняння вигляду $x_{k+1} = a + bx_k$, розв'язок якого можна легко отримати алгебраїчно. Оскільки $P_A(0) = 1$, розв'язок рівняння (1) запишеться у вигляді:

$$P_A(t) = \frac{P_{B \rightarrow A}}{P_{B \rightarrow A} + P_{A \rightarrow B}} + \frac{P_{A \rightarrow B}}{P_{B \rightarrow A} + P_{A \rightarrow B}} (1 - P_{B \rightarrow A} - P_{A \rightarrow B})^k. \quad (2)$$

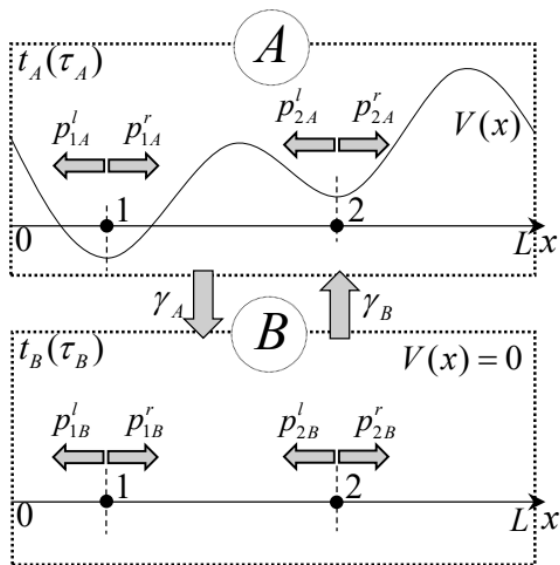


Рис. 1. Схема функціонування стрибкової моделі броунівського мотора on-off: два стани дихотомного процесу A (з включеним потенціалом $V(x)$) та B (за відсутності потенціалу), що характеризуються середніми часами життя t_A і t_B для стохастичного дихотомного процесу та їх аналогами, фіксованими часами життя τ_A і τ_B , для детерміністичного процесу

Покажемо, що при переході від дискретної часової змінної до неперервної ($\Delta t \rightarrow 0$) рівняння (1) та його розв'язок (2) перетворюються на відомі для дихотомного процесу співвідношення. Віднімаючи від рівняння (1) $P_A(t)$ і розділивши його на часовий крок Δt , отримуємо наступне рівняння:

$$\frac{P_A(t + \Delta t) - P_A(t)}{\Delta t} = \gamma_B P_B(t) - \gamma_A P_A(t), \quad (3)$$

в якому $\gamma_A = P_{A \rightarrow B} / \Delta t$ та $\gamma_B = P_{B \rightarrow A} / \Delta t$ мають значення констант швидкостей переходу між станами – середніх частот переключень потенціалів, а $t_A = 1/\gamma_A$ і $t_B = 1/\gamma_B$ мають значення середніх часів життя станів A і B . Переходячи до границі $\Delta t \rightarrow 0$, отримуємо рівняння для ймовірності $P_A(t)$ як функції неперервної часової змінної:

$$\frac{dP_A(t)}{dt} = \gamma_B P_B(t) - \gamma_A P_A(t), \quad (4)$$

розв'язок якого має вигляд [23, 24]:

$$P_A(t) = \frac{\gamma_B}{\gamma} + \frac{\gamma_A}{\gamma} e^{-\gamma t}, \quad (5)$$

де $\gamma = \gamma_A + \gamma_B$ – обернений час кореляції дихотомного процесу. Розв'язок (5) може бути отриманий з його дискретного аналога (2) наступним чином. Врахуємо, що $P_{A \rightarrow B} + P_{B \rightarrow A} = \gamma \Delta t$ і $k = t/\Delta t$. Тоді з використанням другої визначної границі отримуємо співвідношення $(1 - P_{B \rightarrow A} - P_{A \rightarrow B})^k = (1 - \gamma \Delta t)^{t/\Delta t} \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} e^{-\gamma t}$, яке, після підставлення у (4), дає розв'язок (5).

Таким чином, рівняння (1) та його розв'язок (2) є дискретним аналогом рівняння (4) та його розв'язку (5) для неперервної часової змінної. При малих Δt або великих середніх часах життя t_A і t_B розподіли для дискретної і неперервної часової змінної будуть близькі один до одного, тому особливості в поведінці параметрів броунівського мотора з дискретним часом життя виявлятимуться за досить малих значень t_A і t_B .

Броунівський мотор – це наносистема, в якій направлений рух частинок генерується введенням у систему з просторовою та (або) часовою асиметрією нерівноважних флуктуацій. Розглянемо модель, в якій стан з

періодичним асиметричним двоємним потенціалом з просторовим періодом L (стан A) чергується з іншим станом – вільною дифузією (on-off ratchet) або, моделюючи більш загальний випадок, з іншим періодичним потенціалом з тим самим просторовим періодом (стан B) за допомогою дихотомного детерміністичного чи стохастичного процесу.

