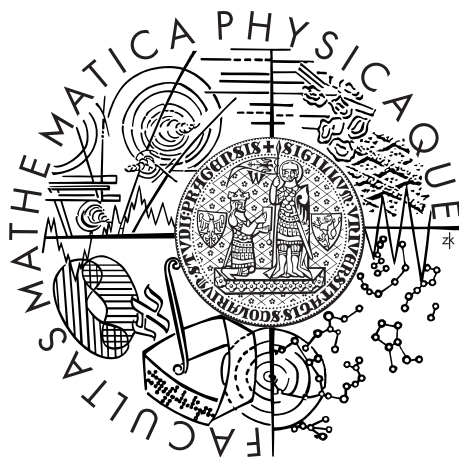


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Václav Březina

Difúze interagujících částic

Katedra makromolekulární fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Artem Ryabov

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2012

Tímto bych chtěl poděkovat vedoucímu mé práce Mgr. Artemu Ryabovovi i doc. RNDr. Petru Chvostovi, CSc. za nabídku tématu této bakalářské práce. Dále chci poděkovat vedoucímu za trpělivost a velkou pomoc při psaní této práce.

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Název práce: Difúze interagujících částic

Autor: Václav Březina

Katedra: Katedra makromolekulární fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Artem Ryabov, Katedra makromolekulární fyziky

Abstrakt:

V práci je studován náhodný pohyb dvou interagujících částic v jedné dimenzi. Model je motivován chemotaxí bakterií v úzkém kanálku. Rychlost každé z částic je dána dichotomickým procesem. Je uvažována interakce typu tuhých koulí, částice se při kontaktu od sebe „odrazí“. Odvodili jsme rovnici řídící časovou evoluci pohybu částic, řešili jsme ji v difúzní limitě na dvou různých geometriích. Nejdříve byla zkoumána difúze částic na přímce. Byly vypočteny střední hodnota a rozptyl vzdálenosti mezi částicemi. Vznikají zde tři kvalitativně odlišné dynamické režimy. Potom jsme se zabývali difúzním pohybem částic na polopřímce s absorpční hranicí. Byly nalezeny hustoty pravděpodobnosti výskytu jednotlivých částic, střední polohy, pravděpodobnosti přežití a střední doba do absorpce. Je kladen důraz na odlišné chování interagujících a neinteragujících částic.

Klíčová slova: difúze, interagující částice, chemotaxe

Title: Diffusion of interacting particles

Author: Václav Březina

Department: Department of Macromolecular Physics

Supervisor: Mgr. Artem Ryabov, Department of Macromolecular Physics

Abstract: We investigate the ballistic diffusion of two hard-core interacting particles in one dimension. The model is motivated by chemotaxis of bacteria in narrow pores. We derive the exact evolution equation for the probability density function of particles positions. The equation is solved analytically in diffusion limit for two different geometries. First, we investigate the diffusion on an infinite line. The mean inter-particle distance and the variance of this distance are calculated. Three qualitatively different regimes as dependent on the drift velocities of individual particles are found. Second, the semi-infinite interval with absorbing boundary is considered. The marginal probability densities, the mean positions, the survival probabilities and the mean times to absorption for individual interacting particles are derived and compared to the corresponding quantities in the case without interaction.

Keywords: ballistic diffusion, hard-core interaction, chemotaxis

Obsah

| | |
|---|-----------|
| Úvod | 2 |
| 1 Model | 3 |
| 1.1 Jednočásticový problém | 3 |
| 1.2 Dvoučásticový problém s interakcí | 6 |
| 1.3 Difúzní limita | 8 |
| 2 Interagující částice na přímce | 10 |
| 2.1 Hustoty pravděpodobnosti | 10 |
| 2.2 Tři dynamické režimy | 12 |
| 3 Polonekonečný systém s absorpcí | 16 |
| 3.1 Hustoty pravděpodobnosti | 16 |
| 3.2 Pravděpodobnost přežití | 22 |
| 3.3 Střední doba do absorpce | 25 |
| Závěr | 28 |
| Seznam použité literatury | 29 |

Úvod

V této práci se budeme zabývat modelem, který popisuje náhodný pohyb *dvou interagujících částic* v jednodimenzionálním prostoru. Částice na sebe působí pouze na blízko (pokud se potkají, vydají se opačným směrem). V jedné dimenzi má tato interakce velký vliv na pohyb částic, protože se částice nemůžou minout.

Naše práce je inspirována náhodným pohybem bakterií, jako např. *Escherichia coli*, nebo *Bacillus subtilis*, které se pohybují pomocí bičíku. Pohyb takové bakterie vypadá takto: pohybuje se přímočaře přibližně konstantní rychlostí, pak se na krátkou dobu zastaví, začne se otáčet a pak opět vyrazí, a to náhodně zvoleným směrem. Bakterie také reagují na koncentraci chemických látek přítomných v prostředí, kde se pohybují. Tento jev se nazývá *chemotaxe*. Jsou přitahovány tzv. atraktanty, odpuzovány tzv. repelenty [1]. Chemotaxe bakterií je předmětem studia už více než 40 let, a to jak z experimentálního, tak z teoretického hlediska. Bylo už vytvořeno mnoho matematických modelů [1]. Avšak pohyb bakterií v úzkých prostorách byl experimentálně zkoumán teprve nedávno [2] [3] [4]. V [2] bylo zjištěno že např. *E. coli* je schopna pohybovat se bez omezení rychlosti v kanálcích, které mají jen o 30% větší průměr, než je ona sama. V menších kanálcích však už je její pohyblivost omezena. Pohyb bakterií v úzkých prostorách je v přírodě častý - většina půdních bakterií žije v úzkých kanálcích [5]. Náš model popisuje pohyb chemotaktických bakterií stejně jako *Keller-Segelův model* [6]. Rozhodli jsme se jej zobecnit a započítat vzájemnou interakci bakterií, které jsou v úzkém kanálku a nemůžou se v něm „vyhnout“. Takový model nebyl podle našich znalostí ještě nikdy studován. (Podobná situace je popsána v diskrétním případě v tzv. *exclusion process* v [7]).

V první kapitole budeme zkoumat nejdříve tzv. persistentní náhodnou procházku. Při té se částice pohybují konstantní rychlostí a náhodně mění směr pohybu. Doby mezi změnami směru jsou nezávislé. Jednočásticový případ persistentní náhodné procházky byl ve zjednodušené formě studován v [8]. Takový pohyb je ale v dvoučásticovém případě a navíc s interakcí velmi složitý, proto provedeme tzv. difúzní limitu a přejdeme k difúznímu (Brownovu) pohybu. Ve druhé kapitole se budeme zabývat difúzí částic na přímce. Budeme hledat hustoty pravděpodobnosti a střední polohy částic. Ve třetí kapitole se podíváme na chování částic na polopřímce s absorpční hranicí. Tam budeme opět hledat hustoty pravděpodobnosti, střední polohy, ale budeme také sledovat, kdy a s jakou pravděpodobností jsou částice absorbovány. V práci se zaměříme na rozdíly v chování částic interagujících a neinteragujících.

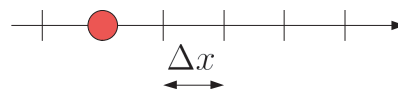
Kapitola 1

Model

V této kapitole popíšeme matematicky pohyb dvou bakterií v úzkém kanálku. Nejdříve definujeme, jak se pohybuje každá z bakterií zvlášť, potom zavedeme interakci mezi nimi. Nakonec provedeme difúzní limitu.

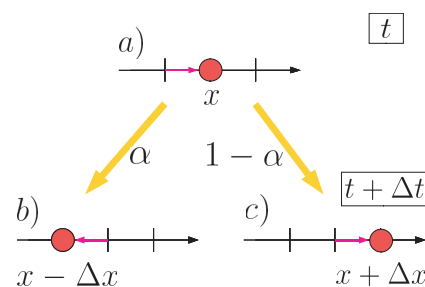
1.1 Jednočásticový problém

Začneme popisem pohybu jedné částice, která se pohybuje po přímce konstantní rychlostí a po uplynutí daného časového intervalu Δt s určitou pravděpodobností může změnit směr svého pohybu. Takový pohyb se nazývá *persistentní náhodná procházka* [8]. Jedná se o model s diskrétním časem a diskrétní polohou. Představme si podle Obr. 1.1, že částice se pohybuje po jednorozměrné mřížce podél osy x , jejíž body jsou od sebe vzdáleny o Δx .

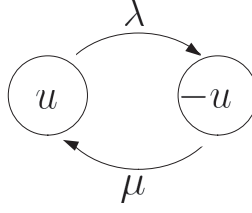


Obrázek 1.1: Částice na 1D mřížce.

Na Obr. 1.2 je ilustrován možný pohyb částice během časového intervalu Δt . Purpurové šipky naznačují, odkud částice přišla. Označme $P_+(x; t)$ pravděpodobnost, že částice *dorazila* v čase t do bodu x z bodu $x - \Delta x$. Pokud se tak stane (Obr. 1.2 a)), částice s pravděpodobností α změní směr pohybu (Obr. 1.2 b)); příští krok bude směřovat vlevo - zpět do bodu $x - \Delta x$), naopak s pravděpodobností $1 - \alpha$ bude pokračovat dále ve směru osy x (Obr. 1.2 c)).



Obrázek 1.2: Persistentní náhodná procházka.



Obrázek 1.3: Rychlost částice (v limitě spojitého času) v čase t je dichotomický proces s možnými stavy u a $-u$; λ a μ jsou rychlostní konstanty přeskoků mezi jednotlivými stavy.

Podobně necht' $P_-(x; t)$ je pravděpodobnost, že částice čase t dorazila do mřížového bodu x z $x + \Delta x$. Analogicky jako v předchozím případě s pravděpodobností β změni směr, naopak s pravděpodobností $1 - \beta$ bude pokračovat ve stejném směru. Tyto pravděpodobnostní úvahy lze shrnout do dvou rovnic:

$$\begin{aligned} P_+(x; t + \Delta t) &= (1 - \alpha)P_+(x - \Delta x; t) + \beta P_-(x - \Delta x; t) , \\ P_-(x; t + \Delta t) &= \alpha P_+(x + \Delta x; t) + (1 - \beta)P_-(x + \Delta x; t) . \end{aligned} \quad (1.1)$$

Proveďme nyní *limitu spojitého času a prostoru*: $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$. Zároveň ponecháme konstantní velikost rychlosti částice $u = \Delta x / \Delta t$. Zároveň půjdou do nuly i pravděpodobnosti přeskoků $\alpha \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow 0$ a to tak, že $\alpha = \lambda \Delta t$, $\beta = \mu \Delta t$; $\lambda, \mu = \text{konst.}$. Parametry λ, μ jsou *rychlostní konstanty* přeskoků mezi rychlostmi u a $-u$, viz Obr. 1.3. Při limitě spojitého času a prostoru přejdeme od pravděpodobností $P_+(x; t)$, $P_-(x; t)$ k hustotám pravděpodobnosti $p_+(x; t)$ a $p_-(x; t)$, jejichž význam je:

$$\begin{aligned} p_+(x; t) \Delta x &\doteq P_+(x; t) \\ p_-(x; t) \Delta x &\doteq P_-(x; t) . \end{aligned} \quad (1.2)$$

S využitím Taylorova rozvoje dospějeme z (1.1) k následující soustavě diferenciálních rovnic:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} p_+(x; t) \\ p_-(x; t) \end{pmatrix} = \left\{ \begin{pmatrix} -u \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & u \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\lambda & \mu \\ \lambda & -\mu \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} p_+(x; t) \\ p_-(x; t) \end{pmatrix} . \quad (1.3)$$

Hustoty pravděpodobností $p_+(x; t)$, resp. $p_-(x; t)$ popisují nalezení částice v čase t v bodě x s rychlostí u , resp. $-u$.

