

基于连续时间无规行走模型研究反常扩散*

林 方 包景东†

(北京师范大学物理系,北京 100875)

(2007 年 3 月 24 日收到,2007 年 5 月 21 日收到修改稿)

基于连续时间无规行走(CTRW)理论,数值研究了布朗粒子的欠扩散、正常扩散和超扩散三种扩散行为.解决了 CTRW 模型的跳跃步长和等待时间分布函数的可实现化问题,对 Metropolis 抽样方法进行了改进以适用于周期势.探讨了布朗马达依靠闪烁棘轮和摇摆棘轮整流反常扩散所获得的定向速度.结果显示,闪烁布朗马达定向流极大值出现在超扩散条件下,摇摆布朗马达定向流极大值出现在弹道扩散条件下.

关键词:无规行走,反常扩散, Metropolis 抽样,棘轮势

PACC: 0540, 8220F, 8715

1. 引 言

人们对布朗运动的认识可以追溯到 1785 年 Ingenhauz 观测到木炭粉末在酒表面的运动,1828 年 Brown 发现花粉颗粒在水面作不间断的无规则运动.1905 年, Einstein 在一篇开创性的文章^[1]中,建立了布朗运动的扩散理论. Einstein 指出,布朗运动的问题可以看成 N 个相同粒子在相同条件下组成的“系综”随时间的扩散,并得出自由粒子的方均位移与扩散时间满足

$$\langle x(t) - x_0 \rangle^2 = 2Dt,$$

其中 D 为扩散系数.20 世纪 40 年代以后,任意势场中的布朗运动的动力学研究开始兴起^[2,3],两种等价的理论也随之诞生:一种是对单个粒子在噪声和外场驱动的轨道建立随机微分方程,即 Langevin 方程;另一种是从 Markov 过程满足的主方程出发,建立粒子概率密度分布函数随时间演化的二阶偏微分方程,即 Fokker-Planck 方程^[4].

近年来,随着实验技术的不断提高,人们在湍流、渗透中的核磁共振、多孔介质的渗透、有缺陷的非晶格半导体中的带电粒子、固体表面、细胞中单元结构的形成、生长表面等环境中,观察到偏离布朗运动特性的扩散行为:自由粒子方均位移在长时间后正比于时间的分数次幂^[5,6],即

$$\langle x(t) - x_0 \rangle^2 \propto t^\alpha,$$

其中 $0 < \alpha < 1$ 为欠扩散, $\alpha = 1$ 为正常扩散, $1 < \alpha < 2$ 为超扩散, $\alpha = 2$ 为弹道扩散^[7].从数学上看,反常扩散来源于时间和空间上的非局域性,描述这一运动的主要手段有^[8]含 non-Ohmic 谱的广义 Langevin 方程,连续时间无规行走(CTRW),分数 Fokker-Planck 方程, Lévy 飞行, Tsallis 统计等.现在对这些问题的研究才刚刚起步,急需发展一些方法来研究反常扩散系统在有势情况下的输运过程.常用的方法有数值求解广义 Langevin 方程^[9]和分数 Fokker-Planck 方程.与两者相比,CTRW 模型的优点在于它的物理图像清楚,不涉及系统的动力学行为,不必求解动力学微分方程,便于数值模拟,只与系统的统计行为(即跳跃步长与跳跃等待时间的分布)有关,因此特别适用于复杂势下多维系统的反常扩散问题,例如生长表面、细胞环境和蛋白质输运等.

随机行走的理论是 Einstein 在 1905 年关于流体中分子热运动的一篇论文^[10]中建立的,他用随机行走方法对处于平衡态的布朗粒子的方均位移进行了理论推导;同年, Pearson 在 *Nature* 上正式提出了随机行走的概念^[11]. Einstein-Pearson 理论要求粒子运动空间均匀和各向同性.1965 年, Montroll 和 Weiss 建立了连续时间无规行走理论^[12],将布朗运动过程分解成随机的空间跳跃和两次跳跃之间的随机等待时间两个部分,两者由各自的概率密度分布函数决定.例如有缺陷的非晶格半导体中的带电粒子的扩散行为可以用一个长尾等待时间分布的 CTRW 模型

* 国家自然科学基金(批准号:10674016)和教育部博士点基金(批准号:20050027001)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: jlbao@bnu.edu.cn

来描述.有作者结合分数 Fokker-Planck 方程,扩展了 CTRW 模型,使其可以运用于有势条件下粒子在周期性晶格中的扩散问题.然而遗憾的是,这样的模型只能用于研究欠扩散情形^[13].