Зафіксуємо положення потенціальних ям у стані A на періоді $(0, L)$ у вузлах 1 і 2 (рис. 1), і для частинки, що знаходиться у вузлі 1 (2), позначимо ймовірність стрибка в яму зліва як $p_{1(2)A}^l$, а стрибка в яму справа як $p_{1(2)A}^r$. Ці ймовірності мають значення ймовірностей подолання потенціального бар'єру ΔV , що відокремлює цю потенціальну яму від сусідньої, і пропорційні до експоненційних факторів закону Ареніуса $\exp[-\beta\Delta V]$, де $\beta = (k_B T)^{-1}$. У стані B аналогічно введемо в тих же вузлах 1 і 2 ймовірності переходу частинки ліворуч або праворуч $p_{1(2)B}^{l(r)}$, які (як показано в

роботі [22]) у випадку вільної дифузії можна визначити як:

$$p_{1B}^l = p_{1B}^r = c_1 / 2, \quad p_{2B}^l = p_{2B}^r = c_2 / 2, \quad (6)$$

а співвідношення c_1/c_2 визначається геометричним розташуванням вузлів 1 і 2 на просторовому періоді. Крім того, значення ймовірностей повинні задовольняти умові детального балансу, що має значення умови виникнення рівноваги в кожному стані, і яке накладається на кінетичні характеристики [22]:

$$p_{1A(B)}^l p_{2A(B)}^l = p_{1A(B)}^r p_{2A(B)}^r. \quad (7)$$

У випадку неперервної часової змінної середню швидкість броунівського мотора можна оцінити, використовуючи електроконформаційну модель [25], в рамках якої для стохастичного та детерміністичного дихотомного процесу (індекси s і d , відповідно) вона запишеться в наступному вигляді:

$$\langle \tilde{v}_{s,d} \rangle = \frac{\gamma_A \gamma_B}{\gamma} \left(\frac{P_{2B}}{\Sigma_B} - \frac{P_{2A}}{\Sigma_A} \right) \varphi_{s,d}, \quad \Sigma_{A(B)} = p_{1A(B)} + p_{2A(B)}, \quad (8)$$

$$\varphi_s = \left(1 + \frac{\gamma_A}{\Sigma_A} + \frac{\gamma_B}{\Sigma_B} \right)^{-1}, \quad \varphi_d = \frac{2 \sinh[\Sigma_A / (2\gamma_A)] \sinh[\Sigma_B / (2\gamma_B)]}{\sinh[\Sigma_A / (2\gamma_A) + \Sigma_B / (2\gamma_B)]},$$

де для випадку детерміністичного процесу $\gamma_{A(B)} = 1/\tau_{A(B)}$, а $\tau_{A(B)}$ – час життя відповідного стану.

Аналітичні співвідношення (8) для середньої швидкості будуть використовуватися в наступних розділах для порівняння зі значеннями середніх швидкостей мотора, отриманими в результаті процесу моделювання.

МЕТОДИКА МОДЕЛЮВАННЯ

Моделювання стрибкового дифузійного руху в термінах теорії ігор проводилося аналогічно підходу, описаного в роботі [21], згідно з яким зміщенню частинки щодо нульової позиції в момент часу $t = 0$ ставиться у відповідність зміна (наростання або спадання) капіталу гравця $n(t)$, а одноразовому акту стрибкового руху частинки в стані A або B – підкидання гральної кості в іграх A або B і,

відповідно, можливий одноразовий виграш або програш.

Процес моделювання доцільно розділити на два блоки: процес зміни капіталу всередині одного зі станів A або B (тобто за правилами гри A (B) у термінах теорії ігор) та процес переключення самих цих станів (ігор). Розглянемо кожен із них.

Всередині обраної гри (тобто вважаючи, що індекс A (B) вже визначено) кожен крок відпрацьовується за допомогою генератора випадкових чисел, що видає рівномірно розподілену на інтервалі $(0,1)$ випадкову величину. Якщо її значення попадає в інтервал $(0, p_{1(2)A(B)}^r]$, то капітал $n(t)$ збільшується на одиницю, якщо в інтервал $(p_{1(2)A(B)}^r, p_{1(2)A(B)}^l + p_{1(2)A(B)}^r]$, то зменшується на одиницю, а в інтервал $(p_{1(2)A(B)}^l + p_{1(2)A(B)}^r, 1)$ – залишається незмінним. Визначати, який

набір ймовірностей для вузлів з номером 1 або 2 буде справедливим у кожному конкретному випадку, зручно за парністю поточного значення капіталу $n(t)$ (а у випадку великої кількості ям N на просторовому періоді – функції залишку від операції ділення $n(t) \bmod N$).

