

非平衡系统的概率模型及 Master 方程的建立*

严士健 李占柄

(北京师范大学量子力学小组) (北京师范大学数学系)

提 要

针对非平衡态统计中出现的非线性及多元线性 Master 方程, 明确提出了一般的概率假定; 应用概率论的方法建立了一般的非线性及多元线性 Master 方程; 讨论了它们与宏观动力学方程的一致性问题; 最后应用多元线性 Master 方程讨论了 Brusselator 的涨落, 并对其耗散结构的产生作了初步解释.

一、引 言

近年来, Prigogine 及其合作者所提出的远离平衡区的耗散结构理论是引人注目的^[1,2]. 目前的发展是: 反应扩散方程的分支点分析, 非线性 Master 方程(简记作 NLME)及多元线性 Master 方程(简记作 MME)的研究^[1,4,5], 以及一些应用于化学、生物的想法. 这些研究对于远离平衡区的自组织现象提供了新的概念.

用 Master 方程来探讨非平衡系统的自组织机制, 目前还处在开始阶段. 为了更深入地讨论一些具体问题, 把模型假定及参数的概率意义提得更明确一些; 方程的推导也更严谨一些; 可能有助于考虑方程的应用范围.

二、一条数学引理

为了明确起见, 先证明一条在建立 NLME 及 MME 时要用到的数学定理. 设对每一

$$t \in (0, \infty), X(t) = (X_1(t), \dots, X_n(t))$$

为一取非负整数值的随机向量(即每一 $X_k(t)$ 都是取非负整数值的随机过程);

$$x = (x_1, \dots, x_n), \alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$$

表示 n 维整点(即每一 α_k, x_k 都是整数); 若每一 α_k, x_k 都是非负整数, 则称 x, α 为 n 维非负整点; e_i 表示第 i 个坐标是 1 而其余坐标是零的 n 维整点; Λ 表示 n 维空间中非零整点的有限集; 以 $P(A)$ 表示事件 A 的概率, $P(A|B)$ 表示在事件 B 之下的条件概率, 则有

* 1978 年 10 月 31 日收到.

定理 1 设有一 Λ 使得对于任何非负整点 x 及 $\alpha \in \Lambda$ 来说, 下列条件满足: 如果

$$P(X(t) = x) \neq 0,$$

则有 $\lambda_{x, x+\alpha}(t)$ 使

$$P(X(t + \Delta t) = x + \alpha | X(t) = x) = \lambda_{x, x+\alpha}(t) \Delta t + o(\Delta t), \quad (2.1)$$

$$P(X(t + \Delta t) - X(t) \notin \Lambda \cup \{0\}) = o(\Delta t). \quad (2.2)$$

则概率

$$P(X(t) = x) = P(x, t)$$

(显然当 x 不是非负整点时, $P(x, t) = 0$) 满足下列方程:

$$\frac{dP(x, t)}{dt} = \sum_{\alpha \in \Lambda} [P(x - \alpha, t) \lambda_{x-\alpha, x}(t) - P(x, t) \lambda_{x, x+\alpha}(t)], \quad (2.3)$$

其中 x 遍历非负整点.

证 由概率的加法性质、(2.2) 式乘法定理及 (2.1) 式, 知

$$\begin{aligned} P(x, t + \Delta t) &= P(X(t + \Delta t) = x) \\ &= P(X(t + \Delta t) = x, X(t + \Delta t) - X(t) \in \Lambda) \\ &\quad + P(X(t + \Delta t) = x, X(t + \Delta t) - X(t) \notin \Lambda \cup \{0\}) + P(X(t + \Delta t) \\ &\quad = x = X(t)) = \sum_{\alpha \in \Lambda} P(X(t + \Delta t) = x, X(t) = x - \alpha) \\ &\quad + P(X(t + \Delta t) = x = X(t)) + o(\Delta t) = \sum_{\alpha \in \Lambda} P(X(t + \Delta t) \\ &\quad = x | X(t) = x - \alpha) P(X(t) = x - \alpha) + P(X(t + \Delta t) = x \\ &\quad = X(t)) + o(\Delta t) = \sum_{\alpha \in \Lambda} P(x - \alpha, t) \lambda_{x-\alpha, x}(t) \cdot \Delta t \\ &\quad + P(X(t + \Delta t) = x = X(t)) + o(\Delta t). \end{aligned}$$

类似地

$$\begin{aligned} P(x, t) &= \sum_{\alpha \in \Lambda} P(X(t) = x, X(t + \Delta t) = x + \alpha) + P(X(t) = x = X(t + \Delta t)) \\ &\quad + o(\Delta t) = \sum_{\alpha \in \Lambda} P(X(t + \Delta t) = x + \alpha | X(t) = x) P(X(t) = x) + P(X(t) \\ &\quad = x = X(t + \Delta t)) + o(\Delta t) = \sum_{\alpha \in \Lambda} P(x, t) \lambda_{x, x+\alpha}(t) \cdot \Delta t + P(X(t) \\ &\quad = x = X(t + \Delta t)) + o(\Delta t). \end{aligned}$$

将以上两式相减即得

$$\begin{aligned} P(x, t + \Delta t) - P(x, t) &= \sum_{\alpha \in \Lambda} [P(x - \alpha, t) \lambda_{x-\alpha, x}(t) \\ &\quad - P(x, t) \lambda_{x, x+\alpha}(t)] \Delta t + o(\Delta t). \end{aligned}$$

两边除以 Δt , 然后令 $\Delta t \rightarrow 0$, 即得 (2.3) 式.

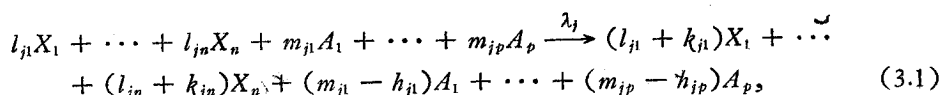
三、NLME 的概率模型

设有一开放系统位于空间区域 V , ΔV 表示在 V 中选定的一个子空间区域, 而 $V -$

ΔV 表示从 V 中去掉 ΔV 而剩下的部分, 以后为简单计, $\Delta V, V - \Delta V$ 的体积也分别用 $\Delta V, V - \Delta V$ 表示. 这个系统有若干物种, 进行着扩散运动和几种基本“反应”(可以是化学反应, 也可以是物种单元的生灭或互相转化). 用 $X_1, \dots, X_n$ 表示我们所要讨论的物种, $X_i(t), X_{i, V-\Delta V}(t), i = 1, 2, \dots, n$, 分别表示在时刻 t , 物种 X_i 在 $\Delta V, V - \Delta V$ 中的粒子(或物种单元)数; 用 $A_1, \dots, A_p$ 表示参加反应的其它物种, 并且每一物种 A_i 在 ΔV 中的粒子数不变(例如可以通过与外界交换物质而达到这一点), 其粒子数记成 a_i . 从概率论的观点看, $X_i(t)$ 可以看成是取非负整数值的随机过程, 给定 $t, X_i(t)$ 是随机变量.

