

基于分数阶环境热浴的非各态历经判据研究

卢宏 吕艳 包景东

Studies of nonergodic criterion based on the fractional heat bath model

Lu Hong Lü Yan Bao Jing-Dong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 170502 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.170502

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.170502>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I17>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

水平温差对环形浅液池内 Marangoni-热毛细对流的影响

Effect of horizontal temperature difference on Marangoni-thermocapillary convection in a shallow annular pool

物理学报.2015, 64(14): 140202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.140202>

轴对称构件受力分析的插值粒子法

Interpolating particle method for mechanical analysis of space axisymmetric components

物理学报.2015, 64(10): 100204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.100204>

大气风场和温度对无线电声波探测系统探测高度影响的数值研究

A numerical study of effects on detection height of a radio acoustic sounding system influenced by atmospheric wind and temperature

物理学报.2015, 64(10): 100205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.100205>

镁基合金自由枝晶生长的相场模拟研究

Phase-field modeling of free dendritic growth of magnesium based alloy

物理学报.2015, 64(6): 060201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.060201>

黏弹性问题的改进的复变量无单元 Galerkin 方法

Improved complex variable element-free Galerkin method for viscoelasticity problems

物理学报.2014, 63(18): 180203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.180203>

基于分数阶环境热浴的非各态历经判据研究*

卢宏^{1)†} 吕艳²⁾ 包景东³⁾

1)(西华大学理学院物理系, 成都 610039)

2)(太原科技大学应用科学学院, 太原 030024)

3)(北京师范大学物理系, 北京 100875)

(2015年2月6日收到; 2015年5月2日收到修改稿)

本文从分数阶谱形式的气固耦合模型出发, 理论推导出具有幂律记忆核的广义朗之万方程. 研究气体分子在自由场和简谐势场中的动力学演化和长时渐进行为, 着重分析三种各态历经判据: Khinchin 判据、Lee 判据以及内在判据和外在表现的适用性. 研究结果表明: Khinchin 判据适用于广义朗之万方程描述的所有扩散和输运过程; Lee 判据并不适用于布朗运动, 只能用来区分不同类型的扩散过程; 而内在判据和外在表现不仅能够把非各态历经分为两类, 同时可以揭示非各态历经的物理内在根源.

关键词: 分数阶谱分布, 广义朗之万方程, 非各态历经

PACS: 05.20.Gg, 02.60.Cb, 05.40.Ca

DOI: 10.7498/aps.64.170502

1 引言

近年来, 无序系统中的随机现象引起人们的广泛关注和大量研究^[1-7]. 在简单系统(标准布朗运动)中, 系统与环境耦合的时间关联函数呈现指数衰减, 其特征时间是常数. 而对于复杂的、远离平衡态的系统, 其时间关联函数呈现幂律衰减. 而实际上大多数系统的关联函数都呈现这种幂律衰减, 例如聚合物系统激发^[8], 非结晶半导体的载流子输运^[9], 微观乳胶中的退相干过程^[10]和分数介质中的扩散等^[11]. 研究表明这种幂律衰减是反常扩散的物理起因, 反常扩散外在表现为系统方均位移的渐进形式满足 $\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle \sim t^\alpha$, 其中 $\alpha \neq 1$, 当 $0 < \alpha < 1$ 时, 系统表现为欠扩散; 当 $1 < \alpha < 2$ 时, 系统具有超扩散行为. 极限情形 $\alpha = 0, 2$ 分别对应于局域化和弹道扩散系统, 已有研究表明这两种系统具有不同的各态历经性^[12,13].

所谓各态历经是指在等能面上几乎所有的点

都能通过等能面上的每一个有限小的区域, 各态历经假说最早由玻尔兹曼创立的, 表述为长时间后可观测量 A 的系综平均等于时间平均, 即 $\langle A \rangle = \bar{A}$, 相关的随机动力学具有唯一渐进定态. 人们在实验中已经观测到各态历经假说的不成立, 例如在 Lévy 飞行的时间统计所控制的两个不同体系: 纳米晶体量子点的荧光中断^[14], 冷冻原子亚反冲激光^[15]. 最近, Latz 把描述系统行为的幂律尾部分布的矩发散与各态历经破坏精确对应^[16,17]. 目前为止, 大多数各态历经被破坏的例子皆是从一次矩、二次矩发散的观点来探讨的, 这导致稳态分布的非唯一性. 那么究竟如何判定并区分系统的非各态历经性? 目前已发展了三种不同判据: Brinkhoff 判据、Khinchin 判据和 Lee 判据. Brinkhoff 判据既适用于经典情况也适用于量子情况, 但是这个表述过于数学化, 很难从中直接辨明多体模型是否满足各态历经条件. Lapas 等指出 Khinchin 判据适用于所有广义朗之万方程描述的扩散过程^[18]. 而 Lee 认为不可逆性是比各态历经更宽泛的物理概念^[19],

* 四川省教育厅青年基金(批准号: 13233683)、西华大学校级重点科研项目(批准号: Z1123330)和西华大学先进计算中心实验室基金资助的课题.