За участь у певній грі в даний момент відповідає другий блок алгоритму, що моделює процес чергування ігор. У моделі детерміністичного дихотомного процесу в кожній з ігор симулюється кількість кроків - кидків кості, що дорівнює цілочисленному часу життя стану $\tau_{A(B)}$. Після виконання системою цієї кількості кроків ігри A і B обмінюються місцями. У випадку стохастичного дихотомного процесу перед кожним кроком кидання кості та зміни капіталу викликається додаткова процедура, яка визначає, чи буде зміна поточної гри. А саме, генерується додаткова випадкова величина, рівномірно розподілена на інтервалі $(0,1)$, і при попаданні її значення в інтервал $(0, \gamma_{A(B)})$ гра переключується, а при попаданні в інтервал $(\gamma_{A(B)}, 1)$ – залишається тією самою. Отже, детерміністичне переключення ігор реалізується простим лічильником циклу, а стохастичне – за участю додаткового випадкового числа при кожному проходженні циклу. Правильність функціонування цього блоку алгоритму можна перевірити, якщо побудувати траєкторію чергування ігор та

усереднити її: отримана чисельна залежність повинна співпасти з теоретичною залежністю (2).

РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ

Величина та напрямок руху, що виникає в ретчет-системах, можуть залежати від низки факторів. Один із способів керування напрямком руху on-off ретчета полягає у зміні температури системи при використанні двоямного потенціалу, положення мінімумів якого віддалені на різні відстані від найбільшого максимуму. Параметризація такого потенціалу у термінах ймовірностей переходів між потенціальними ямами проводилася у роботі [22]. Як зазначалося вище, у стані B , що відповідає вільній дифузії, геометричне розташування вузлів 1 і 2 (що відповідає за рух у той чи інший бік при різних температурах) характеризувалося різними ймовірностями переходу частинки з цих вузлів (в рівнянні (6)). Високотемпературний режим (a) ($\beta\Delta V = 0.5$) і низькотемпературний режим (b) ($\beta\Delta V = 2$) роботи ретчета задавалися в [22] двома наборами значень ймовірностей, які для можливості порівняння результатів використовуються і в цій статті: (a) $p_{1A}^l = 0$, $p_{1A}^r = 0.6065$, $p_{2A}^l = 0.3679$, $p_{2A}^r = 0$, $c_1 = 1$, $c_2 = 1/3$; і (b) $p_{1A}^l = 0$, $p_{1A}^r = 0.1353$, $p_{2A}^l = 0.0183$, $p_{2A}^r = 0$, $c_1 = 1$, $c_2 = 1/3$.

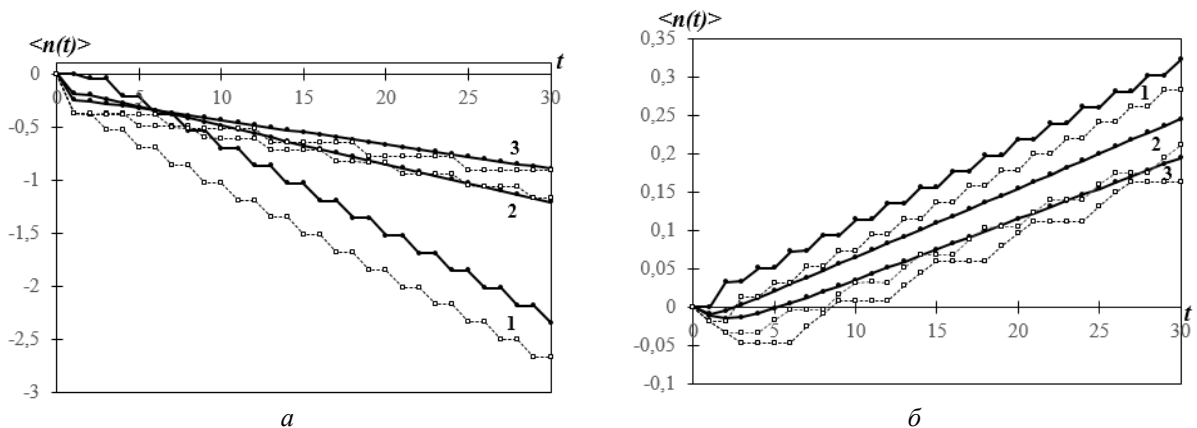


Рис. 2. Усереднені (по 3 млн. реалізацій) траєкторії накопичення капіталу для стохастичного (суцільні криві з круглими чорними маркерами) та детерміністичного (пунктирні криві з квадратними білими маркерами) симетричного дихотомного процесу. Значення цілих часів життя станів $t_A = \tau_A$ наведено поруч із відповідними парами кривих. a – відповідає високотемпературному набору параметрів, b – низькотемпературному

На рис. 2 представлено набори усереднених траєкторій накопичення капіталу для симетричного ($t_A = t_B$, $\tau_A = \tau_B$) дихотомного процесу різної тривалості. Для кожного значення часу життя станів t_A запропонованим в цій роботі методом розраховано криві, що відповідають стохастичному дихотомному процесу (суцільні криві з круглими чорними маркерами). Ці криві доповнено траєкторіями для таких самих значень t_A детерміністичного способу переключень потенціалів (пунктирні криві з квадратними білими маркерами). Рис. 2 *a* відповідає високотемпературному набору параметрів (*a*). На ньому всі криві спадаючі, що в термінах теорії ігор свідчить про зміщення частинок ліворуч. Рис. 2 *б* відповідає низькотемпературному набору параметрів (*б*), на цьому графіку все криві зростаючі, що говорить про виникнення руху частинок праворуч. Пари кривих з меншими часами життя мають більший нахил відносно вісі t , що відповідає виникненню більшої швидкості мотора з такими самими іншими параметрами. Для значень часів життя $t_A = \tau_A = 2,3$ і більше чітко видна різниця в структурі кривих різного способу переключень дихотомного процесу. Детерміністичні криві мають «періодичну структуру»: момент включення потенціалу A відображається стрибком, а дифузійна стадія B має вигляд плато, ці елементи повторюються при циклічній зміні станів, і візуально можна визначити часовий період безпосередньо за графіком. Стохастичні траєкторії мають усереднений характер, внаслідок випадкового переключення потенціалів чітка структура кривих зникає.

