

强束缚势中 Lévy 飞行的非 Gibbs-Boltzmann 统计*

上官丹骅¹⁾²⁾ 吕 艳¹⁾ 包景东^{1)†}

1) (北京师范大学物理系, 北京 100875)

2) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

(2010 年 4 月 21 日收到; 2010 年 5 月 16 日收到修改稿)

解析和数值研究了强束缚势中 Lévy 飞行粒子的稳态分布. 结果表明: 当势从单稳态变化到双稳态时, 粒子的稳态分布呈现单模到双模或双模到三模的转换; 特别在势的鞍点处, 坐标分布密度函数出现了一个峰, 这违背了 Gibbs-Boltzmann 统计.

关键词: Lévy 白噪声, 稳态分布, 强束缚势, Gibbs-Boltzmann 统计

PACC: 0540, 6610C, 8220F

1. 引 言

传统布朗运动模型描述了宏观小粒子在气体、液体里的随机运动, 借此可以了解周围媒介的微观结构. 它有两种等价的描述方法^[1]: 1) 关于粒子轨道的朗之万方程; 2) 粒子分布密度函数随时演化的 Fokker-Planck 方程. 在朗之万方程中, 如果涨落的关联时间远小于宏观运动的时间尺度 (例如, 粒子位置和速度的关联时间) 并且粒子和热浴的相互作用足够弱, 则随机力一般假设为高斯白噪声. 因为前一个条件导致白噪声假设的成立而后一个条件使中心极限定理适用. 在高斯白噪声作用下, 粒子长时间遵从 Gibbs-Boltzmann 统计, 自由场中粒子的方均位移正比于时间 (正常扩散).

近年来, 人们在很多系统中发现了反常扩散现象^[2-5], 即系统在外势情况下的一维方均位移写作 $\langle x^2(t) \rangle \propto t^\gamma$, $0 < \gamma \leq 2$, $\gamma \neq 1$. $0 < \gamma < 1$ 称为欠扩散; $1 < \gamma \leq 2$ 称为超扩散. Lévy 飞行的 $\langle x^2(t) \rangle$ 是发散的, 也被认为是超扩散的一种. 具有长尾渐近形式的 Lévy 分布 (渐近形式为 $\sim |x|^{-\alpha-1}$ ($|x| \rightarrow \infty$)), $0 < \alpha \leq 2$) 扮演了重要角色. 按照广义中心极限定理, Lévy 分布是方差发散的独立同分布随机变量之和的极限形式^[6]. 从物理上看, Lévy 飞行来自于粒子和热浴之间强烈的相互作用. 一般认为, 对于具有

较大质量的粒子, 其应具有一个有限的速度上限, 并且大的跳跃伴随着较长的等待时间, Lévy 飞行似乎仅有数学上的意义. 然而, 这个运动形态却解释了许多系统的奇异性质. 例如, 欠反冲激光冷却原子实验^[7,8], 当系统维数 $d \geq 2$ 时, 对原子和光子相互作用的量子力学分析是相当困难的, 而应视为一个动量空间中经典的不均匀随机行走问题 (反常性来自于动量接近于零的原子的超长寿命), 即 Lévy 飞行. 理论上用满足 Lévy 分布的无关联噪声驱动的朗之万方程来描写 Lévy 飞行; 伴随 Lévy 白噪声的非局域特性, 导致了分数阶 Fokker-Planck 方程^[3,9]. 虽然对这种长跳跃非布朗运动已有一些研究, 但很多问题急待解决, 例如, Jespersen 等^[10] 指出非广延性的 Tsallis 熵不是简谐势中 Lévy 飞行的一个合适的理论框架.

