

Д. Е. ТЕМКИН

# ОДНОМЕРНЫЕ СЛУЧАЙНЫЕ БЛУЖДЕНИЯ В ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ЦЕПОЧКЕ

(Представлено академиком А. Н. Колмогоровым 3 V 1972)

Цель заметки — отметить некоторые особенности, обнаруженные при анализе случайных блужданий в двухкомпонентной неупорядоченной цепочке. Имеется бесконечная цепочка, в каждый узел которой помещается частица  $A$  или  $B$ . Вероятность заполнения частицей  $B$  равна  $C$ , и корреляция при заполнении отсутствует. В начальный момент времени  $t = 0$  в некоторый узел помещена меченая частица  $M$  вместо имевшейся там  $A$  или  $B$ . Частица  $M$  совершает блуждания, обмениваясь местами с ближайшими к ней частицами  $A$  и  $B$ . Так,  $M$  с частотой  $\nu_{+A}$  обменивается местами с соседней справа частицей  $A$  и переходит на один шаг вправо (размерность  $\nu_{+A}$  совпадает с  $t^{-1}$ ), а с частотой  $\nu_{-A}$  переходит влево за счет обмена с  $A$ ;  $\nu_{+B}$  и  $\nu_{-B}$  — аналогичные частоты обмена местами  $M$  с  $B$ . Вследствие несимметричности перескоков  $M$  вправо и влево эта частица, совершая блуждания, будет дрейфовать вправо или влево в зависимости от соотношения между частотами и концентрацией  $C$ . Подобная схема случайных блужданий возникает, например, при анализе редупликации многокомпонентных цепей <sup>(1)</sup>, диффузии <sup>(2)</sup> и кинетики фазовых превращений в сплавах <sup>(3-5)</sup>. Отличие данной схемы блужданий от обычной (см., например, <sup>(6)</sup>), заключающееся в зависимости вероятности перескоков  $M$  от структуры цепочки около  $M$ , приводит к интересным эффектам:

1) в некоторой области параметров  $C$ ,  $\nu_{\pm A}$  и  $\nu_{\pm B}$  (а не в одной точке) стационарная скорость дрейфа частицы  $M$  равна нулю <sup>(5)</sup>;

2) возникают нестационарные явления. В период нестационарности меняется структура цепочки, если ее рассматривать в системе координат, связанной с частицей  $M$ , а такие характеристики процесса, как скорость дрейфа  $v$  частицы  $M$  и коэффициент диффузии, зависят от времени <sup>(2, 5)</sup>.

В работе <sup>(1)</sup> решена задача о стационарной скорости дрейфа и распределении компонентов в цепочке относительно частицы  $M$ . Кратко воспроизведем схему вычисления  $v$  применительно к рассматриваемому здесь случаю <sup>(3)</sup>.

Пусть  $\beta_1\beta_2\dots$  — некоторая последовательность расположения частиц  $A$  и  $B$  справа от  $M$  (узлам правее  $M$  приписывается индекс 1, 2, ...;  $\beta_i = A$  или  $B$ ), а  $U_{\beta_1\beta_2\dots}$  — вероятность того, что частица  $M$ , переместившись на один шаг вправо за счет обмена местами с частицей  $\beta_1$ , никогда не вернется в первоначальную позицию при условии, что следующими за  $\beta_1$  являются частицы  $\beta_2, \beta_3, \dots$ . Если ввести  $\tau_{\beta_1\beta_2\dots}$  — среднее время, в течение которого  $M$  находится в позиции, перед которой имеется конфигурация  $\beta_1\beta_2\dots$ , то, как можно показать,

$$\tau_{\beta_1\beta_2\dots} = (\nu_{+\beta_1} U_{\beta_1\beta_2\dots})^{-1}. \quad (1)$$