Dále nás bude zajímat pouze poloha částice v čase t . Vysčítáním přes možné rychlosti dostaneme hustotu pravděpodobnosti nalezení částice v čase t v bodě x nezávisle na její rychlosti:

$$p(x; t) = p_+(x; t) + p_-(x; t) . \quad (1.4)$$

Ze soustavy (1.3) dostaneme zobecněnou telegrafní rovnici [8] pro $p(x; t)$:

$$\left\{ \frac{1}{\lambda + \mu} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial t} \right\} p(x; t) = \left\{ \frac{u^2}{\lambda + \mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - u \frac{\mu - \lambda}{\lambda + \mu} \frac{\partial}{\partial x} \right\} p(x; t) . \quad (1.5)$$

Rovnici (1.5) je nutné opatřit okrajovými a počátečními podmínkami:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} p(x; t) = 0 , \quad (1.6)$$

což jsou přirozené okrajové podmínky, uplatní se pouze při pohybu na přímce. Nyní je nutné zavést počáteční podmínky. Nechť v čase $t = 0$ s pravděpodobností $1/2$ má částice rychlost u a se stejnou pravděpodobností rychlost $-u$. Také předpokládáme, že se na počátku nachází v bodě y . To se matematicky vyjádří takto:

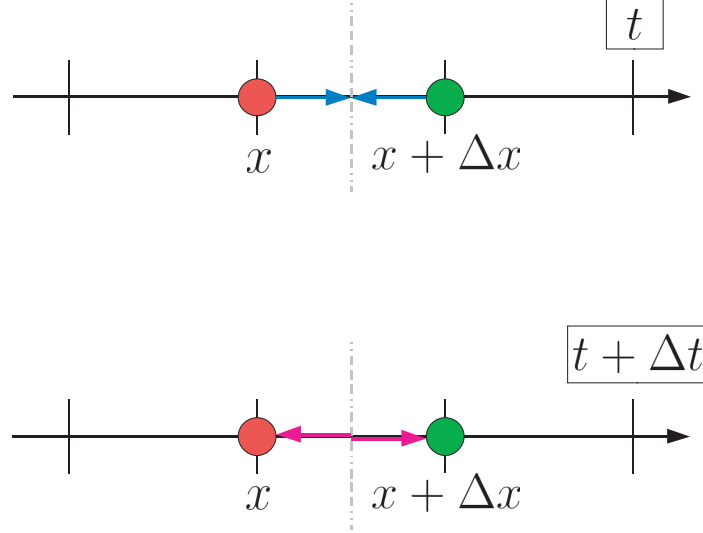
$$\begin{aligned} p_+(x; 0) &= \frac{1}{2}\delta(x - y) , \\ p_-(x; 0) &= \frac{1}{2}\delta(x - y) . \end{aligned} \tag{1.7}$$

Sečtením obou výrazů v (1.7) obdržíme počáteční podmínku:

$$p(x; 0) = \delta(x - y) . \tag{1.8}$$

Řešíme diferenciální rovnici druhého řádu v čase, proto potřebujeme ještě počáteční podmínku pro časovou derivaci. Získáme ji sečtením obou rovnic v (1.3) a dosazením z (1.7):

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x; t)|_{t=0} = 0 . \tag{1.9}$$



Obrázek 1.4: Ilustrace kontaktní interakce částic.

1.2 Dvoučásticový problém s interakcí

Nyní přidáme další částici, která se pohybuje stejnou rychlostí. Částice označíme čísly 1, 2, jejich polohy x_1, x_2 . Podobně, jako v případě pohybu jedné částice, lze i pro dvě odvodit soustavu rovnic z diskrétního modelu. Pro přehlednost zavedeme operátory $L_{\pm\pm} = \pm u \frac{\partial}{\partial x_1} \pm u \frac{\partial}{\partial x_2}$. Hledaná soustava rovnic vypadá takto:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} p_{++}(x_1, x_2; t) \\ p_{+-}(x_1, x_2; t) \\ p_{-+}(x_1, x_2; t) \\ p_{--}(x_1, x_2; t) \end{pmatrix} = \left\{ \begin{pmatrix} L_{--} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & L_{-+} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L_{+-} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & L_{++} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\lambda_1 - \lambda_2 & \mu_2 & \mu_1 & 0 \\ \lambda_2 & -\lambda_1 - \mu_2 & 0 & \mu_1 \\ \lambda_1 & 0 & -\mu_1 - \lambda_2 & \mu_2 \\ 0 & \lambda_1 & \lambda_2 & -\mu_1 - \mu_2 \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} p_{++}(x_1, x_2; t) \\ p_{+-}(x_1, x_2; t) \\ p_{-+}(x_1, x_2; t) \\ p_{--}(x_1, x_2; t) \end{pmatrix}. \quad (1.10)$$

Hustota pravděpodobnosti $p_{++}(x_1, x_2; t)$ popisuje pravděpodobnost nalezení částice 1 v bodě x_1 s rychlostí u a zároveň částice 2 v x_2 s rychlostí u v čase t . Další hustoty mají analogický význam.

Nyní přikročíme k zavedení interakce mezi částicemi. Jelikož mají částice stejnou rychlost, mohou se potkat jen tehdy, když mají opačný směr rychlosti. V diskrétním modelu předpokládejme, že na počátku jsou od sebe vzdáleny o $n\Delta x$, kde n je liché. Pokud se částice objeví na pozicích vedle sebe v čase t a „rozhodnou se“ pohybovat proti sobě, dojde mezi nimi k interakci. Můžeme si představit, že se potkají na půli cesty v bodě $x + \Delta x/2$, změni směr pohybu a v čase $t + \Delta t$ se dostanou opět na svá původní místa, nicméně obě částice změni směr své rychlosti. Ilustrace je na Obr. 1.4. Modré šipky naznačují, jakým směrem se částice vydaly v čase t , purpurové šipky ukazují, odkud částice dorazily v čase $t + \Delta t$. Takovou interakci vyjádříme matematicky výrazem

$$P_{-+}(x, x + \Delta x; t + \Delta t) = P_{+-}(x, x + \Delta x; t). \quad (1.11)$$

Provedeme-li limitu spjitého času a prostoru (viz předchozí podkapitola), získáme interakční okrajovou podmínku pro hustoty pravděpodobnosti

$$p_{+-}(x, x; t) = p_{-+}(x, x; t) , \quad x \in (-\infty, \infty) . \quad (1.12)$$

Analogicky k případu jedné částice definujeme hustotu pravděpodobnosti popisující polohy obou částic v čase t nezávisle na směru rychlosti

$$p(x_1, x_2; t) = p_{++}(x_1, x_2; t) + p_{+-}(x_1, x_2; t) + p_{-+}(x_1, x_2; t) + p_{--}(x_1, x_2; t) . \quad (1.13)$$

Ze soustavy rovnic (1.10) získáme rovnici pro $p(x_1, x_2; t)$:

$$\begin{aligned} & \{ \partial_t^4 + 2(\lambda_1 + \mu_1 + \lambda_2 + \mu_2) \partial_t^3 + [(\lambda_1 + \mu_1 + \lambda_2 + \mu_2)^2 + (\lambda_1 + \mu_1)(\lambda_2 + \mu_2)] \partial_t^2 + \\ & + (\lambda_1 + \mu_1)(\lambda_2 + \mu_2)(\lambda_1 + \mu_1 + \lambda_2 + \mu_2) \partial_t + \\ & + 2u[(\mu_1 - \lambda_1) \partial_{x_1} + (\mu_2 - \lambda_2) \partial_{x_2}] \partial_t^2 + \\ & + 2u(\lambda_1 + \mu_1 + \lambda_2 + \mu_2)[(\mu_1 - \lambda_1) \partial_{x_1} + 2(\mu_2 - \lambda_2) \partial_{x_2}] \partial_t + \\ & + u(\lambda_1 + \mu_1 + \lambda_2 + \mu_2)[(\mu_1 - \lambda_1)(\mu_2 + \lambda_2) \partial_{x_1} + (\mu_2 - \lambda_2)(\mu_1 + \lambda_1) \partial_{x_2}] - \\ & - 2u^2(\partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2) \partial_t^2 - 2u^2(\lambda_1 + \mu_1 + \lambda_2 + \mu_2)(\partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2) \partial_t - \\ & - (\lambda_1 + \mu_1 + \lambda_2 + \mu_2)u^2[(\lambda_2 + \mu_2) \partial_{x_1}^2 - (\lambda_1 + \mu_1) \partial_{x_2}^2] + \\ & + u^2[(\mu_1 - \lambda_1)^2 \partial_{x_1}^2 + (\mu_2 - \lambda_2)^2 \partial_{x_2}^2] - \\ & - 2u^2(\mu_1 - \lambda_1)(\mu_2 - \lambda_2) \partial_{x_1} \partial_{x_2} - 2u^3[(\mu_1 - \lambda_1) \partial_{x_1}^3 + (\mu_2 - \lambda_2) \partial_{x_2}^3] + \\ & + 2u^3[(\mu_1 - \lambda_1) \partial_{x_1} \partial_{x_2}^2 + (\mu_2 - \lambda_2) \partial_{x_1}^2 \partial_{x_2}] + \\ & + u^4[\partial_{x_1}^4 + \partial_{x_2}^4] - 2u^4 \partial_{x_1}^2 \partial_{x_2}^2 \} p(x_1, x_2; t) = 0 . \end{aligned} \quad (1.14)$$

Jedná se o parciální diferenciální rovnici 4. řádu v čase se smíšenými časovými a prostorovými derivacemi. Pro úplnou formulaci problému musíme doplnit počáteční a okrajové podmínky. Nechť se částice v čase $t = 0$ nachází v bodech y_1 a y_2 , $y_2 > y_1$. Dále nechť rychlosti obou částic jsou nezávislé a nabývají hodnot u , nebo $-u$ s pravděpodobností $1/2$. Pak mají počáteční podmínky následující tvar:

$$\begin{aligned} p_{++}(x_1, x_2; 0) &= \frac{1}{4} \delta(x_1 - y_1) \delta(x_2 - y_2) , \\ p_{+-}(x_1, x_2; 0) &= \frac{1}{4} \delta(x_1 - y_1) \delta(x_2 - y_2) , \\ p_{-+}(x_1, x_2; 0) &= \frac{1}{4} \delta(x_1 - y_1) \delta(x_2 - y_2) , \\ p_{--}(x_1, x_2; 0) &= \frac{1}{4} \delta(x_1 - y_1) \delta(x_2 - y_2) . \end{aligned} \quad (1.15)$$

Sečtením výrazů v (1.15) získáme jednu počáteční podmínku pro rovnici (1.14) v následujícím tvaru:

$$p(x_1, x_2; 0) = \delta(x_1 - y_1) \delta(x_2 - y_2) . \quad (1.16)$$

S využitím soustavy (1.10) dostáváme i počáteční podmínky pro časové derivace (Jelikož se jedná o parciální diferenciální rovnici 4. řádu v čase, potřebujeme znát počáteční podmínky pro funkci $p(x_1, x_2; t)$ a pro její časové derivace až do

3. řádu.). Ty zde uvedeme jen pro jednodušší případ $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ a $\mu_1 = \mu_2 = \mu$ (obě částice jsou totožné):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(x_1, x_2; t)|_{t=0} &= 0, \\ \frac{\partial^2}{\partial t^2} p(x_1, x_2; t)|_{t=0} &= \left\{ u^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) - \right. \\ &\quad \left. - u(\mu - \lambda) \left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \right\} \delta(x_1 - y_1) \delta(x_2 - y_2), \\ \frac{\partial^3}{\partial t^3} p(x_1, x_2; t)|_{t=0} &= 0. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Nalézt okrajovou podmínku interakce pro $p(x_1, x_2; t)$ pomocí definice (1.13), rovnosti (1.12) a soustavy rovnic (1.10) se ukázalo být mnohem složitější, než nalézt samotnou rovnici (1.14). Proto ji zavedeme až při řešení rovnice (1.14) v difúzní limitě.