令人惊讶的是, 自由状态下呈发散方均位移的 Lévy 粒子置于简谐势中, 其坐标二次矩仍发散, 需设想在一个随时间增长的箱子^[10]来计算: $\langle x^2(t) \rangle_L \propto \int_{L_1 t^{1/\alpha}}^{L_2 t^{1/\alpha}} dx x^2 p(x, t) \propto t^{2/\alpha}$, 其中 $p(x, t)$ 是粒子坐标的分布密度函数. 这只是数学上的一种处理, 并没有明确的物理意义. 简谐势不能束缚住粒子, 那么何种势可以束缚 Lévy 粒子呢? Chechkin 等^[11,12] 在四次单稳势中发现稳态分布呈现双峰且二次矩有限, 但没有考虑势本身的多稳性. Bao 等人^[13] 研究了 Lévy 白噪声驱动粒子从亚稳态势阱的逃逸过程,

* 国家自然科学基金 (批准号: 10674016, 10875013) 和教育部博士点基金 (批准号: 200800270005) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: jdbao@bnu.edu.cn

发现了位垒相消现象,逃逸速率随噪声强度的变化偏离了著名的 Kramers-Arrhenius 规律.

本文将粒子置于束缚作用足够强的势中,其为对称的偶次多项式势,可以覆盖单稳势和双稳势,这类势在布朗运动研究中发挥重要作用^[14]. 我们将研究势参数变化时,粒子分布密度函数形态的转换,并分析其原因.

2. Lévy 飞行

描述外势场 $U(x)$ 中 Lévy 飞行的过阻尼朗之万方程为^[11,12]

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{U'(x)}{M\gamma} + Y_\alpha(t), \quad (1)$$

式中, M 是粒子质量, γ 是摩擦系数, $Y_\alpha(t)$ 代表 Lévy 指数为 α 的 Lévy 白噪声 (仅考虑 $1 \leq \alpha < 2$), 在傅里叶空间中其特征函数为

$$\hat{p}(k) = \exp(-D|k|^\alpha). \quad (2)$$

与方程(1)等价的方式有分数阶 Fokker-Planck 方程^[11,12]

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{U'(x)}{M\gamma} f \right) + D \frac{\partial^\alpha f}{\partial |x|^\alpha}, \quad (3)$$

式中

$$\begin{aligned} & \frac{d^\alpha}{d|x|^\alpha} \phi(x) \\ &= \begin{cases} -\frac{1}{2\cos(\pi\alpha/2)} [D_+^\alpha \phi + D_-^\alpha \phi], \alpha \neq 1, \\ -\frac{d}{dx} H\phi, \alpha = 1, \end{cases} \quad (4) \end{aligned}$$

$$D_+^\alpha \phi = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \frac{d^2}{dx^2} \int_{-\infty}^x \frac{\phi(\xi) d\xi}{(x-\xi)^{\alpha-1}}, \quad 1 \leq \alpha < 2,$$

$$D_-^\alpha \phi = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \frac{d^2}{dx^2} \int_x^{+\infty} \frac{\phi(\xi) d\xi}{(\xi-x)^{\alpha-1}}, \quad 1 \leq \alpha < 2, \quad (5)$$

$$H\phi = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\phi(\xi) d\xi}{x-\xi}. \quad (6)$$

分数阶导数的一个重要结果是

$$\hat{\Phi} \left(\frac{d^\alpha \phi}{d|x|^\alpha} \right) = -|k|^\alpha \hat{\phi}, \quad (7)$$

其中, $\hat{\Phi}$ 代表傅里叶变化, $\hat{\phi}(k)$ 是 $\phi(x)$ 的傅里叶变化函数.

本文考虑的外势场为

$$\begin{aligned} U(x) &= a \frac{x^{2m}}{2m} + b \frac{x^{2m+2}}{2m+2}, \\ m &= 1, 2, 3, 4, b > 0. \end{aligned} \quad (8)$$

当 $a > 0$ 时为单稳势, 当 $a < 0$ 时为双稳势.