При хаотичном распределении  $A$  и  $B$  в цепочке вероятность конфигурации  $\beta_1\beta_2\dots$  равна произведению  $C_{\beta_1}C_{\beta_2}\dots$ , где  $C_{\beta_i} = C$  при  $\beta_i = B$  и  $(1 - C)$  при  $\beta_i = A$ . Поэтому частица  $M$  в каждом узле цепочки находится в среднем в течение промежутка  $\tau$ , равного

$$\tau = \sum_{\beta_1, \beta_2, \dots} \tau_{\beta_1\beta_2\dots} \prod_{i=1}^{\infty} C_{\beta_i}. \quad (2)$$

|                   | Неупорядоченная цепочка, (10), |        |         |         |         |         |        |         |         |         |         |         |
|-------------------|--------------------------------|--------|---------|---------|---------|---------|--------|---------|---------|---------|---------|---------|
| $v_{-B}$          | 0,0001                         | 0,3    | 0,6     | 0,9     | 1,3     | 1,35    | 1,5    | 2,5*    | 4       | 6       | 10      | 1000    |
| $n \cdot 10^{-5}$ | 3,68                           | 0,881  | 3,32    | 5,28    | 12,36   | 11,88   | 10     | 6,8     | 16,08   | 12,52   | 8,12    | 4,40    |
| $\Delta$          | 194 286                        | 33 112 | 83 736  | 76 466  | 35 014  | 21 684  | 1958   | -1350   | -29386  | -45562  | -47254  | -42124  |
| $l$               | 281 072                        | 61 221 | 207 545 | 302 025 | 636 398 | 605 509 | 501062 | 339 606 | 789 200 | 603 700 | 382 921 | 198 993 |
| $v = \Delta/l$    | 0,691                          | 0,541  | 0,403   | 0,253   | 0,055   | 0,036   | 0,0039 | -0,004  | -0,037  | -0,076  | -0,123  | -0,212  |
| $v_{\text{выч}}$  | 0,6940                         | 0,5470 | 0,4000  | 0,2530  | 0,0570  | 0,0325  | 0      | 0       | -0,0282 | -0,0733 | -0,1123 | -0,1758 |

Примечания. 1)  $n$  — число скачков частицы  $M$ ,  $\Delta$  — ее смещение из начального положения, сместилась влево на 1350 шагов и в течение последующих  $5,6 \cdot 10^5$  скачков колебалась около этой

Средняя скорость дрейфа  $M$  вправо равна  $v = 1/\tau$ . Вероятность  $U_{\beta_1\beta_2\dots}$  удовлетворяет уравнению

$$U_{\beta_1\beta_2\dots} = \frac{v_{+\beta_2}}{(v_{+\beta_2} + v_{-\beta_1})} [U_{\beta_2\beta_3\dots} + (1 - U_{\beta_2\beta_3\dots}) U_{\beta_1\beta_2\dots}], \quad (3)$$

решением которого является

$$U_{\beta_1\beta_2\dots} = \left[ 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \prod_{i=1}^k \left( \frac{v_{-\beta_i}}{v_{+\beta_{i+1}}} \right) \right]^{-1}. \quad (4)$$

Учитывая (1), (2) и (4), получаем для скорости дрейфа вправо

$$v = v_{+A}v_{+B}(1 - \eta_1)/[v_{+B} + C(v_{+A} - v_{+B})], \quad \eta_1 \equiv C \frac{v_{-B}}{v_{+B}} + (1 - C) \frac{v_{-A}}{v_{+A}}. \quad (5)$$

Выражение для скорости дрейфа влево получается из (5) после изменения знака у  $v$  и циклической замены  $v_{+A} \rightleftharpoons v_{-A}$ ,  $v_{+B} \rightleftharpoons v_{-B}$ :

$$v = -v_{-A}v_{-B}(1 - \eta_2)/[v_{-B} + C(v_{-A} - v_{-B})], \quad \eta_2 \equiv C \frac{v_{+B}}{v_{-B}} + (1 - C) \frac{v_{+A}}{v_{-A}}. \quad (6)$$