本文对 CTRW 模型中的跳跃步长和等待时间分布函数的可产生子样进行了探讨,改进了 Metropolis 抽样技术,应用于不对称周期势中布朗马达的定向运动.

2. CTRW 模型及其数值实现

2.1. CTRW 的基本思想

CTRW 模型^[5,6,8,14]能够给出反常扩散系统的稳定态分布,其有两个基本要素:跳跃步长分布的二次矩和两次跳跃之间等待时间分布的一次矩,分别由跳跃步长分布函数 $\lambda(x)$ 和等待时间分布函数 $\psi(\tau)$ 来确定.其物理意义分别是: $\lambda(x)dx$ 表示在间隔 $(x, x+dx)$ 跳跃步长的概率; $\psi(\tau)d\tau$ 表示在间隔 $(\tau, \tau+d\tau)$ 一次等待时间的概率. CTRW 理论是以平均等待时间 $\bar{\tau} = \int_0^{\infty} \psi(\tau)\tau d\tau$ 和跳跃步长的方均 $\sum^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda(x)x^2 dx$ 是否有限,来对扩散行为进行分类的.对于正常扩散,两者都是确定的;对于反常扩散,两者之一是发散的.前者发散而后者有限为欠(慢)扩散;反之为超(快)扩散.

2.2. 数值模拟连续时间无规行走

2.2.1. 欠扩散 ($0 < \alpha < 1$)

在 $0 < \alpha < 1$ 的条件下,经过足够长的时间之后,系统的行为由等待时间分布函数 $\psi(\tau)$ 的渐进行为决定.这里我们选择的等待时间分布密度函数为 Mittag-Leffler 时间分布密度^[15]:

$$\psi(\tau) = -\frac{d}{d\tau} E_{\alpha}(-(\nu\tau)^{\alpha}), \quad (1)$$

其中 $E_{\alpha}(-(\nu\tau)^{\alpha})$ 称为 Mittag-Leffler 函数,有

$$E_{\alpha}(-(\nu\tau)^{\alpha}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[-(\nu\tau)^{\alpha}]^n}{\Gamma(n\alpha + 1)}, \quad (2)$$

无势条件下 ν 为常数.

在数值计算过程中,从 Mittag-Leffler 时间分布密度函数中抽取等待时间 τ 序列是非常麻烦的,在 $\alpha < 0.9$ 的条件下,可以用 Pareto 分布密度函数来近似,其定义为^[16]

$$\psi(\tau) = -\frac{d}{d\tau} P_{\alpha}(\nu\tau), \quad (3)$$

其中

$$P_{\alpha}(\nu\tau) = \frac{1}{[1 + \Gamma(1-\alpha)^{\alpha}\nu\tau]^{\alpha}}. \quad (4)$$

同时,选择如下 Gauss 分布密度函数

$$\lambda(x) = (4\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp(-x^2/4\sigma^2).$$

作为跳跃步长 x 的分布函数.

2.2.2. 正常扩散 ($\alpha = 1$)

如果粒子的跳跃步长分布的二次矩和等待时间分布的一次矩均是有限的,例如,考虑 Poisson 分布 $\psi(\tau) = \bar{\tau}^{-1} \exp(-\tau/\bar{\tau})$ 为粒子下一次跳跃前的等待时间分布; Gauss 分布 $\lambda(x) = (4\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp(-x^2/4\sigma^2)$ 为粒子每次向前或者向后的跳跃步长分布,则可以得到自由粒子在长时间后的方均位移 $x^2(t) = 2Dt$, 这就是著名的 Einstein 公式.事实上,在早期 Einstein 的一维无规行走理论中,并没有考虑两次跳跃间的等待时间分布,而这里引入了一个有限平均等待时间分布.在布朗运动的 Langevin 理论中,只要粒子阻尼核函数的 Laplace 变换在低频情况下与频率无关,则粒子在无势情况下显示正常扩散.显然这是一个理想化的模型.这里就不再对运动图像作赘述.