我们进行如下的标度变换:

$$x' = x/x_0, t' = t/t_0, \quad (9)$$

$$x_0 = \left(\frac{M\gamma D}{b} \right)^{1/(2m+\alpha)}, t_0 = \frac{x_0^\alpha}{D},$$

$$a' = a x_0^{2m-2} \frac{t_0}{M\gamma}. \quad (10)$$

方程(1)及势场可变为(省略撇号)

$$\frac{dx}{dt} = -U'(x) + Y_\alpha(t), \quad (11)$$

$$U(x) = a \frac{x^{2m}}{2m} + \frac{x^{2m+2}}{2m+2}, \quad (12)$$

$Y_\alpha(t)$ 中的 $D=1$. 相应地, 方程(3)成为

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (U'(x)f) + \frac{\partial^\alpha f}{\partial |x|^\alpha}. \quad (13)$$

对方程(13)做傅里叶变换, 利用(7)式可得

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + |k|^\alpha \hat{f} &= (-1)^m a k \frac{\partial^{2m-1} \hat{f}}{\partial k^{2m-1}} \\ &+ (-1)^{m+1} k \frac{\partial^{2m+1} \hat{f}}{\partial k^{2m+1}}. \end{aligned} \quad (14)$$

由于归一化条件和对称性, 稳态解 $\hat{f}_{st}(k)$ 满足

$$\hat{f}_{st}(0) = 1, \hat{f}_{st}(k) = \hat{f}_{st}(-k),$$

$$\hat{f}_{st}^{(p)}(0) = 0, p = 1, 3, \dots. \quad (15)$$

在推导方程(14)时还利用了自然边界条件

$$\hat{f}_{st}^{(p)}(|k| \rightarrow \infty) = 0, p = 0, 1, 2, \dots. \quad (16)$$

3. 结果和讨论

3.1. $\alpha=1$ 的情形 (柯西情形)

当 $\alpha=1$ 时可以解析处理, 以 $U(x) = -a \frac{x^4}{4} + \frac{x^6}{6}, a > 0$ 为例, 此时傅里叶空间中稳态分布满足的方程是

$$\frac{d^5 \hat{f}}{dk^5} + a \frac{d^3 \hat{f}}{dk^3} = -\text{sgn}(k) \hat{f}. \quad (17)$$

由对称性可只考虑 $k > 0$ 的情况, 此时,

$$\frac{d^5 \hat{f}}{dk^5} + a \frac{d^3 \hat{f}}{dk^3} + \hat{f} = 0. \quad (18)$$

定解条件为

$$\hat{f}(0) = 1, \hat{f}^{(1)}(0) = 0, \hat{f}^{(3)}(0) = 0,$$

$$\hat{f}(k \rightarrow \infty) = 0. \quad (19)$$

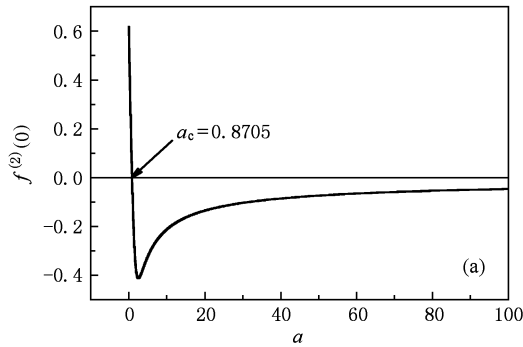
相应的特征方程为 $z^5 + az^3 + 1 = 0$, 由于五次以上的方程没有一般的解法, 只能用数值方法求解, 这里利用了 Jenkins-Traub three-stage 算法. 对于本文考虑的所有 a , 特征方程的解为 $z_1 = t < 0, z_{2,3} = s_1 \pm is_2 (s_1 < 0, s_2 > 0), z_{4,5} = s_3 \pm is_4 (s_3 > 0, s_4 > 0)$. 由于 $\hat{f}(k \rightarrow \infty) = 0$, 实部大于 0 的特征解应不出现.