Полагая  $\eta_1 = 1$  и  $\eta_2 = 1$ , находим два значения  $C$ :

$$C_1 = v_{+B}(v_{+A} - v_{-A}) / (v_{+A}v_{-B} - v_{-A}v_{+B}), \quad (7)$$

$$C_2 = v_{-B}(v_{+A} - v_{-A}) / (v_{+A}v_{-B} - v_{-A}v_{+B}),$$

при которых обращается в ноль соответственно скорость дрейфа вправо и влево. Поскольку  $0 \leq C \leq 1$ , то при  $v_{+A} > v_{-A}$  и  $v_{+B} > v_{-B}$   $M$  дрейфует вправо, а при  $v_{+A} < v_{-A}$  и  $v_{+B} < v_{-B}$  — влево при любых  $C$ . Если же  $v_{+A} > v_{-A}$  и  $v_{+B} < v_{-B}$ , то при  $0 \leq C < C_1$   $M$  дрейфует вправо, при  $C_2 < C \leq 1$  — влево, а в области концентраций  $C_1 \leq C \leq C_2$  отсутствует стационарный режим с отличной от нуля скоростью дрейфа.

В случае цепочки с полностью упорядоченной структурой, задаваемой периодическим повторением последовательности частиц  $\beta_1\beta_2\dots\beta_r$ , имеем  $r$  вероятностей сохранения  $U_{\beta_i\beta_{i+1}\dots}$  и времен  $\tau_{\beta_i\beta_{i+1}\dots}$ ,  $i = 1, \dots, r$ . Суммируя последние, находим  $\tau$  и  $v = 1/\tau$  <sup>(5)</sup>:

$$v = r \left[ 1 - \left( \frac{v_{-A}}{v_{+A}} \right)^{r(1-C)} \left( \frac{v_{-B}}{v_{+B}} \right)^{rC} \right] / \left[ \sum_{i=1}^r \frac{1}{v_{+\beta_i}} + \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^{r-1} \frac{1}{v_{+\beta_{i+j}}} \prod_{k=0}^{j-1} \left( \frac{v_{-\beta_{i+k}}}{v_{+\beta_{i+k}}} \right) \right]. \quad (8)$$

Здесь учтено, что среди  $r$  частиц ( $r$  — период структуры цепочки) имеется  $rC$  частиц  $B$  и  $r(1 - C)$  частиц  $A$ . Согласно (8) независимо от  $r$   $v = 0$  при  $C = C_0$ , где

$$C_0 = \ln \frac{v_{-A}}{v_{+A}} / \ln \frac{v_{-A}v_{+B}}{v_{+A}v_{-B}}. \quad (9)$$

Выражения (5), (6) и (8) для скорости дрейфа проверялись путем моделирования на ЭЦВМ процесса блуждания частицы  $M$  <sup>(5)</sup>. В началь-

Упорядоченная цепочка, (11)

| 0,0001 | 0,3    | 0,9    | 1,3    | 1,5     | 1,75    | 2,0     | 2,5     | 3,0     | 4,0     | 5,0     |
|--------|--------|--------|--------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| 0,44   | 0,44   | 0,96   | 0,92   | 4,16    | 5,20    | 3,44    | 0,52    | 0,48    | 0,80    | 1,12    |
| 24 810 | 17 022 | 14 148 | 5272   | 9582    | -8004   | -13212  | -4124   | -5210   | -11634  | -18700  |
| 34 341 | 30 525 | 55 194 | 48 643 | 212 962 | 257 255 | 165 451 | 23 993  | 21 480  | 34 282  | 46 783  |
| 0,722  | 0,558  | 0,256  | 0,108  | 0,045   | -0,023  | -0,080  | -0,172  | -0,243  | -0,339  | -0,400  |
| 0,7194 | 0,5580 | 0,2607 | 0,1090 | 0,0464  | -0,0214 | -0,0793 | -0,1718 | -0,2414 | -0,3374 | -0,3992 |

$t$  — время блуждания. 2) В эксперименте, отмеченном звездочкой, частица  $M$  за  $1,2 \cdot 10^6$  скачков позиции.

ный момент времени частица  $M$  помещалась в некоторую позицию в цепочке. Определялся тип ближайших частиц справа и слева. Если, к примеру, слева находилась  $A$ , а справа  $B$ , то к общему времени процесса блуждания добавлялась величина  $1 / (v_{+B} + v_{-A})$ . При указанной конфигурации вероятности скачка вправо и влево равны соответственно  $v_{+B} / (v_{+B} + v_{-A})$  и  $v_{-A} / (v_{+B} + v_{-A})$ . С помощью датчика случайных чисел разыгрывалось смещение  $M$  на один шаг вправо или влево, и процесс повторялся. Скорость дрейфа определялась как отношение смещения частицы  $M$  из начального положения ко времени блуждания.