2.2.3. 超扩散 ($1 < \alpha < 2$)

在 CTRW 模型中,超扩散要求平均等待时间 $\bar{\tau}$ 是确定的,而跳跃步长的方均 \sum^2 发散.我们可以选择 Lévy 分布^[17]作为跳跃步长的分布函数,其分布的渐进形式为

$$\lambda(x) \propto |x|^{-1-\mu} \quad (\mu = 2/\alpha),$$

在这种情况下,自由粒子的方均位移 $x^2(t)$ 发散.这里,我们对 Lévy 分布实施有限宽度的修正^[8,18],即

$$x^2(t)_L \sim \int_{L_2}^{L_1} t^{1/\mu} dx x^2 W(x,t) \propto t^{\alpha}, \quad (5)$$

式中 $W(x,t)$ 为粒子分布密度.(5)式实质上是一个边界为 $(L_1 t^{1/\mu}, L_2 t^{1/\mu})$ 的随时间增长的“盒子”.在做系综平均求 $x^2(t)$ 的时候,只有处于这个“盒子”中的粒子才参与平均,舍弃了落在“盒子”以外的粒子. L_1 和 L_2 的取值应该满足:对于任意 $\alpha \in (1, 2)$,确保参与平均的粒子坐标 x 满足分布 $W(x,t) \sim$

$$\frac{Dt}{|x|^{1+\mu}}.$$

我们仍选择 Poisson 分布 $\psi(\tau) = \bar{\tau}^{-1} \exp(-\tau/\bar{\tau})$ 作为自由粒子两次跳跃之间等待时间 τ 的分布函数.

从图 1 和 2 可以看出,数值模拟的结果与理论值符合得很好.这表明本文对等待时间 τ 和跳跃步

长 x 随机序列的抽样方法是合理可行的,这种方法可以用来将 CTRW 应用于存在非线性势场的情况.

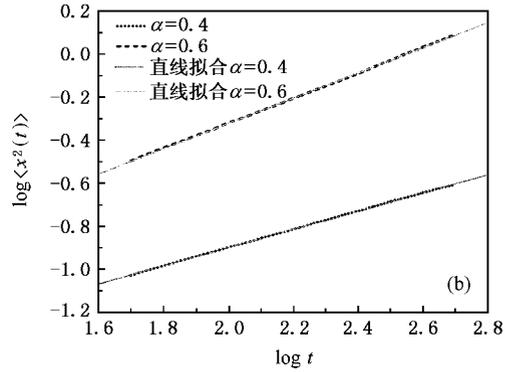
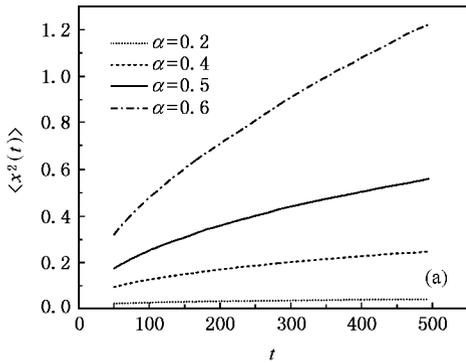


图 1 (a) 欠扩散条件下自由粒子方均位移 $x^2(t)$ 随时间演化曲线 (b) 反常指数 $\alpha = 0.4$ 和 $\alpha = 0.6$ 时自由粒子 $\log x^2(t) - \log t$ 图中直线拟合斜率分别为 0.41293 ± 0.00057 和 0.58766 ± 0.00093