如果在 ΔV 中, 系统的几个特定粒子进行一次特定的基本反应或者某一物种 X_i 的一个特定粒子由 $V - \Delta V$ (相应地 ΔV) 进入 ΔV (相应地 $V - \Delta V$), 则称系统在 ΔV 内发生一次状态改变.

假设所讨论的系统的全部基本反应共为下列 J 个:



$j = 1, 2, \dots, J$. 即第 j 个基本反应是由 $l_{ji}, i = 1, \dots, n$ 个 X_i 粒子及 $m_{ji}, i = 1, 2, \dots, p$ 个 A_i 粒子进行而生成 $l_{ji} + k_{ji}, i = 1, 2, \dots, n$ 个 X_i 粒子及 $m_{ji} - h_{ji}, i = 1, \dots, p$ 个 A_i 粒子, 其中向量 $k_j = (k_{j1}, \dots, k_{jn})$ 是非零整点, 并且 $-k_{ji} \leq l_{ji}$ (即 $l_{ji} + k_{ji} \geq 0$).

再设所讨论的系统满足下列的概率假定:

I. 在时间间隔 $(t, t + \Delta t]$ 内, 区域 ΔV 内发生一次以上的状态改变的概率是 $o(\Delta t)$;

II. 在 $(t, t + \Delta t]$ 内, ΔV 内几个特定粒子进行一次特定基本反应, 例如第 j 个反应的概率为 $\lambda_j \Delta t + o(\Delta t)$;

III. 在 $(t, t + \Delta t]$ 内, 区域 ΔV (相应地 $V - \Delta V$) 内物种 X_i 的一个粒子进入 $V - \Delta V$ (相应地 ΔV) 的概率为 $D_i \rho_i(t) \Delta t + o(\Delta t)$ (相应地 $D_i \rho_{i, V-\Delta V}(t) \Delta t + o(\Delta t)$), 其中 $\rho_i(t)$ (相应地 $\rho_{i, V-\Delta V}(t)$) 表示时刻 t 区域 ΔV (相应地 $V - \Delta V$) 内单位体积所含的 X_i 的粒子数;

IV. $\rho_{i, V-\Delta V}(t) = E[X_{i, V-\Delta V}(t)]/(V - \Delta V)$, 其中 $E[\xi]$ 表示随机变量 ξ 的数学期望(平均值);

V. $E[X_{i, V-\Delta V}(t)]/(V - \Delta V) = E[X_i(t)]/\Delta V$. 假定 V 是文献[3]中明确提出的.

注 1 假定 II, III, 实际上假定了系统具有无后效性(马氏性), 因为在下面的推导中, 讨论 t 以后的发展时, 只考虑在时刻 t 的粒子数、密度及数学期望. 另外在后面应用假设 II 时, 还包含了这样的意思: 在 $(t, t + \Delta t]$ 中, 几个特定粒子进行反应与它们在 ΔV 中的相对位置无关, 而且它们反应与否与 ΔV 中有多少个其它粒子无关.

在上述假定下, 有

定理 2 采用第二、三节的记号, 则在第三节的假设下, $P(x, t)$ 满足下列的 NLME:

$$\begin{aligned}
\frac{dP(x, t)}{dt} = & \sum_{i=1}^n \mathcal{D}_i E[X_i(t)] \{P(x - e_i, t) - P(x, t)\} \\
& + \sum_{i=1}^n \mathcal{D}_i \{P(x + e_i, t)(x_i + 1) - P(x, t)x_i\} \\
& + \sum_{j=1}^J \lambda_j C_j \left\{ P(x - k_j, t) \binom{x_1 - k_{j1}}{l_{j1}} \cdots \binom{x_n - k_{jn}}{l_{jn}} \right. \\
& \left. - P(x, t) \binom{x_1}{l_{j1}} \cdots \binom{x_n}{l_{jn}} \right\}, \quad (3.2)
\end{aligned}$$

其中

$$\mathcal{D}_i = D_i / \Delta V, \quad i = 1, \cdots, n;$$

$$C_j = \binom{a_1}{m_{j1}} \cdots \binom{a_p}{m_{jp}}, \quad j = 1, \cdots, J;$$

而

$$\binom{k}{l} = \frac{k(k-1)\cdots(k-l+1)}{l!},$$

x 遍历一切非负整点.

定理 2 的证明思路是设法应用定理 1. 为此取 Λ 为系统经过一次状态改变而得到的改变量的集合, 即 Λ 是由向量 k_j (第 j 个反应的改变量), $j = 1, \cdots, J$ 及 $\pm e_i$ (X_i 粒子扩散的改变量), $i = 1, \cdots, n$ 组成的集合. 则由假定 1 知 (2.2) 式成立. 于是剩下就是要证明满足条件 (2.1) 式并计算出 $\lambda_{x, x+\alpha}$. 为此先证明两条引理.

引理 1 设 $P(x, t) > 0$, m 是任意正整数, E_0 表示在 $(t, t + \Delta t]$ 内某些一次以上状态改变组成的随机事件; $E_i, i = 1, \cdots, m$ 是在 $(t, t + \Delta t]$ 内某些一次状态改变组成的随机事件, 而且当 $i \neq j, 1 \leq i, j \leq m$ 时, 组成 E_i 的一次状态改变与组成 E_j 的一次状态改变是不同的. 则有

$$P\left(\bigcup_{i=0}^n E_i \mid \mathbf{X}(t) = x\right) = \sum_{i=1}^n P(E_i \mid \mathbf{X}(t) = x) + o(\Delta t), \quad (3.3)$$

其中 $\bigcup_{i=0}^n E_i$ 表示随机事件 $E_0, E_1, \cdots, E_n$ 的和.