我们给出如下形式的解:

$$\hat{f}(k) = c_1 e^{tk} + c_2 e^{s_1 k} \cos(s_2 k) + c_3 e^{s_1 k} \sin(s_2 k). \quad (20)$$

由其他定解条件可得

$$\begin{aligned} c_1 + c_2 &= 1, \\ c_1 t + c_2 s_1 + c_3 s_2 &= 0, \\ c_1 t^3 + c_2 (s_1^3 - 3s_1 s_2^2) + c_3 (3s_1^2 s_2 - s_2^3) &= 0. \end{aligned} \quad (21)$$



由 $\hat{f}(k)$ 的对称性可以得到 $k < 0$ 时的解, 经傅里叶逆变换后得

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{-c_1 t}{t^2 + x^2} + \frac{c_3 (s_2 - x) - c_2 s_1}{2(s_1^2 + (s_2 - x)^2)} + \frac{c_3 (s_2 + x) - c_2 s_1}{2(s_1^2 + (s_2 + x)^2)} \right\}. \quad (22)$$

由于解的对称性, $f^{(2)}(0)$ 每变化一次符号即对应着模态的一次变化.

在图 1(a) 中, 我们利用数值方法解方程组 (21) 得到了 $f^{(2)}(0)$ 随 a 的变化, 找到临界的 $a_c = 0.8705$, 当 $a < a_c$ 时为双峰(双模), 当 $a > a_c$ 时为三峰(三模); 在图 1(b) 中, 画出了 $a = 0.1, 10$ 的稳态分布(纵坐标为对数坐标). 可以看出, 稳态分布出现了二模到三模的转换.

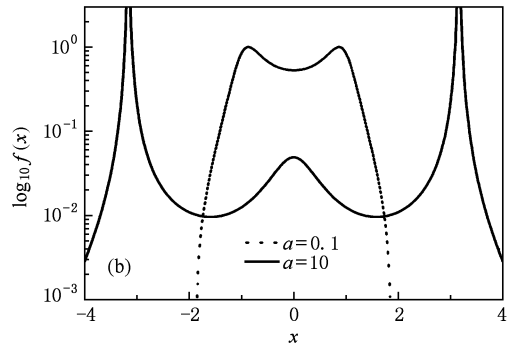


图 1 $m = 2$ 时模态的变化 (a) $f^{(2)}(0)$ 随 a 的变化; (b) $a = 0.1, 10$ 时的稳态分布

按照通常的 Gibbs - Boltzmann 统计, 稳态分布 $f(x) = e^{-\beta U(x)} / Z$, 在势的鞍点处稳态分布应呈现一个谷底, 但上图显示当 $a > a_c$ 时, 在势的鞍点处稳态分布反而出现了一个峰值, 虽然峰的高度很小且随着 a 的增大越来越低, 但这本质上不同于 Gibbs-Boltzmann 统计, 显示了 Lévy 统计不同寻常的行为.

我们在图 2 绘出了一个 $\alpha = 1$ 时态转换的相图.

图 2 中, $m = 1, a > 0$ 的特殊情况就是文献^[11]的一部分结果, 而我们的结果更具一般性.

3.2. $\alpha \neq 1$ 的情形

$\alpha \neq 1$ 的情形已不能严格解析求解, 我们利用 Monte-Carlo 方法进行数值模拟^[15].

$$x(t + \Delta t) = x(t) - U'(x(t)) \Delta t + (\Delta t)^{1/\alpha} \xi_\alpha, \quad (23)$$

其中

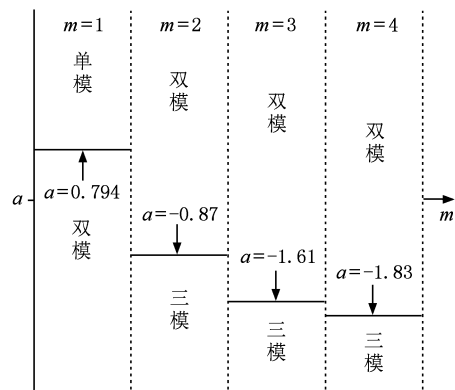


图 2 模态变化的相图

$$\xi_\alpha = \left(\frac{-\ln u \cos \varphi}{\cos(1 - \alpha) \varphi} \right)^{1-1/\alpha} \frac{\sin(\alpha \varphi)}{\cos \varphi}, \quad (24)$$

$\varphi = \pi(v - 1/2)$, u, v 是 $(0, 1)$ 区间上的随机数.

