

时间非对称分数阶类Langevin棘齿*

周兴旺¹⁾ 林丽烽¹⁾²⁾ 马洪¹⁾ 罗懋康^{1)†}

1)(四川大学数学学院, 成都 610064)

2)(福建农林大学计算机与信息学院, 福州 350002)

(2013年11月27日收到; 2014年2月19日收到修改稿)

本文将细胞内环境假定为分数阶牛顿黏弹性体并建立了单位质量的一维线动分子马达的时间非对称分数阶类郎之万棘齿模型, 其中的周期势函数是空间对称的, 而用于刻画ATP水解反应引起的环境波动的则是无偏的时间非对称类郎之万噪声. 然后本文将模型转化为离散映射以便进行计算机模拟. 最后本文以Logistic映射所生成的类郎之万噪声为例简单模拟了模型的定向输运行为. 各参数情形下的模拟结果均显示: 无需势函数的空间对称破缺, 时间非对称的类郎之万噪声已足以引起模型的定向输运. 负向的输运行为应归因于Logistic映射的两个不稳定不动点的非对称分布. 因此, 尽管模拟结果同整数阶模型相比并无本质区别, 但分数阶模型对于分子马达的噪声整流机理的刻画却无疑更接近实际情况.

关键词: 类郎之万噪声, 分数阶类郎之万棘齿, 时间非对称, 定向输运

PACS: 05.10.Gg, 45.10.Hj

DOI: 10.7498/aps.63.110501

1 引言

在分子马达的噪声整流工作机理中马达的非对称性不可或缺^[1]. 以波动力棘齿为例, 模型的非对称性既可以体现为空间非对称性, 如非对称空间周期势, 也可以体现为时间非对称性, 如时间非对称波动力, 或者兼而有之. 所谓波动力的时间非对称性是指其具有三阶以上不恒为零的奇数阶高阶矩或相关函数^[2], 因而时间非对称性本质上是一种统计非对称性^[3].

一般而言, 对于高斯白噪声 $L(t)$ 作为波动力的棘齿模型, 模型的空间或时间非对称性并不必然地引起定向输运. 而对于无偏的确定性波动力棘齿^[2-8], 如周期二分力棘齿^[4]、周期三分力棘齿^[5]、周期正(余)弦棘齿^[6]、混沌棘齿^[7-9]以及类郎之万棘齿^[10-15]等而言, 波动力的时间非对称性则足以导致定向输运的出现.

值得注意的是, 以上的棘齿模型都是整数阶的, 其生物学基础是细胞内部生化反应环境的理

想性假设^[16]. 但近年来随着新生物学时代的来临^[17], 人们所观察到的细胞内部环境的极端拥挤与异质性等非理想情形却从根本上颠覆了这个假设^[18,19], 因而整数阶棘齿模型并不适宜刻画分子马达的真实工作机理. 作为整数阶微积分的自然推广, 分数阶微积分适合于刻画黏弹性介质中的耗散物理过程的长时间、长距离记忆效应^[20], 因而各种分数阶棘齿模型^[21-23]的出现是很自然的. 相关讨论还可参见包景东教授所著的经典文献^[24]及其参考文献.

在本文中, 我们假定细胞内部环境为分数阶牛顿黏弹性体, 并建立了单位质量的一维线动分子马达的分数阶类郎之万棘齿模型, 其中的波动力是无偏类郎之万噪声 $L_\tau(t) = s\tau^{1/2} \sum_{j=0}^{\infty} y_j \delta(t/j - \tau)$, 这里 s 为噪声强度, τ 为噪声输入周期, $\{y_j\}_{j=0}^{\infty}$ 为混沌序列. 当噪声的输入周期 $\tau \rightarrow 0$ 时, $L_\tau(t)$ 的极限为高斯白噪声, 而对于有限的 τ 则 $L_\tau(t)$ 类似于混沌噪声^[10], 因而该噪声可以刻画ATP水解反应所引起的环境波动, 其中当 $\tau \rightarrow 0$ 时表示无水解反