1.3 Difúzní limita

V rovnici (1.14) provedeme tzv. difúzní limitu: pro $i = 1, 2$: $\lambda_i, \mu_i \rightarrow \infty$ a $u \rightarrow \infty$. To však ještě k provedení limity nestačí. Je nutno upřesnit, jak rychle jdou tyto konstanty k nekonečnu:

$$\frac{u^2}{\lambda_i + \mu_i} = D_i, \quad u \frac{\mu_i - \lambda_i}{\lambda_i + \mu_i} = v_i, \quad D_i, v_i = \text{konst.}, \quad i = 1, 2. \quad (1.18)$$

Tato limita znamená přechod na makroskopickou prostorovou a časovou škálu.

V dalším textu budeme předpokládat $D_1 = D_2$. To znamená $\frac{u^2}{\lambda_1 + \mu_1} = \frac{u^2}{\lambda_2 + \mu_2}$, čili $\lambda_1 + \mu_1 = \lambda_2 + \mu_2$. Součet $\lambda + \mu$ udává „tikot vnitřních hodin“ částice, tzn. jak často dochází ke změnám směru rychlosti. Po provedení difúzní limity splňuje $p(x_1, x_2; t)$ rovnici

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x_1, x_2; t) = \left\{ D \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) - \left(v_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \right\} p(x_1, x_2; t). \quad (1.19)$$

Počáteční podmínka

$$p(x_1, x_2; 0) = \delta(x_1 - y_1) \delta(x_2 - y_2), \quad y_1 < y_2, \quad (1.20)$$

určuje polohu částic v čase $t = 0$. V případě pohybu na přímce jsou zadány přirozené okrajové podmínky

$$\lim_{x_{1,2} \rightarrow \pm\infty} p(x_1, x_2; t) = 0. \quad (1.21)$$

V případě pohybu na polopřímce v Kap. 3 budou zavedeny jiné okrajové podmínky.

K rovnici (1.19) musíme najít ještě jednu okrajovou podmínku, která popisuje interakci. Pro její odvození si představme, že pohyb obou částic je reprezentován jednou částicí, která se pohybuje ve dvou dimeziích. Interakce znamená, že tato

částice se pohybuje jen v polovině $-\infty < x_1 < x_2 < \infty$. „Interakční“ okrajovou podmínku získáme úvahou o toku pravděpodobnosti, jehož složka kolmá na přímkou $x_1 = x_2$ musí být nulová. Více k odvození je v [10]. Okrajová podmínka vnášející mezi částice interakci a zabraňující předbíhání částic je:

$$\left\{ D \left(\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_1} \right) - (v_2 - v_1) \right\} p(x_1, x_2; t) |_{x_1=x_2} = 0 . \quad (1.22)$$

V dalších kapitolách budeme řešit rovnici (1.19) ve dvou různých geometriích. Model je v difúzní limitě namísto parametrů u, λ_i a μ_i popsán difúzními konstantami D_i , které určují pohyblivost částic a driftovými rychlostmi v_i . Dalšími parametry jsou počáteční polohy částí y_1 a y_2 . Difúzní konstanta D závisí nepřímo úměrně na součtu rychlostních konstant λ a μ (viz (1.18)). Popisuje pohyblivost částice. Naproti tomu driftová rychlost v je úměrná rozdílu rychlostních konstant. Popisuje tedy asymetrii pohybu a udává, kterým směrem částice ve středním smyslu poputuje. Driftová rychlost v našem modelu popisuje chemotaxi.

Kapitola 2

Interagující částice na přímce

Nyní se budeme věnovat situaci, kdy jsou dvě bakterie uprostřed velmi dlouhého kanálku. Driftové rychlosti v_1 a v_2 popisují chemotaxi těchto bakterií, D jejich pohyblivost. Uvidíme, že pro různé driftové rychlosti vznikají tři kvalitativně odlišné situace. Například v případě bez chemotaxe by se bakterie jen díky vzájemné interakci začaly od sebe ve středním smyslu vzdalovat. Další zajímavý případ nastává při vhodném nastavení driftových rychlostí, kdy mohou bakterie dokonce vytvořit „klastř“ a pohybovat se spolu.

2.1 Hustoty pravděpodobnosti

Budeme řešit problém (1.19)-(1.22). Přejdeme do jiné souřadnicové soustavy, ve které bude možno dvoučásticový problém převést na dva problémy jednočásticové. Tou správnou volbou je přechod k součtové a rozdílové souřadnici:

$$R = \frac{x_1 + x_2}{2}, \quad r = x_2 - x_1. \quad (2.1)$$

Dále označme

$$v_R = \frac{v_1 + v_2}{2}, \quad v_r = v_2 - v_1. \quad (2.2)$$

Platí $x_2 > x_1$ (viz počáteční podmínka (1.20)), proto také $R \in (-\infty, \infty)$ a $r \in (0, \infty)$. Pokud bychom považovali naše částice za hmotné body o stejné hmotnosti, pak by tato nová soustava byla těžišťová. Po provedení transformace (2.1) (její jakobián je roven jedné) zjistíme, že v rovnici (1.19) lze separovat proměnné

$$p(r, R; t) = p_R(R; t) p_r(r; t) \quad (2.3)$$

a získáme diferenciální rovnice pro hustoty $p_R(R; t)$ a $p_r(r; t)$.

Tuto separaci proměnných můžeme provést kdykoliv, ale netriviální je transformace okrajových podmínek. V případě řešení pohybu na přímce máme kromě přirozených okrajových podmínek jen podmínku interakční (1.22). Po transformaci zjistíme, že se redukuje pouze na reflexní podmínku pro rozdílovou souřadnici r .

Máme tedy dvě nezávislé úlohy. První z nich je pohyb součtové souřadnice R („těžiště“). Její hustota pravděpodobnosti je řešením rovnice

$$\frac{\partial}{\partial t} p_R(R; t) = \left\{ \frac{D}{2} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - v_R \frac{\partial}{\partial R} \right\} p_R(R; t), \quad (2.4)$$

s počáteční podmínkou

$$p_R(R; t) = \delta(R - R_0) , \quad R_0 = \frac{y_1 + y_2}{2} \quad (2.5)$$

a přirozenými okrajovými podmínkami

$$\lim_{R \rightarrow \pm\infty} p_R(R; t) = 0 . \quad (2.6)$$

Vidíme, že jde o difúzní pohyb na přímce s difúzní konstantou $D/2$ a driftovou rychlostí v_R . Tuto rovnici lze vyřešit např. pomocí Laplaceovy transformace v čase (viz např. [9]):

$$p_R(R; t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(R - R_0 - v_R t)^2}{2Dt}\right) . \quad (2.7)$$

Nyní budeme studovat chování rozdílové souřadnice. Její hustota pravděpodobnosti splňuje rovnici

$$\frac{\partial}{\partial t} p_r(r; t) = \left\{ 2D \frac{\partial^2}{\partial r^2} - v_r \frac{\partial}{\partial r} \right\} p_r(r; t) . \quad (2.8)$$

Počáteční podmínka je

$$p_r(r; 0) = \delta(r - r_0) , \quad r_0 = y_2 - y_1 . \quad (2.9)$$

Okrajová podmínka (1.22) přejde díky transformaci (2.1) ve výraz

$$\left\{ 2D \frac{\partial}{\partial r} - v_r \right\} p_r(r; t)|_{r=0} = 0 , \quad (2.10)$$

druhá okrajová podmínka je

$$\lim_{r \rightarrow \infty} p_r(r; t) = 0 . \quad (2.11)$$

Zde opět vidíme, že jde o difúzní pohyb s difúzní konstantou $2D$, driftovou rychlostí v_r . Tentokrát ale $r > 0$, jde tedy o pohyb na polopřímce, navíc je v bodě $r = 0$ reflexní hranice (2.10). Tuto rovnici lze řešit opět pomocí Laplaceovy transformace v čase, řešením je

$$p_r(r; t) = \frac{1}{\sqrt{8\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(r - r_0 - v_r t)^2}{8Dt}\right) + \frac{\exp\left(-\frac{v_r r_0}{2D}\right)}{\sqrt{8\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(r + r_0 - v_r t)^2}{8Dt}\right) - \frac{v_r}{4D} \exp\left(\frac{v_r r}{2D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{r + r_0 + v_r t}{\sqrt{8Dt}}\right) , \quad (2.12)$$

kde $\operatorname{erfc}(\bullet)$ je komplementární chybová funkce [13].

Hustotu pravděpodobnosti $p(x_1, x_2; t)$ bychom mohli získat inverzní transformací k (2.1) a dosazením do (2.3). My ji však nebudeme potřebovat, protože dynamiku částic lze studovat přímo pomocí hustot $p_r(r; t)$ a $p_R(R; t)$.

2.2 Tři dynamické režimy

Střední polohu součtové, resp. rozdílové souřadnice definujeme vztahy

$$\langle R(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} R p_R(R; t) dR , \quad (2.13)$$

resp.

$$\langle r(t) \rangle = \int_0^{\infty} r p_r(r; t) dr , \quad (2.14)$$

Nejprve se budeme zabývat součtovou souřadnicí. Její střední hodnota je

$$\langle R(t) \rangle = R_0 + v_R t . \quad (2.15)$$

To znamená, že „těžiště“ soustavy dvou částic je díky driftu ve středním smyslu unášeno rychlostí v_R . Pokud $v_R = 0$ (nastává při $v_1 = -v_2$, viz (2.2)), ve středním smyslu se nepohybuje. Pokud $v_R > 0$, „těžiště“ se pohybuje doprava, pro $v_R < 0$ se pohybuje směrem doleva.