图 3 是在外势 $U(x) = -a \frac{x^4}{4} + \frac{x^6}{6}, a > 0$ 中 $\alpha =$

1.2, 1.8 的稳态分布. 可以看出, 当 $1 < \alpha < 2$ 时稳态分布仍然呈现了双模到三模的转换, 但 α 越接近 2,

这一效应越不明显, 结果越接近于 Gibbs-Boltzmann 统计, 因为 $\alpha = 2$ 就是正常的布朗运动.

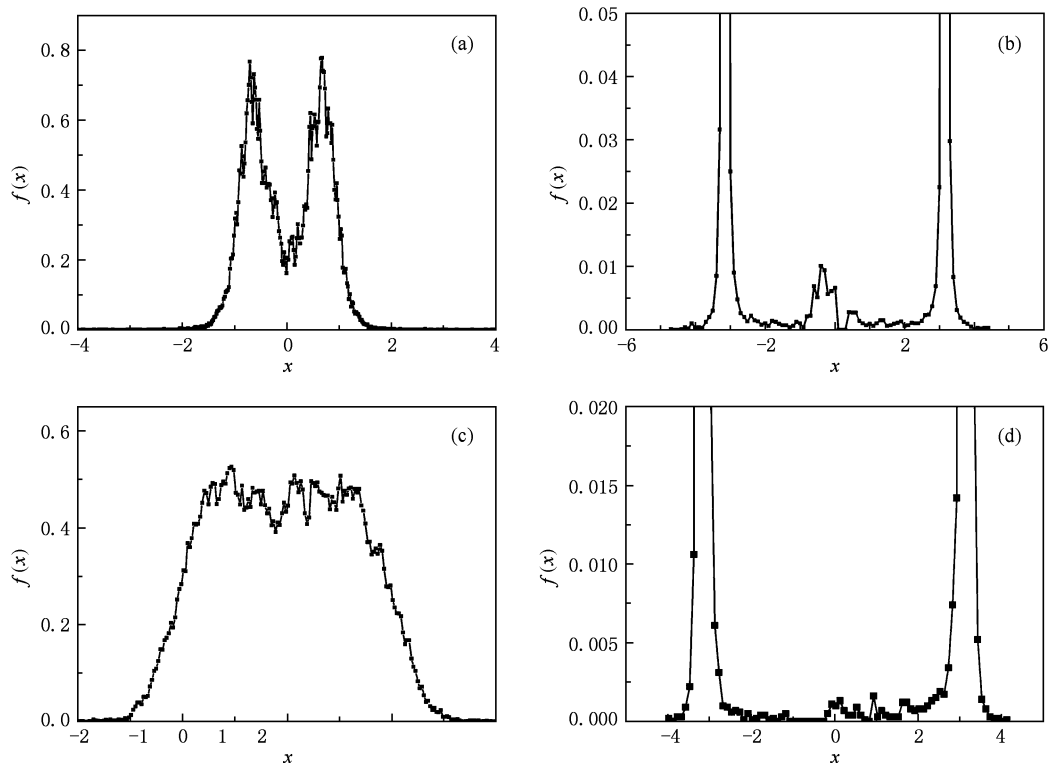


图3 $\alpha \neq 1$ 时的稳态分布, 时间步长 $\Delta t = 10^{-7}$, 终止时刻 $T = 8$, 样本数 10^5 (a) $\alpha = 1.2, a = 0.1$; (b) $\alpha = 1.2, a = 10$; (c) $\alpha = 1.8, a = 0.1$; (d) $\alpha = 1.8, a = 10$

值得注意的是, 由于 Lévy 飞行经常有大的跳跃, 时间步长必须取得足够小才能保证粒子的坐标结果不会超过计算机的表示范围, 而小的步长又意味着长的计算时间. 本文利用并行算法解决了这一问题.

