

非线性漂移的 Fokker-Planck 方程的非定态解

胡 岗

(北京师范大学物理系)

1983 年 12 月 2 日收到

提 要

本文用格林函数方法讨论 Fokker-Planck 方程的非定态问题, 将标度理论的“标度区”和“最终时区”统一考虑。在标度理论的头两个时区, 所得结果与标度理论的解一致。当 $t \rightarrow \infty$ 时, 所得的非定态解趋于 Fokker-Planck 方程的定态解, 解决了标度区分布函数在稳定点发散的问题, 避免了“标度区”和“最终时区”对接的困难。

一

处于非平衡态的物理、化学系统的随机性质经常用具有非线性漂移的 Fokker-Planck 方程(简称 F-P) 来描述^[1-3]。研究这类方程的近似方法有 $\mathcal{Q}$ 展开, W-K-B 法, 变分法以及标度理论等。其中标度理论被认为是研究初态处于不稳定点附近的系统时间演化的有代表性的方法。标度理论把时间分为三段, 对每段区域采用不同近似, 从而在各个阶段把方程简化为可解形式, 然后通过各区间解的对接给出统一的时间过程。这个理论对中间区段即所谓“标度区”获得成功。但最终时区的讨论以及后两区段的对接始终未能得到令人信服的结果^[1,2]。

本文提出解决具有非线性漂移的 F-P 方程时间问题的新方法。这种方法的基本点在于把不稳定点附近的线性近似与格林函数的 $\mathcal{Q}$ 展开理论结合使用, 从而把所谓“标度区”和“最终时区”的演化过程统一处理。既解决了 $\mathcal{Q}$ 展开理论应用于不稳定点附近系统所遇到的方差发散的困难, 也避免了标度理论后两时区对接的难题。

二

所用的模型是最简单的具有双峰势的 F-P 方程,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} [(x - x^3)P(x, t)] + \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t). \quad (1)$$

类似的方程多次出现在文献上^[1,2,4]。相应的决定性方程有如下三个定态解:

$$x = 0, x = \pm 1. \quad (2)$$

$x = 0$ 为不稳定点, $x = \pm 1$ 为稳定解. ε^{-1} 是标志体积的量. 标度理论适用在

$$\varepsilon \rightarrow 0, t \rightarrow \infty, \varepsilon e^{2t} \text{ 有限} \quad (3)$$

的条件下. 这一条件符合大多数具有实际意义的物理、化学系统, 在本文采取的近似中也起关键作用.

当系统的初态离不稳定点 $x = 0$ 较远时, $\mathcal{Q}$ 展开是一种很好的近似. 假设初始 x 的平均值为 y_0 , 初始涨落为 $\varepsilon\sigma_0$, 在以后分布函数随时间的演化为^[2,1]

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon\sigma(t)}} \exp\left[-\frac{[x - y(t)]^2}{2\varepsilon\sigma(t)}\right], \quad (4a)$$

其中

$$y(t) = y(t) - y(t)^3, \quad (4b)$$

$$\sigma(t) = \sigma_0 \left\{ \frac{y(t) - [y(t)]^3}{y_0 - y_0^3} \right\}^2 + \{y(t) - [y(t)]^3\}^2 \int_{y_0}^{y(t)} \frac{2du}{(u - u^3)^3}. \quad (5)$$

当 $\sigma_0 = 0$ 时, (4a) 式可以看成分布为 $\delta(x - y_0)$ 的格林函数. 只要 $\sigma(t)$ 不发散到 ε^{-1} 的级别, 涨落 $\varepsilon\sigma(t)$ 就不会显著影响平均值, 上述的 $\mathcal{Q}$ 展开就可近似成立. 但初始的 y_0 越小, 近似程度就越差, 当

$$y_0 \ll 1 \quad (6)$$

时, $\sigma(t)$ 的最大值近似为^[2]

$$\sigma_{\max}(t) \approx \frac{1}{y_0^2}. \quad (7)$$

所以当

$$y_0 \approx \sqrt{\varepsilon} \quad (8)$$

时, $\sigma_{\max}(t)$ 将达到 ε^{-1} 级别, 那么各阶矩的偶合就不能略去, $\mathcal{Q}$ 展开也将失效. 当我们感兴趣于从不稳定点或其近邻地区出发的系统的演化时, $\mathcal{Q}$ 展开就不能简单使用.