Pro rozptyl platí:

$$\langle (R(t) - \langle R(t) \rangle)^2 \rangle = Dt . \quad (2.16)$$

Nyní přejdeme k rozdílové souřadnici. Budeme zkoumat její chování po dlouhém čase. K tomu využijeme Laplaceovu transformaci. Označme $p_r(r; s)$ Laplaceovu transformaci v čase funkce $p_r(r; t)$. Pak

$$\langle r(s) \rangle = \int_0^{\infty} r p_r(r; s) dr \quad (2.17)$$

je Laplaceův obraz střední hodnoty rozdílové souřadnice. Nalezli jsme, že

$$\langle r(s) \rangle = \frac{v_r}{s^2} + \frac{r_0}{s} + \frac{\sqrt{v_r^2 + 8Ds} - v_r}{2s^2} \exp\left(-r_0 \frac{v_r + \sqrt{v_r^2 + 8Ds}}{4D}\right) . \quad (2.18)$$

Dále jsme využili tzv. Tauberových teorémů (viz [11]), tedy stejného chování $\langle r(t) \rangle$ pro $t \rightarrow \infty$ a $\langle r(s) \rangle$ pro $s \rightarrow 0$ a z rovnice (2.18) jsme určili chování střední rozdílové souřadnice pro dlouhý čas:¹

$$\langle r(t) \rangle \sim \begin{cases} v_r t & v_r > 0 , \\ \sqrt{\frac{8Dt}{\pi}} & v_r = 0 , \\ \frac{2D}{v_r} & v_r < 0 . \end{cases} \quad (2.19)$$

Vidíme, že zde vznikly *tři kvalitativně odlišné dynamické režimy*, které závisí na rozdílu driftových rychlostí v_r . K diskuzi chování střední polohy využijeme grafy na Obr. 2.1, které byly nakresleny pomocí numerické integrace (2.14) s využitím analytického výsledku (2.12).

Případ $v_r > 0$ odpovídá tomu, že jsou částice driftem od sebe taženy pryč (viz Obr. 2.2). V grafu 2.1 a) je plnou čarou zakreslena střední rozdílová souřadnice interagujících částic, čárkovaně neinteragujících částic se stejnými parametry.

¹Definujeme: $g(t) \sim h(t)$ pro $t \rightarrow \infty \iff \lim_{t \rightarrow \infty} g(t)/h(t) = 1$.

Vidíme, že částice se od sebe lineárně vzdalují v čase. Díky tomu také „vymizí“ interakce mezi nimi, takže se po dlouhém čase chovají stejně jako dvě neinteragující částice.

Zajímavý jev vzniká při $v_r = 0$. Drift působí na obě částice stejně. V grafu 2.1 b) vidíme, že zde se interagující částice pro $t \rightarrow \infty$ od sebe vzdalují jako $t^{1/2}$ (2.19). Zdá se to být neintuitivní. Částice na sebe nepůsobí na dálku, ani nejsou od sebe taženy driftem, přesto se od sebe díky interakci ve středním smyslu vzdalují. Neinteragující částice by v tomto případě zůstávaly pořád stejně daleko (přerušovaná čára v grafu 2.1 b)).

V posledním případě $v_r < 0$ jsou částice k sobě tlačeny driftem. Neinteragující částice by v tomto případě nejdřív přibližovaly, poté by „sebou prošly“ a následně byly od sebe odtaženy do nekonečna (přerušovaná čára v grafu 2.1 c)) U interagujících částic se po dlouhém čase ustálí hustota pravděpodobnosti

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p_r(r; t) = \frac{|v_r|}{2D} \exp\left(-\frac{|v_r|r}{2D}\right), \quad v_r < 0. \quad (2.20)$$

Můžeme říct, že systém dospěje do rovnováhy. Jak je vidět v grafu 2.1 c), částice zaujmou rovnovážnou vzdálenost. V grafu 2.1 c) je počáteční podmínka rovna rovnovážné poloze. Je zajímavé, že částice tuto vzájemnou rovnovážnou polohu nejprve opustí, začnou se přibližovat, až po čase se do rovnovážné polohy opět vrátí. Vysvětlení je takové, že částice se nejdříve „nevidí“, jsou tedy přitahovány k sobě, až po chvíli začne působit interakce a částice se dostanou do rovnovážné polohy. Střední rovnovážná vzdálenost částic je

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle r(t) \rangle = \frac{2D}{|v_r|}, \quad v_r < 0, \quad (2.21)$$

všimněme si, že nezávisí na počáteční podmínce.

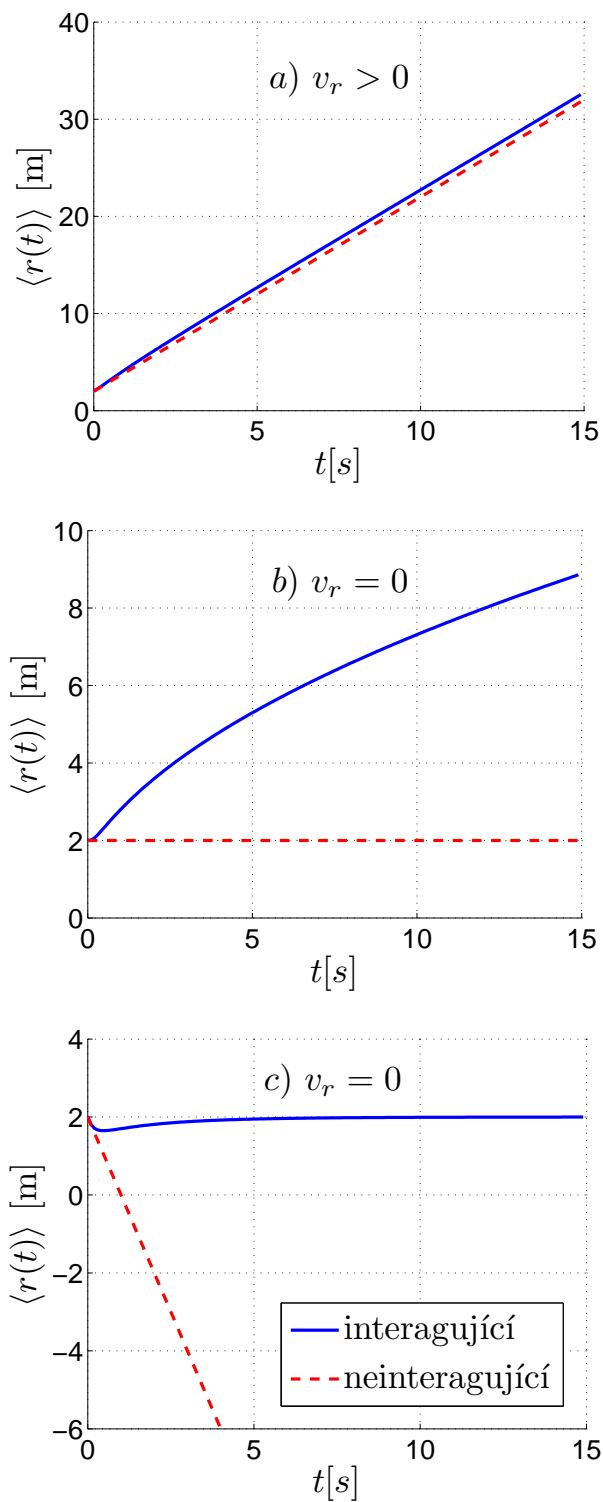
Pro úplnější představu o dynamice musíme znát rozptyl vzdálenosti částic. Jeho velikost popisuje, jak moc se od sebe při jednotlivých realizacích pohybu částic liší rozdílová souřadnice. Nejprve jsme našli časovou Laplaceovu transformaci

$$\begin{aligned} \langle r^2(s) \rangle = & -\frac{2v_r^2}{s^3} + \frac{2r_0v_r - 4D}{s^2} - \\ & - \frac{v_r(v_r - \sqrt{v_r^2 + 8Ds})}{s^3} \exp\left(-\frac{r_0(v_r + \sqrt{v_r^2 + 8Ds})}{4D}\right). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Pak jsme opět využili Tauberových teorémů a určili chování $\langle r^2(t) \rangle$ pro dlouhý čas:

$$\langle (r(t) - \langle r(t) \rangle)^2 \rangle \sim \begin{cases} 4Dt & v_r > 0, \\ (4D - \frac{8D}{\pi})t & v_r = 0, \\ \frac{4D^2}{v_r^2} & v_r < 0. \end{cases} \quad (2.23)$$

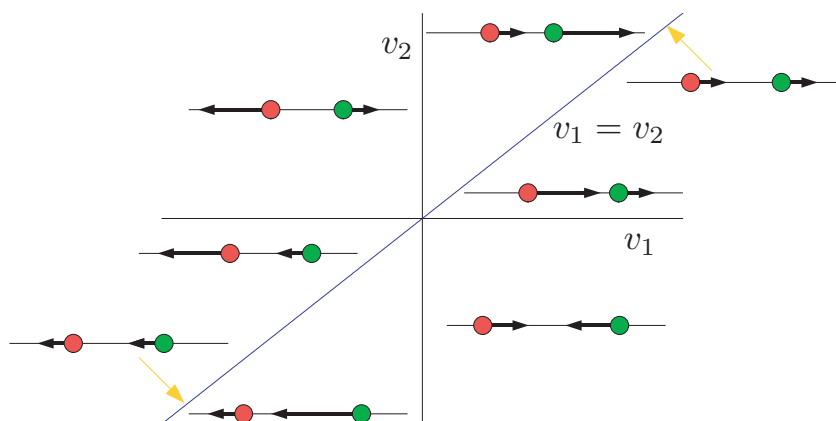
Vidíme tedy, že v případě $v_r > 0$ rozptyl roste jako $4Dt$. To je stejný výsledek, jako v případě jedné částice, která difunduje s difúzní konstantou $2D$ na přímce. Pro $v_r = 0$ opět roste rozptyl úměrně t , ale s jiným prefaktorem, než v předcházející případě. V posledním případě $v_r < 0$ se rozptyl blíží rovnovážné hodnotě $4D^2/v_r^2$.



Obrázek 2.1: Časový vývoj střední vzdálenosti částic interagujících (plná čára) a neinteragujících (přerušovaná čára) ve třech dynamických režimech: a) $v_r > 0$, b) $v_r = 0$ a c) $v_r < 0$. Byly použity následující hodnoty parametrů: $r_0 = 2$ m, $D = 2 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$; a) $v_r = 2 \text{ ms}^{-1}$, b) $v_r = 0 \text{ ms}^{-1}$ a c) $v_r = -2 \text{ ms}^{-1}$.

To znamená, že střední rozdílová souřadnice má i po uplynutí dlouhé doby velkou vypovídací hodnotu.

Na závěr kapitoly jsme zařadili ilustraci vzniku jednotlivých dynamických režimů. Na Obr. 2.2 jsou znázorněny situace pro různé driftové rychlosti v_1 a v_2 . Šipky u jednotlivých částic vyjadřují velikost a směr jejich driftových rychlostí. Jelikož se řešení difúzní rovnice (2.12) pro rozdílovou souřadnici kvalitativně liší pro tři různé případy $v_r > 0$, $v_r = 0$ a $v_r < 0$, můžeme o Obr. 2.2 hovořit jako o „fázovém diagramu“. Při $v_r > 0$ jsou částice driftem od sebe odtahovány. Na Obr. 2.2 tomuto případu odpovídá polovina nad přímkou $v_1 = v_2$. Vidíme, že režim $v_r > 0$ je možno realizovat pomocí v_1 a v_2 třemi různými způsoby. Pokud $v_r = 0$, na obě částice působí drift stejně, to odpovídá přímce $v_1 = v_2$ ve fázovém diagramu. Konečně v případě $v_r < 0$ v dolní části „fázového diagramu“ jsou částice tlačeny driftem k sobě.