* 国家自然科学基金(批准号: 11171238)和福建农林大学青年教师基金(批准号: 2011XJJ23)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: makaluo@scu.edu.cn

应发生. 然后, 我们将该模型转化为离散映射以方便研究. 最后, 为了研究模型的时间非对称性对定向输运的影响, 我们以 Logistic 映射所生成的类郎之万噪声为例对模型的定向输运行为进行了简单模拟. 各参数情形下的模拟结果均表明: 模型的时间非对称性已足以引起定向输运, 而无需模型的空间非对称性. 值得注意的是, 波动力的统计非对称性仅能保证模型定向输运的出现而不能决定其输运方向, 而模型的负向输运却可归因于 Hondou 等 [7-9] 提出的混沌映射的动力非对称性概念, 即 Logistic 映射的两个不稳定不动点的非对称分布.

2 分数阶类郎之万棘齿

我们将细胞内环境考虑为分数阶牛顿黏弹性体 [25], 则对于单位质量的一维线动分子马达受场 $V(x, t)$ 及类郎之万波动 $L_\tau(t)$ 共同作用的情形, 马达质心位置 $x(t)$ 的时间演化可由如下 α 阶 Caputo 时间分数阶方程刻画:

$$\begin{aligned} \gamma D_*^\alpha x(t) + \frac{\partial V(x, t)}{\partial x} &= L_\tau(t), \quad 0 < \alpha \leq 1, \\ L_\tau(t) &= s\tau^{1/2} \sum_{j=0}^{\infty} y_j \delta(t/j - \tau), \end{aligned} \quad (1)$$

其中 $\gamma \gg 1$ 为阻尼系数, 马达初始位置 $x(t = 0) = x_0$, 无偏类郎之万噪声 $L_\tau(t)$ 由混沌映射 f 生成, f 的不变密度为 $\rho(x)$, D_*^α 为 α 阶 Caputo 微分算子 [23], 即

$$D_*^\alpha(x(t)) : = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(m - \alpha)} \int_0^t \frac{x^{(m)}(t') dt'}{(t - t')^{\alpha + 1 - m}}, & m - 1 < \alpha < m, \\ \frac{d^m}{dt^m} x(t), & \alpha = m, \end{cases} \quad (2)$$

这里我们取 $m = 1, 0 < \alpha \leq 1$, 即

$$D_*^\alpha(x(t)) : = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(1 - \alpha)} \int_0^t \frac{\dot{x}(t')}{(t - t')^\alpha} dt', & 0 < \alpha < 1, \\ \dot{x}(t), & \alpha = 1. \end{cases} \quad (3)$$

我们称模型 (1) 为分数阶类郎之万棘齿模型. 当 $\alpha = 1$ 时, 模型便退化为整数阶类郎之万模型 [12-15]

$$\begin{aligned} \gamma \dot{x}(t) + \frac{\partial V(x, t)}{\partial x} &= L_\tau(t), \\ L_\tau(t) &= s\tau^{1/2} \sum_{j=0}^{\infty} y_j \delta(t/j - \tau). \end{aligned} \quad (4)$$

3 模型对应的离散映射

从数学的角度看, 模型 (1) 是一类带冲击的分数阶微分方程, 并且是非马尔科夫的, 因而寻求其解析解, 或将其转化为 Fokker-Planck 方程以及利用 Frobenius-Perron 方程 [12-15] 来研究其概率密度演化都是困难的. 而鉴于类郎之万噪声 $L_\tau(t)$ 与混沌噪声一样都是离散的, 适宜计算机模拟, 我们可将模型转化为离散映射, 即研究其整时间点情形.