† 通信作者. E-mail: bj_luhong@163.com

并提出可区分非各态历经运动的Lee判据,但其是否适用于广义布朗运动尚不可知. Bao和Hänggi等^[20-22]发现对于弹道扩散和局域化这两种非欧姆摩擦系统,力自由粒子不满足各态历经性,外在表现为:系统的长时渐进分布依赖于粒子坐标或速度的初始准备.而各态历经被破坏的内在原因在于记忆阻尼核函数的拉普拉斯变换在低频时正比或反比于频率.那么如何确定一个广义布朗运动是否是各态历经的?本文将基于分数阶谱分布的耦合振子链热浴模型对Khinchin判据、Lee判据以及内在判据和外在表现进行探讨.

本文将从气固耦合模型出发推导出具有幂律记忆核的广义朗之万方程,研究气体分子在自由和简谐外场中的时间演化动力学,并分析其渐进行为.着重对Khinchin判据、Lee判据、内在判据和外表现的有效性进行讨论.

2 模 型

假设热浴由 N 个相互耦合的全同振子组成,气体分子坐标与环境坐标双线性耦合.通过对角化变换,总哈密顿量写作

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(x) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left[\frac{P_j^2}{m} + k_j(Q_j - x)^2 \right], \quad (1)$$

其中 (x, p) 是气体分子的坐标和动量变量, $V(x)$ 是作用在系统上的外部势场, (Q_j, P_j) 是热浴振子第 j 个正则模的坐标和动量变量.选取热浴振子间的耦合系数形式如下:

$$k_j = \tilde{f}^2(\omega_j) \Delta\omega = \frac{2a_0}{\pi} \Gamma(1-\alpha) \sin\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right) \frac{\Delta\omega}{\omega_j^{1-\alpha}}, \quad (2)$$

其中 $\Gamma(z)$ 是欧拉伽马函数,参数 $a_0 > 0$, $0 \leq \alpha \leq 2$, ω_j 是组成热浴的第 j 个振子的特征频率, $\Delta\omega = N^{b_0}/N$ 是平均谱密度,参数常量 $b_0 > 0$.振子间以(2)式耦合的热浴环境热涨落将引起 $1/f^\alpha$ 内部噪声,而且随着 $N \rightarrow \infty$,噪声谱包含的频率范围也随着逐渐增加直至包含所有可能的频率^[23].

利用正则方程,推导出气体分子所满足广义朗之万方程

$$M\ddot{x}(t) = V'(x) - M \int_0^t \gamma(t-t') \dot{x}(t') dt'$$

$$+ \xi(t), \quad (3)$$

其中 $\gamma(t)$ 是记忆阻尼核函数, $\xi(t)$ 是随机力,其表达式分别为

$$\gamma(t) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^N \tilde{f}^2(\omega_j) \cos(\omega_j t) \Delta\omega, \quad (4)$$

$$\xi(t) = \sum_{j=1}^N \tilde{f}(\omega_j) \left[\tilde{Q}_j(0) \cos(\omega_j t) + \frac{\dot{Q}_j(0)}{\omega_j} \sin(\omega_j t) \right], \quad (5)$$

式中 $\tilde{Q}_j(0) = Q_j(0) - x(0)$ 是重新定义的热浴正则模坐标的初始位置.随机力 $\xi(t)$ 来源于与热浴振子的热振荡,其与 $\gamma(t)$ 满足涨落耗散定理 $\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = Mk_B T \gamma(t-s)$, T 是热浴温度, k_B 是玻尔兹曼常数.

在热力学极限($N \rightarrow \infty$)下,记忆阻尼核函数(4)式由求和转变为积分

$$\begin{aligned} \gamma(t) &= \int_0^\infty \tilde{f}^2(\omega) \cos(\omega t) d\omega \\ &= \frac{2a_0}{\pi} \Gamma(1-\alpha) \int_0^\infty \sin\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right) \frac{1}{\omega^{1-\alpha}} \\ &\quad \times \cos(\omega t) d\omega \\ &= a_0 t^{-\alpha}, \end{aligned} \quad (6)$$

利用逆傅里叶余弦变换公式

$$\begin{aligned} f(t) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \Gamma(z) \omega^{-z} \cos\left(\frac{z\pi}{2}\right) \cos(\omega t) d\omega \\ &= t^{\alpha-1}, \end{aligned} \quad (7)$$

其中 $0 < z < 1$.则记忆阻尼核函数 $\gamma(t)$ 的拉普拉斯变换形式写作

$$\hat{\gamma}(z) = \gamma_\alpha z^{\alpha-1}. \quad (8)$$

上式中参数 $\gamma_\alpha = a_0 \Gamma(1-\alpha)$,当 $0 < \alpha < 1$ 时, $\gamma_\alpha > 0$;当 $1 < \alpha < 2$ 时, $\gamma_\alpha < 0$.