Obrázek 2.2: „Fázový diagram“, znázorňuje možné kombinace driftových rychlostí, jsou zde tři oblasti s kvalitativně rozdílným chováním v závislosti na v_1 , v_2 .

Kapitola 3

Polonekonečný systém s absorpcí

Teď se zaměříme na zkoumání pohybu dvou bakterií na okraji velmi dlouhého (polonekonečného) kanálku. Když bakterie tento kanálek opustí, nemůže se do něj už vrátit. Takovému okraji budeme říkat *absorpční hranice*. Když bakterie opustí kanálek, řekneme, že byla absorbována. Je zřejmé, že jako první musí kanálek opustit bakterie, která je blíže okraji. Až potom ji může následovat ta další. Nejprve popíšeme pohyb bakterií, pak budeme zkoumat pravděpodobnosti nalezení jednotlivých bakterií kdekoli v kanálku po nějakém čase. Nakonec určíme střední dobu opuštění kanálku pro jednotlivé bakterie. Budeme zkoumat rozdíly mezi chováním jedné bakterie, která je v kanálku sama a chováním jednotlivých bakterií, které spolu interagují.

3.1 Hustoty pravděpodobnosti

Budeme zkoumat pohyb částic na poloprostoru $(0, \infty)$ s dokonalou absorpční hranicí v nule. Pokud jedna z částic doputuje do absorpční hranice, je zachycena a už se odtud nemůže dostat. Předpokládejme, že obě částice jsou totožné, tzn. $v_1 = v_2 = v$.

Vyřešíme nejprve jednočásticový problém. Nechť $f(x; t|y)$ je hustota pravděpodobnosti výskytu částice na polopřímce $(0, \infty)$. Ta splňuje diferenciální rovnici

$$\frac{\partial}{\partial t} f(x; t|y) = \left\{ D \frac{\partial^2}{\partial x^2} - v \frac{\partial}{\partial x} \right\} f(x; t|y) . \quad (3.1)$$

Počáteční podmínka je

$$f(x; 0|y) = \delta(x - y), \quad y > 0 . \quad (3.2)$$

První okrajová podmínka je

$$\lim_{x \rightarrow \infty} f(x; t) = 0 . \quad (3.3)$$

Další okrajovou podmínkou zavedeme absorpční hranici v $x = 0$ [12]:

$$f(x; t|y)|_{x=0} = 0 . \quad (3.4)$$

Řešení takto definovaného problému je

$$f(x; t|y) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \left[\exp\left(-\frac{(x - y - vt)^2}{4Dt}\right) - \exp\left(-\frac{vy}{D}\right) \exp\left(-\frac{(x + y - vt)^2}{4Dt}\right) \right] , \quad (3.5)$$

pro $x \in (0, \infty)$, jinak $f(x; t|y) = 0$. Toto řešení jednočásticového problému nám později poslouží k vyjádření řešení problému dvoučásticového. Je třeba si všimnout, že integrál $\int_0^\infty f(x; t|y) dx$ je na začátku roven jedné (díky počáteční podmínce), pak se ale s rostoucím časem zmenšuje. Je to díky absorpci. Tento integrál udává pravděpodobnost, že se částice nachází v čase t v intervalu $(0, \infty)$, tedy pracděpodobnost, že částice ještě nebyla absorbována. Tuto pravděpodobnost označíme $S(t|y)$ a nazvěme ji *pravděpodobnost přežití do času t* :

$$S(t|y) = \int_0^\infty f(x; t|y) dx . \quad (3.6)$$

Této veličině se budeme podrobněji věnovat v další podkapitole.

Přidejme nyní další částici. Zavedeme matematický popis situace, kdy ještě nedošlo k absorpci žádné částice. Nechť $p^{(2)}(x_1, x_2; t|y_1, y_2) dx_1 dx_2$ je pravděpodobnost toho, že ani jedna z částic nebyla do času t absorbována a že levá částice se nachází v intervalu $(x_1, x_1 + dx_1)$ a zároveň pravá v $(x_2, x_2 + dx_2)$ v čase t . Hustota pravděpodobnosti $p^{(2)}(x_1, x_2; t|y_1, y_2)$ splňuje diferenciální rovnici

$$\frac{\partial}{\partial t} p^{(2)}(x_1, x_2; t|y_1, y_2) = \left\{ D \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) - v \left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \right\} p^{(2)}(x_1, x_2; t|y_1, y_2) \quad (3.7)$$

s počáteční podmínkou

$$p^{(2)}(x_1, x_2; 0|y_1, y_2) = \delta(x_1 - y_1) \delta(x_2 - y_2) , \quad y_2 > y_1 , \quad (3.8)$$

přirozenou okrajovou podmínkou

$$\lim_{x_2 \rightarrow \infty} p^{(2)}(x_1, x_2; t|y_1, y_2) = 0 , \quad (3.9)$$

interakční okrajovou podmínkou (viz (1.22))

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_1} \right) p^{(2)}(x_1, x_2; t|y_1, y_2) |_{x_1=x_2} = 0 \quad (3.10)$$

a okrajovou podmínkou pro absorpci (analogicky jako pro jednu částici)

$$p^{(2)}(x_1, x_2; t|y_1, y_2) |_{x_1=0} = 0 . \quad (3.11)$$

Díky předpokladu, že jsou částice identické ($v_1 = v_2$), můžeme se na ně dívat jako na dvě částice neinteragující. Místo interakce si však vymění pozice (částice, která byla původně vlevo, bude vpravo a naopak). Uvažujme takto: levá částice v poloze x_1 odpovídá částici, která se původně nacházela v y_1 a zároveň částice na x_2 odpovídá původní částici na y_2 . Díky tomu, že u stejných částic uvažujeme o interakci jako o výměně pozic, můžou si navzájem odpovídat i částice na x_1 s původní částicí na y_2 a částice na x_2 s původní částicí na y_1 . Touto úvahou dospějeme k řešení

$$p^{(2)}(x_1, x_2; t|y_1, y_2) = f(x_1; t|y_1) f(x_2; t|y_2) + f(x_1; t|y_2) f(x_2; t|y_1) . \quad (3.12)$$

Hustota (3.12) je nenulová pouze pro $0 < x_1 < x_2 < \infty$. Zpětně lze snadno ověřit, že na námi zkoumaném prostoru tato funkce splňuje diferenciální rovnici (3.7) i příslušné okrajové a počáteční podmínky.

K úplnému popisu musíme definovat další hustotu pravděpodobnosti, která popisuje druhou částici po absorpci té první. Označíme ji horním indexem (1) a definujeme $p^{(1)}(x_2; t|y_1, y_2)dx_2$ jako pravděpodobnost toho, že první částice už byla absorbována a druhá se nachází v intervalu $(x_2, x_2 + dx_2)$ v čase t .

Tvar $p^{(1)}(x_2; t|y_1, y_2)$ lze nalézt podobnou úvahou, jako $p^{(2)}(x_1, x_2; t|y_1, y_2)$, a to opět díky stejným vlastnostem částic. Představme si, že došlo k absorpci levé částice. Pokud to byla částice, jež se na počátku nacházela v bodě y_2 , byla absorbována s pravděpodobností $1 - S(t|y_2)$ (viz (3.6)) a pravá částice je ta, co se na počátku nacházela v bodě y_1 . Naopak pokud byla absorbována částice z počátečního bodu y_1 , došlo k absorpci s pravděpodobností $1 - S(t|y_1)$ a v kanálku zůstala částice z počátečního bodu y_2 . Ve světle této úvahy napíšeme výraz pro hustotu pravděpodobnosti výskytu druhé části po absorpci té první takto:

$$p^{(1)}(x_2; t|y_1, y_2) = f(x_2; t|y_1) [1 - S(t|y_2)] + f(x_2; t|y_2) [1 - S(t|y_1)] . \quad (3.13)$$

Marginální hustoty pravděpodobnosti

Zajímá nás poloha jednotlivých částic bez ohledu na to, kde se zrovna nachází částice jiná. Budeme tedy zkoumat tzv. *marginální hustoty pravděpodobnosti*, označme je $p_1(x_1; t|y_1, y_2)$ a $p_2(x_2; t|y_1, y_2)$.

První z nich lze získat jednoduše integrací přes všechny možné polohy pravé částice.

$$p_1(x_1; t|y_1, y_2) = \int_{x_1}^{\infty} p^{(2)}(x_1, x_2; t|y_1, y_2) dx_2 . \quad (3.14)$$

U druhé částice si musíme dát pozor na případ, kdy částice nalevo od ní byla absorbována:

$$p_2(x_2; t|y_1, y_2) = \int_0^{x_2} p^{(2)}(x_1, x_2; t|y_1, y_2) dx_1 + p^{(1)}(x_2; t|y_1, y_2) . \quad (3.15)$$

První člen v rovnici (3.15) popisuje případ, kdy ještě nedošlo k absorpci žádné částice, druhý člen popisuje případ, kdy už byla levá částice absorbována.

Pomocí vztahů (3.6), (3.12) a (3.13) - (3.15) můžeme napsat explicitní tvar marginálních hustot pravděpodobnosti:

$$p_1(x_1; t|y_1, y_2) = f(x_1; t|y_1) \int_{x_1}^{\infty} f(x_2; t|y_2) dx_2 + f(x_1; t|y_2) \int_{x_1}^{\infty} f(x_2; t|y_1) dx_2 , \quad (3.16)$$

$$p_2(x_2; t|y_1, y_2) = f(x_2; t|y_1) \int_0^{x_2} f(x_1; t|y_2) dx_1 + f(x_2; t|y_2) \int_0^{x_2} f(x_1; t|y_1) dx_1 + f(x_2; t|y_1) \left[1 - \int_0^{\infty} f(x_1; t|y_2) dx_1 \right] + f(x_2; t|y_1) \left[1 - \int_0^{\infty} f(x_1; t|y_1) dx_1 \right] . \quad (3.17)$$

Na Obr. 3.1 jsou pro případ bez driftu znázorněny jednočásticová hustota pravděpodobnosti (3.5) (graf *a*) a marginální hustoty pravděpodobnosti jednotlivých interagujících částic (3.14), (3.15) (grafy *b*) a *c*). Pro všechny grafy byly použity stejné parametry. Všechny tři grafy jsou kresleny až od času $t = 0.5$ s, protože díky počáteční podmínce (δ funkce) rostou pro malý čas do nekonečna.

Z grafů můžeme sledovat, jak interakce ovlivňuje pohyb částic. Největší rozdíl je vidět, když si zvolíme pevný čas t a díváme se na plochu pod grafem. U pravé interagující částice je tato plocha větší, než u neinteragující, u levé interagující je nejmenší. Je to díky tomu, že levá částice je ve středním smyslu pravou tlačena k absorpční hranici, naopak levá částice tlačí tu pravou pryč od absorpční hranice.