Особлива ситуація виникає при $t_A = \tau_A = 1$, для цього значення і стохастичні, і детерміністичні залежності після проходження початкових релаксаційних процесів виглядають однаково. Це пояснюється тим, що при такому малому часі життя неможливо організувати ймовірнісну схему зміни станів, оскільки при кожному підкиданні гральної кості достовірно відбувається переключення станів.

На рис. 3 наведено два сімейства графіків траєкторій зміни капіталу гравця для несиметричних дихотомних процесів: для фіксованого значення часу життя виключеного потенціалу $t_B = \tau_B = 6$ і різних

значень часу життя включеного потенціалу $t_A = \tau_A = 1,2,3$. Залежності рис. 3 *a* розраховано для високотемпературного набору параметрів (*a*), а рис. 3 *б* – для низькотемпературного набору параметрів (*б*) для стохастичного (суцільні криві з круглими чорними маркерами) та детерміністичного (пунктирні криві з квадратними білими маркерами) дихотомних процесів. Відрізки часу, на яких потенціал включений, позначено світло сірим кольором, і, відповідно, сірий та білий відрізки у сумі складають повний період зміни потенціалів. Як вище вже зазначалося, в перші декілька періодів відбуваються релаксаційні процеси, після проходження яких рух частинок можна вважати усталеним. Стохастичні залежності на всіх графіках мають однаковий характер: несиметричність часів життя станів A і B ніяк не впливає на структуру кривих (див. рис. 2), це майже прямі, які різняться лише нахилом відносно вісі t . Особливості формування направленного руху на рівні одиничних стрибків дозволяють проаналізувати детерміністичні залежності. Для високотемпературного режиму роботи мотора (рис. 3 *a*) переважна більшість частинок виконує рух (тобто, перестрибує в сусідню потенціальну яму) в перший крок після включення потенціалу, а залишок часу, що проходить після першого часового кроку, не є результативним щодо подальшої генерації руху. Для низькотемпературного режиму роботи (рис. 3 *б*), навпаки, рух відбувається протягом всього часу життя включеного потенціалу $V(x)$. Попри те, що фактично рух фіксується в стані A , передумова до нього формується в дифузійній стадії B , в якій частинки дифундують з положень вузлів (потенціальних ям) у довільному напрямку, а асиметричний потенціал при включенні стану A прискорює рух в одному напрямку і блокує в протилежному. При високих температурах термоактиваційне подолання потенціального бар'єру відбувається швидко, для цього достатньо одного часового кроку (рис. 3 *a*). А при низьких температурах на термоактиваційне подолання бар'єру та перестрибування у наступну потенціальну яму потрібно більше часу, що призводить до подовження фази руху в стані A на траєкторіях накопичення капіталу (рис. 3 *б*).