只有当热浴提供给耦合其上的系统阻尼同时满足下列两个条件

$$(i) \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\hat{\gamma}(z)}{z} \rightarrow \infty; \quad (ii) \lim_{z \rightarrow 0} z \hat{\gamma}(z) = 0. \quad (9)$$

时,系统的渐进态才为平衡态,即其坐标与速度都是各态历经变量^[20].我们考察记忆阻尼核函数在Laplace空间的极限性质.(8)式分别乘以 z 和 z^{-1} ,并取极限 $z \rightarrow 0$,有如下关系式:

$$\lim_{z \rightarrow 0} \frac{\hat{\gamma}(z)}{z} = \lim_{z \rightarrow 0} \gamma_\alpha z^{\alpha-2}$$

$$= \begin{cases} \text{const}, & \alpha = 2, \\ \infty, & \text{其他} \alpha, \end{cases} \quad (10)$$

$$\lim_{z \rightarrow 0} z \hat{\gamma}(z) = \lim_{z \rightarrow 0} \gamma_\alpha z^\alpha = \begin{cases} \text{const}, & \alpha = 0, \\ 0, & \text{其他} \alpha. \end{cases} \quad (11)$$

从上式可知, 对于 $0 < \alpha < 2$ 的扩散过程同时满足条件 (i) 和 (ii) 式, 系统呈现各态历经运动. 而对于 $\alpha = 2$ 的弹道扩散过程不满足条件 (i) 式, 我们称为第一类非各态历经运动; 对于 $\alpha = 0$ 的局域化过程不满足条件 (ii) 式, 称为第二类非各态历经运动.

2.1 自由场

考虑气体分子不受外场作用 ($U(x) = 0$), 利用拉普拉斯变换推导出广义朗之万方程 (3) 式的解

$$x(t) = x(0) + H(t)v(0) + \int_0^t H(t-t')\xi(t')dt', \quad (12)$$

$$v(t) = h(t)v(0) + \int_0^t h(t-t')\xi(t')dt', \quad (13)$$

其中 $x(0)$ 和 $v(0)$ 分别是气体分子的初始坐标和速度. 响应函数 $H(t)$ 和 $h(t)$ 的拉普拉斯变换形式分别为

$$\hat{H}(z) = \frac{1}{z^2 + z\hat{\gamma}(z)} = \frac{1}{z^2 + z\gamma_\alpha z^{\alpha-1}},$$

$$\hat{h}(z) = \frac{1}{z^2 + \hat{\gamma}(z)} = \frac{1}{z + \gamma_\alpha z^{\alpha-1}}, \quad (14)$$

且有关系式 $H(t) = \int_0^t h(t')dt'$, $h(t) = \dot{H}(t)$. 对方程 (14) 进行拉普拉斯逆变换得到响应函数 $h(t)$ 和 $H(t)$ 的表达式

$$h(t) = E_{2-\alpha}(-\gamma_\alpha t^{2-\alpha}), \quad (15)$$

$$H(t) = \int_0^t h(t')dt' = tE_{2-\alpha,2}(-\gamma_\alpha t^{2-\alpha}), \quad (16)$$

上式中 E_α 是 Mittag-Leffler(M-L) 函数, $E_{\alpha,\beta}$ 是广义 M-L 函数 [24], 定义式分别为

$$E_\alpha(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(\alpha n + 1)},$$

$$E_{\alpha,\beta}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{\Gamma(\alpha n + \beta)}, \quad \alpha > 0, \quad \beta > 0. \quad (17)$$

利用拉普拉斯变换推导出气体分子坐标和速度的时间关联函数为

$$\{\langle x(t_1)x(t_2) \rangle\}$$

$$= \{x^2(0)\} + H(t_1)H(t_2)(\{v^2(0)\} - k_B T) + k_B T[I(t_1) + I(t_2) - I(|t_1 - t_2|)], \quad (18)$$

$$\{\langle v(t_1)v(t_2) \rangle\} = h(t_1)h(t_2)[\{v^2(0)\} - k_B T] + k_B T h(|t_1 - t_2|), \quad (19)$$

上式中我们定义

$$I(t) = \int_0^t H(t')dt' = t^2 E_{2-\alpha,3}(-\gamma_\alpha t^{2-\alpha}), \quad (20)$$

利用初值定理可知 $I(0) = 0$. 把响应函数 $h(t)$, $H(t)$ 和 $I(t)$ 的表达式方程 (14)—(20) 分别代入 (18) 和 (19) 式, 力自由的气体分子坐标和速度的时间关联函数写为如下形式:

$$\{\langle x(t_1)x(t_2) \rangle\} = \{x^2(0)\} + t_1 E_{2-\alpha,2}(-\gamma_\alpha t_1^{2-\alpha})t_2 \times E_{2-\alpha,2}(-\gamma_\alpha t_2^{2-\alpha})[v^2(0) - k_B T] + k_B T[t_1^2 E_{2-\alpha,3}(-\gamma_\alpha t_1^{2-\alpha}) + t_2^2 E_{2-\alpha,3}(-\gamma_\alpha t_2^{2-\alpha}) - (|t_1 - t_2|)^2 \times E_{2-\alpha,3}(-\gamma_\alpha (|t_1 - t_2|)^{2-\alpha})], \quad (21)$$

$$\{\langle v(t_1)v(t_2) \rangle\} = E_{2-\alpha}(-\gamma_\alpha t_1^{2-\alpha})E_{2-\alpha}(-\gamma_\alpha t_2^{2-\alpha})[\{v^2(0)\} - k_B T] + k_B T E_{2-\alpha}(-\gamma_\alpha (|t_1 - t_2|)^{2-\alpha}), \quad (22)$$