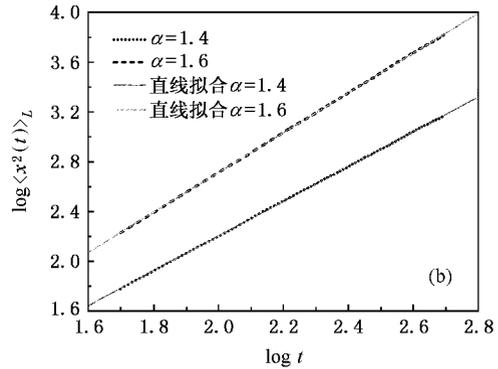
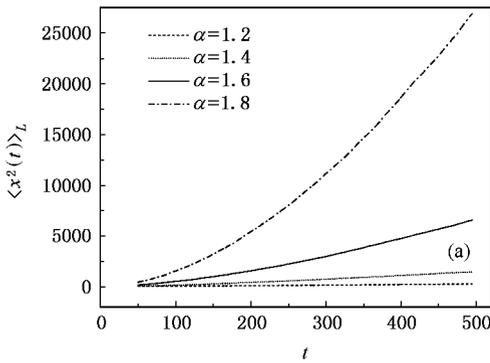


图 2 (a) 超扩散条件下修正后的自由粒子方均位移 $x^2(t)_L$ 随时间演化曲线 (b) 反常指数 $\alpha = 1.4$ 和 $\alpha = 1.6$ 时自由粒子 $\log x^2(t)_L - \log t$ 图中直线拟合斜率分别为 1.39635 ± 0.00102 和 1.60096 ± 0.00111

3. CTRW 在布朗马达中的应用

在一维不对称周期势(棘轮势)中的布朗粒子同时在噪声和外部非平衡涨落的作用下将产生定向输运,形成定向流^[19].根据外部非平衡涨落的不同方式,主要分两类棘轮模型:闪烁棘轮和摇摆棘轮,本文分别研究两者整流反常扩散形成定向流.

用 CTRW 模型模拟粒子在不对称周期势下的扩散过程,由于势的存在,粒子的跳跃有两种情况:一是从势能较高的位置跳跃到势能较低的位置,从能量变化的角度看这样的跳跃总是可以实现的;二是从势能较低的位置跳跃到势能较高的位置,这样的跳跃则是以一定概率来实现的.本文采用 Metropolis 抽样方法,来判断能否实现从势能较低的位置到势能较高的位置的跳跃.

如图 3 所示,图中粒子从 x_i 跳跃到 $x'_{i+1} = x_i +$

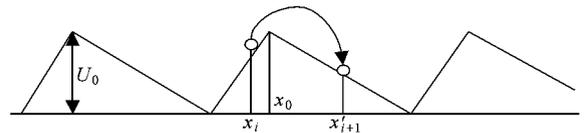


图 3 直接 Metropolis 抽样无法准确判断粒子能否实现某次翻越势垒的跳跃示意图

Δx , 运用 Metropolis 抽样方法来判断,则势能差 $\Delta U \leq 0$ 本次跳跃总是可以实现的,其实不然.粒子从 x_i 跳跃到 x'_{i+1} 的过程中翻越了势垒,所以粒子的此次跳跃实际包含两个阶段:从 x_i 到势垒位置 x_0 , $\Delta U > 0$ 以一定概率实现;从势垒位置 x_0 到 x'_{i+1} , $\Delta U \leq 0$ 总是可以实现.根据以上的分析,我们对运用 Metropolis 抽样来判断粒子能否实现某次跳跃的方法做了改进,使之更加贴近真实的物理情形:在计算 ΔU 之前,首先判断粒子是否翻越势垒,如果粒子翻越了势垒,则

$$\Delta U = \Delta U(x_0, x_i) = U_0 - U(x_i);$$

如果粒子没有翻越势垒, 则

$$\Delta U = \Delta U(x'_{i+1}, x_i) = U(x'_{i+1}) - U(x_i),$$

之后运用一般的 Metropolis 抽样判定方案.

3.1. 闪烁棘轮整流反常扩散

假设布朗粒子在闪烁棘轮势场 $U(x, t) = f(t) U_s(x)$ 中作随机运动, 其中 $f(t)$ 周期地取 1 和 0 两个值, 分别表示势场存在或脱离, 即

$$f(t) = 1, n\tau < t < n\tau + \tau_{on};$$

$$f(t) = 0, n\tau + \tau_{on} < t < (n + 1)\tau.$$

$$\tau = \tau_{on} + \tau_{off},$$

棘轮势选作

$$U_s(x) = \begin{cases} \frac{U_0}{aL}x, & nL \leq x \leq nL + aL, \\ \frac{U_0}{(1-a)L}(L-x), & nL + aL \leq x \leq (n+1)L, \end{cases} \quad (6)$$

这里 U_0 为势垒高度, L 为棘轮势空间周期, a 为棘轮势的不对称度.