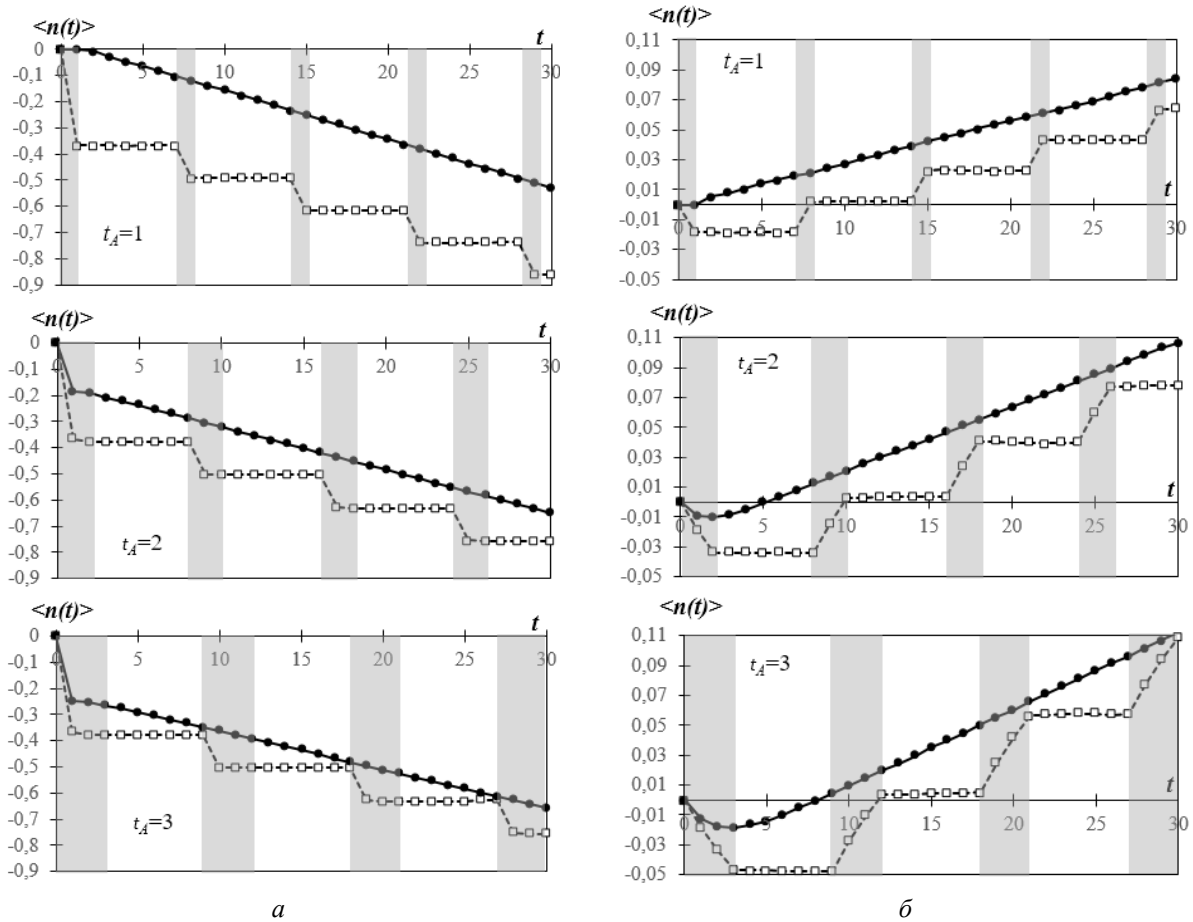


Рис. 3. Усреднені (по 3 млн. реалізацій) траєкторії накопичення капіталу для стохастичного (суцільні криві з круглими чорними маркерами) та детерміністичного (пунктирні криві з квадратними білими маркерами) дихотомного процесу. Всі траєкторії розраховано для фіксованого $t_B = \tau_B = 6$ і різних значень $t_A = \tau_A = 1, 2, 3$ (зазначені на графіках). *a* – відповідає високотемпературному набору параметрів, *б* – низькотемпературному. Інтервали часу з включеним потенціалом позначені сірим кольором

Порівняння залежностей середніх швидкостей (нахилів траєкторій накопичення капіталу) від безрозмірного частотного параметра $\tilde{\gamma} \Delta t$ ($\tilde{\gamma} = \gamma_A \gamma_B / (\gamma_A + \gamma_B)$) симетричного дихотомного процесу, отримані методом моделювання та за аналітичними формулами (8), представлені на рис. 4. Рис. 4 *a, б* відповідають наборам ймовірностей (*a*) та (*б*). У високотемпературному режимі роботи броунівського мотора (рис. 4 *a*) детерміністичні та стохастичні залежності відрізняються лише за високих частот, тоді як у низькотемпературному режимі (рис. 4 *б*) залежності зближуються, але повільніше. Таким чином, проведене моделювання підтверджує висновок про збіг результатів неперервного та дискретного описів при малих частотах (див. розділ 2). Стохастична

розрахункова залежність і крива, що відповідає аналітичному представленню (8) для випадку стохастичного переключення станів (суцільна і пунктирна криві з круглими маркерами), збігаються не повністю, але зближуються при зменшенні частотного параметра, так само як детерміністичні розрахункові залежності і аналітичне представлення (8) для випадку детерміністичного переключення станів (суцільна та пунктирна криві з квадратними маркерами). Оскільки формула (8) виводилася для неперервного часового параметра, а моделювання проводилося для дискретної часової змінної, збіг можна вважати задовільним. Отже, результати моделювання підтверджуються аналітичними залежностями.

