

用一种分数阶算法研究非马尔可夫过程中 阻尼与涨落的竞争机制

林方[†] 胡丹青 李乐乐

(四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

(2013年1月6日收到; 2013年2月27日收到修改稿)

基于分数阶朗之万方程和随机行走理论, 建立了一种用于研究非马尔可夫系统中随机变量随时间演化的数值模拟算法, 称之为分数阶随机行走模拟法. 进一步运用此算法分别数值研究了无阻尼有涨落、有阻尼无涨落和阻尼与涨落兼备三种情况下, 受欠扩散分数阶朗之万方程约束的随机变量随时间的演化行为. 结果显示阻尼和涨落存在竞争关系: 高斯型涨落的影响会随着时间的增长被“抹平”, 从而凸显阻尼使系统趋于平衡的作用; 而长尾型涨落则由于包含“小概率大贡献”事件, 使得长时间演化之后系统变量仍以一定概率出现突然变化.

关键词: 非马尔可夫, 欠扩散, 阻尼与涨落, 分数阶朗之万方程

PACS: 05.30.Pr, 05.40.Fb, 05.10.Gg

DOI: 10.7498/aps.62.120503

1 引言

近年来, 对复杂系统结构及其动力学性质的研究逐渐成为一个被广泛关注的热点问题^[1,2]. 大量实际系统都可以看做复杂系统, 如液晶、聚合物、蛋白质、生物有机体甚至生态系统等. 随着实验技术的发展和仪器分辨率的提高, 人们发现这类系统随时间的演化规律与标准的布朗运动不同, 表现出反常扩散行为, 例如非晶半导体中的载流子输运、多孔系统、微分几何图形上的输运、聚合物系统的激发或表面塌滑动力学等表现出欠扩散系统的特征; 而漩涡、胶粒系统和各向异性岩石中的输运、固体表面的集体滑动扩散、单分子分光计、湍流等离子体中的输运、细菌的运动等则表现出超扩散系统的特征.

所谓反常扩散^[3,4], 是指自由系统偏离正常布朗运动的扩散行为, 表现为粒子的方均位移满足

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle \sim K_\alpha t^\alpha \quad (\alpha \neq 1), \quad (1)$$

其中 K_α 称为广义扩散系数, α 称为功率指数或者反常指数: $0 < \alpha < 1$ 称为欠扩散 (sub-diffusion);

$1 < \alpha < 2$ 称为超扩散 (super-diffusion); $\alpha = 0$ 称为局域化 (localization), $\alpha = 2$ 则称为弹道扩散 (ballistic diffusion), 它们被认为是扩散的两个极限^[2,5]. 还有一类方均位移不能直接定义的扩散, 例如 Lévy 飞行^[6,7], 其方均位移是发散的, 一般也归类为超扩散.

目前, 人们对欠扩散系统的特性做了较为深入的研究, 发现与正常扩散系统不同, 欠扩散系统表现出对历史的长程记忆效应, 是一种典型的非马尔可夫系统^[8]. 广义朗之万方程 (GLE)^[2] 能够将系统对历史的记忆与噪声谱函数的特殊形式统一起来, 提供了反常扩散研究的动力学理论, 能够刻画系统的涨落、耗散以及弛豫等特征. 目前已发展了一些直接数值求解随机微分方程的算法, 包括带任意关联色噪声驱动的 GLE 的模拟算法^[9,10]; 然而其不足之处在于非欧姆谱噪声的关联函数形式复杂且计算量大, 甚至在很多情况下不能写出关联函数的解析表达式.

随着研究的深入, 人们发现分数阶代数^[1] 能够为研究此类问题提供较为便利的手段. 以一维自由粒子欠扩散为例, 粒子坐标的演化可以用分数阶朗

[†] 通讯作者. E-mail: linfang@scu.edu.cn

之万方程 (FLE)^[2,11]

$$\begin{cases} m\dot{q}(t) = p(t), \\ \frac{d^\alpha}{dt^\alpha} p(t) - p_0 \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} = -\lambda^\alpha p(t) + \xi(t) \end{cases} \quad (2)$$

描述, 其中功率指数 α 的取值范围为 $(0, 1)$, p_0 为动量初值, λ 为阻尼系数, $\xi(t)$ 则表征随机涨落. d^α/dt^α 是 α 阶导数算符, 通常用 Riemann-Liouville 积分形式将其定义为^[1]

$$\begin{aligned} \frac{d^\alpha}{dt^\alpha} p(t) &\doteq {}_0D_t^\alpha [p(t)] \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dt} \int_0^t dt' \frac{p(t')}{(t-t')^\alpha}, \end{aligned} \quad (3)$$