闪烁棘轮势模型如图 4 所示, 当棘轮势存在时, 粒子被束缚在某个势阱的底部(例如 $x = 0$ 处), 棘轮势撤掉后, 布朗粒子开始自由扩散. 经过势脱离时间 τ_{off} 后, 棘轮势重新建立, 若粒子在 $L(i-1+a)$ 至 $L(i+a)$ 区间内, 将被束缚在位于 iL 处的势阱内. 由于势阱的不对称性, 对合适的 τ_{off} , 一个起初在 iL 处的势阱内的粒子, 其出现在 $(i+1)L$ 处势阱内的概率大于出现在 $(i-1)L$ 处势阱内的概率, 出现向右的定向运动. 如果棘轮势存在的时间 τ_{on} 足够长, 那么棘轮势恢复后, 大部分粒子能够回到各自所在势阱的底部. 棘轮势撤掉后, 布朗粒子重新开始自由扩散. 如此循环往复, 就能产生向右的定向流.

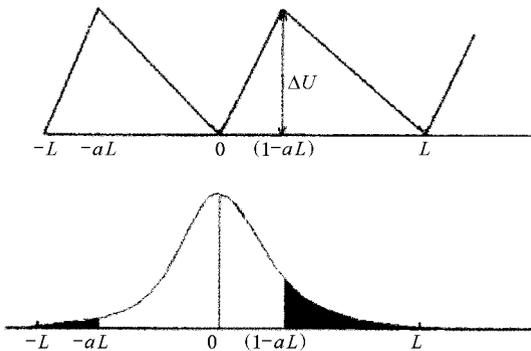


图 4 闪烁棘轮引发粒子定向运动示意图

图 5 显示了势脱离时间 $\tau_{off} = 10.0$ 时定向流 J 随反常指数 α 的变化规律, 结果发现 J 不是 α 的单调函数. 开始时随着 α 的增大, 平均等待时间缩短, 长程跳跃的概率增大, 粒子扩散的速度增大, 每个循环 ($\tau_{on} + \tau_{off}$) 中粒子跨过的平均势垒数增加, 定向流增大. 后来随着 α 的增大, 粒子扩散变得更快, 此时的 $\tau_{off} = 10.0$ 值对 α 较大的系统而言已经足够长, 使得布朗粒子充分扩散, 通过前和后势垒的概率趋于相等, 即棘轮势的不对称选择功能变弱, 净流反而减小. 同时还发现, 当 $\alpha < 1$ 时, 定向流随 α 值得降低而迅速减小, 直至趋近于 0. 这是因为对欠扩散而言, 粒子不能在 τ_{off} 这段时间内扩散到达其左右两侧的位垒处, 势场就重新恢复, 则粒子被约束在各个势阱底部, 因此定向流很小.

在图 6 中, 计算了 $\alpha = 0.8, 1.2, 1.5, 1.8$ 时, J 随势脱离时间 τ_{off} 的变化规律, 结果显示 J 是 τ_{off} 的