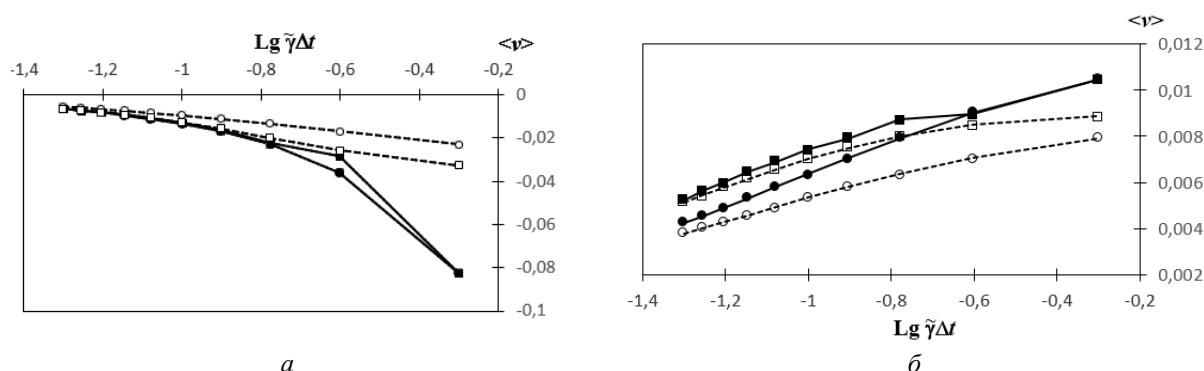


Рис. 4. Залежності середньої швидкості від безрозмірного частотного параметра $\tilde{\gamma} \Delta t$ для високотемпературного (а) та низькотемпературного (б) наборів параметрів. Суцільними лініями з чорними маркерами позначено криві – результати моделювання, а штриховими з білими маркерами – залежності, розраховані за аналітичним представленням (8). Криві з круглими маркерами відповідають стохастичному дихотомному процесу, а з квадратними – детерміністичному дихотомному процесу

АНАЛІЗ ТА ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

В даній роботі продовжено і розширено підхід попередніх робіт авторів [21, 22] в області моделювання нерівноважного направленного транспорту методом теорії ігор як чисельного методу розрахунку характеристик броунівських моторів. До отриманих раніше результатів додано методику розрахунку стохастичного дихотомного процесу і показано, що запропонований спосіб у граничних випадках відповідає аналітичному опису цієї моделі.

Проведене порівняння результатів моделювання детерміністичного та стохастичного переключення станів моторів виявило, що стохастичність процесу безпосередньо впливає на характеристики ретчет-ефекту. В стохастичному описанні використовується ймовірнісна схема переключення станів, і поведінка траєкторій набуває принципово іншого характеру, ніж в детерміністичному (рис. 2). Значима відмінність у цих процесах проявляється при малих значеннях часів життя станів (і, відповідно, великих частотах): згенерована швидкість мотора за величиною істотно відрізняється для різних способів. Очевидно, що при зменшенні частоти переключення станів відмінності зменшуються (див. рис. 4), а при малих частотах взагалі зникають. При цих умовах функціонування мотора переходить в адиабатичний режим, в якому немає

відмінностей у способі процесу переключення потенціалів.

Для ілюстрації запропонованої методики було використано два набори ймовірнісних параметрів (а) і (б), які відповідають різним температурам середовища. За ними побудовано рисунки 2–4 та досліджено поведінку характеристик мотора в низькотемпературному та високотемпературному режимах. Аналіз проведеного моделювання підтвердив можливість керувати напрямком руху мотора за допомогою зміни температурного режиму, а також продемонстрував різницю між детерміністичним і стохастичним дихотомними процесами. Поведінка траєкторій накопичення капіталу гравця (зміщення частинок) при несиметричних дихотомних процесах при різних температурах середовища (рис. 3) виявилась різною, що дозволило виявити особливості виникнення направленного руху на рівні одиничних стрибків.

По результатам аналізу були сформульовані рекомендації щодо можливого покращення ефективності роботи мотора. Так, для високотемпературного режиму роботи доцільно скорочувати час життя стану A з включеним потенціалом $V(x)$, а для низькотемпературного режиму, навпаки, тривалість цієї фази має вирішальне значення, і її доцільно збільшувати.

Ratchet effect modeling by method of paradoxical games for stochastic fluctuations of double-well potential

A.D. Terets, V.A. Mashira, T.Ye. Korochkova

Faculty of Physics, Taras Shevchenko National University of Kyiv

4 Academician Glushkov Avenue, Kyiv, 03127, Ukraine

Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine

17 General Naumov Str., Kyiv, 03164, Ukraine, tais.crust@gmail.com

Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of National Academy of Sciences of Ukraine

4 Krzhizhanovsky Str., Kyiv, 03142, Ukraine

The ratchet effect is a directed nanoparticle flux phenomenon induced by nonequilibrium fluctuations in a system with spatial and (or) temporal asymmetry. One is used as the way to create a controlled nanotransport and is the basis of the theory of Brownian motors. Fluctuation motion simulation is a promising way to calculate the main characteristics of Brownian motors, it avoids complex calculations and quickly obtains predictions about the appearance or absence of generated directional motion in a specific model. Nonequilibrium fluctuations are usually introduced into the system by a dichotomous process that switches two periodic asymmetric potential profiles at certain fixed intervals (deterministic process), or randomly with average potential lifetimes (stochastic process). We investigate the modeling of the process of the ratchet effect in the framework of the Brownian motor jump-like model by the method of Parrondo's paradoxical game for the stochastic dichotomous process and compare results with a similar deterministic process. A calculus method for the main characteristics obtaining of the motor with stochastic dichotomous process is proposed, it is shown correspondence to the analytical description of this model in extreme cases. It is shown that the stochasticity of the process directly affects the characteristics of the ratchet effect: the trajectories of the average displacements of nanoparticles fundamentally differs in the deterministic description, and a gradual difference in these processes is observed at low values. The study of asymmetric dichotomous processes for different temperature modes of motor operation is carried out. The model allows one to analyze the peculiarities of the directional motion starting at the level of single jumps, as well as to formulate recommendations for possible improvement of motor efficiency for different temperatures. For high-temperature mode, it is advisable to reduce the lifetime of the state with the active potential, and for low-temperature mode, arbitrary, it should be increased.