其中 $\{x^2(0)\}$ 和 $\{v^2(0)\}$ 是气体分子的初始坐标和速度准备. 若初始条件取 $\{v^2(0)\} = k_B T$, 则气体分子速度的时间关联函数 $\{\langle v(t_1)v(t_2) \rangle\}$ 仅是时间差 $|t_1 - t_2|$ 的函数, 而 $\{\langle x(t_1)x(t_2) \rangle\}$ 的表达式存在老化项. 如果方程 (21) 和 (22) 中取 $t_1 = t_2$, 那么气体分子的坐标和速度二次矩为

$$\{\langle x^2(t) \rangle\} = \{x^2(0)\} + t^2 [E_{2-\alpha,2}(-\gamma_\alpha t^{2-\alpha})]^2 \times [\{v^2(0)\} - k_B T] + 2k_B T t^2 E_{2-\alpha,3}(-\gamma_\alpha t^{2-\alpha}), \quad (23)$$

$$\{\langle v^2(t) \rangle\} = [E_{2-\alpha}(-\gamma_\alpha t^{2-\alpha})]^2 [\{v^2(0)\} - k_B T] + k_B T. \quad (24)$$

在长时间极限下, 广义 M-L 函数具有如下渐近形式:

$$E_{\alpha,\beta}(t) \sim -[t\Gamma(\beta - \alpha)]^{-1}, \quad (25)$$

把上式代入方程 (14)—(20), 获得响应函数 $h(t)$, $H(t)$ 和 $I(t)$ 的时间渐近值

$$h(t) \sim \frac{t^{\alpha-2}}{\gamma_\alpha \Gamma(\alpha - 1)},$$

$$\begin{aligned} H(t) &\sim \frac{t^{\alpha-1}}{\gamma_\alpha \Gamma(\alpha)}, \\ I(t) &\sim \frac{t^\alpha}{\gamma_\alpha \Gamma(\alpha+1)}, \end{aligned} \quad (26)$$

把上述渐进结果代入方程 (24), 得到气体分子速度二次矩的长时渐近值

$$\begin{aligned} &\{\langle v^2(t) \rangle\} \\ &\sim \frac{\{v^2(0)\} - k_B T}{[\gamma_\alpha \Gamma(\alpha-1)]^2} t^{2\alpha-4} + k_B T \\ &\rightarrow \begin{cases} k_B T, & 0 \leq \alpha < 2; \\ \gamma_2^{-2} \{v^2(0)\} + k_B T (1 - \gamma_2^{-2}), & \alpha = 2, \end{cases} \end{aligned} \quad (27)$$

上式在计算中利用 M-L 函数的特殊形式 [24]

$$\begin{aligned} E_2(t) &= \cosh(\sqrt{t}), \\ E_1(t) &= e^t, \\ E_0(t) &= \frac{1}{1-t}. \end{aligned} \quad (28)$$

气体分子的速度二次矩 $\{\langle v^2(t) \rangle\}$ 在长时极限下以 $t^{2\alpha-4}$ 的形式衰减. 对于 $0 \leq \alpha < 2$, 其速度二次矩缓慢的弛豫到唯一的平衡态; 而只有对于 $\alpha = 2$ (弹道扩散), 气体分子的速度二次矩才依赖其初始速度准备. 这表明对于做弹道扩散运动的气体分子, 其速度是一个非各态历经变量, 而对于其他指数反常扩散运动的气体分子, 其速度是各态历经变量.

把响应函数 $h(t)$, $H(t)$ 和 $I(t)$ 的长时渐进表达式 (26) 代入方程 (23), 得到气体分子坐标二次矩的长时渐近表达式

$$\begin{aligned} &\{\langle x^2(t) \rangle\} \\ &\sim \{x^2(0)\} + \frac{[\{v^2(0)\} - k_B T]}{[\gamma_\alpha \Gamma(\alpha)]^2} t^{2\alpha-2} \\ &\quad + 2k_B T \frac{t^\alpha}{\gamma_\alpha \Gamma(\alpha+1)} \\ &\rightarrow \begin{cases} \{x^2(0)\} + \frac{2k_B T}{a_0}, & \alpha = 0; \\ \infty, & 0 < \alpha \leq 2. \end{cases} \end{aligned} \quad (29)$$

对于作 $0 < \alpha \leq 2$ 的反常扩散运动的气体分子, 其坐标变量即使在长时极限下仍存在老化项, 不会达到平衡. 对于 $\alpha = 0$, 有效阻尼 $\hat{\gamma}(0) \rightarrow \infty$ 导致气体分子的坐标在极短时间内达到稳态, 以至于其能量不能与热浴振子充分交换, 长时间后气体分子依然具有初始条件的记忆, 从而引起气体分子的稳态坐标二次矩依赖于其初始坐标准备. 综上可知, 对于 $\alpha = 2$, 气体分子的速度是一个非各态历经变量; 对

于 $\alpha = 0$, 气体分子的坐标是一个非各态历经变量; 而对于其他指数的反常扩散运动, 其坐标和速度都是各态历经变量.