按照文献 [25] 的方法, 我们记 $n\tau^+ = n\tau + 0^+$, $n\tau^- = n\tau - 0^+$, 这里 0^+ 表示正无穷小量, 并记 $x_n = x(n\tau^+)$, 即在每一次混沌冲击输入后立刻记录马达的位置 x_n , 则可得到马达质心位置 $x(t)$ 的离散状态序列 $\{x_n\}_{n=0}^\infty$. 注意在每次冲击输入前后有 $x(n\tau^+) = x(n\tau^-)$, 初始位置为 $x_0 = x(0)$. 为简化记号, 令 $U(x, t) = \frac{\partial V(x, t)}{\partial x}$. 则模型 (1) 可改写为

$$\begin{aligned} D_*^\alpha x(t) &= \gamma^{-1} [L_\tau(t) - U(x, t)], \quad 0 < \alpha \leq 1, \\ L_\tau(t) &= s\tau^{1/2} \sum_{j=0}^{\infty} y_j \delta(t/j - \tau). \end{aligned} \quad (5)$$

(5) 式中第一式两边用 α 阶积分算子

$$J^\alpha(x(t)) := \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t - t')^{\alpha - 1} x(t') dt' \quad (6)$$

作用得

$$x(t) = x(0) + \gamma^{-1} [J^\alpha L_\tau(t) - J^\alpha U(x, t)]. \quad (7)$$

不妨假设 $n\tau \leq t < (n + 1)\tau$, 则有

$$\begin{aligned} J^\alpha L_\tau(t) &= \frac{s\tau^{1/2}}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t - t')^{\alpha - 1} \left[\sum_{j=0}^{\infty} y_j \delta(t' - j\tau) \right] dt' \\ &= \frac{s\tau^{1/2}}{\Gamma(\alpha)} \left\{ \int_0^{\tau^-} (t - t')^{\alpha - 1} \left[\sum_{j=0}^{\infty} y_j \delta(t' - j\tau) \right] ds \right. \\ &\quad + \sum_{k=1}^{n-1} \int_{k\tau^-}^{(k+1)\tau^-} (t - t')^{\alpha - 1} \\ &\quad \times \left. \left[\sum_{j=0}^{\infty} y_j \delta(t' - j\tau) \right] dt' \right\} \\ &\quad + \int_{n\tau^-}^t (t - t')^{\alpha - 1} \left[\sum_{j=0}^{\infty} y_j \delta(t' - j\tau) \right] dt' \\ &= \frac{s\tau^{3/2}}{\Gamma(\alpha)} \sum_{j=0}^{n-1} y_j (t - j\tau)^{\alpha - 1} + \frac{s\tau^{1/2}}{\Gamma(\alpha)} y_n (t - n\tau)^\alpha. \end{aligned} \quad (8)$$

从而当 $t = (n + 1)\tau$ 时有

$$J^\alpha L_\tau(t)|_{t=(n+1)\tau} = \frac{s\tau^{\alpha+1/2}}{\Gamma(\alpha)} \sum_{j=0}^n y_j (n+1-j)^{\alpha-1}. \quad (9)$$

另外, 我们假定 $U(x, t)$ 在区间 $[x_k, x_{k+1}]$, $k = 0, 1, \dots$ 上无明显变化, 则在每个时间区间 $[k\tau^-, (k+1)\tau^-]$ 上可将 $U(x, t)$ 视为常数^[13,14], 类似(9)式的计算可得

$$J^\alpha U(x, t)|_{t=(n+1)\tau} = \frac{\tau^\alpha}{\Gamma(1+\alpha)} \sum_{j=0}^n U(x_n) [(n+1-j)^\alpha - (n-j)^\alpha]. \quad (10)$$

将(9)、(10)两式代入(7)式, 并令

$$\begin{aligned} a &= \frac{s\tau^{\alpha+1/2}}{\Gamma(\alpha)\gamma}, \\ b &= \frac{\tau^\alpha}{\Gamma(1+\alpha)\gamma}, \\ A_\alpha(n, j) &= (n+1-j)^{\alpha-1}, \\ B_\alpha(n, j) &= [(n+1-j)^\alpha - (n-j)^\alpha], \end{aligned}$$