При моделировании изучалась одна неупорядоченная структура с фактической концентрацией  $C = 0,4900$  и упорядоченная структура  $AABB$  с периодом  $r = 4$ . Определялась  $v$  для различных  $v_{-B}$  при  $v_{+A} = v_{+B} = 1$  и  $v_{-A} = 0,6$ . В этих условиях, согласно (5) и (6), имеем соответственно

$$v = 0,6940 - 0,4900v_{-B} \text{ при } v_{-B} \leq 1,416,$$

$$v = -(0,0900v_{-B} - 0,2940) / (0,5100v_{-B} + 0,2940) \text{ при } v_{-B} \geq 3,267, \quad (10)$$

а для структуры  $AABB$ , согласно (8),

$$v = (1 - 0,36v_{-B}^2) / (1,39 + 0,98v_{-B} + 0,55v_{-B}^2). \quad (11)$$

В табл. 1 приведены результаты моделирования и расчета по формулам (10) и (11). Согласие результатов может служить «экспериментальным» подтверждением правильности соотношений (5) — (8)\*. В то же время из этих соотношений следует, что в области  $C_1 \leq C \leq C_2$  в неупорядоченной цепочке отсутствует режим блужданий с отличной от нуля средней скоростью дрейфа. В связи с этим возникает вопрос о характере блужданий в этой области.

Вопрос об определении скорости дрейфа может быть решен с помощью функций распределения  $W_n(t)$ ,  $W_{n,k}(t)$  и т. д., характеризующих структуру цепочки в системе координат, связанной с частицей  $M$ , и имеющих следующий смысл:  $W_n(t)$  — вероятность обнаружить в момент  $t$  частицу  $B$  в  $n$ -м относительно частицы  $M$  узле цепочки (узлам цепочки справа от  $M$  соответствуют  $n = 1, 2, \dots$ , а слева  $n = -1, -2, \dots$ );  $W_{n,k}(t)$  — вероятность обнаружить частицы  $B$  одновременно в двух точках с координатами  $n$  и  $k$  относительно  $M$ . Аналогично можно определить и последующие функции распределения. Скорость дрейфа равна разности частот перескока  $M$  вправо и влево и выражается через  $W_1(t)$  и  $W_{-1}(t)$ :

$$v(t) = v_{+A}[1 - W_1(t)] + v_{+B}W_1(t) - v_{-A}[1 - W_{-1}(t)] - v_{-B}W_{-1}(t). \quad (12)$$

Функции распределения удовлетворяют бесконечной системе «зацепляющихся» уравнений. Так, для  $W_n(t)$  имеем систему уравнений, содер-

\* Наблюдаемое в случае неупорядоченной структуры (табл. 1) систематическое расхождение при больших  $v_{-B}$  связано, по-видимому, с особенностями структуры исследованной цепочки (вместо бесконечной неупорядоченной цепочки изучалась упорядоченная, но с большим периодом  $r = 4096$ ).

жащих бинарные функции  $W_{n,k}(t)$ :

$$dW_n(t)/dt = v_{+A}(W_{n+1} - W_n) + (v_{+B} - v_{-A})(W_{1,n-1} - W_{1,n}) + \\ + v_{-A}(W_{n-1} - W_n) + (v_{-B} - v_{-A})(W_{-1,n-1} - W_{-1,n}) \quad n \neq 1 \text{ и } -1, \quad (13)$$

$$dW_1(t)/dt = v_{+A}W_2 - v_{+B}W_1 + (v_{+B} - v_{+A})W_{1,2} + \\ + v_{-B}W_{-1} - v_{-A}W_1 - (v_{-B} - v_{-A})W_{-1,1}, \quad (14)$$

$$dW_{-1}(t)/dt = v_{+B}W_1 - v_{+A}W_{-1} - (v_{+B} - v_{+A})W_{-1,1} + \\ + v_{-A}W_{-2} - v_{-B}W_{-1} + (v_{-B} - v_{-A})W_{-2,-1}. \quad (15)$$