Na závěr této podkapitoly ještě zmíníme, že kolektivní chování interagujících a neinteragujících částic je stejné. Máme na mysli platnost vztahu

$$f(x; t|y_1) + f(x; t|y_2) = p_1(x; t|y_1, y_2) + p_2(x; t|y_1, y_2) , \quad (3.18)$$

který se dá jednoduše ověřit dosazením z (3.16) a (3.17).

Střední polohy částic

Střední poloha částice, která se pohybuje sama na polopřímce s absorpční hranicí je definována jako

$$\langle x(t) \rangle = \int_0^\infty x f(x; t|y) dx . \quad (3.19)$$

Analogicky jsou definovány střední polohy jednotlivých interagujících částic

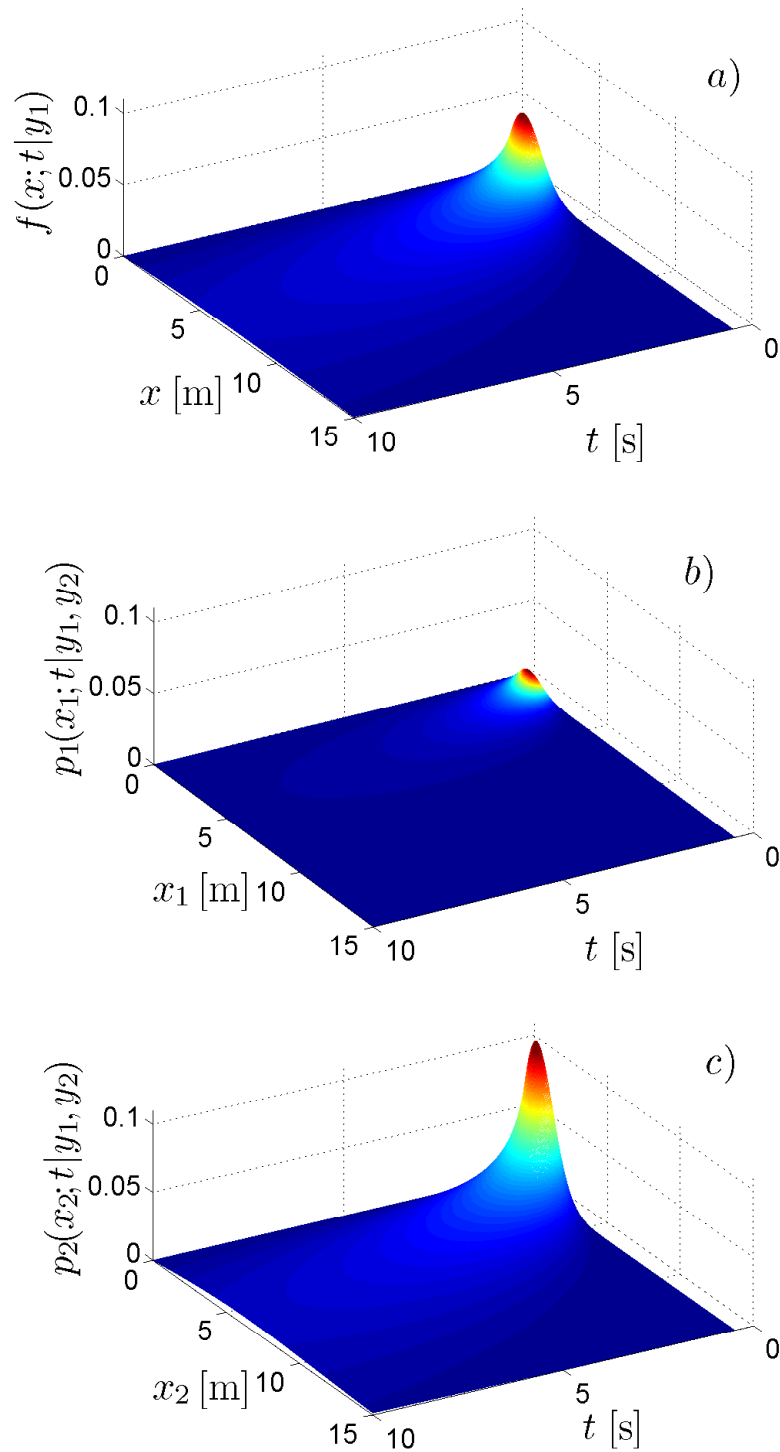
$$\langle x_i(t) \rangle = \int_0^\infty x p_i(x; t|y_1, y_2) dx , \quad i = 1, 2 . \quad (3.20)$$

Střední polohy $\langle x_1(t) \rangle$ a $\langle x_2(t) \rangle$ jsme spočítali numericky s použitím (3.16), (3.17) a (3.5), zakreslili jsme je do grafů na Obr. 3.2. S vyhodnocením grafů nám pomůže následující vztah mezi středními polohami interagujících a neinteragujících částic. Vynásobíme-li x rovnicí (3.18) a přeintegrujeme přes celou polopřímku, dostaneme rovnost:

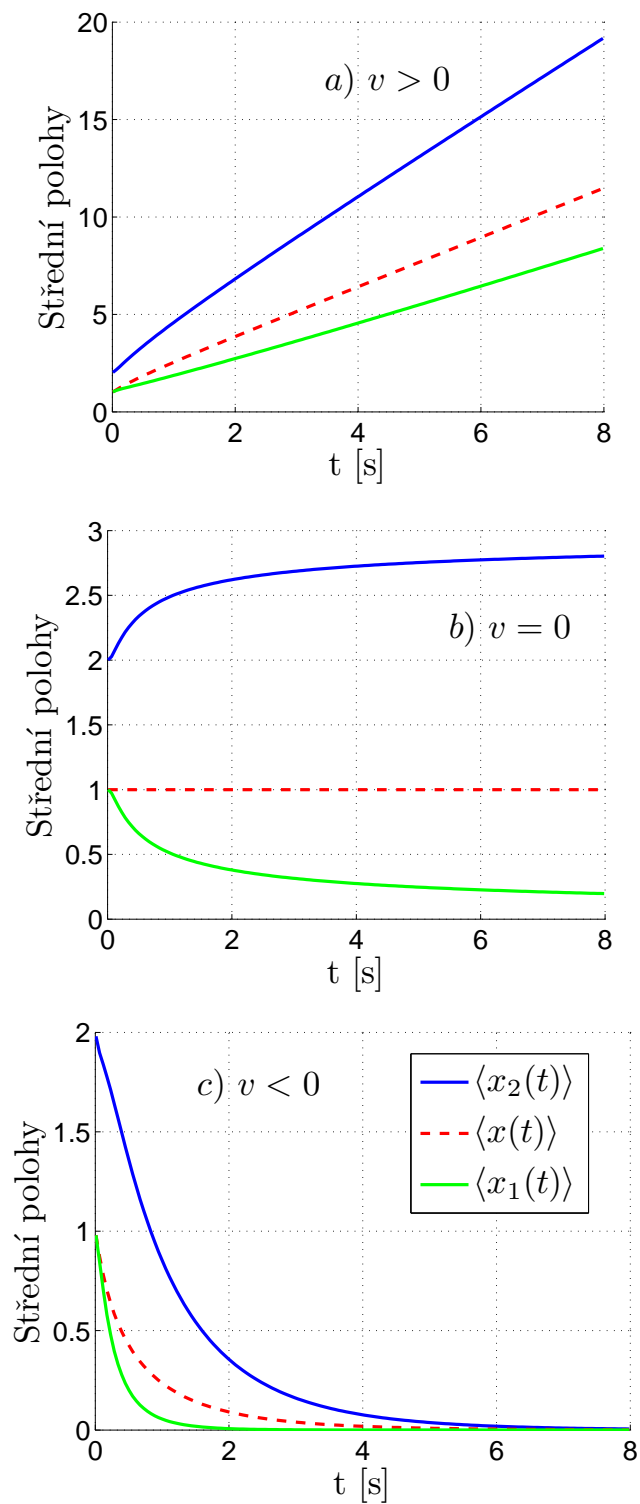
$$y_1 + y_2 + 2vt = \langle x_1(t) \rangle + \langle x_2(t) \rangle , \quad (3.21)$$

levá strana V grafu 3.2 a) je případ $v > 0$. Z obrázku je vidět, že díky driftu jsou částice taženy směrem k nekonečnu stejně jako neinteragující částice (přerušovaná čára). V grafu 3.2 b) je případ bez driftu. Zde by střední poloha neinteragující částice zůstala konstantní. V grafu vidíme, že díky interakci se střední poloha levé interagující částice blíží nule a střední poloha pravé částice se blíží ke konstantě. To můžeme ověřit pomocí (3.21). Pro $v = 0$ je výraz na levé straně konstantní, proto musí být součet $\langle x_1(t) \rangle + \langle x_2(t) \rangle$ také konstantní.

V grafu 3.2 c) je vidět, že většina trajektorií obou částic velmi rychle končí v absorpční hranici. Tady interakce přináší jen změnu v čase, za který jsou jednotlivé částice absorbovány.



Obrázek 3.1: Hustoty pravděpodobnosti výskytu částic na polopřímce s absorpční hranicí. V grafu a) je hustota pravděpodobnosti výskytu pro jednu neinteragující částici, v grafu b) marginální hustota pro interagující částici blíže k absorpční hranici a v grafu c) marginální hustota pro interagující částici dále od absorpční hranice. Byly použity parametry $v = 0 \text{ ms}^{-1}$, $D = 2 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, $y_1 = 0.2 \text{ m}$ a $y_2 = 0.3 \text{ m}$.



Obrázek 3.2: Časový vývoj středních poloh částic interagujících ((3.20), plná čára) a neinteragujících ((3.19), přerušovaná čára) pro tři různé hodnoty driftové rychlosti v . Byly použity parametry $y_1 = 1$ m, $y_2 = 2$ m, $D = 2$ m²s⁻¹, v grafu a) $v = 2$ ms⁻¹, v grafu b) $v = 0$ ms⁻¹ a v grafu c) $v < 0$ ms⁻¹.

3.2 Pravděpodobnost přežití

Pravděpodobnost přežití jedné neinteragující částice $S(t|y)$ je pravděpodobnost, že částice nebyla absorbována do času t . Tato pravděpodobnost je definována rovnicí (3.6). Po dosazení z (3.5) integrací získáme její analytický tvar:

$$S(t|y) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{-y - vt}{\sqrt{4Dt}}\right) - \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{vy}{D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{y - vt}{\sqrt{4Dt}}\right). \quad (3.22)$$

S využitím rozvoje komplementární chybové funkce v nule a v nekonečnu [13] jsme určili rychlost poklesu a limitu funkce $S(t|y)$ pro $t \rightarrow \infty$:

$$S(t|y) \sim \begin{cases} 1 - \exp\left(-\frac{vy}{D}\right) - \sqrt{\frac{D}{\pi}} \frac{2y}{v^2 t^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{(y + vt)^2}{4Dt}\right) & v > 0, \\ \frac{y}{\sqrt{\pi Dt}} & v = 0, \\ \sqrt{\frac{D}{\pi}} \frac{2y}{v^2 t^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{(y + vt)^2}{4Dt}\right) & v < 0. \end{cases} \quad (3.23)$$

V případě $v > 0$, kdy je částice tažena driftem od absorpční hranice, se pravděpodobnost přežití blíží konstantě

$$\lim_{t \rightarrow \infty} S(t|y) = 1 - \exp\left(-\frac{vy}{D}\right), \quad v > 0. \quad (3.24)$$

Výraz (3.24) udává pravděpodobnost, že částice nikdy nebude absorbována. V ostatních případech pravděpodobnost přežití klesá s časem k nule.