Keywords: ratchet effect, game theory approach, Parrondo's paradoxical game, nonequilibrium fluctuations, spatial asymmetry, temporal asymmetry, stochastic dichotomous process, jump-like model, Brownian motor, diffusion nanotransport

ЛІТЕРАТУРА

1. Reimann P. Brownian Motors: Noisy Transport far from Equilibrium // *Phys. Rep.* –2002. –V. 361, N 2–4. – P. 57–265.
2. Astumian R.D. Thermodynamics and kinetics of a Brownian motor // *Science.* – 1997. – V. 276, N 5314. – P. 917–922.
3. Cubero D., Renzoni F. Brownian Ratchets: From Statistical Physics to Bio and Nanomotors. – Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2016. – 200 p.
4. Hanggi P. Organic electronics: Harvesting randomness // *Nat. Mater.* – 2011. – V. 10. – P. 6–7.
5. Astumian R.D. Adiabatic Theory for Fluctuation-Induced Transport on a Periodic Potential // *J. Phys. Chem.* – 1996. – V. 100, N 49. – P. 19075–19081.
6. Kay E. R., Leigh D. A., Zerbetto F. Synthetic Molecular Motors and Mechanical Machines // *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* – 2007. – V. 46, N 1–2. – P. 72–191.
7. Cheatham M.R., Bramble J.P., McMillan D.G.G. et al Manipulation and sorting of membrane proteins using patterned diffusion-aided ratchets with AC fields in supported bilayers // *Soft Matter.* – 2012. – V. 8, N 20. – P. 5459–5465.
8. Drexler K.E. Nanosystems: Molecular Machinery, Manufacturing and Computation. – New York: Wiley. – 1992. – 576 p.
9. Howard J. Mechanics of Motor Proteins and the Cytoskeleton. – Sunderland, MA: Sinauer Associates, 2001. – 367 p.
10. Lipowsky R., Klumpp S. 'Life is Motion' – Multiscale Motility of Molecular. Motor // *Physica A.* – 2005. – V. 352, N 1. – P. 53–112.

11. Krogh A., Larsson B., von Heijne G., Sonnhammer E. Predicting transmembrane protein topology with a hidden Markov model. Application to complete genomes // *J. Mol. Biol.* – 2001. – V. 305, N 3. – P. 567–580.
12. Vale R.D. The molecular motor toolbox for intracellular transport // *Cell.* – 2003. – V. 112, N 4. – P. 467–480.
13. Kramers H.A. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions // *Physica VII.* – 1940. – V. 7, N 4. – P. 284–304.
14. Derrida B. Velocity and diffusion constant of a periodic one-dimensional hopping model // *J. Stat. Phys.* – 1983. – V. 31, N 3. – P. 433–450.
15. Gardiner C.R. *Handbook of Stochastic Methods*, 2nd ed. – Berlin: Springer, 1985. – 442 p.
16. Parrondo J.M.R., Harmer G.P., Abbott D. New paradoxical games based on Brownian ratchets // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – V. 5, N 4. – P. 5226–5229.
17. Gorre-Talini L., Jeanjean S., Silberzan P. Sorting of Brownian particles by pulsed application of an asymmetric potential // *Phys. Rev. E.* – 1997. – V. 56, N 2. – P. 2025–2034.
18. Okada Y.; Hirokawa N. A Processive Single-Headed Motor: Kinesin Superfamily Protein KIF1A // *Science.* – 1999. – V. 283, N 5405. – P. 1152–1157.
19. Dekhtyar M.L., Ishchenko A.A., Rozenbaum V.M. Photoinduced molecular transport in biological environments based on dipole moment fluctuations // *J. Phys. Chem. B.* – 2006. – V. 110, N 41. – P. 20111–20114.
20. Розенбаум В.М. Высокотемпературные броуновские моторы: детерминистические и стохастические флуктуации периодического потенциала // *Письма в ЖЭТФ.* – 2008. – Т. 88, № 5. – С. 391–395.
21. Розенбаум В.М. Конструктивная роль хаоса: броуновские моторы и выигрышные стратегии в теории игр // *Хімія, Фізика та Технологія Поверхні.* – 2020. – Т. 11, № 1. – С. 100–114.
22. Терец А.Д., Корочкова Т.Е., Розенбаум В.М. и др. Моделирование обращения движения броуновской частицы под действием неравновесных флуктуаций // *Хімія, Фізика та Технологія Поверхні.* – 2020. – Т. 11, № 3. – С. 395–404.
23. Корочкова Т.Е., Шкода Н.Г., Розенбаум В.М. и др. Общее решение кинетического уравнения Паули и его приложения к диффузионному транспорту // *Поверхность.* – 2018. – Т. 10(25). – С. 3–18.
24. Rozenbaum V.M., Shapochkina I.V., Teranishi Y., Trakhtenberg L.I. High-temperature ratchets driven by deterministic and stochastic fluctuations // *Phys. Rev. E.* – 2019. – V. 99, N 1. – P. 012103-1-10.
25. Rozenbaum V.M., Yang D.-Y., Lin S.H., Tsong T.Y. Catalytic Wheel as a Brownian Motor // *J. Phys. Chem. B.* – 2004. – V. 108, N 40. – P. 15880–15889.