证 用数学归纳法证明. 当 $n = 1$ 时, 由概率加法公式知

$$\begin{aligned}
P(E_0 \cup E_1 \mid \mathbf{X}(t) = x) &= P(E_1 \mid \mathbf{X}(t) = x) + P(E_0 \mid \mathbf{X}(t) = x) \\
&\quad - P(E_0 \cap E_1 \mid \mathbf{X}(t) = x),
\end{aligned}$$

其中 $E_0 \cap E_1$ 表示事件 E_0 与 E_1 的乘积, 于是 E_0 及 $E_0 \cap E_1$ 都是由一次以上状态改变组成的, 由假定 1 及 $P(x, t) = P(\mathbf{X}(t) = x) > 0$ 知, 上式右边后两项都是 $o(\Delta t)$, 所以

$$P(E_0 \cup E_1 \mid \mathbf{X}(t) = x) = P(E_1 \mid \mathbf{X}(t) = x) + o(\Delta t),$$

即 $n = 1$ 时, (3.3) 式成立. 设 (3.3) 式对 n 成立, 则由概率加法公式, 归纳假定及上面同样的理由得到

$$P\left(\bigcup_{i=0}^{n+1} E_i \mid \mathbf{X}(t) = x\right) = P\left(\bigcup_{i=0}^n E_i \mid \mathbf{X}(t) = x\right) + P(E_{n+1} \mid \mathbf{X}(t) = x)$$

$$\begin{aligned}
& -P\left(\bigcup_{i=0}^n (E_i \cap E_{n+i}) | \mathbf{X}(t) = x\right) = \left[\sum_{i=1}^n P(E_i | \mathbf{X}(t) = x) + o(\Delta t) \right] \\
& + P(E_{n+1} | \mathbf{X}(t) = x) + o(\Delta t) = \sum_{i=1}^{n+1} P(E_i | \mathbf{X}(t) = x) + o(\Delta t).
\end{aligned}$$

故由归纳法知 (3.3) 式成立.

引理 2 设 $\mathbf{X}(t) = x$, $F_j, j = 1, 2, \dots, J$, 表示在 $(t, t + \Delta t]$ 内在 ΔV 中发生一次第 j 个基本反应组成的随机事件, $G_i(H_i), i = 1, \dots, n$, 分别表示在 $(t, t + \Delta t]$ 内有一 X_i 粒子由 $V - \Delta V (\Delta V)$ 进入 $\Delta V (V - \Delta V)$ 的随机事件, 则

$$P(F_j | \mathbf{X}(t) = x) = \lambda_j C_j \binom{x_1}{l_{j1}} \cdots \binom{x_n}{l_{jn}} \Delta t + o(\Delta t), \quad (3.4)$$

$$P(G_i | \mathbf{X}(t) = x) = \mathcal{D}_i E[X_i(t)] \Delta t + o(\Delta t), \quad (3.5)$$

$$P(H_i | \mathbf{X}(t) = x) = \mathcal{D}_i x_i \Delta t + o(\Delta t). \quad (3.6)$$

证 由于 $\mathbf{X}_i(t) = x_i$, 所以由定理 2 前面的假设知, F_j 中所包含的特定的第 j 个反应的个数, 应该是由 x_i 个 $X_i, i = 1, \dots, n$, 粒子中取 l_{ji} 个, 由 a_i 个 $A_i, i = 1, \dots, p$, 粒子中取 m_{ji} 个的组合数, 由组合公式知这个组合数应该是

$$\binom{x_1}{l_{j1}} \cdots \binom{x_n}{l_{jn}} \binom{a_1}{m_{j1}} \cdots \binom{a_p}{m_{jp}} = C_j \binom{x_1}{l_{j1}} \cdots \binom{x_n}{l_{jn}}.$$

于是由假定 II 及引理 1 知 (3.4) 式成立.

由假定 III, IV, V 知

$$\begin{aligned}
P(G_i | \mathbf{X}(t) = x) &= D_i \frac{E[X_{i, V-\Delta V}(t)]}{V - \Delta V} \Delta t + o(\Delta t) \\
&= D_i \frac{E[X_i(t)]}{\Delta V} \Delta t + o(\Delta t) = \mathcal{D}_i E[X_i(t)] \Delta t + o(\Delta t).
\end{aligned}$$

又因 $X_i(t) = x_i$, 所以 $\rho_i(t) = x_i/\Delta V$, 从而由假定 III

$$P(H_i | \mathbf{X}(t) = x) = D_i \frac{x_i}{\Delta V} \Delta t + o(\Delta t) = \mathcal{D}_i x_i \Delta t + o(\Delta t).$$

以下证明定理 2: 任取 $\alpha \in \Lambda$, 则由引理 1 前面规定的 Λ 的意义知会发生以下三种情形: (i) 只有若干个 k_j 与 α 相等, 设 $k_{j_1} = k_{j_2} = \cdots = k_{j_m} = \alpha$; (ii) 除 $k_{j_1} = \cdots = k_{j_m} = \alpha$ 外, 还有 $e_i = \alpha$; (iii) 除 $k_{j_1} = \cdots = k_{j_m} = \alpha$ 外, 还有 $-e_i = \alpha$. 于是由引理 1, 2 知: 在情形 (i) 时,

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{X}(t + \Delta t) = x + \alpha | \mathbf{X}(t) = x) &= \sum_{h=1}^m P(F_{jh} | \mathbf{X}(t) = x) + o(\Delta t) \\
&= \sum_{h=1}^m \lambda_{jh} C_{jh} \binom{x_1}{l_{jh1}} \cdots \binom{x_n}{l_{jhn}} \Delta t + o(\Delta t);
\end{aligned} \quad (3.7)$$

在情形 (ii) 时,

$$\begin{aligned}
P(\mathbf{X}(t + \Delta t) = x + \alpha | \mathbf{X}(t) = x) &= \sum_{h=1}^m \lambda_{jh} C_{jh} \binom{x_1}{l_{jh1}} \cdots \binom{x_n}{l_{jhn}} \Delta t \\
&+ \mathcal{D}_i E[X_i(t)] \Delta t + o(\Delta t);
\end{aligned} \quad (3.8)$$

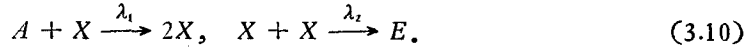
在情形 (iii) 时,

$$\begin{aligned} P(X(t + \Delta t) = x + \alpha | X(t) = x) \\ = \sum_{h=1}^m \lambda_{ih} C_{ih} \left(\begin{matrix} x_1 \\ l_{ih1} \end{matrix} \right) \cdots \left(\begin{matrix} x_n \\ l_{ihn} \end{matrix} \right) \Delta t + \mathcal{O}_i x_i \Delta t + o(\Delta t). \end{aligned} \quad (3.9)$$

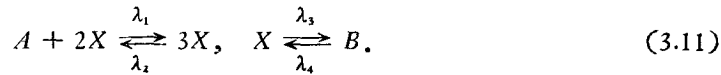
这就证明条件 (2.1) 式是成立的, 而且 $\lambda_{x, x+\alpha}$ 事实上已经求出. 将 (3.7) 至 (3.9) 式代入 (2.3) 式, 即得 (3.2) 式, 故定理 2 获证.