上面利用内在判据和外表现给出气体分子坐标和速度变量的各态历经性行为, 下面我们将考察 Khinchin 判据和 Lee 的各态历经判据的适用性.

1) Khinchin 判据

Khinchin 判据表述为: 如果一个物理量 A 的自相关函数长时间后满足 $A(t \rightarrow \infty) = 0$, 那么这个物理量 A 是各态历经的.

气体分子速度自相关函数 (VACF) 写作

$$\begin{aligned} C_v(t) &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle v(\tau)v(t+\tau) \rangle}{\langle v^2(\tau) \rangle} = h(t) \\ &= E_{2-\alpha}(-\gamma_\alpha t^{2-\alpha}), \end{aligned} \quad (30)$$

特别的, 对于 $\alpha = 2$ 有 $C_v(t) = (1 + \gamma_\alpha t^0)^{-1} = 1$; 对于 $\alpha = 0$ 有 $C_v(t) = \cosh(\sqrt{-\gamma_\alpha t^2})$. 当 $\alpha = 1$ 时 $C_v(t)$ 退化为 e 指数形式. VACF 的长时渐近表达式为

$$\begin{aligned} C_v(t) &\sim \frac{t^{\alpha-2}}{\gamma_\alpha \Gamma(\alpha-1)} \\ &\rightarrow \begin{cases} 0, & 0 \leq \alpha < 2; \\ \frac{1}{1+\gamma_2}, & \alpha = 2, \end{cases} \end{aligned} \quad (31)$$

对于欠扩散 ($0 < \alpha < 1$) 运动, VACF 存在负的幂律尾巴. 这个负关联导致气体分子速度方向不断变化, 在这段时间正方向运动, 在下一时刻很可能负方向运动, 从而导致其运动非常缓慢, 称为 whip-back 效应; 而对于超扩散 ($1 < \alpha < 2$) 运动, VACF 具有正的幂律长尾, 气体分子总是沿着同一个方向运动, 其扩散波包不断扩大. 对于欧姆情形 ($\alpha = 1$), $C_v(t) = \exp(-\gamma t)$, 其长时间后消失, 这是由 $\Gamma(0) = \infty$ 所引起的, 即气体分子不同时刻的速度不存在关联. 根据 KT 可知, 对于 $0 \leq \alpha < 2$ 情形, 气体分子的速度变量是各态历经变量; 当且仅当 $\alpha = 2$ 时, 气体分子的速度才是非各态历经变量. 这与依据内在判据和外表现而得到的结果一致.

2) Lee 判据

Lee 指出动力学变量 A 是各态历经的充分必要条件为, 其自相关函数的积分在时间趋于无穷时为一非零常数, 即

$$0 < W = \int_0^\infty \frac{A(t)A(0)}{(A(0)A(0))} dt < \infty. \quad (32)$$

气体分子的速度自相关函数的积分写作

$$W_v = \int_0^\infty C_v(t) dt = \hat{C}_v(0) = \hat{h}(0)$$

$$= \lim_{z \rightarrow 0} \frac{1}{z + \gamma_\alpha z^{\alpha-1}} = \begin{cases} 0, & 0 \leq \alpha < 1; \\ \frac{1}{a_0}, & \alpha = 1, \\ \infty, & 1 < \alpha \leq 2. \end{cases} \quad (33)$$

根据 Lee 各态历经判据可知, 对于 $0 \leq \alpha < 1$ 的欠扩散运动, 以及 $1 < \alpha \leq 2$ 的超扩散运动, 粒子的速度皆是一个非各态历经变量; 只有 $\alpha = 1$ 的正常布朗运动, 其速度才是各态历经变量. 这表明 Lee 提出的各态历经判据只能用来区分自由粒子的扩散过程, 而不能用来判断自由粒子的各态历经性.

2.2 简谐场

把气体分子置于简谐外势场中, $U(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2$. 考察此情形下气体分子的时间演化动力学和长时渐进行为, 讨论气体分子坐标和速度变量的各态历经性是否会在简谐势束缚下发生改变.