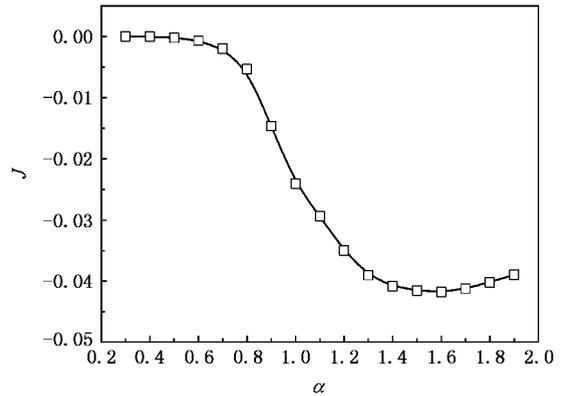


图 5 闪烁布朗马达定向流 J 随反常指数 α 的变化规律 $L = 3.0, U_0 = 3.0, k_B T = 0.05$

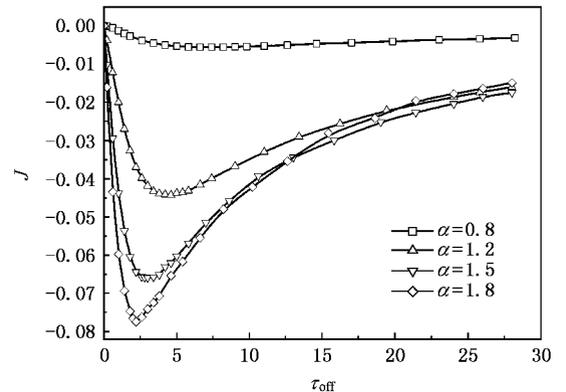


图 6 不同 α 对应的定向流 J 随势脱离时间 τ_{off} 的变化规律 $L = 3.0, U_0 = 3.0, k_B T = 0.05$

非单调函数. 当 τ_{off} 很小时, 粒子几乎无法扩散离开所在的势阱底部, 就在重新建立的势场作用下, 回到原来位置, 因此定向流很小; 当 τ_{off} 较长时, 布朗粒子通过前和后势垒的概率几乎相等, 定向净流也很小, 所以存在最佳的 τ_{off} 使 J 出现极值. 而且, 我们还发现不同的 α , J 极值对应的 τ_{off} 也不同, α 越小, 对应的 τ_{off} 的越大. 这也比较容易理解, α 越小, 粒子扩散越慢, 其需要更长的扩散时间来离开所在的势阱位置.

3.2. 摇摆棘轮整流反常扩散

假设布朗粒子在摇摆棘轮势场 $U(x, t) = U_s(x) + \epsilon(t)x$ 中作随机运动, 其中棘轮势 $U_s(x)$ 仍为方程 (6) 的形式, $\epsilon(t)$ 为一个时间平均为零的周期方波驱动力, 即

$$\epsilon(t) = \begin{cases} A, & n\tau_\epsilon \leq t \leq (n + \frac{1}{2})\tau_\epsilon, \\ -A, & (n + \frac{1}{2})\tau_\epsilon \leq t \leq (n + 1)\tau_\epsilon. \end{cases} \quad (7)$$

现在简单分析摇摆棘轮整流反常扩散的机理. 如图 7 所示, 当棘轮势向左倾斜 (图 7 中第 2 部分所示), 使得原来 L 处势阱的势高于原来 aL 处势垒的势, 势向左单调递减, 此时粒子可以毫无阻碍地沿 x 轴负向运动. 当棘轮势向右倾斜 (图 7 中第 3 部分所示) 此时存在一系列的势阱 (图 7 中以箭头表示) 可以阻碍粒子沿 x 轴正向运动. 一个外加的时间上均

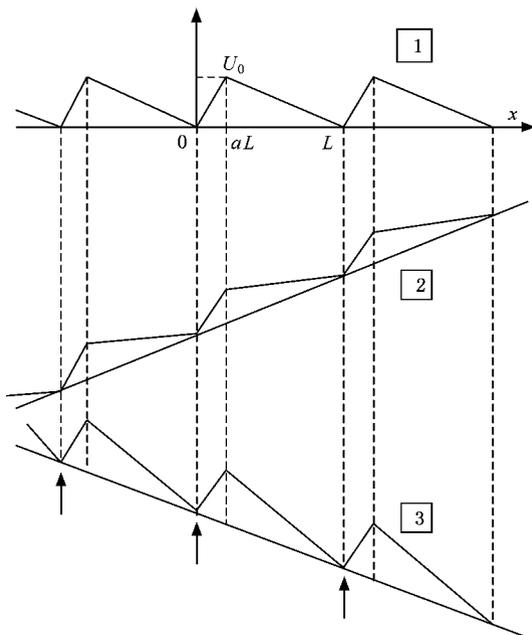


图 7 摇摆棘轮示意图

值为零的方波形驱动力 A 可以使棘轮在 $\pm Ax$ 之间摇摆, 由于粒子负向运动的平均速度大于正向, 从而产生沿 x 轴负向的定向流. 超扩散将加强这种粒子在两个方向迁移的非对称性.