应用方程 (3.2) 可以直接得出各种具体模型的 NLME. 例如

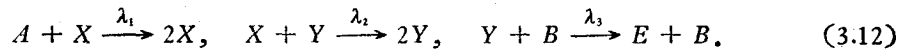
(i) 单物种自催化模型^[6]:



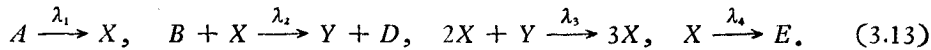
(ii) Schlögl 模型:



(iii) Volterra-Lotka 模型^[1,2,4]:

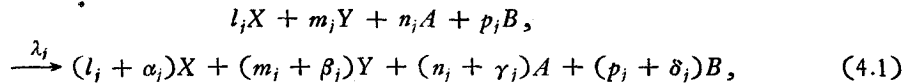


(iv) Brusselator 模型^[1,2,4]:



四、MME 的概率模型

现在考虑多元线性 Master 方程 (MME) 的概率模型. 设有一开放系统位于空间区域 V 内. 为了不致使书写过于复杂, 设所要讨论的物种只有两个, 用 X, Y 表示, 其余参加反应的也只有两个物种 A, B , 它们在 V 中所进行的基本反应共有下列 J 个:



$j = 1, \dots, J$, 其中 (α_j, β_j) 是非零整点, 且 $l_j + \alpha_j \geq 0$, $m_j + \beta_j \geq 0$, 并且有扩散运动. 设将 V 分割成 N 个两两不交的体积相同的正方形 $V_1, \dots, V_N$ (如果 V 的边界上的正方体不能全在 V 中, 则认为 V 可以扩大使之包含此种正方体). 物种 X, Y 在时刻 t 位于 V_i 中的粒子数分别记作 $X_i(t), Y_i(t)$; 并记 $\mathbf{X}(t) = (X_1(t), \dots, X_N(t))$, $\mathbf{Y}(t) = (Y_1(t), \dots, Y_N(t))$. 设物种 A, B 在 V_i 中的粒子数不变, 并分别记作 a_i, b_i .

若系统的几个特定粒子在 V 中进行一次基本反应, 或一个特定的 X 或 Y 粒子由 V_i 进入 $V_j (i \neq j)$, 则称系统发生了一次状态改变. 设我们所讨论的系统满足以下三条概率假定:

I' 在时间间隔 $(t, t + \Delta t]$ 内, 系统发生一次以上状态改变的概率是 $o(\Delta t)$;

II' 在 $(t, t + \Delta t]$ 内, 系统中几个特定粒子在 V 中进行一次第 $j (1 \leq j \leq J)$ 个基本反应的概率是 $\lambda_j \Delta t + o(\Delta t)$;

III' 在 $(t, t + \Delta t]$ 内, 一个特定的 $X(Y)$ 粒子由 V_i 进入 $V_j (i \neq j, 1 \leq i, j \leq N)$ 的概率为 $d_{ij}^x \Delta t + o(\Delta t) (d_{ij}^y \Delta t + o(\Delta t))$.

定理 3. 在上述假设下, 概率 $P(\mathbf{X}(t) = x, \mathbf{Y}(t) = y) = P(x, y, t)$, x, y 都是 N 维整点, 满足方程

$$\begin{aligned} \frac{dP(x, y, t)}{dt} = & \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \{ [d_{ij}^x(x_i + 1)P(x + e_i - e_j, y, t) - d_{ij}^x x_i P(x, y, t)] \\ & + [d_{ij}^y(y_j + 1)P(x, y + e_i - e_j, t) - d_{ij}^y y_j P(x, y, t)] \} \\ & + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^J \lambda_j \binom{a_i}{n_j} \binom{b_i}{p_j} \left[\binom{x_i - \alpha_i}{l_j} \binom{y_i - \beta_j}{m_j} P(x - \alpha_i \cdot e_i, \right. \\ & \left. y - \beta_j \cdot e_j, t) - \binom{x_i}{l_j} \binom{y_i}{m_j} P(x, y, t) \right]. \end{aligned} \quad (4.2)$$

证. 证法与定理 2 的类似. 仍然是应用定理 1, 不过在此用 $2N$ 维向量过程 $(\mathbf{X}(t), \mathbf{Y}(t))$ 代替定理 1 及引理 1 中的 $\mathbf{X}(t)$. 设 Λ 是系统在 V 中经过一次状态改变 $(\mathbf{X}(t), \mathbf{Y}(t))$ 所可能得到一切改变量组成的集合, 即 Λ 由以下三类 $2N$ 维整点组成: (i) $(\alpha_i e_i, \beta_j e_j)$, $i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, J$. 它是“在 V_i 中进行一次第 j 个反应”(这个随机事件记成 F_{ij}), $(\mathbf{X}(t), \mathbf{Y}(t))$ 的改变量; (ii) $(-e_i + e_j, 0)$, $i, j = 1, \dots, N$, 它是“ V_i 中一个 X 粒子进入 V_j ”(记成 G_{ij}^x), $(\mathbf{X}(t), \mathbf{Y}(t))$ 的改变量; (iii) $(0, -e_i + e_j)$, $i, j = 1, \dots, N$, 它是“ V_i 中一个 Y 粒子进入 V_j ”(记成 G_{ij}^y), $(\mathbf{X}(t), \mathbf{Y}(t))$ 的改变量. 于是, 由假定 I' 易见(2.2)式成立. 其次按照证明引理 2 一样的方法, 应用引理 1 及假定 II', 可以得到: 在 $(t, t + \Delta t]$ 内,

$$P(F_{ij} | \mathbf{X}(t) = x, \mathbf{Y}(t) = y) = \lambda_j \binom{a_i}{n_j} \binom{b_i}{p_j} \binom{x_i}{l_j} \binom{y_j}{m_j} \Delta t + o(\Delta t), \quad (4.3)$$

$$P(G_{ij}^x | \mathbf{X}(t) = x, \mathbf{Y}(t) = y) = d_{ij}^x x_i \Delta t + o(\Delta t), \quad (4.4)$$

$$P(G_{ij}^y | \mathbf{X}(t) = x, \mathbf{Y}(t) = y) = d_{ij}^y y_j \Delta t + o(\Delta t), \quad (4.5)$$

(这相当于定理 2 的证明中引理 2 的内容). 然后象证明 (3.7)–(3.9) 式一样, 应用引理 1 及 (4.3)–(4.5) 式可以证明: 对任何 $(\alpha, \beta) \in \Lambda$, 则当 $P(x, y, t) > 0$ 时, 有 $\lambda_{(x,y),(x+\alpha,y+\beta)}$ (可以分情形明显写出) 使

$$P(\mathbf{X}(t + \Delta t) = x + \alpha, \mathbf{Y}(t) = y + \beta | \mathbf{X}(t) = x,$$

$$\mathbf{Y}(t) = y) = \lambda_{(x,y),(x+\alpha,y+\beta)} \cdot \Delta t + o(\Delta t),$$

即定理 1 的 (2.2) 式满足. 将 $\lambda_{(x,y),(x+\alpha,y+\beta)}$ 的明显表达式代入与 (2.3) 式的相应方程 (即将 (2.3) 式中的 x 换 (x, y) , $x - \alpha$ 换成 $(x - \alpha, y - \beta)$, α 换 (α, β)), 即得 (4.2) 式.