Pravděpodobnost přežití v dvoučásticovém případě definujeme vztahem

$$S_i(t|y_1, y_2) = \int_0^\infty p_i(x_i; t|y_1, y_2) dx_i, \quad i = 1, 2. \quad (3.25)$$

V případě interagujících částic¹ lze najít příslušné pravděpodobnosti přežití integrací hustot (3.16) a (3.17). My však opět využijeme „stejnosti“ částic a provedeme pravděpodobnostní úvahu. Pravděpodobnost přežití levé částice je součin pravděpodobností přežití dvou neinteragujících částic, které začínají v bodech y_1 a y_2 . Pokud totiž ani jedna neinteragující částice nebyla absorbována, nebyla tedy absorbována ani levá částice interagující. Výsledek je

$$S_1(t|y_1, y_2) = S(t|y_1)S(t|y_2). \quad (3.26)$$

Pokud nebyla absorbována částice začínající v y_1 nebo nebyla absorbována částice z y_2 , nebyla tedy absorbována ani pravá interagující částice. Nesmíme však zapomenout odečíst od součtu těchto pravděpodobností odečíst případ, kdy nebyla absorbována ani jedna, abychom jej nepočítali dvakrát. Výsledný výraz vypadá takto:

$$S_2(t|y_1, y_2) = S(t|y_1) + S(t|y_2) - S(t|y_1)S(t|y_2). \quad (3.27)$$

Výrazy (3.26) a (3.27) lze ověřit integrací hustot (3.16) a (3.17). Jak interakce mezi částicemi změní asymptotické chování jejich pravděpodobnosti přežití?

¹Případ $v = 0$, pro N interagujících částic byl zkoumán v [14].

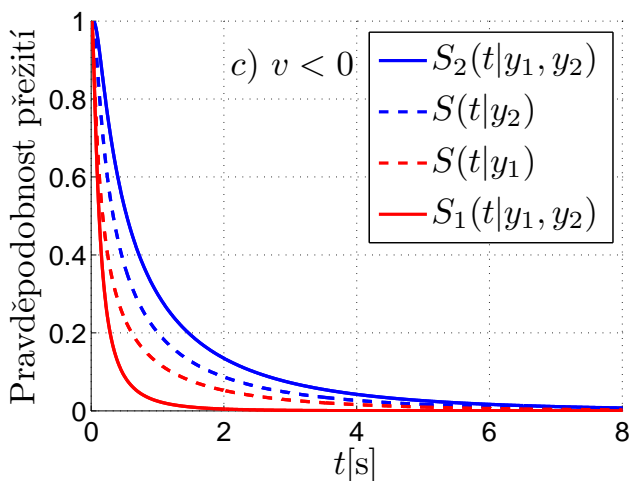
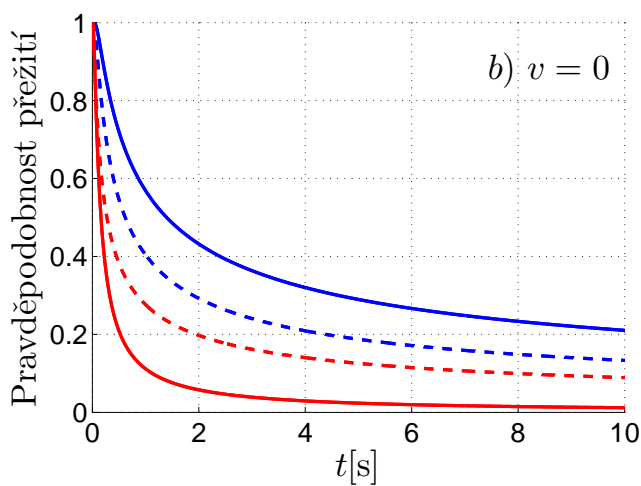
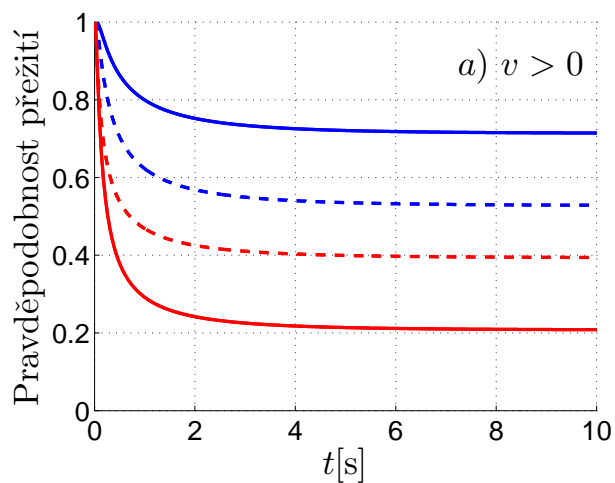
Odpověď obdržíme dosazením časových asymptotik (3.23) do vztahů (3.26), (3.27). Pro pravděpodobnost přežití levé částice máme:

$$S_1(t|y_1, y_2) \sim \begin{cases} \left[1 - \exp\left(-\frac{vy}{D}\right)\right] \left[1 - \exp\left(-\frac{vy}{D}\right)\right] & v > 0, \\ \frac{y_1 y_2}{\pi D t} & v = 0, \\ \frac{4y_1 y_2 D}{v^4 \pi t^3} \exp\left(-\frac{(y_1 + vt)^2 + (y_2 + vt)^2}{4Dt}\right) & v < 0. \end{cases} \quad (3.28)$$

Případ $v > 0$ je podobný pro interagující i neinteragující částici. Pravděpodobnosti přežití se blíží ke konstantě díky tomu, že drift „odtáhne“ částice pryč od absorpční hranice. Ale platí $S_1(t|y_1, y_2) < S(t|y_1)$, protože díky přítomnosti pravé částice je více trajektorií levé částice, které vedou do absorpční hranice. V případě bez driftu je už vliv interakce znát, pravděpodobnost přežití levé interagující částice se blíží k nule rychleji (jako t^{-1} místo $t^{-1/2}$) opět díky vlivu pravé částice. V případě driftu směrem k absorpční hranici klesají pravděpodobnosti přežití pro levou interagující, resp. pro neinteragující částici jako exponenciála (násobená faktory t^{-3} , resp. $t^{-3/2}$). Pro pravou částici platí:

$$S_2(t|y_1, y_2) \sim \begin{cases} 1 - \exp\left(-\frac{v}{D}(y_1 + y_2)\right) & v > 0, \\ \frac{y_1 + y_2}{\sqrt{\pi D t}} & v = 0, \\ \sqrt{\frac{D}{\pi}} \frac{2}{v^2 t^{\frac{3}{2}}} \left\{ y_1 \exp\left(-\frac{(y_1 + vt)^2}{4Dt}\right) + y_2 \exp\left(-\frac{(y_2 + vt)^2}{4Dt}\right) \right\} & v < 0. \end{cases} \quad (3.29)$$

Pravděpodobnost přežití pravé částice se v případě $v > 0$ blíží konstantě. Platí $S_2(t|y_1, y_2) > S(t|y_1)$ díky tomu, že přítomnost levé částice snižuje počet trajektorií pravé částice, které končí v absorpční hranici. Pravděpodobnosti přežití jsme zakreslili do grafů na Obr. 3.3. Pro srovnání jsou tam znázorněny neinteragující částice začínající v y_1 a v y_2 (přerušovaná čára).



Obrázek 3.3: Pravděpodobnosti přežití do času t . Plnou čarou jsou vyznačeny interagující částice, přerušovanou neinteragující se stejnými počátečními podmínkami jako interagující. Byly použity parametry $y_1 = 1$ m, $y_2 = 1.5$ m, $D = 4$ m²s⁻², v grafu a) $v = 2$ ms⁻¹, v grafu b) $v = 0$ ms⁻¹ a v grafu c) $v = -2$ ms⁻¹.

3.3 Střední doba do absorpce

Na začátek musíme zdůraznit, že střední doba do absorpce je konečná jen v případě $v < 0$. Nejprve odvodíme střední dobu do absorpce pro jednu částici. Abychom to mohli udělat, musíme znát příslušnou hustotu pravděpodobnosti. Necht' $\phi(t|y)dt$ je pravděpodobnost toho, že částice je absorbována v intervalu $(t, t + dt)$. Tuto hustotu můžeme implicitně definovat vztahem:

$$S(t|y) = \int_t^\infty \phi(t'|y) dt' , \quad (3.30)$$

jelikož pravděpodobnost přežití do času t odpovídá pravděpodobnosti absorpce až po čase t . Derivací dostaneme hledanou hustotu pravděpodobnosti:

$$\phi(t|y) = -\frac{d}{dt}S(t|y) , \quad v < 0 . \quad (3.31)$$

Nyní definujeme střední dobu do absorpce:

$$\langle t \rangle = \int_0^\infty t' \phi(t'|y) dt' . \quad (3.32)$$

Střední doba do absorpce je konečná jen v případě $v < 0$. Pomocí vztahů (3.32) a (3.31) a integrace per partes lze výpočet střední doby do absorpce provést pomocí integrace pravděpodobnosti přežití:

$$\langle t \rangle = \int_0^\infty S(t|y) dt . \quad (3.33)$$

Z chování $S(t|y)$ pro $t \rightarrow \infty$ (3.23) tedy vidíme, že v případech $v > 0$, resp. $v = 0$ je střední doba do absorpce nekonečná (integrál (3.33) diverguje, protože $S(t|y)$ se v nekonečnu chová jako t^0 , resp. $t^{-1/2}$ viz (3.23)). Proto budeme v dalším textu předpokládat $v < 0$.

V případě $v < 0$ vztahu (3.31) pro jednu částici máme:

$$\phi(t|y) = \frac{y}{\sqrt{4\pi Dt^3}} \exp\left(-\frac{(y+vt)^2}{4Dt}\right) . \quad (3.34)$$

Vidíme, že případě $v < 0$ hustota pravděpodobnosti $\phi(t|y)$ klesá exponenciálně, střední doba do absorpce (3.32) je proto konečná. Po dosazení do (3.32) dostáváme pro jednu částici

$$\langle t \rangle = \frac{y}{|v|} . \quad (3.35)$$

Tento výsledek je zajímavý tím, že nezávisí na difúzní konstantě D . Znamená to, že zvýšená pohyblivost částice přispívá stejnou měrou k trajektoriím, které končí v absorpční hranici, i k těm, které vedou pryč od této hranice. Výsledek můžeme ověřit pro $D = 0$, tedy částici, která se chová deterministicky. Taková částice by se z bodu y pohybovala konstantní rychlostí $|v|$ směrem k absorpční hranici. Doputovala by tam tedy v čase $y/|v|$.