同时还可以定义 $-\alpha$ 阶导数算符

$$\begin{aligned} \frac{d^{-\alpha}}{dt^{-\alpha}} p(t) &\doteq {}_0D_t^{-\alpha} [p(t)] \\ &= \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t dt' \frac{p(t')}{(t-t')^{1-\alpha}}, \end{aligned} \quad (4)$$

两者满足

$$\frac{d^\alpha}{dt^\alpha} \cdot \frac{d^{-\alpha}}{dt^{-\alpha}} = 1. \quad (5)$$

从上述定义式可以看出, 当 $\alpha = 1$ 时方程 (2) 退化为描述正常扩散的标准朗之万方程. 由此可见, 正常扩散和欠扩散的重要区别在于系统演化对历史的记忆. 正常扩散系统的演化属于短时记忆 (即时间短程关联) 过程, 呈现马尔可夫特性; 而欠扩散系统的演化则属于长时记忆 (即时间长程关联) 过程, 其对历史的记忆可追溯到初始时刻, 呈现非马尔可夫特性.

随机行走 (RW) 是研究扩散与输运常用的一种模型, 其特点在于建立了一种基于观测过程而不是基于系统真实动力学行为的方法来研究扩散现象. 由于扩散粒子的运动轨迹具有处处连续但是处处不可导的特性, 所以粒子在两次观测之间的实际运动轨迹是不得而知的. 因此, 当 Einstein^[12] 和 Pearson^[13] 提出 RW 理论的时候, 干脆假设粒子在观测间隔停留在上一次观测位置不动, 等到再次观测时再从上一观测位置通过一“瞬时跳跃”到达当前位置, 这就是最初随机行走理论的主要思想. Montroll 和 Weiss^[14] 及 Scher 等^[15] 进一步地将原来固定的观测间隔引申为满足一定分布的“等待时间”, 发展出了连续时间随机行走 (CTRW) 理论.

CTRW 理论得到了广泛应用, 然而仅能模拟过阻尼系统是其固有的硬伤^[1,2]. “阻尼”在扩散与输运中扮演着重要的角色, 它决定了系统对历史记忆的长短及形式, 在欠扩散 (非马尔可夫) 体系中更是

如此; 然而 CTRW 模型中的“阻尼”只是跳跃步长或等待时间分布密度函数中的一个参数, 无论是模型或者算法均没有体现历史记忆效应, 因此在研究非马尔可夫过程的时候有其固有的局限性.

实际上, 随机行走理论作为一种非动力学模型, 其中包含的“跳跃”并不仅仅局限于“坐标变动”. 在随机行走理论的基础上, 引入分数阶代数, 使之适用于时间长程关联系统, 从而能够体现阻尼对系统演化的影响, 是研究非马尔可夫过程的一种思路^[8]. 本文借用随机行走理论的重要思想——离散化和随机跳跃, 建立一种用于模拟分数阶朗之万方程的递推算法, 称之为分数阶随机行走模拟法 (FRA).

2 分数阶随机行走模拟法

随机行走模型图像清楚、算法简单, 可以把复杂的扩散过程简化为“等待”和“跳跃”, 其中包含的重要思想便是将连续的粒子运动离散化. 本小节将借用这一思想, 建立便于计算机模拟的分数阶朗之万方程 (2) 的离散化的递推算法.

首先定义“迁移算符” B , 令

$$Bp(t) = p(t - \Delta t), \quad (6)$$

根据正常扩散的随机行走模型: $p(t) = p(t - \Delta t) + \xi(t)$, $\xi(t)$ 即“随机跳跃”. 代入上式可得

$$\xi(t) = (1 - B)p(t). \quad (7)$$

下面分两步建立分数阶随机行走递推算法. 第一步, 令 $p(t)$ 初值为 0, 并且不考虑方程的阻尼项, 即假设系统演化只受随机涨落影响, 此时随机涨落的作用等同于“随机跳跃”, 结合 (7) 式可得

$$\frac{d}{dt} p(t) = \xi(t) = (1 - B)p(t), \quad (8)$$

将其扩展应用于分数阶扩散, 则有^[16]

$$\frac{d^\alpha}{dt^\alpha} p(t) = \xi(t) = (1 - B)^\alpha p(t). \quad (9)$$

可见 $\frac{d^\alpha}{dt^\alpha} = (1 - B)^\alpha$; 再由 (5) 式, 容易得到 $\frac{d^{-\alpha}}{dt^{-\alpha}} = (1 - B)^{-\alpha}$. 于是, 将 $\frac{d^{-\alpha}}{dt^{-\alpha}}$ 作用于 (9) 式各项, 可得

$$p(t) = \frac{d^{-\alpha}}{dt^{-\alpha}} \xi(t) = (1 - B)^{-\alpha} \xi(t). \quad (10)$$

参考 West^[17] 和 Hosking^[18] 的研究工作, 可对算符 $(1 - B)^{-\alpha}$ 进行二项式展开, 得到

$$(1 - B)^{-\alpha} = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{-\alpha}{k} (-1)^k B^k, \quad (11)$$