图 8 显示了方波驱动力周期取 $\tau_\epsilon = 12.0$ 时定向流 J 随反常指数 α 的变化规律. 结果发现 J 的绝对值随着 α 的增大而增大, 最大值出现在 $\alpha = 2.0$. 为了解释这一现象, 我们研究了绝热近似条件下, 亦即方波驱动力周期取 $\tau_\epsilon \rightarrow \infty$, 棘轮势摇摆非常缓慢时, 棘轮势向左倾斜时负向流 J_- 、棘轮势向右倾斜时正向流 J_+ 以及粒子平均流 $(J_- + J_+)/2$ 随 α 的变化规律 (如图 8 插图所示). 可见随着 α 的增大, 粒子正向流和负向流同时增大, 但是负向流的绝对值和增大快于正向流, 因此粒子定向流沿 x 轴负向并随 α 增大而增大. 同时还发现, 当 $\alpha < 1$ 时, 定向流迅速减小, 直至趋近于 0. 这是因为对欠扩散而言, 扩散速度实在太慢, 以至于粒子在棘轮势向左倾斜的半个周期中, 不能向左翻越至少一个势垒, 就在接下来的棘轮势向右倾斜的半个周期中, 被束缚在各个势阱的位置, 如此循环往复, 从而不能形成定向流.

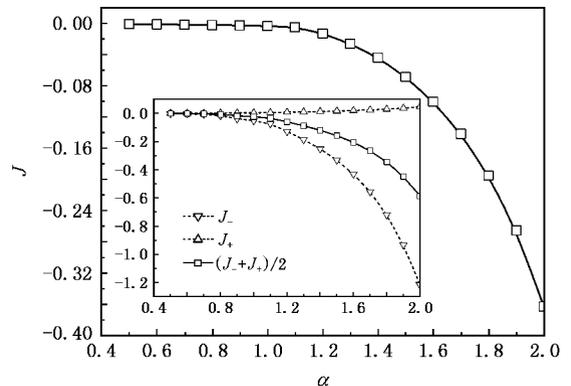


图 8 摇摆布朗马达定向流 J 随反常指数 α 的变化规律 $L = 4.0, U_0 = 2.0, k_B T = 0.2$

在图 9 中, 计算了 $\alpha = 1.2, 1.5, 1.8$ 时, J 随方波驱动力周期 τ_ϵ 的变化规律. 结果显示 J 的大小随 τ_ϵ 的增大而增大, 最后趋近于各自的绝热近似极限. 可以这样来理解这一现象, 当 τ_ϵ 较小时, 由于长程跳跃粒子的扩散速度远大于短程跳跃粒子, 此时只有长程跳跃的粒子能在棘轮势向左倾斜的有限时间内向左翻越较多的势垒, 而短程跳跃的粒子翻越的势垒数目远小于长程跳跃粒子, 因此它们对流的贡献有限, 此时流较小. 随着 τ_ϵ 的逐渐增大, 每个周期中棘轮势向左倾斜的时间也增长, 使得越来越多的