但当 y_0 十分接近于 $x = 0$ 时, F-P 方程作为整体来讨论却可以大大简化, 因为这时

$$x^2 \ll x. \quad (9)$$

原 F-P 方程的漂移项可线性化, 其解可直接写为

$$P_{\text{in}}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon\sigma(t)}} \exp\left[-\frac{x^2}{2\varepsilon\sigma(t)}\right], \quad (10)$$

$$\sigma(t) = e^{2t} - 1. \quad (11)$$

在这里假设了初始分布为

$$P(x, 0) = \delta(x). \quad (12)$$

(4—5) 式是 $\mathcal{Q}$ 展开的结果, 而 (10—12) 式则是 Suzuki 的标度理论的初始阶段, 我们扼要叙述这些公式为便于下面的分析和引用.

当 $t > 0$ 时, 在 $x = 0$ 附近分布函数的最大密度为

$$\rho = \frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon(e^{2t} - 1)}}, \quad (13)$$

只要 $t \gg 1$, 就有

$$\rho \ll \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}. \quad (14)$$

那么在 $x = 0$ 的 $\sqrt{\varepsilon}$ 邻域内几率分布的总值接近于 0, 即绝大部分几率都已分布在不稳定区以外. 我们把初始区的时间界线定为 t_s , 它需满足

$$\varepsilon^{-1} \gg e^{2t_s} \gg 1. \quad (15)$$

既然 ε 很小, t_s 在很大范围内满足(15)式. 值得指出的是, 尽管标度理论一直强调时间的三个分段, 但初始阶段的确切时间要求始终没有给出, 这也是标度理论经常受到批评的原因之一^[4]. 下一节我们将给出 t_s 的具体值, 要求是在 t_s 时刻系统的绝大部分几率已溢出不稳定区, 而线性漂移近似依然成立.

初始阶段后系统如何演化? 标度理论建议在第二时区(标度区)略去随机力, 用决定性方程

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [(x - x^3)P(x, t)] \quad (16)$$

代替 F-P 方程(1). 这个近似使计算大为简化, 并在这一时区定性行为和定量关系都与原方程很接近. 但它存在不少问题, 最突出的是当 $t \rightarrow \infty$ 时, 分布函数趋于两个以 $x = \pm 1$ 为峰的 delta 函数, 而不是方程(1)的定态分布. 为了解决这一问题, 标度理论又分出时间演化的第三阶段, 在标度区后再把随机力重新引入. 事实上, 这种做法无论在物理概念和数学处理上都是很含糊的, 它所带来的问题将在下一节中具体论述.

既然在 $t > t_s$ 后, 绝大部分几率已离开了不稳定区, 是否可以简单地使用 $\mathcal{Q}$ 展开呢? 回答是否定的. 正如 Van Kampen 所断言^[4], 整个分布的涨落必将继续长大, 直到宏观量级, 各级矩方程绝不会互相独立, 自治场理论是不可能正确反应线性区以后的系统特征, 例如它不能说明分布函数是如何从单峰变为双峰这一本质现象的.

为了避免以上各理论的困难而寻找一条合理又简捷的途径, 我们分析方程(4), (10)和(13). 注意到以下几个特点:

1. 当 $t > t_s$ 时, 系统绝大多数几率已溢出了不稳定区. 从(4)和(5)式可以看出, 只要初始涨落 $\varepsilon\sigma_0$ 为 ε 级别, 在不稳定区外, $\mathcal{Q}$ 展开总是很好的近似.

2. $t = 0$ 时为 $\delta(x)$ 分布的系统, 到 $t > t_s$ 后, 虽然绝大部分几率已在不稳定区以外但仍然不能用 $\mathcal{Q}$ 展开理论. 原因是在 t_s 时刻 $P(x, t_s)$ 分布在 $x = 0$ 的势垒两侧. 而决定性方程(16)决定了这种分布随时刻必然色散. 正是这种决定性的色散现象导致了涨落的发散. 所以在 $t > t_s$ 后涨落的发散本质上不是由于在这时区的随机力的作用, 而是由 t_s 时刻的初始分布和决定性方程(即漂移力)所造成. 这一点和第一阶段绝然不同.

3. F-P 方程(1)是分布函数的线性方程, 可以应用格林函数方法. 由于 delta 分布的初始涨落为零, 所以在不稳定区以外用 $\mathcal{Q}$ 展开理论求方程(1)的格林函数是很好的近似, 这些 delta 分布的涨落都不会发散到宏观量级. 在 $t > t_s$ 时, 把这些格林函数以 $P_{in}(x, t_s)$ 为权重取和就得到整个非定态过程的解. 几率束的色散效应导致的涨落发散自然体现在格林函数取和的整体分布中.