代回 (10) 式; 同时将 $p(t)$ 离散化, 即将时间间隔 $(0, t)$ 分为 n 等分, 每等分 $\Delta t = t/n$, 则第 j 个时间检测点数值 p_j 即表示 $j\Delta t$ 时刻的数值 $p(j\Delta t)$; $\xi(t)$ 同理. 于是得到

$$p_{j+1} = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{-\alpha}{k} (-1)^k B^k \xi_j$$

$$= \sum_{k=0}^j \binom{-\alpha}{k} (-1)^k \xi_{j-k}, \quad (12)$$

注意上式第二个等号后面的求和上限由 ∞ 变为 j , 这是由于取定零时刻之后, 将“零时刻以前”的随机涨落全部取做 0. 引入 Γ 函数, 可将展开系数写成^[17]

$$\binom{-\alpha}{k} = (-1)^k \frac{\Gamma(k + \alpha + 1/2)}{\Gamma(k + 1)\Gamma(\alpha + 1/2)}, \quad (13)$$

最后可得 p_j 的递推式

$$p_{j+1} = \sum_{k=0}^j \frac{\Gamma(k + \alpha + 1/2)}{\Gamma(k + 1)\Gamma(\alpha + 1/2)} \xi_{j-k}. \quad (14)$$

于是, 得到了“零阻尼零初值”条件下的 FLE 和离散化递推公式之间的对应关系, 即

$$p(t) = \frac{d^{-\alpha}}{dt^{-\alpha}} \xi(t) \Leftrightarrow$$

$$p_{j+1} = \sum_{k=0}^j \frac{\Gamma(k + \alpha + 1/2)}{\Gamma(k + 1)\Gamma(\alpha + 1/2)} \xi_{j-k}. \quad (15)$$

第二步, 假设 $p(t)$ 的初始值非零, 记作 p_0 , 并且考虑阻尼项, 如方程 (2) 所示. 将方程两边分别用分数阶导数算符 $\frac{d^{-\alpha}}{dt^{-\alpha}}$ 作用, 并考虑到分数阶导数公式^[1]

$$\frac{d^\alpha}{dt^\alpha} 1 = \frac{x^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} \quad \text{或} \quad \frac{d^{-\alpha}}{dt^{-\alpha}} \frac{x^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} = 1, \quad (16)$$

可以得到

$$p(t) - p_0 = \frac{d^{-\alpha}}{dt^{-\alpha}} (-\lambda^\alpha p(t) + \xi(t)). \quad (17)$$

由对应关系 (15) 式, 最后可得一维欠扩散系统粒子动量的离散化递推式

$$p_{j+1} = p_0 + \sum_{k=0}^j \frac{\Gamma(k + \alpha + 1/2)}{\Gamma(k + 1)\Gamma(\alpha + 1/2)}$$

$$\times (-\lambda^\alpha p_{j-k} + \xi_{j-k}). \quad (18)$$

从递推式中可见, 动量的第 $j+1$ 个时间检测点数值是由从零时刻开始的 j 个检测点数值和 j 个随机跳跃共同决定的, 实际上可将各时间检测点的动量变化看成其在阻尼和涨落的共同作用下做“有记忆

的行走”, 体现了对历史的长程记忆, 符合非马尔可夫系统的演化特性.

3 数值模拟与分析

前文通过分析推导得到 FLE((2) 式) 的 FRA 递推公式. 从此递推公式可以看出, 只要确定了 α, λ 等主要参数、涨落 ξ 的分布函数以及变量 p 的初值 p_0 , 就可以通过递推式 (18) 式得到第 1 个时间检测点数值 p_1 ; 将 p_1 和 p_0 代回递推式 (18) 式则可以得到第 2 个时间检测点数值 p_2, \dots , 如此循环, 即可得到从零时刻到当前时刻受 FLE((2) 式) 约束的单个变量 $p(t)$ 在各时间检测点的数值序列 $\{p_j\}$. 重复以上循环 N 次, 即可得到 N 个“粒子”组成的系综的统计行为.

本节将依据以上算法流程, 分三种情况对可用 FLE 描述的非马尔可夫过程中阻尼与涨落的作用以及彼此之间的竞争关系进行数值模拟与分析.