例 由定理 3 立刻得到 Brusselator 模型 (3.14) 式的 MME 如下:

$$\begin{aligned} \frac{dP(x, y, t)}{dt} = & \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \{ [d_{ij}^x(x_i + 1)P(x + e_i - e_j, y, t) - d_{ij}^x x_i P(x, y, t)] \\ & + [d_{ij}^y(y_j + 1)P(x, y + e_i - e_j, t) - d_{ij}^y y_j P(x, y, t)] \} \\ & + \sum_{i=1}^N \left\{ \lambda_1 a_i [P(x - e_i, y, t) - P(x, y, t)] + \lambda_2 b_i [(x_i + 1) \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times P(x + e_i, y - e_i, t) - x_i P(x, y, t)] + \lambda_3 \left[\binom{x_i - 1}{2} \right. \\
& \times (y_i + 1) P(x - e_i, y + e_i, t) - \binom{x_i}{2} y_i P(x, y, t) \left. \right] \\
& + \lambda_4 [(x_i + 1) P(x + e_i, y, t) - x_i P(x, y, t)] \Big\}. \quad (4.6)
\end{aligned}$$

这便是文献[5]中提出的方程.

同样可以得到其他具体模型的 MME.

五、Master 方程与宏观动力学方程的比较

概率模型正确与否的检验,从根本上来说,应该是以能否正确反映现实的物理、化学、生物系统为标准. 但是从 Master 方程出发,求出粒子数的数学期望所满足的微分方程,比较它与相应的宏观动力学方程的异同,也可以得到一些说明.

为了求粒子数的数学期望所满足的方程,先证明

引理 3 设 $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ 是 n 维整点, $l = (l_1, \dots, l_n)$ 是非负整点,且

$$\alpha_i \leq l_i, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

则

$$\begin{aligned}
& \sum_x x_j \binom{x_1 + \alpha_1}{l_1} \cdots \binom{x_n + \alpha_n}{l_n} P(x + \alpha, t) \\
& = E \left[(X_j(t) - \alpha_j) \binom{X_1(t)}{l_1} \cdots \binom{X_n(t)}{l_n} \right], \quad (5.1)
\end{aligned}$$

其中 $\sum_x$ 中的 $x = (x_1, \dots, x_n)$ 遍历一切 n 维非负整点, i 可以是 $1, 2, \dots, n$ 中任何一数.

证 对 (5.1) 式左边作变量代换 $y_i = x_i + \alpha_i, i = 1, \dots, n$, 得到

$$\sum_{\substack{y_i = \alpha_i \\ i=1, \dots, n}}^{\infty} (y_j - \alpha_j) \binom{y_1}{l_1} \cdots \binom{y_n}{l_n} P(y, t) = S \quad (\text{记})$$

注意若 y 有一坐标 < 0 , 则 $P(y, t) = 0$; 而当 $l_i > y_i$ 时, $\binom{y_i}{l_i} = 0$. 所以在 $\alpha_i \leq l_i$ 的条件下,

$$\begin{aligned}
S &= \sum_{\substack{y_i=0 \\ i=1, \dots, n}}^{\infty} (y_j - \alpha_j) \binom{y_1}{l_1} \cdots \binom{y_n}{l_n} P(y, t) \\
&= E \left[(X_j(t) - \alpha_j) \binom{X_1(t)}{l_1} \cdots \binom{X_n(t)}{l_n} \right].
\end{aligned}$$

(最后一步等式应用了随机变量的函数的数学期望公式.) 这就是 (5.1) 式.

定理 4 若 $P(x, t) = P(\mathbf{X}(t) = x)$ 满足 NLME (3.2) 式, 则

$$\frac{dE[X_m(t)]}{dt} = \sum_{j=1}^J \lambda_j C_j k_{jm} E \left[\binom{X_1(t)}{l_{j1}} \cdots \binom{X_n(t)}{l_{jn}} \right] \quad m = 1, 2, \dots, n. \quad (5.2)$$

证 由 (5.1) 式即得

$$\sum_x x_m P(x - e_i, t) = E[X_m(t) + \delta_{mi}], \quad (5.3)$$

$$\sum_x x_m (x_i + 1) P(x + e_i, t) = E[(X_m(t) - \delta_{mi}) X_i(t)]. \quad (5.4)$$

将方程 (3.2) 两边乘以 x_m , 并对一切 n 维非负整点 x 求和, 则由数学期望公式

$$Ef(X(t)) = \sum_x f(x) P(x, t) \quad (5.5)$$

及 (5.1), (5.3), (5.4) 式, 即得 (5.2) 式.

例 由 (3.13) 式对于 Volterra-Lotka 模型来说, (5.2) 式即为

$$\begin{cases} \frac{dE[X(t)]}{dt} = \lambda_1 a E[X(t)] - \lambda_2 E[X(t)Y(t)], \\ \frac{dE[Y(t)]}{dt} = \lambda_2 E[X(t)Y(t)] - \lambda_3 b E[Y(t)]. \end{cases}$$

而它的没有扩散项的宏观动力学方程是

$$\begin{aligned} \frac{d[X]}{dt} &= k_1[A] \cdot [X] - k_2[X][Y], \\ \frac{d[Y]}{dt} &= k_3[X] \cdot [Y] - k_3[B][Y], \end{aligned}$$

其中 $[X], [Y], [A], [B]$ 表示相应物种的浓度. 比较上述两组方程可以看出它们之间的一致性. 因为宏观地考虑系统时, 实际上认为 X, Y 的粒子在不进行反应时是独立地运动着, 反映到随机上来就是 $E[X(t)Y(t)] = E[X(t)] \cdot E[Y(t)]$. 对于别的模型也可看出两者的一致性. 因此可以认为 NLME 作为没有扩散项的宏观动力学方程的对应的随机描述工具是合适的.