结合初始 ($t_0 = t_s$) 分布(10)式和格林函数(4)式 ($\sigma_0 = 0$), 方程(1)的解可写成

$$P(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon\sigma(t)}} \exp\left[-\frac{[x - y(t)]^2}{2\varepsilon\sigma(t)}\right] \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon e^{2t_s}}} \exp\left[-\frac{u^2}{2\varepsilon e^{2t_s}}\right] du. \quad (17)$$

从(4b)式解得

$$y(t) = \frac{ue^{(t-t_s)}}{\sqrt{1-u^2+u^2e^{2(t-t_s)}}}. \quad (18)$$

$\sigma(t)$ 由(5)式给出,其中 $\sigma_0 = 0$, $y_0 = y(t_s) = u$. (17)式当然给出 $t > t_s$ 的解. 在 $t < t_s$ 时,方程(1)的解简单的由(10)式给出,以后只讨论 $t > t_s$ 时的解.

三

为了更方便的讨论各时间阶段的演化特点,我们用标度化的时间把(17)式化为

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int \frac{1}{\sqrt{\epsilon\sigma(\tau)}} e^{-\frac{[x-y(\tau)]^2}{2\epsilon\sigma(\tau)}} \cdot e^{-\frac{V^2}{2}} dV, \quad (19)$$

$$y(\tau) \approx \frac{V\tau}{\sqrt{1+V^2\tau^2}},$$

$$\sigma(\tau) \approx y(\tau)^2[1-y(\tau)^2]^2 \left\{ \frac{1}{\epsilon V^2 e^{2t_s}} - \frac{1}{y(\tau)^2} + \frac{1}{8} \frac{1}{[1-y(\tau)]^2} + \frac{1}{8} \frac{1}{[1+y(\tau)]^2} \right\}. \quad (20)$$

这里标度时间为

$$\tau = \sqrt{\epsilon} e^{t_s}, \quad (21a)$$

而

$$V = \frac{u}{\sqrt{\epsilon} e^{t_s}}. \quad (21b)$$

在 $y(\tau)$ 和 $\sigma(\tau)$ 中略去一些项. 这些项在时间过程中永远处于次要项的地位.

整个(19),(20)式只是标度时间 τ 的函数. 在 $\sigma(\tau)$ 表示式的第二个括号中,有一项含有 t_s . 似乎在线性区中对接时间 t_s 的选择会影响后来的结果. 实际上, 由于 $e^{t_s} \gg 1$, 含 t_s 的因子在积分中会自行消去,这在下面讨论中会明显看出.

现在可根据(19)–(20)式对各时间段内分布函数的演化特征进行讨论.

1. $\tau \ll 1$

这时系统处于线性区,绝大部分几率仍处于 $x = 0$ 附近,在积分(17)式中仅当 u 很小时被积函数才对积分有较大贡献(在(19)式中仅在 V 有限时被积函数才对积分有贡献,当 V 很大时 $e^{-\frac{V^2}{2}}$ 因子很快趋于零). 这样(20)式右端 $\sigma(\tau)$ 的最后大括号中只有第一项是主要的,可以得到

$$\begin{aligned} y(\tau) &= V\tau \ll 1, \\ \sigma(\tau) &= \tau^2 \epsilon^{-1} e^{-2t_s}. \end{aligned} \quad (22)$$

(19)式对 V 积分得出

$$P(x, \tau) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi[\tau^2 + \epsilon\sigma(\tau)]}} \exp\left[-\frac{x^2}{2[\tau^2 + \epsilon\sigma(\tau)]}\right].$$

考虑(15)式,上式变为

$$P(x, \tau) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau^2}} e^{-\frac{x^2}{2\tau^2}}. \quad (23)$$

这正是在 $t > t_s$ 后的线性区内,在标度时刻 τ 的分布函数,这个分布的确与 t_s 无关.从中可以得出结论:只要 $e^{t_s} \gg 1$, t_s 的具体选择不会对(19)式的主要项产生影响.(23)式告诉我们,只要绝大部分几率溢出不稳定区,即使在初始阶段的线性区,格林函数的 Q 展开已经很好地代表了实际过程.当随着 t 增大而系统进入非线性区后,系统离不稳定点越来越远,可以很自然的断言,这时 Q 展开会更好地适用于格林函数.