3.1 无阻尼有涨落的情况

首先考虑相对简单的无阻尼情况, 即 $\lambda = 0$, 此时系统中单粒子的 FLE 写成

$$\frac{d^\alpha}{dt^\alpha} p(t) - p_0 \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} = \xi(t), \quad (19)$$

两边分别用 $-\alpha$ 阶导数算符 $\frac{d^{-\alpha}}{dt^{-\alpha}}$ 作用, 可得

$$p(t) - p_0 = \frac{d^{-\alpha}}{dt^{-\alpha}} \xi(t), \quad (20)$$

由 2.2 节的分析可得, 此时 $p(t)$ 的第 j 个时间检测点数据 p_j 服从递推公式

$$p_{j+1} = p_0 + \sum_{k=0}^j \frac{\Gamma(k + \alpha + 1/2)}{\Gamma(k + 1)\Gamma(\alpha + 1/2)} \xi_{j-k}, \quad (21)$$

同时, 依据现有的研究结论^[1], $p(t)$ 的二次矩 $\sigma_p^2 = \langle (p(t) - p_0)^2 \rangle$ 满足

$$\sigma_p^2 = \frac{4D}{(2\alpha - 1)\Gamma(\alpha)^2} t^{2\alpha-1} \Rightarrow$$

$$\lg \sigma_p^2 = (2\alpha - 1) \lg t + \frac{4D}{(2\alpha - 1)\Gamma(\alpha)^2}. \quad (22)$$

本小节通过数值模拟来验证 FRA 算法在无阻尼情况下的正确性, 如图 1 所示. 数值计算采用 1000 个实验“粒子”模拟 $p(t)$ 的系综行为; 初始值 $p_0 = 1$; 由于仅研究系统的稳态行为(下同), 去掉起始的 10 个数据点. 数据点理论上应能拟合为直线,

斜率为 $2\alpha - 1$. 图中直线拟合斜率分别为 $-0.42, 0, 0.41, 0.82$, 与理论值 $-0.4, 0, 0.4, 0.8$ 符合良好.

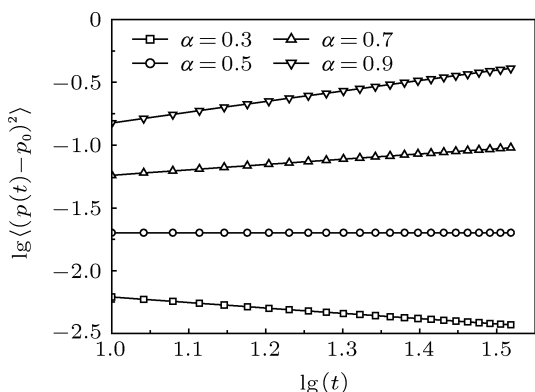


图1 无阻尼有涨落情况下, 功率指数 α 分别取 0.3, 0.5, 0.7 和 0.9 时, 二次矩 $\langle (p(t) - p_0)^2 \rangle$ 的对数随时间 t (离散化的时间检测点) 的对数变化

值得注意的是, 该算法并没有引入“等待时间”, 而且每次“跳跃”的变量是动量而非坐标, 因此, FRA 是基于随机行走思想的创新, 已不同于通常意义上的 CTRW 模型, 所模拟的过程可以看作对真实物理过程的再现. 同时, 欠扩散的实现完全依靠算法本身包含的“对历史的长程记忆”因素, 而非人为引入的“等待时间”, 这亦是 FRA 与 CTRW 模型很大的不同之处.

3.2 有阻尼无涨落的情况

其次考虑无涨落情况, 此时系统类似于初始时刻被拉离平衡位置的经典阻尼振子, 区别在于经典阻尼振子是马尔可夫短时关联系统, 而非本文所关注的长时关联系统. 系统的 FLE 写成

$$\frac{d^\alpha}{dt^\alpha} p(t) - p_0 \frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} = -\lambda^\alpha p(t), \quad (23)$$

两边分别用 $-\alpha$ 阶导数算符 $\frac{d^{-\alpha}}{dt^{-\alpha}}$ 作用, 可得

$$p(t) - p(0) = -\lambda^\alpha \frac{d^{-\alpha}}{dt^{-\alpha}} p(t), \quad (24)$$

由 2.2 节的分析可得, 此时 $p(t)$ 的第 j 个时间检测点数据 p_j 服从递推公式

$$p_{j+1} = p_0 - \lambda^\alpha \sum_{k=0}^j \frac{\Gamma(k+\alpha+1/2)}{\Gamma(k+1)\Gamma(\alpha+1/2)} p_{j-k}, \quad (25)$$

数值模拟结果如图 2 和图 3 所示. 计算采用 1000 个实验“粒子”模拟 $p(t)$ 的系综行为; 初始值 $p_0 = 1$; 阻尼系数 $\lambda = 0.1$; 去掉起始的 5 个数据点.