Аналогично можно записать уравнения для бинарной и последующих функций распределения. Так как, по предположению, при  $t = 0$  частица  $M$  помещается в случайный узел цепочки, то

$$W_n(0) = C, \quad W_{n,k}(0) = C^2, \dots \quad (16)$$

Таким образом, в рассматриваемом подходе задача определения  $v(t)$  сводится к решению бесконечной системы уравнений для функций распределения. Соответствующая бесконечная система для предельных стационарных вероятностей  $W_n(\infty)$ ,  $W_{n,k}(\infty)$ , ... при  $C_1 \leq C \leq C_2$  имеет точное решение

$$W_n(\infty) = \begin{cases} C_1 & \text{при } n \leq -1, \\ C_2 & \text{при } n \geq 1, \end{cases} \quad W_{n,k}(\infty) = W_n(\infty)W_k(\infty), \dots, \quad (17)$$

которому по (12) соответствует  $v(\infty) = 0$ . В работе <sup>(5)</sup> вопрос изучается в предположении отсутствия корреляции ( $W_{n,k}(t) = W_n(t)W_k(t)$ ) и при конечных  $t$ . Получается, что при больших  $t$  частица  $M$  дрейфует вправо в случае  $C_1 \leq C < C^*$  и влево в случае  $C^* < C \leq C_2$  ( $C^* = 1/2(C_1 + C_2)$ ), причем скорость стремится к нулю при возрастании  $t$ . Остается желательным более полное математическое исследование характера блуждания при  $C_1 \leq C \leq C_2$ .

Отмеченная нестационарность процесса блуждания частицы  $M$  связана с тем, что в неупорядоченной цепочке имеются флуктуации структуры. Взаимодействие  $M$  с этими флуктуациями приводит к тому, что распределение компонентов относительно  $M$ , однородное при  $t = 0$  (см. (16)), с течением времени меняется и перестает быть однородным. При  $t \rightarrow \infty$  устанавливается стационарное распределение, которое для  $W_n(\infty)$  при  $0 \leq C < C_1$  имеет вид <sup>(3)</sup>

$$W_n(\infty) = \begin{cases} C & \text{при } n \leq -1, \\ C + C(1 - C) \left[ \frac{v_{+A} - v_{-A} - v_{+B} + v_{-B}}{v_{+B} + C(v_{+A} - v_{+B})} \right] \eta_1^{n-1} & \text{при } n \geq 1, \end{cases} \quad (18)$$

и приводит к дрейфу частицы  $M$  вправо со скоростью (5); при  $C_2 < C \leq 1$  устанавливается распределение, аналогичное (18), и дрейф влево со скоростью (6), а в интервале  $C_1 \leq C \leq C_2$  происходит со временем приближение к распределению (17), и средняя скорость дрейфа стремится к нулю. В полностью упорядоченной цепочке флуктуации структуры отсутствуют, процесс блуждания носит обычный характер, подобный блужданиям в однокомпонентной цепочке, и скорость дрейфа обращается в нуль в одной точке  $C = C_0$  (9). При неоднородных блужданиях, в отличие от одномерных, частица  $M$  имеет возможность «обойти» трудно проходимые флуктуации структуры. Поэтому скорость дрейфа будет обращаться в нуль не в области, а в точке.

Поступило  
2 IV 1972

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- <sup>1</sup> А. А. Чернов, Биофизика, **12**, 2, 297 (1967). <sup>2</sup> Д. Е. Темкин, ФТТ, **13**, 11, 3381 (1971). <sup>3</sup> Д. Е. Темкин, J. Cryst. Growth, **5**, 193 (1969). <sup>4</sup> Д. Е. Темкин, Кристаллография, **14**, 3, 423 (1969). <sup>5</sup> Д. Е. Темкин, Кристаллография, **17**, 1, 77 (1972). <sup>6</sup> В. Феллер, Введение в теорию вероятностей и ее применения, **1**, М., 1967.