所用方法的近似程度可以确切讨论.误差来源于三个方面.一是不稳定区的残留几率,它近似为

$$\sqrt{\varepsilon} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon \cdot e^{2t_s}}} \propto e^{-t_s}. \quad (24)$$

在 $t > t_s$ 时,稳定区格林函数的 Q 展开也要造成误差,这误差可由(7)和(10)式求出,它也是 e^{-t_s} 级别.第三个误差来源是第一阶段的非线性效应,它的级别为 $x^3/x = x^2$, $x \approx \sqrt{\varepsilon} e^{t_s}$. 为了得到尽可能小的误差,令

$$\varepsilon e^{2t_s} \approx e^{-t_s},$$

$$e^{-t_s} \approx \varepsilon^{\frac{1}{3}}$$

或

$$t_s = -\frac{1}{3} \ln \varepsilon. \quad (25)$$

计算结果的误差约为 $\varepsilon^{\frac{1}{3}}$. 当 $\varepsilon = 10^{-3}$ 时,精度已达到 90%,即定性上相当好的反应了客观过程在实际物理、化学系统中 ε 的值要小得多,所以在大多数情况下,上述方法在定量上也给出了很好的近似.

与此相反使用标度理论则难以估计结果的误差程度,因随机力在各时间段所占的地位难以从数学上确切描述,(1)式中的扩散项不仅与 ε 有关,而且与 $P(x, t)$ 对 x 的二阶偏导有关,即使在稳定区,略去随机力也会改变结果的性质.

(25)式给出的 t_s 反映了从第一阶段过渡到第二阶段的分界时间.在 t_s 时刻,分布函数已扩散到距中心 $\varepsilon^{\frac{1}{3}}$ 的范围内.

2. $0 < \tau < 1$

考虑 $e^{2t_s} \gg 1$, (19) 式可立即化成

$$\int \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \delta[x - y(\tau)] e^{-\frac{y^2}{2}} dV. \quad (26)$$

$y(\tau)$ 由(20)式给出.这正是标度理论的结果.在这一时间区域标度理论是很好的近似.(19)式对标度理论的(26)式给出了修正.在 $0 < \tau < 1$ 时,尽管这个修正有参考价值(计算机模拟表明,这个修正大大改进了近似程度),但修正在(25)式所给的误差范围之内,这里就不再具体讨论.

3. $\tau > 1$

当 $\tau = 1$, 即

$$t_r = -\frac{1}{2} \ln \varepsilon \quad (27)$$

时, 分布函数的前峰已达到了 $x = \pm 1$ 的稳定点. 这标志着所谓标度区的结束. 标度理论正是在这里遇到了困难.

从这时刻起一直到稳定分布的实现, 系统内始终进行着两类过程. 一方面中间部分的几率继续往两边流动, 这是所谓标度区的过程, 另一方面 $x = \pm 1$ 附近的几率峰开始形成、发展和完成, 这是所谓的非定态在“最终时区”的行为. 如何并在什么时刻把随机力重新引入方程, 且对那部分几率引入, 这在物理概念上是含糊的, 在数学处理上也是十分繁杂的^[2].

在这个区段(19)式对标度理论的(26)式的修正变得重要起来.

由于我们始终考虑随机力, 这时不存在重新引入的问题. 上面所述的过程十分简单. 对 V 的积分区可分为两部分. 对 $V = 0$ 附近的部分, 在(20)式右端大括号的第一项依然起主要作用, 而离 $V = 0$ 较远的部分, 相应于 $y(\tau) = \pm 1$, 大括号中后两项就成为主要项了. 在这两区域中有一过渡带, 由于 ε 很小, 过渡带很狭. 随时间的发展, 过渡带越来越向中间靠拢, 当 $\tau \approx \varepsilon^{-\frac{1}{2}}$, 即

$$t_f = -\frac{5}{6} \ln \varepsilon \quad (28)$$

时, 除误差范围内的极少部分外, 所有 $y(V, \tau)$ 均在 ± 1 附近, (19)和(20)式变为

$$y(\tau) = \begin{cases} +1 & V > 0; \\ -1 & V < 0, \end{cases}$$

$$\sigma(\tau) = \frac{1}{\tau}, \quad (29)$$

$$P(x, \infty) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\varepsilon}} e^{-\frac{(x-1)^2}{\varepsilon}} + \frac{1}{\sqrt{4\pi\varepsilon}} e^{-\frac{(x+1)^2}{\varepsilon}}$$

$$\approx \frac{1}{\sqrt{4\pi\varepsilon}} \exp \left[-\frac{1}{4\varepsilon} (x-1)^2 (x+1)^2 \right]. \quad (30)$$

这正是方程(1)定态分布的精确解, (30)式中后一近似在本文采取的精度范围内.