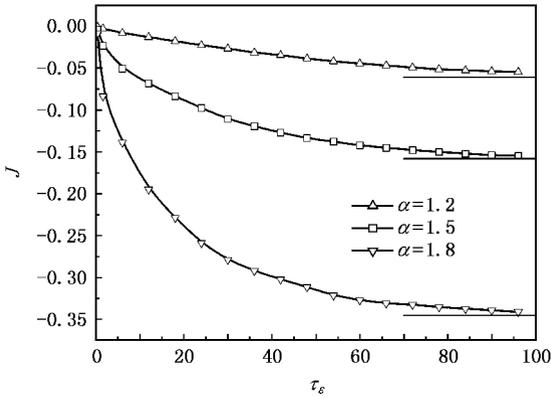


图9 不同 α 对应的定向流 J 随方波驱动力周期 τ_ϵ 的变化规律

$$L = 4.0, U_0 = 2.0, k_B T = 0.2$$

短程跳跃粒子有足够的时间向左跨越尽可能多的势垒,流随之增大,最后当 τ_ϵ 很大,棘轮势的摆动非常缓慢,接近于绝热近似条件,定向流亦趋近于各自的绝热近似值。

4. 小 结

本文运用连续时间无规行走模型,研究了粒子在长时间后的扩散行为,包括任意功率指数的欠扩散和超扩散.解决了数值实现连续时间无规行走的两个关键问题:(1)用 Pareto 分布密度函数来近似代替 Mittag-Leffler 分布密度函数,以完成在欠扩散情况下长等待时间分布的抽样;(2)对 Lévy 分布实施有限宽度的修正,以实现超扩散情况下的跳跃步长分布的抽样.我们的蒙特卡罗模拟结果与理论解符合得很好.然后,对周期势场中的 Metropolis 抽样方法的进行了改进,探讨了闪烁布朗马达和摇摆布朗马达在存在反常扩散时的定向输运,获得了有意义的结果.闪烁布朗马达稳定流的极大值出现在超扩散情况下,摇摆布朗马达稳定流的最大值出现在弹道扩散情况下。

- [1] Einstein A 1905 *Ann. Phys.* (Leipzig) **17** 549
- [2] Kramers H A 1940 *Physica* **7** 284
- [3] Chandrasekhar S 1943 *Rev. Mod. Phys.* **15** 1
Wang M C, Uhlenbeck G E 1945 *Rev. Mod. Phys.* **17** 323
- [4] Risken H 1984 *The Fokker-Planck Equation* (Berlin Heidelberg: Springer-Verlag) p1—12
- [5] Metzler R, Klafter J 2000 *Phys. Rep.* **339** 1
- [6] Metzler R, Klafter J 2004 *J. Phys. A* **37** R161
- [7] Bao J D, Zhuo Y Z 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 138104
- [8] Bao J D 2005 *Progress in Phys.* **25** 359 (in Chinese) [包景东 2005 物理学进展 **25** 359]
- [9] Kun L, Bao J D 2005 *Phys. Rev. E* **72** 067701
- [10] Stachel J, trans. by Fan D N *The Collected Papers of Albert Einstein* (Volume 2) (Changsha: Hunan Science and Technology Press) p181—206 (in Chinese) [范岱年[译]爱因斯坦全集(第二卷)(长沙:湖南科学技术出版社)第181—206页]
- [11] Skolov I M, Klafter J 2005 *Chaos* **15** 26103
- [12] Montroll E W, Weiss G H 1965 *J. Math. Phys.* **6** 167
- [13] Heinsalu E, Patriarca M, Goychuk I, Hänggi P 2007 *J. Phys.* **19** 65114
- [14] Metzler R, Klafter J 1998 *Phys. Rev. E* **58** 1621
- [15] Goychuk I, Heinsalu E, Patriarca M, Schmid G, Hänggi P 2006 *Phys. Rev. E* **73** 2010(R)
- [16] Heinsalu E, Patriarca M, Goychuk I, Schmid G, Hänggi P 2006 *Phys. Rev. E* **73** 46133
- [17] Chechkin A V, Gonchar V Y 2000 *Physica A* **277** 312
- [18] Jespersen S, Metzler R, Fogedby H C 1999 *Phys. Rev. E* **59** 2736
- [19] Bao J D, Zhuo Y Z 1998 *Phys. Lett. A* **239** 228

Approach of continuous time random walk model to anomalous diffusion^{*}

Lin Fang Bao Jing-Dong[†]

(*Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*)

(Received 24 March 2007; revised manuscript received 21 May 2007)

Abstract

A numerical method based on the continuous time random walk (CTRW) theory is developed to study the normal diffusion and anomalous diffusion including both sub-diffusion and super-diffusion. The probability density functions for both the jump distance and the residence time in the CTRW model are determined as well as the Metropolis sampling method in the periodic potential has been improved. The directional transport of a Brownian motor in both a flashing ratchet potential and a rocking ratchet potential is investigated. Our results have shown that the maximum of directional current occurs in the case of super-diffusion in a flashing ratchet and in the case of ballistic diffusion in a rocking ratchet.

Keywords : continuous time random walk (CTRW), anomalous diffusion, Metropolis sampling method, ratchet potential

PACC : 0540, 8220F, 8715

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10674016) and the Doctor Education Fund of Ministry of Education of China (Grant No. 20050027001).

[†] Corresponding author. E-mail : jlbao@bnu.edu.cn