则有

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_0 + a \sum_{j=0}^n y_j A_\alpha(n, j) \\ &\quad - b \sum_{j=0}^n U(x_j) B_\alpha(n, j). \end{aligned} \quad (11)$$

定义位移

$$\Delta x_{n+1} := x_{n+1} - x_0,$$

则有

$$\begin{aligned} \Delta x_{n+1} &= a \sum_{j=0}^n y_j A_\alpha(n, j) \\ &\quad - b \sum_{j=0}^n U(x_j) B_\alpha(n, j), \quad n \geq 0. \end{aligned} \quad (12)$$

结合(5)式的第二式, 对 $n \geq 0$ 我们得到离散映射

$$\begin{aligned} \Delta x_{n+1} &= a \sum_{j=0}^n y_j A_\alpha(n, j) - b \sum_{j=0}^n U(x_j) B_\alpha(n, j), \\ y_{n+1} &= f(y_n). \end{aligned} \quad (13)$$

我们称此离散映射为模型(1)所对应的分数阶类郎之万映射.

这样, 我们就将对于模型(1)的定向输运行为的研究转化为对于离散映射(13)的研究, 从而大大降低了研究难度.

4 数值模拟

不失一般性, 我们在模型(1)中取对称周期势函数

$$V(x) = (-d/2) \cos \pi x, \quad (14)$$

周期 $L = 2$, 势垒高度 $\Delta V = d$, $U(x) = (\pi d/2) \sin \pi x$, 并取马达初始位置 $x_0 = 0$, 混沌映射 f 为 Logistic 映射 $f(x) = 1 - 2x^2$, 不变密度为^[26]

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}}, & |x| \leq 1, \\ 0, & \text{其他.} \end{cases} \quad (15)$$

所生成混沌序列 $\{y_j\}_{j=0}^\infty$ 满足

$$\begin{aligned} 1) \quad &\langle y_j \rangle = 0; \\ 2) \quad &\langle y_i y_j \rangle = \frac{1}{2} \delta_{ij}; \\ 3) \quad &\langle y_{n_1} y_{n_2} y_{n_3} \rangle \\ &= -\frac{1}{8} \sum_{P(i_1, i_2, i_3)} \delta(n_{i_1}, n_{i_2}) \delta(n_{i_1} + 1, n_{i_3}), \end{aligned}$$

这里 δ_{ij} 表示 Kronecker Delta 函数, $\sum_{P(i_1, i_2, i_3)}$ 表示

对指标集 (i_1, i_2, i_3) 的 6 个置换进行求和^[12]. 取 $n_1 = n_2, n_3 = n_1 + 1$, 简单计算可得 $\langle y_{n_1}^2 y_{n_1+1} \rangle = -1/4 \neq 0$, 从而 Logistic 映射具有不恒为零的三点(阶)相关函数. 由定义, Logistic 映射所生成无偏类郎之万噪声 $L_\tau(t)$ 是时间非对称的.

对于固定的马达初始位置 x_0 , 由迭代 f 的混沌特性, 对几乎所有初值 y_0 , 充分长时间后的迭代值 $f^j(y_0)$ 将失去对 y_0 的记忆性, 从而可以看成与 y_0 无关的随机变量, 在此后的迭代中我们就可将此随机变量 $f^j(y_0)$ 作为新的初值. 另外, 如果迭代 f 存在不变密度 $\rho(x)$, 则初值 y_0 的任意分布都将收敛到 $\rho(x)$. 因而不失一般性我们假设初值 y_0 为服从不变密度 $\rho(x)$ 的随机变量, 其模拟方法可参见经典文献^[27]. 这样, 在离散映射(13)的作用下, 任意初始系综 (x_0, y_0) 将持续演化得到系综 (x_{n+1}, y_{n+1}) . 我们的模拟目标是马达的平均位移 $\langle \Delta x_{n+1} \rangle$ (MD: Mean Displacement), 这里的平均指系综平均. 我们定义定向流

$$J = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\langle \Delta x_n \rangle}{n}. \quad (16)$$