本文所提出的方法综合了 $\mathcal{Q}$ 展开和标度理论的思想. 初始阶段的线性漂移力近似和两时区的对接来源于标度理论, 而格林函数的 $\mathcal{Q}$ 展开是对传统 $\mathcal{Q}$ 展开理论的修正. 这样原 $\mathcal{Q}$ 展开的方差发散困难在这里不再出现, 而标度理论的三个时区被简化为两个时区. 标度理论的主要困难——第三时区的描述和后两时区的对接在新的方法中不存在. 当 $\tau \rightarrow \infty$ 时, 新方法自然导致了系统的定态解.

以上详细计算仅对具体方程(1), 但基本方法可立即推广到普遍的单变量 F-P 方程, 设方程为

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [c_1(x)P(x, t)] + \frac{\varepsilon}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [c_2(x)P(x, t)], \quad (31)$$

相应的决定性方程有一不稳定定态解

$$x = a$$

和两稳定定态解

$$x = b, x = c. \quad (32)$$

当初始分布为 $\delta(x - a)$ 时, 对 $t < t_s$ 我们仍可用线性近似,

$$P_{in}(x, t) = \frac{\sqrt{c'_1(a)}}{\sqrt{4\pi\varepsilon[e^{2c'_1(a)t} - 1]c_2(a)}} \exp\left[-\frac{(x-a)^2 c'_1(a)}{4\varepsilon[e^{2c'_1(a)t} - 1]c_2(a)}\right]. \quad (33)$$

当 $t > t_s$ 时

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int \frac{1}{\sqrt{\varepsilon\sigma(t)}} e^{-\frac{[x-y(t)]^2}{2\varepsilon\sigma(t)}} \cdot e^{-\frac{V^2 c'_1(a)}{4c_2(a)}} dV. \quad (34)$$

这里 $y(t)$ 和 $\sigma(t)$ 可由下列积分求出:

$$\begin{aligned} \int_{y_0}^{y(t)} \frac{dy}{c_1(y)} &= t - t_s, \\ \sigma(t) &= \{c_1[y(t)]^2\} \int_{y_0}^{y(t)} \frac{c_2(y)}{[c_1(y)]^3} dy, \end{aligned} \quad (35)$$

其中

$$y_0 = a + V \sqrt{\varepsilon} e^{c'_1(a)t_s}.$$

t_s 用(25)式类似的方法求得.

当 $c'_1(a)$, $c'_1(b)$, $c'_1(c)$ 和 $c_2(a)$ 中有一个等于零时, 系统处于某种临界状态. 尤其是当 $c_2(a) = 0$ 时, 扩散项将起与常数扩散相当不同的作用, 这时方程(31)的性质将在以后作专门讨论.

初始的 δ 分布可能在离不稳定点距离 x_0 的地方. 如 $x_0 \gg \sqrt{\varepsilon}$, 可直接用 $\mathcal{Q}$ 展开. 如 x_0 在不稳定点的 $\sqrt{\varepsilon}$ 邻域, 需用(34)式, 不同的是 V 被 $(V - \varepsilon^{-\frac{1}{2}}x_0)$ 代替.

对更一般的初始分布 $P(x, 0)$, 系统的演化可由 $\delta(x - x')$ 的演化以 $P(x', 0)$ 为权重求和处理.

作者与方福康副教授和姜璐同志对非定态问题进行过有益的讨论, 得到郝柏林教授热情的帮助, 谨此一并感谢.

参 考 文 献

- [1] M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.*, **56** (1976), 477.
- [2] M. Suzuki, *Adv. Chem. Phys.*, **46** (1981), 195.
- [3] N. G. Van Kampen, *Adv. Chem. Phys.*, **34** (1976), 245.
- [4] N. G. Van Kampen, *J. Stat. Phys.*, **17**(2) (1977), 71.
- [5] B. Caroli, C. Caroli, and B. Roulet, *J. Stat. Phys.*, **21**(1979), 415.

TIME DEPENDENT SOLUTION OF FOKKER-PLANCK EQUATION WITH NON-LINEAR DRIFT FORCE

HU GANG

(Department of Physics, Beijing Normal University)

ABSTRACT

A new approach of the Ω -expansion of the Green's function is employed to study the time dependent problem of the Fokker-Planck equation. The scaling region and the final region in the scaling theory is unified to a single region. As $t \rightarrow \infty$ the time dependent solution approaches the stationary solution of the Fokker-Planck equation. The difficulty of matching the last two time regions in the scaling theory is then avoided.