从图 2(a) 中可以看出, α 取不同值的时候, 曲线表现出来的相同特征是 $\langle p(t) \rangle$ 随着时间增长趋

于 0. 这是容易理解的: 从动力学的角度看, $p(t)$ 是“振子”的动量, 当只存在阻尼不存在涨落的情况下, “振子”的动量最后必将趋于 0, 并静止于平衡位置. 这点在图 2(b) 中也有一致的表现, 随着 $p(t)$ 的平均值趋于 0, 其二次矩 $\langle (p(t) - p_0)^2 \rangle$ 趋于 1. 图中各曲线表现出来的不同之处在于, 随着 α 的增大, $\langle p(t) \rangle$ 趋于 0 的弛豫时间变长, $\alpha = 0.5$ 是一个“分水岭”: $\alpha < 0.5$, $\langle p(t) \rangle$ 恒正, 并且随着 α 的增大, 趋于 0 的速度加快; $\alpha > 0.5$, $\langle p(t) \rangle$ 跨过零值, 呈现出振荡的特征, 并且 α 越大, $\langle p(t) \rangle$ 趋于 0 的速度越慢, 所达到的负值极值点的绝对值也越大, 振荡的特性越强. 这表明随着 α 的增大, 系统逐渐接近正常扩散, 扩散性加强, 阻尼的作用趋弱, 以往的研究 [19,20] 中也有相似的结论.

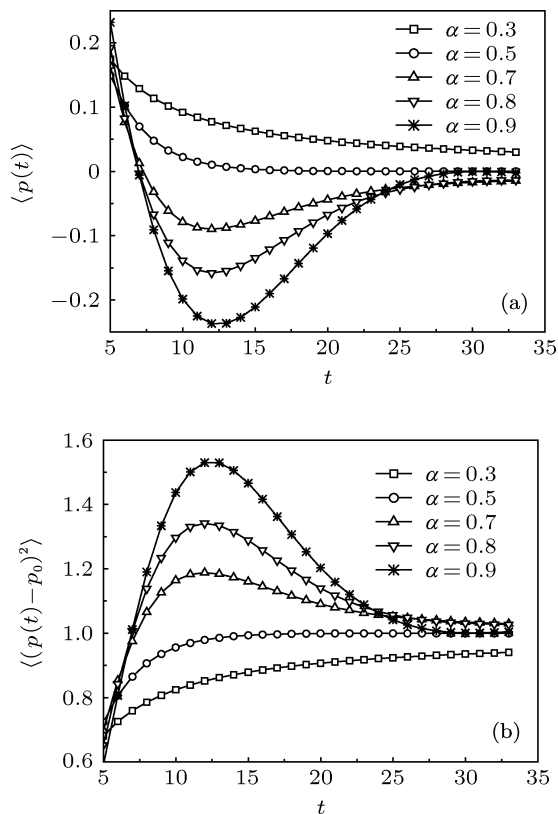


图2 有阻尼无涨落情况下, 功率指数 α 分别取 0.3, 0.5, 0.7, 0.8 和 0.9 时, (a) 平均值 $\langle p(t) \rangle$ 随时间 t 的变化, (b) 二次矩 $\langle (p(t) - p_0)^2 \rangle$ 随时间 t 的变化

图 3 展示了 α 取定值 0.7, 阻尼系数 λ 取不同值时, $\langle p(t) \rangle$ 表现出来的不同行为. 可见随着阻尼系数的增大, 系统的弛豫时间缩短, 振荡的特征减弱, $\langle p(t) \rangle$ 更快地趋于 0; 也就是说, 初始被拉离平衡位置的“振子”更快地静止于平衡位置. 欠扩散系统和正常扩散系统都是空间短程关联系统, 阻尼对二者

的“阻滞”作用是类似的,表现出相似的特征 [19,20].

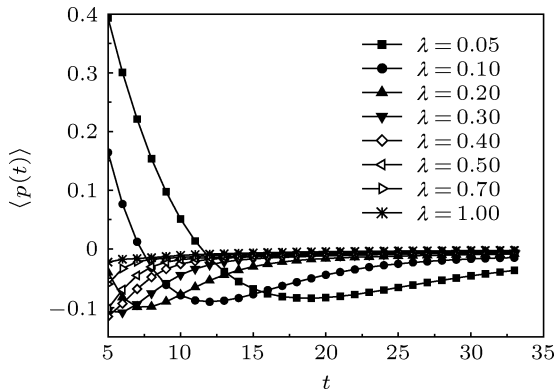


图3 有阻尼无涨落情况下,功率指数 $\alpha = 0.7$, 阻尼系数 λ 取不同值时,平均值 $\langle p(t) \rangle$ 随时间 t 的变化

3.3 阻尼和涨落兼备的情况

最后,考虑一般的情况,此时阻尼与涨落兼备.系统的FLE如方程(2)所示, $p(t)$ 的离散化递推公式则如(18)式所示.数值模拟结果如图4、图5和图6所示.