用拉普拉斯变换方法推导出气体分子坐标和速度的平均值及其时间关联函数

$$\{\langle x(t) \rangle\} = [1 - \omega^2 I(t)] \{x(0)\} + H(t) \{v(0)\}, \quad (34)$$

$$\{\langle v(t) \rangle\} = h(t) \{v(0)\} - \omega^2 H(t) \{x(0)\}, \quad (35)$$

$$\begin{aligned} & \{\langle x(t_1)x(t_2) \rangle\} \\ &= \{\langle x(t_1) \rangle\} \{\langle x(t_2) \rangle\} + k_B T [I(t_1) + I(t_2) \\ & \quad - I(|t_1 - t_2|) - \omega^2 I(t_1)I(t_2) \\ & \quad - H(t_1)H(t_2)], \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} & \{\langle v(t_1)v(t_2) \rangle\} \\ &= \{\langle v(t_1) \rangle\} \{\langle v(t_2) \rangle\} + k_B T [H(|t_1 - t_2|) \\ & \quad - \omega^2 H(t_1)H(t_2) - h(t_1)h(t_2)], \end{aligned} \quad (37)$$

上式中响应函数 $I(t)$, $H(t)$ 和 $h(t)$ 的拉普拉斯变换形式分别为

$$\begin{aligned} \hat{I}(z) &= \frac{1}{z(z^2 + z\hat{\gamma}(z) + \omega^2)}, \\ \hat{H}(z) &= \frac{1}{z^2 + z\hat{\gamma}(z) + \omega^2}, \\ \hat{h}(z) &= \frac{z}{z^2 + z\hat{\gamma}(z) + \omega^2}. \end{aligned} \quad (38)$$

若方程 (36) 和 (37) 中取 $t_1 = t_2$, 则可得到气体分子坐标和速度的二次矩表达式

$$\{\langle x^2(t) \rangle\} = \{\langle x(t) \rangle\}^2 + k_B T [2I(t) - \omega^2 I^2(t)$$

$$- H^2(t)], \quad (39)$$

$$\begin{aligned} \{\langle v^2(t) \rangle\} &= \{\langle v(t) \rangle\}^2 + k_B T [1 - \omega^2 H^2(t) \\ & \quad - h^2(t)], \end{aligned} \quad (40)$$

其中响应函数 $I(t)$ 写作

$$\begin{aligned} I(t) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \omega^{2k} t^{2(k+1)} \\ & \quad \times E_{2-\alpha, 3+\alpha k}^{(k)}(-(\omega_\alpha t)^{2-\alpha}), \end{aligned} \quad (41)$$

式中 $E_{\alpha, \beta}^{(k)}(y)$ 是广义 M-L 函数的导数

$$\begin{aligned} E_{\alpha, \beta}^{(k)}(y) &= \frac{d^k}{dy^k} E_{\alpha, \beta}(y) \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(j+k)! y^j}{j! \Gamma(\alpha(j+k) + \beta)}, \end{aligned} \quad (42)$$

且 $\omega_\alpha^{2-\alpha} = |\gamma_\alpha|$. 利用关系式

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} (t^{\alpha k + \beta - 1} E_{\alpha, \beta}^{(k)}(-\gamma t^\alpha)) \\ &= t^{\alpha k + \beta - 2} E_{\alpha, \beta - 1}^{(k)}(-\gamma t^\alpha), \end{aligned} \quad (43)$$

推导出响应函数 $H(t)$ 和 $h(t)$ 的表达式

$$\begin{aligned} H(t) &= \frac{dI(t)}{dt} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \omega^{2k} t^{2(k+1)} \\ & \quad \times E_{2-\alpha, 2+\alpha k}^{(k)}(-(\omega_\alpha t)^{2-\alpha}), \end{aligned} \quad (44)$$

$$\begin{aligned} h(t) &= \frac{dH(t)}{dt} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \omega^{2k} t^{2(k+1)} \\ & \quad \times E_{2-\alpha, 1+\alpha k}^{(k)}(-(\omega_\alpha t)^{2-\alpha}). \end{aligned} \quad (45)$$

从方程 (39) 和 (40) 可知响应函数 $I(t)$, $H(t)$ 和 $h(t)$ 完全决定气体分子坐标和速度二次矩的动力学行为. 当取极限 $\omega \rightarrow 0$ 时, 可以重新得到自由场中的结果.

对于大值 y , 广义 M-L 函数及其导数具有如下渐近形式:

$$\begin{aligned} E_{\alpha, \beta}(y) &\sim -[y \Gamma(\beta - \alpha)]^{-1}, \\ E_{\alpha, \beta}^{(k)}(y) &\sim -\frac{k!}{y^{k+1} \Gamma(\beta - \alpha)}, \end{aligned} \quad (46)$$