我们取定 $\gamma = 100$. 图 1 显示了模型的定向流对势垒高度 d 的依赖性, 这里噪声强度 s 分别等于 10, 40, 80, $\tau = 0.5, \alpha = 0.8$. 易见较小、较大高度的

势函数对定向流的限制作用都将减弱,从而模型的定向流对势垒高度的依赖表现为单峰函数;图2显示了模型的定向流对噪声强度 s 的依赖性,这里分数阶 α 分别等于 0.4, 0.6, 0.8, 1, $\tau = 0.5$, $d = 10$. 易见,较小的噪声强度难以使得粒子越过势垒产生定向流,而较大的噪声强度则使得粒子可以双向越过势垒,在无偏噪声的作用下模型的定向流将减弱,从而模型的定向流对噪声强度的依赖仍然表现为单峰函数;图3显示了模型的定向流对于噪声输入周期 τ 的依赖性,这里分数阶 α 分别等于 0.4, 0.6, 0.8, 1, $s = 80$, $d = 10$. 易见对于较小的 τ , 类郎之万噪声类似于白噪声,无法引起定向流,而对于较大的 τ , 类郎之万噪声则类似于混沌噪声,噪声的时间非对称性足以引起定向流,但随着 τ 的增大混沌噪声的强度也增大,从而势函数的限制作用反而不断减弱,从而模型的定向流对噪声输入周期 τ 的依赖也表现为单峰函数;而图4则显示了模型的定向流对分数阶的依赖性,这里的噪声输入周期 τ 分别等于 0.1, 0.4, 0.7, 1, $d = 10$, $s = 80$. 易见随着分数阶的增大,粒子受到的阻尼作用单调减小,定向流单调增大,从而模型的定向流对分数阶的依赖是单调增加的. 值得注意的是,当 $\alpha = 1$ 时的模型就是 Chew 和 Ting^[12-14] 利用概率方法所研究的整数阶类郎之万模型,而当 $\alpha = 1$, $\tau = 1$ 时的模型就是 Hondou 等^[7-9] 所研究的混沌模型.

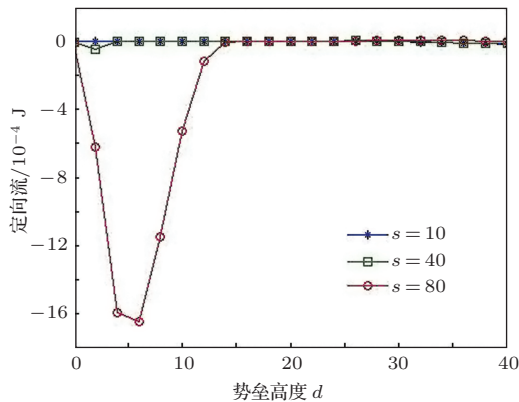


图1 势垒高度对模型定向运输的影响

数值模拟结果表明: 首先,即使在缺乏空间非对称性的情形下模型仍然可以出现定向运输,因而时间非对称性类郎之万噪声已足以引起模型的定向运输;其次,各参数均仅影响定向流的大小而不影响其方向;最后,各参数情形下模型的运输方向均为负向,该负向运输行为虽然不能由类郎之万噪声的统计非对称性得到,但却可归因于 Logistic 映

射的两个不稳定不动点 ($x_- = -1$, $x_+ = 1/2$) 分布的非对称性^[7-9], 即 Logistic 映射的动力非对称性.