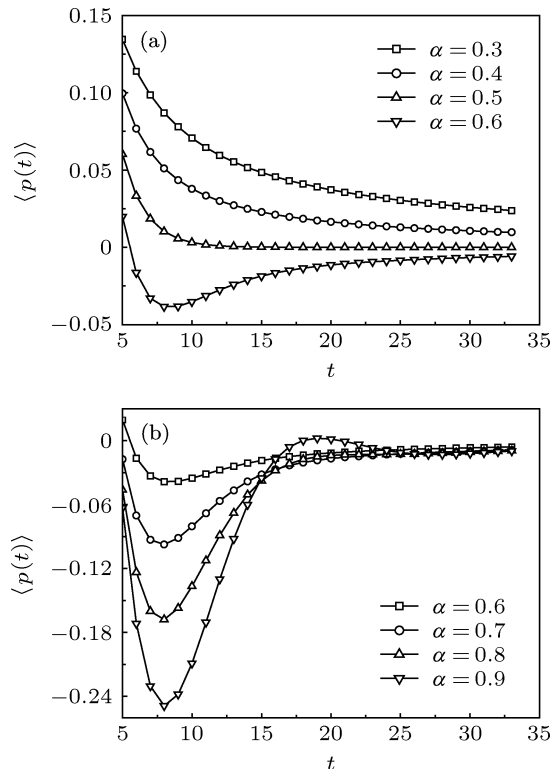


图4 阻尼和涨落兼备的情况下,平均值 $\langle p(t) \rangle$ 随时间 t 的变化

图4展示了取定阻尼系数,并且采用同一组标准高斯型随机涨落样本 $\{\xi_j\}$ 的条件下, α 取不同值时系统 $\langle p(t) \rangle$ 随着时间的演化曲线. 计算采

用1000个实验“粒子”模拟 $p(t)$ 的系综行为; 初始值 $p_0 = 1$; 阻尼系数 $\lambda = 0.2$; 去掉起始的5个数据点. 随机涨落样本 $\{\xi_j\}$ 从标准高斯分布中抽样得到. 为了方便比较, α 不同取值的模拟采用同一组样本; 基于同样的原因, $\alpha = 0.6$ 的曲线同时出现在图4(a), (b)中. 可以看出, 这些曲线和图2和图3所展示的无阻尼情况下 $\langle p(t) \rangle$ 随着时间的演化曲线十分相似, 也就是说, 涨落的影响并不明显. 为了验证这一结论, 图5展示了其他条件相同, α 分别取值0.4和0.8时, 存在与不存在涨落两种情况下, $\langle p(t) \rangle$ 随时间的演化曲线. 计算采用1000个实验“粒子”模拟 $p(t)$ 的系综行为; 初始值 $p_0 = 1$, 阻尼系数 $\lambda = 0.2$; 去掉起始的5个数据点. 随机涨落样本 $\{\xi_j\}$ 从标准高斯分布中抽样得到. 从图5中可以看出, 两者的差别的确很小, 特别是到末段几乎完全重合. 作者认为这一结果出现的原因有两点: 1) 标准高斯型随机涨落均值为0, 方差为1(有限值, 即不存在“长拖尾”、大涨落), 分布密度函数关于 y 轴对称(即取“正”和“负”的概率相等); 2) 所研究的对象是时间长程关联系统, 从零时刻开始的历史对当前时刻的系统状态都有影响. 综合以上两点, 涨落的作用随着时间的增长被“抹平”, 阻尼起主要甚至决定性的作用.