另一方面, 由于 (5.2) 式没有扩散项, 所以作为反应扩散方程的随机描述工具则是不尽合适的. 其所以出现这种情况, 从它的概率模型看, 原因在于有了假定 V , 实际上它假定了无论 ΔV 在 V 中的位置如何, ΔV 中 X_i 粒子的平均数是一样的, 这就是假定了系统在 V 中的某种均匀性, 因此扩散项便消失了.

下面再求 MME 中 $E[X_m(t)], E[Y_m(t)]$ 所满足的微分方程, 这就是

定理 5 若 $P(x, y, t) = P(X(t) = x, Y(t) = y)$ 满足 MME (4.2) 式, 则

$$\begin{aligned} \frac{dE[X_m(t)]}{dt} &= \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \{d_{im}^x E[X_i(t)] - d_{mi}^x E[X_m(t)]\} \\ &\quad - \sum_{j=1}^J \lambda_j \alpha_j \binom{a_m}{n_j} \binom{b_m}{p_j} E \left[\binom{X_m(t)}{l_j} \binom{Y_m(t)}{m_j} \right], \\ \frac{dE[Y_m(t)]}{dt} &= \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \{d_{im}^y E[Y_i(t)] - d_{mi}^y E[Y_m(t)]\} \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$- \sum_{j=1}^J \lambda_j \beta_j \binom{a_m}{n_j} \binom{b_m}{p_j} E \left[\binom{X_m(t)}{l_j} \binom{Y_m(t)}{m_j} \right] \quad m = 1, 2, \dots, N. \quad (5.7)$$

证. 应用(5.1)及(5.5)式(只需将 $\mathbf{X}(t)$ 换成 $(\mathbf{X}(t), \mathbf{Y}(t))$, 将 x 换成 (x, y) 即可)直接计算, 即可得出.

(5.6), (5.7) 式右边的第二项与反应项对应, 由前面的分析可以认为反应的宏观动力学方程的项是一致的, 右边的第一项是差分形给出的扩散项, 因为由假定 III' 知

$$\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N d_{im}^Z E[Z_i(t)]$$

表示从 V_m 外面的 Z 物种粒子在时刻 t 单位时间内进入 V_m 的平均个数, 而

$$\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N d_{mi}^Z E[Z_m(t)]$$

表示 V_m 中 Z 粒子在时刻 t 单位时间内进入 V_m 外面的平均个数.

如果还设

$$d_{ij}^Z = \begin{cases} d^Z & \text{当 } V_i, V_j \text{ 相邻,} \\ 0 & \text{其它,} \end{cases} \quad Z \text{ 表 } x \text{ 或 } y, \quad (5.8)$$

$$\lim_{V_m \rightarrow r} \frac{E[Z_m(t)]}{V_m} = \rho_Z(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{r} = (r_1, r_2, r_3). \quad (5.9)$$

再设 V_m 为边长为 l 的正方形, $e_1 = (1, 0, 0)$, $e_2 = (0, 1, 0)$, $e_3 = (0, 0, 1)$. 于是在假设(5.8)及(5.9)式下,

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq m}}^N \{d_{im}^Z E[Z_i(t)] - d_{mi}^Z E[Z_m(t)]\} &= \sum_{i=1}^3 d^Z \int_{V_m} [\rho_Z(\mathbf{r} + l e_i, t) \\ &\quad - 2\rho_Z(\mathbf{r}, t) + \rho_Z(\mathbf{r} - l e_i, t)] d\mathbf{r} \doteq \sum_{i=1}^3 d^Z l^2 \int_{V_m} \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} \rho_Z(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \\ &= \sum_{i=1}^3 d^Z l^2 \int_{V_m} \nabla^2 \rho_Z(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \quad (l \ll 1), \end{aligned} \quad (5.10)$$

其中

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3^2}$$

为拉普拉斯算子. 于是(5.6), (5.7) 式右边的第一项就更接近于反应扩散方程的扩散项了. 因此作为模型来说, 讨论 MME 更为合理一些.

六、Brusselator 的空间耗散结构解释

称 $2N$ 元函数

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{s}, t) = \sum_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} r_1^{x_1} \cdots r_N^{x_N} s_1^{y_1} \cdots s_N^{y_N} NP(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \quad (6.1)$$

(其中 $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ 遍历一切 N 维非负整点, $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_N)$, $\mathbf{s} = (s_1, \dots, s_N)$ 为 N 维空间的

向量) 为分布 $P(x, y, t)$ 的母函数. 不难算出: 对应于 Brusselator 的 MME (4.6) 式, 它的概率分布 $P(x, y, t)$ 的母函数 F 满足方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial t} = & \sum_{i,j=1}^N \left[d_{ij}^x(r_j - r_i) \frac{\partial F}{\partial r_i} + d_{ij}^y(s_j - s_i) \frac{\partial F}{\partial s_i} \right] + \sum_{i=1}^N \left\{ \lambda_1 a_i (r_i - 1) F \right. \\ & \left. + [\lambda_2 b_i (s_i - r_i) + \lambda_4 (1 - r_i)] \frac{\partial F}{\partial r_i} + \lambda_3 (r_i - s_i) r_i^2 \frac{\partial^3 F}{\partial r_i^2 \partial s_i} \right\}. \end{aligned} \quad (6.2)$$

再定义累积量母函数

$$\phi(r, s, t) = \frac{1}{M} \ln F(r, s, t), \quad M = \frac{1}{\Delta V}, \quad (6.3)$$

其中 ΔV 是 V_i 的体积. 再设 $K_1 = \lambda_1 a_i / M$ (设 K_1 与 i 无关), $K_{2i} = \lambda_2 b_i$, $K_3 = \lambda_3 M^2$, $K_4 = \lambda_4$. 则方程 (6.2) 转化成

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} = & \sum_{i,j=1}^N \left[d_{ij}^x(r_j - r_i) \frac{\partial \phi}{\partial r_i} + d_{ij}^y(s_j - s_i) \frac{\partial \phi}{\partial s_i} \right] + \sum_{i=1}^N \left\{ K_1 (r_i - 1) \right. \\ & + [K_{2i} (s_i - r_i) + K_4 (1 - r_i)] \frac{\partial \phi}{\partial r_i} + K_3 (r_i - s_i) r_i^2 \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial r_i} \right)^2 \frac{\partial \phi}{\partial s_i} \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{M} \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_i^2} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial s_i} + \frac{2}{M} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial r_i} \cdot \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_i \partial s_i} + \frac{1}{M^2} \frac{\partial^3 \phi}{\partial r_i^2 \partial s_i} \right] \right\}. \end{aligned}$$