4. 结 论

本文分析了一类强束缚势中的 Lévy 飞行, 解析与数值相结合而给出了一个统一的处理方法. 研究发现当势参数 $m = 1$ 且 $a > a_c$ 时稳态分布为单模;

当势参数 $m = 1$ 且 $a < a_c$ 时稳态分布为双模; 当势参数 $m > 1$ 且 $a > a_c$ 时稳态分布为双模; 当势参数 $m > 1$ 且 $a < a_c$ 时稳态分布为三模. 首次发现双稳势中出现了三峰, 严重偏离 Gibbs-Boltzmann 统计. 本文的结果进一步增加了对 Lévy 统计的认识, 丰富了 Lévy 飞行在不同外部影响下的物理图像. Lévy 白噪声驱动系统的这些不同一般的特征提出了一个挑战, 即寻找一个统一的理论框架, 在此框架下能解释为什么单稳势中会出现双峰和双稳势中会出现三峰. 这方面还需要进一步的工作.

- [1] Bao J D 2009 *Stochastic Simulation Methods for Classical and Quantum Dissipation Systems* (Beijing: Science Press) p96-100 (in Chinese) [包景东 2009 经典和量子耗散系统的随机模拟方法 (北京: 科学出版社) 第 96—100 页]
- [2] Bouchaud J P, Georges A 1990 *Phys. Rep.* **195** 127
- [3] Metzler R, Klafter J 2000 *Phys. Rep.* **339** 1
- [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] Chang F X, Chen J, Huang W 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1113 (in Chinese) [常福宣、陈进、黄薇 2005 物理学报 **54** 1113]
- [6] Khintchine A Y, Lévy P 1936 *C. R. Acad. Sci. Paris* **202** 374
- [7] Bardou F, Bouchaud J P, Emile O, Aspect A, Cohen-Tannoudji C 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 203

- [8] Schaufler S, Schleich W P, Yakovlev V P 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 3162
- [9] Metzler R, Barkai E, Klafter J 1999 *Europhys. Lett.* **46** 431
- [10] Jespersen S, Metzler R, Fogedby H C 1999 *Phys. Rev. E* **59** 2736
- [11] Chechkin A, Gonchar V, Klafter J, Metzler R, Tanatarov L 2002 *Chem. Phys.* **284** 233
- [12] Chechkin A, Gonchar V, Klafter J, Metzler R, Tanatarov L 2004 *J. Stat. Phys.* **115** 1505
- [13] Bao J D, Wang H Y, Jia Y, Zhuo Y Z 2005 *Phys. Rev. E* **72** 051105
- [14] Bolotin Y L, Bulavin V V, Chechkin A V, Gonchar V Y 1999 *Prog Nucl Energy* **35** 65
- [15] Fulger D, Scalas E, Germano G 2008 *Phys. Rev. E* **77** 021122

Lévy flights in a steep potential well displaying non-Gibbs-Boltzmann statistics*

ShangGuan Dan-Hua¹⁾²⁾ Lü Yan¹⁾ Bao Jing-Dong^{1)†}

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

2) (Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)

(Received 21 April 2010; revised manuscript received 16 May 2010)

Abstract

We study analytically and numerically the probability density function in the stationary state of non-linear oscillators which are subjected to Lévy white noise and confined by a steep symmetric potential. The probability density function transforms from unimodality to bimodality or from bimodality to trimodality when the potential transforms from single well to double well; especially, the probability density function shows a peak at the saddle point of the potential. This result is far from the Gibbs-Boltzmann statistics.

Keywords: Lévy white noise, stationary distribution, steep potential, Gibbs-Boltzmann statistics

PACC: 0540, 6610C, 8220F

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10674016, 10875013) and the Doctor Education Fund of Ministry of Education of China (Grant No. 200800270005).

† Corresponding author, E-mail: jdbao@bnu.edu.cn