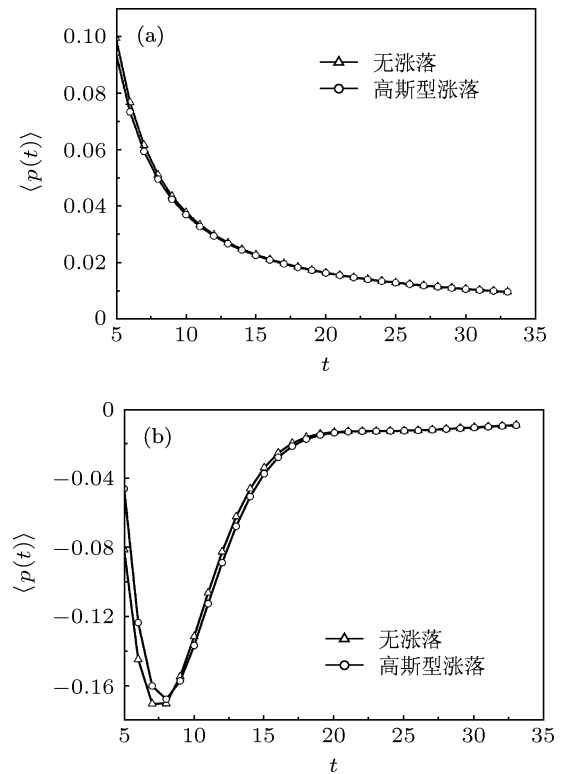


图5 在阻尼相同的情况下,随机涨落存在与否的情况比较 (a) $\alpha = 0.4$; (b) $\alpha = 0.8$

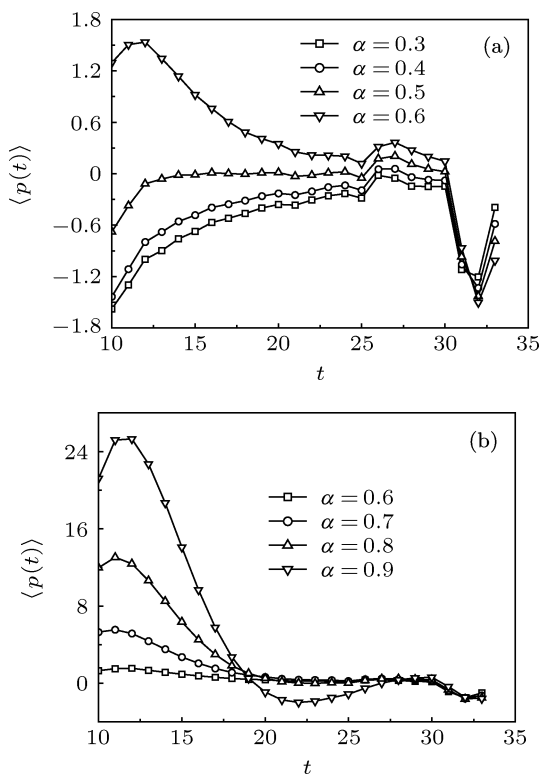


图6 本图用于与图4和图5比较分析, 详见正文

为了验证上述结论并进一步研究阻尼和涨落的竞争机制, 作者对 Mittag-Leffler 分布^[1] 稍做修改并归一化, 以此作为新的随机涨落的分布密度函数, 即

$$f(\xi) = \begin{cases} -\frac{1}{2} \frac{d}{d\xi} E_{\alpha}(-(\lambda\xi)^{\alpha}) & \xi \geq 0, \\ \frac{1}{2} \frac{d}{d\xi} E_{\alpha}(-(-\lambda\xi)^{\alpha}) & \xi < 0, \end{cases} \quad (26)$$

其中 $E_{\alpha}(-(\lambda\xi)^{\alpha})$ 称为 Mittag-Leffler 函数^[1]. 如此所得到的分布也满足均值为 0, 且关于 y 轴对称; 但是与高斯分布不同, 其方差发散, 存在“长拖尾”、大涨落, 这就使得“小概率大贡献”事件^[21] 的发生成为可能. 而一旦“小概率大贡献”事件发生, 就会使随机变量的演化曲线发生较大的突变, 正如图 6 所示. 该图模拟采用的参数与图 4 相同; 不同之处在于随机涨落样本 $\{\xi_j\}$ 从分布函数 (26) 中抽样得到. 为了方便比较, α 不同取值的模拟采用同一组样本; 为了突出 $p(t)$ 长时间后的涨落情况, 去掉起始的 10 个数据点.

图 6 展示了取定阻尼系数, 并且采用从分布密度函数 (26) 中抽样^[22] 得到的同一组随机涨落样本的条件下, α 取不同值时系统 $\langle p(t) \rangle$ 随着时间的演化曲线, 从中可以看出阻尼和涨落的竞争. 一方面, 阻尼决定了 $\langle p(t) \rangle$ 演化的整体趋势, 即随时间增长趋于 0; 另一方面, 涨落增加了曲线的细节, 从图中

可以看出, 曲线在第 26 和 31 个时间检测点处发生了较大的突变, 其中以第 31 个时间检测点处的突变尤为明显. 可以推断, 这两个时间检测点的随机涨落样本处于分布函数的“长拖尾”处, 属于“小概率大贡献”事件, 一旦出现, 对 $\langle p(t) \rangle$ 的影响极大; 然而, 由于出现的概率很小, 随着时间的流逝, 系统对历史的长程记忆效应会将这样的突变“抹平”, $\langle p(t) \rangle$ 的取值再次趋于 0, 直到下一个“小概率大贡献”事件发生. 可以预见, 最后 $\langle p(t) \rangle$ 的演化曲线将呈现在零附近间或出现大幅涨落的形式.

4 总结与展望

本文建立了可用于研究非马尔可夫系统演化的数值算法——分数阶随机行走模拟法, 并用此方法模拟了具备非马尔可夫特性的欠扩散系统的行为, 其中随机变量的演化可由分数阶朗之万方程来描述. 对比常见的欠扩散系统的模拟方法 (如 GLE 和 CTRW), FRA 以 FLE 为理论依据, 其优点主要体现在: 与非欧姆普噪声驱动的 GLE 相比, FRA 同样体现了系统演化对历史的记忆, 同时大大简化了编程难度并缩短了计算时间; 与 CTRW 模型相比, FRA 中阻尼不再仅仅是等待时间或跳跃步长分布函数中的一个参数, 从而能够很好地刻画历史的作用, 同时保留了随机行走模型简单便于编程的优点. 本文还将数值模拟结果与现有文献结论进行了比较, 从数值角度验证了 FRA 的有效性.