Pro interagující částice definujeme analogicky $\phi_i(t|y_1, y_2) dt$, $i = 1, 2$ jako pravděpodobnost absorpce i -té částice v časovém intervalu $(t, t + dt)$. Analogicky jako v jednočásticovém případě ji definujeme pomocí pravděpodobnosti přežití:

$$\phi_i(t|y_1, y_2) = -\frac{d}{dt}S_i(t|y_1, y_2) , \quad i = 1, 2 . \quad (3.36)$$

Střední doba do absorpce pro interagující částice je pak rovna

$$\langle t_i \rangle = \int_0^\infty t \phi_i(t|y_1, y_2) dt, \quad i = 1, 2. \quad (3.37)$$

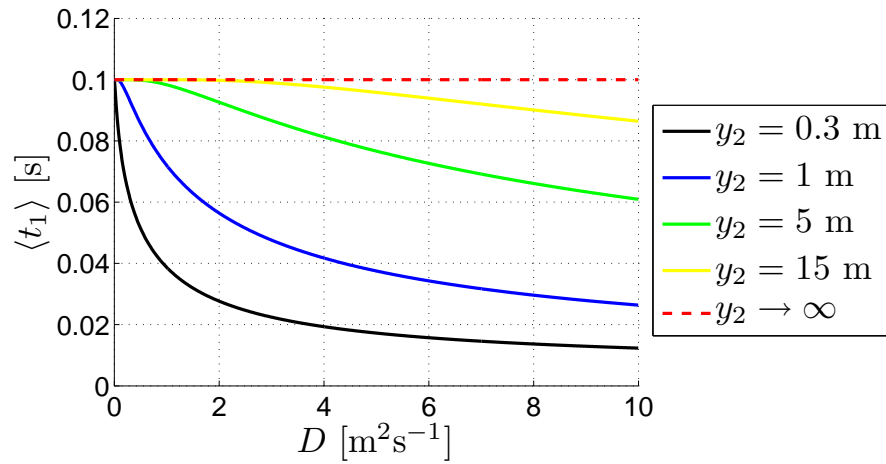
Pro střední doby do absorpce opět můžeme využít vztahu (3.18), ze kterého plyne:

$$\frac{y_1}{|v|} + \frac{y_2}{|v|} = \langle t_1 \rangle + \langle t_2 \rangle. \quad (3.38)$$

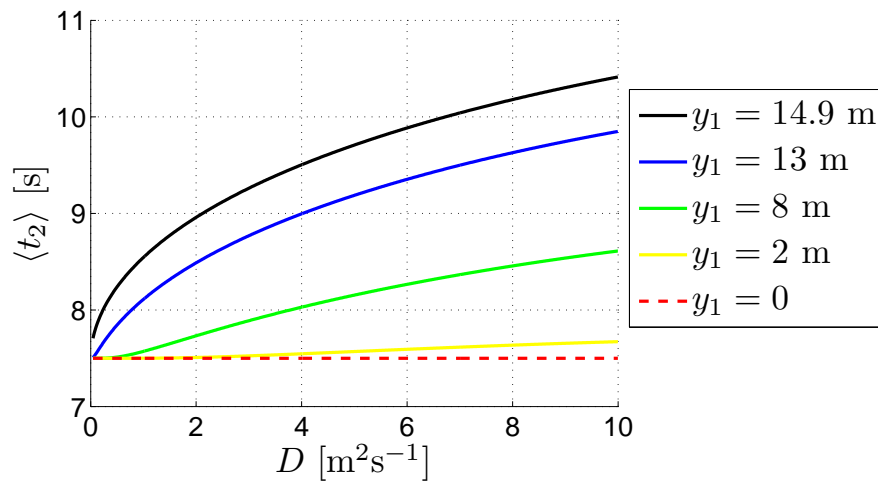
Na levé straně je součet středních dob do absorpce neinteragujících částic.

Střední doby do absorpce interagujících částic závisí na všech parametrech modelu (v , D , y_1 a y_2). To je velký rozdíl oproti neinteragujícím částicím, jejichž střední doby do absorpce nezávisí na D (viz (3.35)), způsobený pouze interakcí. Na Obr. 3.4 je znázorněna numericky spočtená závislost střední doby do absorpce levé částice v závislosti na difúzní konstantě. Tuto závislost jsme vykreslili pro 5 různých počátečních poloh pravé částice (Levá částice začíná vždy na stejném místě!). Poslední z nich (čárkovaně), $y_2 \rightarrow \infty$, odpovídá případu jediné částice na polopřímce, do grafu jsme tedy zakreslili $y_1/|v|$. Z grafu vidíme, že s rostoucí počáteční vzdáleností částic slábne vliv interakce a postupně se blížíme k případu neinteragující částice. V grafu je také vidět, že pohyblivější částice jsou dříve absorbovány. Všimněme si, že všechny křivky začínají ve stejném bodě. Limita $D \rightarrow 0$ totiž znamená, že se částice začnou pohybovat deterministicky rychlostí v směrem k absorpční hranici. Proto také interakce mezi nimi nehraje žádnou roli (částice si udržují konstantní vzdálenost). To je důvod, proč při $D \rightarrow 0$ je střední doba do absorpce první částice stejná pro všechny polohy druhé částice.

Podobnou situaci máme na Obr. 3.5, kde pro jednu pevnou počáteční polohu pravé částice a pět různých počátečních poloh levé částice je vykreslena závislost střední doby do absorpce pravé částice v závislosti na difúzní konstantě. Příklad $y_1 = 0$ znamená, že pravá částice difunduje na polopřímce sama, do grafu jsme tedy zakreslili $y_2/|v|$. Opět vidíme, že vliv interakce klesá s rostoucí vzdáleností částic, pro $D \rightarrow 0$ jsou částice deterministické a střední doba do absorpce nezávisí na jejich počáteční vzdálenosti.



Obrázek 3.4: Střední doba do absorpce levé částice v závislosti na difúzní konstantě. Zakresleno pro 5 různých počátečních poloh y_2 a jednu pevnou počáteční polohu y_1 . Byly použity parametry $v = -2 \text{ ms}^{-1}$, $y_1 = 0.2 \text{ m}$, y_2 viz legenda.



Obrázek 3.5: Střední doba do absorpce pravé částice v závislosti na difúzní konstantě. Zakresleno pro pět různých počátečních poloh y_1 a jednu pevnou počáteční polohu y_2 . Byly použity parametry $v = -2 \text{ ms}^{-1}$, $y_2 = 15 \text{ m}$, y_1 viz legenda.

Závěr

Zobecnili jsme pravděpodobnostní model persistentní náhodné procházky na případ dvou interagujících částic v jednodimenzionálním prostoru. Tento model jsme použili k popisu náhodného pohybu dvou bakterií v úzkém kanálku. V první kapitole jsme popsali pohyb bakterií pomocí persistentní náhodné procházky. Podařilo se nám odvodit rovnici (1.14) pro hustotu pravděpodobnosti. Pro tuto rovnici jsme odvodili také počáteční podmínky (1.17) pro zjednodušující předpoklady. Model jsme aproximovali pomocí difúzní limity (1.18).

V druhé kapitole jsme studovali pohyb dvou bakterií na přímce. Jejich společné „těžiště“ se chová jako jedna difundující částice na přímce, rozdílová souřadnice jako jedna difundující částice na polopřímce s reflexní hranicí. Pro různé hodnoty rozdílu driftových rychlostí $v_r = v_2 - v_1$; $v_r > 0$, $v_r = 0$ a $v_r < 0$ nastávají tři kvalitativně odlišné dynamické režimy. V případě $v_r > 0$ vliv interakce po dlouhém čase vymizí. V případě $v_r = 0$ se bakterie od sebe vzdalují jako $t^{1/2}$, a to pouze díky interakci. A nakonec v případě $v_r < 0$ spěje systém do rovnováhy, bakterie vytvoří „klastř“ a pohybují se společně.

Ve třetí kapitole byl studován pohyb bakterií na polopřímce s absorpční hranicí za předpokladu, že obě bakterie jsou stejné ($v_1 = v_2 = v$). Nalezli jsme marginální hustoty pravděpodobnosti souřadnic obou bakterií (3.16) a (3.17). Zde jsou opět kvalitativní rozdíly pro tři různé situace: $v > 0$, $v = 0$ a $v < 0$. Pokud $v > 0$, bakterie jsou taženy pryč od absorpční hranice. V případě $v = 0$ se blíží střední poloha levé bakterie nule, střední poloha pravé bakterie konstantě (Obr. 3.2). Dále jsme zkoumali pravděpodobnosti přežití bakterií do času t . Pro levou bakterii klesá pravděpodobnost přežití rychleji, než kdyby interakce přítomna nebyla. Naproti tomu u pravé bakterie klesá pravděpodobnost přežití pomaleji. Nakonec jsme sledovali střední doby do absorpce jednotlivých bakterií. Narozdíl od případu bez interakce se objevila závislost na difúzní konstantě (pohyblivosti). Čím je pohyblivost levé (pravé) bakterie větší, tím je její střední doba do absorpce kratší (delší), viz Obr. 3.4 a Obr. 3.5.

Seznam použité literatury

- [1] TINDALL, M. J., MAINI, P. K., PORTER, S. L., ARMITAGE, J. P., Overview of Mathematical Approaches Used to Model Bacterial Chemotaxis II: Bacterial Populations, *Bulletin of Mathematical Biology*, 2008, 70, 1570-1607.
- [2] MÄNNIK, J., DRIESSEN, R., GALAJDA, P., KEYMER, J. E. and DEKKER, C., Bacterial Growth and motility in sub-micron constrictions, *PNAS*, 2009, 106, 35, 14861-14866.
- [3] WANG, W., SHOR, L. M., LEBOEUF, E. J., WIKSWO, J. P. and KOSSON, D. S., Mobility of Protozoa through Narrow Channels, *Applied and Environmental Microbiology*, 2005, 4628-4637.
- [4] SAIKAT, J., SUNGHWAN, J., Paramecium swimming in capillary tube, *arXiv*: 1012.4812v1, 2010.
- [5] RANJARD, L., RICHAUME, A. S., Quantitative and qualitative microscale distribution of bacteria in soil, *Res Microbiol*, 2001, 152, 707-716.
- [6] KELLER, E. F., SEGEL, L. A., Traveling bands of chemotactic bacteria: A theoretical analysis, *J. Teor. Biol.*, 1971, 30, 235-248.
- [7] KRAPIVSKI, P. L, REDNER, S., BEN-NAIM, E., *A Kinetic View of Statistical Physics*, 1st ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2010.
- [8] WEISS, G. H., Some applications of persistent random walks and the telegrapher's equation, *Physica A*, 2002, 311, 381-410.
- [9] DUFFY, D. G., *Transform methods for solving partial differential equations*, 2nd ed., CHAPMAN & HALL /CRC, New York, 2004.
- [10] RYABOV, A., CHVOSTA, P., Single-file diffusion of externally driven particles, *Phys. Rev. E*, 2011, 83, 020106.
- [11] FELLER, W., *An Introduction to Probability Theory and Its Applications, Vol II*. 2nd ed., John Wiley & Sons, New York, 1971.
- [12] REDNER, S. *A Guide to First-Passage Processes*, Cambridge University press, New York, 2001.
- [13] ABRAMOWITZ, M. and STEGUN, I. A., *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables*, Dover, New York, 1972.
- [14] RYABOV A., CHVOSTA P., Survival of interacting Brownian particles in crowded one-dimensional environment, *J. Chem. Phys.*, 2012, 136, 064114.