当 ΔV 足够小 (即 M 足够大), 由上式可以看出 ϕ 的高阶导数可以忽略. 于是得到

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} = & \sum_{i,j=1}^N \left\{ d_{ij}^x(r_j - r_i) \frac{\partial \phi}{\partial r_i} + d_{ij}^y(s_j - s_i) \frac{\partial \phi}{\partial s_i} \right\} + \sum_{i=1}^N \left\{ K_1 (r_i - 1) \right. \\ & \left. + [K_{2i} (s_i - r_i) + K_4 (1 - r_i)] \frac{\partial \phi}{\partial r_i} + K_3 (r_i - s_i) r_i^2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial r_i} \right)^2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial s_i} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (6.4)$$

另一方面, 容易看出: 当 $r_i = s_i = 1, i = 1, \dots, N$ 时, $\phi(r, s, t) = 0$, 于是令

$$r_i = \xi_i + 1, \quad s_i = \eta_i + 1,$$

则可设

$$\begin{aligned} \phi(r, s, t) = & \sum_{i=1}^N a_i^{(1)} \xi_i + \sum_{i=1}^N a_i^{(2)} \eta_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (b_{ij}^{(11)} \xi_i \xi_j + b_{ij}^{(12)} \xi_i \eta_j \\ & + b_{ij}^{(21)} \xi_j \eta_i + b_{ij}^{(22)} \eta_i \eta_j) + \dots. \end{aligned} \quad (6.5)$$

由 (6.5), (6.3), (6.1) 及 (5.5) 式不难算出

$$a_m^{(1)} = \frac{1}{M} E[X_m(t)], \quad a_m^{(2)} = \frac{1}{M} E[Y_m(t)],$$

$$b_{mm}^{(11)} = \frac{1}{M} (D[X_m(t)] - E[X_m(t)]),$$

$$b_{im}^{(11)} = b_{mi}^{(11)} = \frac{1}{M} \text{cov}(X_i(t), X_m(t)),$$

$$b_{mm}^{(22)} = \frac{1}{M} (D[Y_m(t)] - E[Y_m(t)]),$$

$$\begin{aligned}
b_{im}^{(22)} &= b_{mi}^{(22)} = \frac{1}{M} \text{cov}(Y_i(t), Y_m(t)), \\
b_{im}^{(12)} &= b_{mi}^{(21)} = \frac{1}{M} \text{cov}(X_i(t), Y_m(t)), \\
b_{im}^{(21)} &= b_{mi}^{(12)} = \frac{1}{M} \text{cov}(X_m(t), Y_i(t)) \quad i \neq m, i, m = 1, \dots, N,
\end{aligned} \quad (6.6)$$

其中

$$D[\xi] = E[\xi - E(\xi)]^2, \quad \text{cov}(\xi, \eta) = E(\xi - E\xi)(\eta - E\eta)$$

分别表示 ξ 的方差及 ξ, η 的相关矩。

以下设 (5.8) 式成立。将 (6.5) 式代入 (6.4) 式, 比较 $\xi_m, \eta_m, \xi_m^2, \xi_m\eta_m, \eta_m^2$ 的系数, 得方程组

$$\begin{aligned}
\frac{da_m^{(1)}}{dt} &= d^x \nabla^2 a_m^{(1)} + K_1 - (K_{2m} + K_4) a_m^{(1)} + K_3 (a_m^{(1)})^2 a_m^{(2)}, \\
\frac{da_m^{(2)}}{dt} &= d^y \nabla^2 a_m^{(2)} + K_{2m} a_m^{(1)} - K_3 (a_m^{(1)})^2 a_m^{(2)}.
\end{aligned} \quad (6.7)$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{db_{mm}^{(11)}}{dt} &= d^x \nabla^2 b_{mm}^{(11)} - (K_{2m} + K_4) b_{mm}^{(11)} + K_3 [2(a_m^{(1)})^2 a_m^{(2)} \\
&\quad + 2a_m^{(1)} a_m^{(2)} b_{mm}^{(11)} + (a_m^{(1)})^2 b_{mm}^{(12)}], \\
\frac{db_{mm}^{(12)}}{dt} &= d^x \nabla^2 b_{mm}^{(12)} + d^y \nabla^2 b_{mm}^{(12)} - (K_{2m} + K_4) b_{mm}^{(12)} + K_{2m} b_{mm}^{(11)} \\
&\quad + K_3 [-2(a_m^{(1)})^2 a_m^{(2)} + 2a_m^{(1)} a_m^{(2)} (b_{mm}^{(12)} - b_{mm}^{(11)}) \\
&\quad + (a_m^{(1)})^2 (b_{mm}^{(22)} - b_{mm}^{(12)})], \\
\frac{1}{2} \frac{db_{mm}^{(22)}}{dt} &= d^y \nabla^2 b_{mm}^{(22)} + K_{2m} b_{mm}^{(12)} - K_3 [2a_m^{(1)} a_m^{(2)} + (a_m^{(1)})^2 b_{mm}^{(22)}],
\end{aligned} \quad (6.8)$$

其中

$$\begin{aligned}
\nabla^2 a_m^{(l)} &= \sum_i' (a_i^{(l)} - a_m^{(l)}), \quad \nabla^2 b_{mm}^{(ll)} = \sum_i' (b_{mi}^{(ll)} - b_{mm}^{(ll)}), \quad l = 1, 2, \\
\nabla^2 b_{mm}^{(12)} &= \sum_i' (b_{im}^{(12)} - b_{mm}^{(12)}), \quad \nabla^2 b_{mm}^{(22)} = \sum_i' (b_{mi}^{(22)} - b_{mm}^{(22)}).
\end{aligned}$$

上述和式 $\sum_i'$ 中的 i 遍历与 V_m 相邻的 V_i 的足码 i , 一共六项。由 (5.10) 式的推导可以看出它相当于拉普拉斯算子的差分形式, 所以借用符号 ∇^2 , 下同此。

容易看出: 若 K_{2i} 满足

$$\nabla^2 K_{2m} = 0, \quad m = 1, 2, \dots, N, \quad (6.9)$$

则

$$a_m^{(1)} = K_1/K_4, \quad a_m^{(2)} = K_{2m}K_4/(K_1 \cdot K_3) \quad (6.10)$$

是 (6.7) 式的定态解。现在来考虑: 在定态解 (6.10) 式下, 当 $t \rightarrow \infty$ 时, $b_{mm}^{(il)}$ 的性态。为此, 将 (6.10) 式代入 (6.8) 式, 并且假定

$$d^x \nabla^2 b_{mm}^{(1l)} = -\mathcal{D}_{xm} b_{mm}^{(1l)}, \quad d^y \nabla^2 b_{mm}^{(2l)} = -\mathcal{D}_{ym} b_{mm}^{(2l)}, \quad l = 1, 2 \quad (6.11)$$