进一步地, 本文运用 FRA 研究了阻尼和涨落两大因素对系统的作用以及彼此之间的竞争, 得到以下结论: 1) 阻尼使系统趋于平衡, 而涨落则使系统偏离这种平衡, 两者存在竞争; 2) 对时间长程关联系统, 高斯型涨落的作用将随时间增长被“抹平”, 从而使阻尼的作用凸显; 3) 长尾分布导致的“小概率大贡献”事件起到关键作用, 使得非高斯型涨落在长时间之后仍对系统演化起作用, 避免被历史记忆“抹平”. 其中 2) 和 3) 在以往文献中鲜有提及.

作者认为下一步的研究工作可朝两个方向展开: 1) 与科研前沿问题相结合, 物理、金融、生物、化学等领域都有扩散与输运问题, 本文建立的模型算法简单, 能够用于模拟非马尔可夫系统, 应用前景广阔; 2) 本文仅建立了欠扩散 (时间长程关联) 系统的一种数值模拟方法; 然而在许多领域中, 近年来吸引研究者关注^[23,24] 的超扩散 (空间长程关联) 问题扮演着重要的角色, 因此, 超扩散系统的模型算法也值得深入研究.

- [1] Metzler R, Klafter J 2000 *Phys. Rep.* **339** 1
 [2] Bao J D 2012 *Introduction of Anomalous Statistical Dynamics* (Science Press, Beijing) (in Chinese) [包景东 2012 反常统计动力学导论 (北京: 科学出版社)]
 [3] Richardson L F 1926 *Proc. Roy. Soc.* **110** 709
 [4] Bao J D 2005 *Prog. Phys.* **25** 359 (in Chinese) [包景东 2005 物理学进展 **25** 359]
 [5] Bao J D, Zhou Y Z 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 138104
 [6] Fogedby H C 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 2517
 [7] Chechkin A V, Gonchar V Yu 2000 *Physica A* **277** 312
 [8] Beran J 1994 *Statistics of Long-Memory Process* (New York: Chapman and Hall)
 [9] Lü K, Bao J D 2005 *Phys. Rev. E* **72** 067701
 [10] Bao J D, Zhou Y Z, Lü K 2006 *Phys. Rev. E* **74** 041125
 [11] Lutz E 2010 *Phys. Rev. E* **64** 051106
 [12] Einstein A 1905 *Ann. Phys. (Leipzig)* **17** 549
 [13] Pearson K 1905 *Nature* **72** 342
 [14] Montroll E W, Weiss G H 1965 *J. Math. Phys.* **6** 167
 [15] Scher H, Montroll E W 1975 *Phys. Rev. B* **12** 2455
 [16] Bouchaud J P, Georges A 1990 *Phys. Rep.* **195** 12
 [17] West B J 1999 *Physiology, Promiscuity and Prophecy at the Millennium: A Tale of Tails* (Singapore: World Scientific)
 [18] Hosking J T M 1981 *Biometrika* **68** 165
 [19] Burov S, Barkai E 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 070601
 [20] Burov S, Barkai E 2008 *Phys. Rev. E* **78** 031112
 [21] Lin F, Bao J D 2011 *Chin. Phys. B* **20** 040502
 [22] Heinsalu E, Patriarca M, Goychuk I, Hänggi P 2007 *J. Phys.: Condens. Matter* **19** 065114
 [23] Dybiec B 2009 *Phys. Rev. E* **80** 041111
 [24] Lü Y, Bao J D 2011 *Phys. Rev. E* **84** 051108

Application of a fractional algorithm to studying the competition between dissipation and fluctuation in non-Markov process

Lin Fang[†] Hu Dan-Qing Li Le-Le

(College of Physical Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

(Received 6 January 2013; revised manuscript received 27 February 2013)

Abstract

Based on fractional Langevin equation and random walk theory, a numerical algorithm that can be applied to non-Markov long-memory system is established in this paper. In addition, the evolution behaviour of random variable ruled by fractional sub-diffusion equation is numerically studied in three conditions: no dissipation, no fluctuation and both being present. The results show that competition exists between dissipation and fluctuation. As time goes by, the effect of Gaussian fluctuation weakens and damping plays a main role in the evolution of system; however, because of the existance of “rare-though-dominant” events, long-tail fluctuation makes the evolution of system abrupt change at a certain probability.

Keywords: non-Markov, sub-diffusion, dissipation and fluctuation, fractional Langevin equation

PACS: 05.30.Pr, 05.40.Fb, 05.10.Gg

DOI: 10.7498/aps.62.120503

[†] Corresponding author. E-mail: linfang@scu.edu.cn