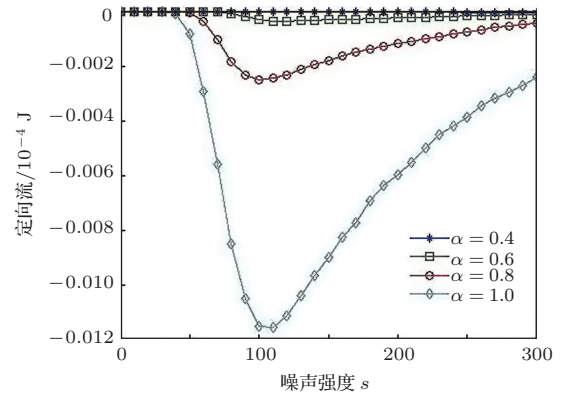


图2 噪声强度对模型定向运输的影响

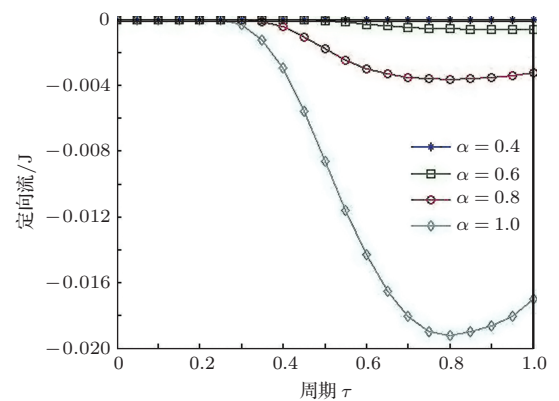


图3 噪声输入周期对模型定向运输的影响

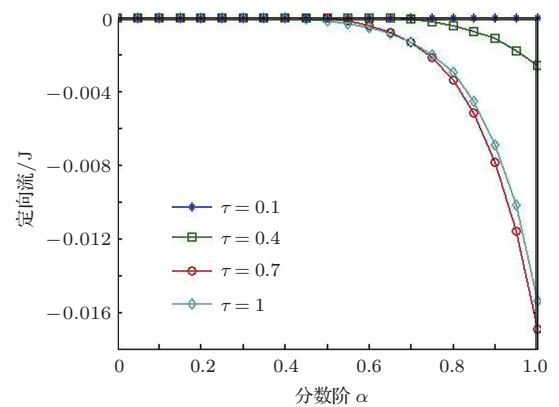


图4 分数阶对模型定向运输的影响

5 结论

在本文中,基于细胞内部环境的分数阶牛顿黏弹性体假定,我们对单位质量的一维线动分子马达

在空间周期对称势与无偏类郎之万噪声共同作用下的定向输运建立了一类时间非对称分数阶类郎之万棘齿模型. 通过导出模型所对应的离散映射, 我们以 Logistic 映射生成的类郎之万噪声为例对模型的定向输运行为进行了数值模拟. 模型的定向流对各参数的依赖性表明模型的时间非对称性足以导致定向流的产生而无需模型的空间非对称性. 同时, 负向流的出现可归因于 Hondou 等所提出的动力非对称性概念. 尽管模型的定向输运行为同整数阶模型相比并无本质区别, 但分数阶模型对分子马达的噪声整流机理的刻画却无疑更接近实际情况.