则得到 $b_{mm}^{(ij)}$ 所满足的方程组(记成矩阵形式)

$$\frac{d\mathbf{b}_m}{dt} = A_m \mathbf{b}_m + \mathbf{c}_m \quad m = 1, 2, \dots, N, \quad (6.12)^{1)}$$

其中

$$\mathbf{b}_m = \begin{pmatrix} b_{mm}^{(11)} \\ b_{mm}^{(12)} \\ b_{mm}^{(22)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}_m = \begin{pmatrix} 4K_1K_{2m}/K_4 \\ 2K_1K_{2m}/K_4 \\ 0 \end{pmatrix};$$

$$A_m = \begin{pmatrix} 2(K_{2m}-K_4)-2\mathcal{D}_{xm} & 2\left(\frac{K_1}{K_4}\right)^2 K_3 & 0 \\ -K_{2m} & K_{2m}-K_4-\left(\frac{K_1}{K_4}\right)^2 K_3-\mathcal{D}_{xm}-\mathcal{D}_{ym} & \left(\frac{K_1}{K_4}\right)^2 K_3 \\ 0 & -2K_{2m} & -2\left(\frac{K_1}{K_4}\right)^2 K_3-2\mathcal{D}_{ym} \end{pmatrix}.$$

方阵 A_m 的特征方程 $|A_m - \omega I| = 0$ 是

$$\omega^3 - 3\Delta_m \omega^2 + (3\Delta_m^2 - \delta_m^2)\omega - (\Delta_m^3 - \Delta_m \delta_m^2) = 0,$$

其中

$$\Delta_m = K_{2m} - K_4 - \left(\frac{K_1}{K_4}\right)^2 K_3 - \mathcal{D}_{xm} - \mathcal{D}_{ym}, \quad (6.13)$$

$$\delta_m^2 = \Delta_m^2 - 4 \left[\mathcal{D}_{xm} \mathcal{D}_{ym} - K_{2m} \mathcal{D}_{ym} + K_4 \mathcal{D}_{ym} + K_4 \left(\frac{K_1}{K_4}\right)^2 K_3 + \mathcal{D}_{xm} \left(\frac{K_1}{K_4}\right)^2 \cdot K_3 \right],$$

它的三个特征根(本征值)是

$$\omega_1 = \Delta_m, \quad \omega_+ = \Delta_m + \delta_m, \quad \omega_- = \Delta_m - \delta_m. \quad (6.14)$$

设其相应的特征向量为 $\boldsymbol{\varphi}_{m1}, \boldsymbol{\varphi}_{m+}, \boldsymbol{\varphi}_{m-}$, 则由微分方程的理论知, (6.12) 式的通解为

$$\mathbf{b}_m(t) = -A_m^{-1} \mathbf{c}_m + c_1 \boldsymbol{\varphi}_{m1} e^{\omega_1 t} + c_2 \boldsymbol{\varphi}_{m+} e^{\omega_+ t} + c_3 \boldsymbol{\varphi}_{m-} e^{\omega_- t}. \quad (6.15)$$

最后, 由 (6.14), (6.15) 式知, 若

$$\Delta_m < 0, \quad \Delta_m^2 - \delta_m^2 > 0, \quad (6.16)$$

则当 $t \rightarrow \infty$ 时, $\mathbf{b}_m(t) \rightarrow -A_m^{-1} \mathbf{c}_m$, 否则 $\mathbf{b}_m(t)$ 的分量必有趋于无穷大者. 事实上, 若 (6.16) 式成立, 则 $\omega_1 = \Delta_m < 0$, $\omega_{\pm} = \Delta_m \pm \delta_m < 0$.

由 (6.6) 式知, $b_{mm}^{(ij)}(t)$ 可以表示 V_m 中系统随时间 t 的涨落. 而 $\mathbf{b}_m$ 越大, 说明在 V_m 中涨落越大, 即微观粒子数起伏越大. 显示不出稳定的倾向, 宏观现象也就越弱; 反之, $\mathbf{b}_m$ 越小就越有稳定倾向, 呈现出宏观效应. 所以上述结论说明: 如果条件 (6.16) 式在某些 V_m 中不满足, 经过一段时间以后, 则原来的定态解所表现的宏观现象减弱, 有可能在混乱的背景上出现新的有序结构. 因此某些开放系统, 如果能通过与外界交换能量与物质而使某些区域中的有关参数稳定地不满足条件 (6), 则在这些区域中有可能出现新的有序结构. 这也许可以作为耗散结构出现的一个粗浅解释.

在本文写作过程中, 北京师范大学量子力学小组及数学系概率论教研组的同志参加了讨论, 特别是

1) 在假定 (6.11) 式下, 得到 V_m 中的方程 (6.12) 与文献 [4] 中 ΔV 中的方程是一致的. 因此此处的讨论可以认为是文献 [4] 的推广.

刘若庄、方福康同志提出了一些宝贵的意见。长沙铁道学院侯振挺同志也参加了讨论。作者在此表示感谢。

参 考 文 献

- [1] G. Nicolis and I. Prigogine, (1977) *Self-organization in Non-equilibrium Systems*.
- [2] 方福康, 耗散结构简介, 1978 年统计物理会议综述报告.
- [3] M. Malek-Mansour and G. Nicolis, *J. Stat. Phys.*, **13**(1975), 197.
- [4] G. Nicolis, M. Malek-Mansour, A. Van Nypelseer and K. Kitahara, *J. Stat. Phys.*, **14** (1976), 417.
- [5] S. Chaturvedi, C. W. Gardiner, I. S. Matheson and D. F. Walls, *J. Stat. Phys.*, **17**(1977), 469.
- [6] W. Horsthemke, M. Malek-Mansour and B. Hayez, *J. Stat. Phys.*, **16**(1977), 201.

THE STOCHASTIC MODELS FOR NON-EQUILIBRIUM SYSTEMS AND FORMULATION OF MASTER EQUATIONS

YAN SHI-TIAN

(Research group of quantum-mechanics, Peking Normal University)

LI ZHAN-BING

(Department of Mathematics, Peking Normal University)

ABSTRACT

In this paper we present clearly a set of postulates on probabilities which are the basis of the nonlinear master equations and multivariate linear master equations appeared in non-equilibrium statistical physics. By using the methods of probability theory, we deduced these master equations from our general postulates. We further discussed the conditions under which the master equations are consistent with the macroscopic kinetic equations. Finally, we discussed the fluctuation in Brusselator model using multivariate linear master equation approach and made a preliminary explanation on the appearance of dissipative structure through fluctuation.