把上式代入 (41), (44) 和 (45) 式得到函数 $I(t)$, $H(t)$ 和 $h(t)$ 的长时渐近表达式

$$I(t) \sim \frac{1}{\omega^2} - \frac{\omega_\alpha^{2-\alpha}}{\omega^4} \frac{\sin(\alpha\pi)}{\pi} \frac{\Gamma(\alpha)}{t^\alpha}, \quad (47)$$

$$H(t) \sim -\frac{\omega_\alpha^{2-\alpha}}{\omega^4} \frac{\sin(\alpha\pi)}{\pi} \frac{\Gamma(\alpha+1)}{t^{(\alpha+1)}}, \quad (48)$$

$$h(t) \sim -\frac{\omega_\alpha^{2-\alpha}}{\omega^4} \frac{\sin(\alpha\pi)}{\pi} \frac{\Gamma(\alpha+2)}{t^{(\alpha+2)}}, \quad (49)$$

在上面的计算中已利用

$$\Gamma(\lambda)\Gamma(1-\lambda) = \frac{\pi}{\lambda\pi}, \quad \lambda \neq 0, 1, 2. \quad (50)$$

把方程(47)–(49)代入(34)和(35)式, 得到气体分子坐标和速度一次矩的渐近形式

$$\begin{aligned} \{\langle x(t) \rangle\} &\sim \frac{\omega_\alpha^{2-\alpha}}{\omega^2} \frac{\sin(\alpha\pi)}{\pi} \left\{ \frac{\Gamma(\alpha)}{t^\alpha} \{x(0)\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\omega^2 t^{\alpha+1}} \{v(0)\} \right\}, \end{aligned} \quad (51)$$

$$\begin{aligned} \{\langle v(t) \rangle\} &\sim -\frac{\omega_\alpha^{2-\alpha}}{\omega^2} \frac{\sin(\alpha\pi)}{\pi} \left\{ \frac{\Gamma(\alpha+1)}{t^{\alpha+1}} \{x(0)\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Gamma(\alpha+2)}{\omega^2 t^{\alpha+2}} \{v(0)\} \right\}, \end{aligned} \quad (52)$$

若把方程(47)–(49)代入(39)和(40)式, 则可获得气体分子坐标和速度二次矩的长时表达式

$$\begin{aligned} \{\langle x^2(t) \rangle\} &\sim \{\langle x(t) \rangle\}^2 + k_B T \left[\frac{1}{\omega^2} - \frac{\omega_\alpha^{2(2-\alpha)}}{\omega^6} \right. \\ &\quad \left. \times \frac{\sin^2(\alpha\pi)}{\pi^2} \frac{\Gamma(\alpha)^2}{t^{2\alpha}} \right], \end{aligned} \quad (53)$$

$$\begin{aligned} \{\langle v^2(t) \rangle\} &\sim \{\langle v(t) \rangle\}^2 + k_B T \left[1 - \frac{\omega_\alpha^{2(2-\alpha)}}{\omega^6} \right. \\ &\quad \left. \times \frac{\sin^2(\alpha\pi)}{\pi^2} \frac{\Gamma(\alpha+1)^2}{t^{2(\alpha+1)}} \right], \end{aligned} \quad (54)$$

从上式可知, 气体分子的坐标和速度变量皆是以与时间 t 成长尾幂律形式衰减, 在外加简谐势场的束缚作用下, 这两个值均趋向平衡态. 特别的, 对于反常扩散的两个极限 $\alpha = 0, 2$, 有

$$\begin{aligned} \{\langle x^2(t \rightarrow \infty) \rangle\} &= a\{x^2(0)\} + b k_B T, \quad \alpha = 0, \end{aligned} \quad (55)$$

$$\{\langle v^2(t \rightarrow \infty) \rangle\} = k_B T, \quad \alpha = 2. \quad (56)$$

其中 a, b 是与时间 t 无关的参量. 可见对于弹道扩散系统($\alpha = 2$), 其速度变量可以通过外加束缚势恢复各态历经性; 而对于局域化系统($\alpha = 0$), 不能通过外加束缚势恢复其坐标的各态历经性.

1) Khinchin 判据

气体分子速度的自相关函数

$$C_v(t) = h(t) \sim -\frac{\omega_\alpha^{2-\alpha}}{\omega^4} \frac{\sin(\alpha\pi)}{\pi} \frac{\Gamma(\alpha+2)}{t^{\alpha+2}}. \quad (57)$$

从上式可见, 当 $t \rightarrow \infty$ 时, 对于所有扩散过程皆有 $C_v(t) = 0$. 根据KT可知在束缚势作用下, 气体分子的速度是一个各态历经变量. 特别的, 对于 $\alpha = 2$ 的弹道扩散过程, 自由气体分子的速度的非各态历经性在束缚势作用下得以恢复.

2) Lee 判据

气体分子的速度自相关函数的积分形式写作

$$W_v = \int_0^\infty C_v(t) dt = \hat{h}(0), \quad (58)$$

把响应函数 $h(t)$ 的拉普拉斯变换形式方程(38)代入方程(58), 得到

$$W_v = \lim_{z \rightarrow 0} \frac{z}{z^2 + z\hat{\gamma}(z) + \omega^2} = 0. \quad (59)$$

根据Lee提出的各态历经判据可知: 对于 $0 \leq \alpha \leq 2$, 在外部简谐势场作用下, 气体分子的速度是一个非各态历经变量. 这与我们分析得到的结论不同, 也与KT判据得到的结论相反. 因此Lee判据并不适用于布朗运动.