参考文献

- [1] Reimann P 2002 *Physics Reports* **361** 57
- [2] Chialvo D R, Dykman M I, Millonas M M 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1605
- [3] Hänggi P, Bartussek R, Talkner P 1996 *Europhys. Lett.* **35** 315
- [4] Zheng Z G, Li X W 2001 *Commun. Theor. Phys.* **36** 151
- [5] Schreiber M, Reimann P, Hänggi P 1998 *Europhys. Lett.* **44** 146
- [6] Hänggi P, Marchesoni F 2009 *Reviews of Modern Physics* **81** 387
- [7] Hondou T 1994 *J. Phys. Soc. Japan* **63** 2014
- [8] Hondou T, Sawada Y 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3269
- [9] Hondou T, Sawada Y 1996 *Phys. Rev. E* **54** 3149
- [10] Beck C, Reopstorff G 1987 *Physica A* **45** 1
- [11] Beck C 1991 *Nonlinear* **4** 1131
- [12] Chew L Y, Ting C 2002 *Physica A* **307** 275
- [13] Chew L Y, Ting C 2004 *Phys. Rev. E* **69** 031103
- [14] Chew L Y, Ting C, Lai C H 2005 *Phys. Rev. E* **72** 036222
- [15] Chew L Y 2012 *Phys. Rev. E* **85** 016212
- [16] Luby-Phelps K 2000 *Review of Cytology* **192** 189
- [17] [美国科学院研究理事会编, 王菊芳译 2013 二十一世纪新生物学 (北京: 科学出版社)]
- [18] Ellis R J 2001 *Trends in Biochemical Sciences* **26** 597
- [19] Ellis R J 2001 *Current Opinion in Structural Biology* **11** 114
- [20] Tarasov V E 2010 *Fractional Dynamics: Applications of Fractional Calculus to Dynamics of Particles Fields and Media* (Beijing: Higher Education Press)p442
- [21] Baiwen S M, Peng H, Tu Z, Ma H 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 210501 (in Chinese)[白文斯密, 彭皓, 屠浙, 马洪 2012 物理学报 **61** 210501] (in Chinese) [白文斯密, 彭皓, 屠浙, 马洪 2012 物理学报 **61** 210501]
- [22] Lin L F, Zhou X W, Ma H 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 240501 (in Chinese) [林丽烽, 周兴旺, 马洪 2013 物理学报 **62** 240501]
- [23] Wang F, Deng C, Tu Z, Ma H 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 040501 (in Chinese)[王飞, 邓翠, 屠浙 2013 物理学报 **62** 040501]
- [24] [包景东 2012 反常统计动力学导论 (北京: 科学出版社) 第 183 页]
- [25] Mainardi F 2010 *Fractional Calculus and Waves in Linear Viscoelasticity: An Introduction to Mathematical Models* (London: Imperial College Press) p57
- [26] Lasota A, Mackey M 1994 *Chaos, Fractals, and Noise: Stochastic Aspects of Dynamics* (New York: Springer-Verlag) p8
- [27] [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 13 页]

Temporal-asymmetric fractional Langevin-like ratchet*

Zhou Xing-Wang¹⁾ Lin Li-Feng¹⁾²⁾ Ma Hong¹⁾ Luo Mao-Kang^{1)†}

1) (*College of Mathematics, Sichuan University, Chengdu 610064, China*)

2) (*College of Computer and Information, Fujian Agriculture and Forestry University, Fuzhou 350002, China*)

(Received 27 November 2013; revised manuscript received 19 February 2014)

Abstract

In this paper, a temporal-asymmetric fractional Langevin-like ratchet is constructed for the operation of a 1D linear molecular motor subjected to both spatial-symmetric periodic potential and temporal-asymmetric unbiased Langevin-like noise. In this ratchet, the Langevin-like noise is used to simulate the intracellular fluctuation induced by ATP hydrolysis. Then, for numerical study of this ratchet, the corresponding discrete mapping is derived. Finally, as an example, the unidirectional transport of the ratchet driven by unbiased Langevin-like noise, generated by the Logistic mapping, is numerically studied. Negative transport of the ratchet indicates that without the spatial asymmetry of potential, the temporal asymmetry is enough for the presence of unidirectional transport. Since temporal asymmetry has to be regarded as a generic property of nonequilibrium system, this ratchet is expected to be reasonably used for the operation of molecular motor.

Keywords: Langevin-like noise, fractional Langevin-like ratchet, temporal asymmetry, unidirectional-transport

PACS: 05.10.Gg, 45.10.Hj

DOI: [10.7498/aps.63.110501](https://doi.org/10.7498/aps.63.110501)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11171238) and the Young Teacher Fund of Fujian Agriculture and Forestry University, China (Grant No. 2011XJJ23).

† Corresponding author. E-mail: makaluo@scu.edu.cn