REFERENCES

1. Reimann P. Brownian Motors: Noisy Transport far from Equilibrium. *Phys. Rep.* 2002. **361**(2–4): 57.
2. Astumian R.D. Thermodynamics and kinetics of a Brownian motor. *Science.* 1997. **276**(5314): 917.
3. Cubero D., Renzoni F. *Brownian Ratchets: From Statistical Physics to Bio and Nanomotors.* (Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2016).
4. Hanggi P. Organic electronics: Harvesting randomness. *Nat. Mater.* 2011. **10**: 6.
5. Astumian R.D. Adiabatic Theory for Fluctuation-Induced Transport on a Periodic Potential. *J. Phys. Chem.* 1996. **100**(49): 19075.
6. Kay E. R., Leigh D. A., Zerbetto F. Synthetic Molecular Motors and Mechanical Machines. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 2007. **46**(1–2): 72.
7. Cheetham M.R., Bramble J.P., McMillan D.G.G., Bushby R.J., Olmsted P.D., Jeuken L.J.C., Evans S.D. Manipulation and sorting of membrane proteins using patterned diffusion-aided ratchets with AC fields in supported bilayers. *Soft Matter.* 2012. **8**(20): 5459.
8. Drexler K.E. *Nanosystems: Molecular Machinery, Manufacturing and Computation.* (New York: Wiley, 1992).
9. Howard J. *Mechanics of Motor Proteins and the Cytoskeleton.* (Sunderland, MA: Sinauer Associates, 2001).
10. Lipowsky R., Klumpp S. ‘Life is Motion’ – Multiscale Motility of Molecular. Motor. *Physica A.* 2005. **352**(1): 53.
11. Krogh A., Larsson B., von Heijne G., Sonnhammer E. Predicting transmembrane protein topology with a hidden Markov model. Application to complete genomes. *J. Mol. Biol.* 2001. **305**(3): 567.
12. Vale R.D. The molecular motor toolbox for intracellular transport. *Cell.* 2003. **112**(4): 467.
13. Kramers H.A. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. *Physica VII.* 1940. **7**(4): 284.
14. Derrida B. Velocity and diffusion constant of a periodic one-dimensional hopping model. *J. Stat. Phys.* 1983. **31**: 433.

15. Gardiner C.R. *Handbook of Stochastic Methods*. 2nd ed (Berlin: Springer, 1985).
16. Parrondo J.M.R., Harmer G.P., Abbott D. New paradoxical games based on Brownian ratchets. *Phys. Rev. Lett.* 2000. **85**(4): 5226.
17. Gorre-Talini L., Jeanjean S., Silberzan P. Sorting of Brownian particles by pulsed application of an asymmetric potential. *Phys. Rev. E*. 1997. **56**(2): 2025.
18. Okada Y., Hirokawa N. A Processive Single-Headed Motor: Kinesin Superfamily Protein KIF1A. *Science*. 1999. **283**(5405): 1152.
19. Dekhtyar M.L., Ishchenko A.A., Rozenbaum V.M. Photoinduced molecular transport in biological environments based on dipole moment fluctuations. *J. Phys. Chem. B*. 2006. **110**(41): 20111.
20. Rozenbaum V.M. High-temperature brownian motors: Deterministic and stochastic fluctuations of a periodic potential. *JETP Lett.* 2008. **88**(5): 342.
21. Rozenbaum V.M. Constructive role of chaos: Brownian motors and winning strategies in game theory. *Him. Fiz. Tehnol. Poverhni*. 2020. **11**(1): 100. [in Russian].
22. Terets A.D., Korochkova T.Ye., Rozenbaum V.M., Mashira V.A., Shapochkina I.V., Furs A.N., Ikim M.I., Gromov V.F. Motion reversal modeling for a Brownian particle affected by nonequilibrium fluctuations. *Him. Fiz. Tehnol. Poverhni*. 2020. **11**(3): 395. [in Russian].
23. Korochkova T.E., Shkoda N.G., Rozenbaum V.M., Kamysh Yu.A., Shapochkina I.V., Ikim M.I., Gerasimov G.N., Gromov V.F. General solution of Pauli master equation and applications to diffusive transport. *Surface*. 2018. **10**(25): 3. [in Russian].
24. Rozenbaum V.M., Shapochkina I.V., Teranishi Y., Trakhtenberg L.I. Symmetry of deterministic ratchets. *Phys. Rev. E*. 2019. **100**(2): 022115-1-16.
25. Rozenbaum V.M., Yang D.-Y., Lin S.H., Tsong T.Y. Catalytic Wheel as a Brownian Motor. *J. Phys. Chem. B*. 2004. **108**(40): 15880.

Надійшла 14.05.2022, прийнята 05.09.2022