3 结 论

本文基于分数阶谱环境热浴模型推导出具有幂律记忆阻尼核的广义朗之万方程, 它可以描述所有类型的扩散过程. 利用拉普拉斯变换推导出含有 Mittag-Leffler 函数的气体分子的坐标和速度时间关联函数, 发现其以长尾幂律形式衰减. 我们着重讨论了三种各态历经判据: Khinchin 判据、Lee 判据, 以及内在判据和外在表现的适用性, 研究结果表明:

1) Khinchin 判据适用于具有幂律记忆阻尼核的广义朗之万方程所描述的扩散和输运过程;

2) Lee 判据并不适用于布朗运动, 只能用来区分自由粒子的扩散性质;

3) 内在判据和外表现不仅能够区分不同类型的非各态历经运动, 同时可以利用阻尼核函数揭示非各态历经的物理内在根源.

参考文献

- [1] Tamm M V, Nazarov L I, Gavrilov A A, Chertovich A V 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 178102
- [2] Guo G, Bittig A, Uhrmacher A 2015 *J. Comput. Phys.* **288** 167
- [3] Hu W Y, Shao Y Z 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 238202 (in Chinese) [胡文勇, 邵元智 2014 物理学报 **63** 238202]
- [4] Lin F, Bao J D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 696 (in Chinese) [林方, 包景东 2008 物理学报 **57** 696]
- [5] Montroll E, Weiss G 1965 *J. Math. Phys. Lett.* **6** 167
- [6] Viñales A D, Despósito M A 2006 *Phys. Rev. E* **73** 016111
- [7] Burov S, Barkai E 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 070601
- [8] Amblard F, Maggs A C, Yurke B, Pargellis A N, Leibler S 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 4470
- [9] Gu Q, Schiff E A, Grebner S, Wang F, Schwara R 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 3196

- [10] Sciortion F, Tartaglia P 1997 *Physica A* **236** 140
- [11] Stephenson J 1995 *Physica A* **222** 234
- [12] Lu H, Qin L, Bao J D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 8127 (in Chinese) [卢宏, 覃莉, 包景东 2009 物理学报 **58** 8127]
- [13] Lu H, Bao J D 2013 *Chin. Phys. Lett.* **30** 010502
- [14] Brokman X, Hermier J P, Messin G, Deebiolles P, Bouchard J P, Dahan M 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 120601
- [15] Saubamea B, Leduc M, Cohen-Tannoudji C 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 3796
- [16] Lutz E 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 190602
- [17] Papoulis A 1965 *Probability, Random Variables and Stochastic Processes* (New York: McGraw-Hill)
- [18] Lapas L C, Morgado R, Vainstein M H, Rubi J M, Oliveirs F A 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 230602
- [19] Lee M H 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 110403
- [20] Bai Z W, Bao J D, Song Y L 2005 *Phys. Rev. E* **72** 061105
- [21] Bao J D, Hänggi P, Zhuo Y Z 2005 *Phys. Rev. E* **72** 061107
- [22] Bao J D, Zhuo Y Z, Oliveira F A, Hänggi P 2006 *Phys. Rev. E* **74** 061111
- [23] Kupferman R 2004 *J. Stat. Phys.* **114** 291
- [24] Mainardia F, Goren R 2000 *J. Comput. Appl. Math.* **118** 283

Studies of nonergodic criterion based on the fractional heat bath model*

Lu Hong^{1)†} Lü Yan²⁾ Bao Jing-Dong³⁾

1) (School of Science, Xihua University, Chengdu 610039, China)

2) (School of Applied Science, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China)

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

(Received 6 February 2015; revised manuscript received 2 May 2015)

Abstract

The generalized Langevin equation with a power law memory kernel is derived via the gas/solid-surface model with fractional heat bath. Using Lapalce transformation, the dynamic evolution and long-time asymptotic behaviors of the gas particles occurring either in free or harmonic potentials are then investigated. In particular, the validity of three kinds of ergodic criteria is analyzed in detail, including the Khinchin criterion, Lee criterion, and the intrinsic and external behaviors. It is found that the Khinchin criterion holds for all ranges of diffusion and transport processes described by a generalized Langevin equation. Lee criterion is just applied to distinguish diffusion processes. Meanwhile, the intrinsic criterion and external behaviors can not only divide the nonergodicity into two classes but also reveal the underlying physical origins.

Keywords: fractional spectrum distribution, generalized Langevin equation, nonergodicity

PACS: 05.20.Gg, 02.60.Cb, 05.40.Ca

DOI: 10.7498/aps.64.170502

* Project supported by the Natural Science Foundation of the Education Department of Sichuan Province, China (Grant No. 13233683), the Key Scientific Research Foundation of Xihua University (Grant No. Z1123330), and the Foundation of Key Laboratory of Advanced Scientific Computation, Xihua University, China.

† Corresponding author. E-mail: bj_luhong@163.com