



反常与非遍历多尺度建模、分析及算法

邓伟华

兰州大学数学与统计学院, 兰州 730000

E-mail: dengwh@lzu.edu.cn

收稿日期: 2023-03-01; 接受日期: 2023-05-08; 网络出版日期: 2023-06-29

国家自然科学基金 (批准号: 12225107) 和甘肃省基础研究创新群体项目 (批准号: 22JR5RA391) 资助项目

摘要 反常与非遍历现象在自然界中无处不在. 随着实验技术的发展, 各种新的实验现象仍不断涌现. 为解释现象/揭示机理, 本文建立微观模型 (随机过程), 并对微观模型进行随机分析和统计分析. 同时, 本文推导出一些宏观统计量 (如粒子位置、泛函、逃逸概率和首次通过时间等) 的概率分布满足的宏观方程, 进而研究方程解的正则性及方程的数值计算方法. 非静止介质中的反常与非遍历多尺度动力学将是数学和自然科学中有重要理论价值和应用前景的研究课题. 流形上的反常与非遍历动力学也是值得研究的课题. 所有情形下的跨尺度反常与非遍历动力学是重要的研究课题.

关键词 可计算建模 非平衡态统计物理 非静态介质 分析与算法

MSC (2020) 主题分类 82C10, 82-10, 65M12

1 引言

St. Petersburg 悖论由 Nicolaus Bernoulli 在 1713 年发表 (参见文献 [57]). 悖论来源于这样一个投硬币的游戏. 设定掷出正面或者反面为成功, 游戏者如果第一次投掷成功, 得 1 个硬币, 游戏结束; 如果第一次不成功, 继续投掷, 第二次成功得 2 个硬币, 游戏结束; 如果直到第 N 次投掷才成功, 得 2^{N-1} 个硬币, 游戏结束. 游戏者如果投掷不成功就反复继续投掷, 直到成功, 游戏结束. 最终, 投了 N 次游戏结束的概率为 $1/2^N$, 从而平均赢得的硬币数为 $(1/2) \times 1 + (1/4) \times 2 + \cdots + (1/2^N) \times 2^{N-1} + \cdots = \infty$. 按照这个游戏规则, 庄家需要你下无限多个硬币的赌注, 而你可能会反驳说, 这不合理, 只有无限次投币后才可能赢得无限多硬币. 这个悖论本质上是试图从并没有特征尺度的分布中去确定一个特征尺度 [48], 因为获得成功以及成功后所获得的硬币会发生在无穷多个不同的尺度上, 这也提醒我们此时应该直接考虑概率分布而不是仅仅考虑它的矩矩.

如果概率分布的一阶矩存在, 它便定义了一个尺度. 同样, 有时二阶矩存在也定义了一个尺度. 人们在生活中或研究科学问题时, 常常去寻找一个尺度, 如飞机的速度和原子的大小. 同时, 人们又必须面对大量不存在特征尺度的问题, 具有代表性的是在无序材料中的输运和弛豫呈现的时间多尺度特

英文引用格式: Deng W H. Anomalous and nonergodic multiscale modeling, analyses and algorithms (in Chinese). Sci Sin Math, 2023, 53: 1039–1066, doi: 10.1360/SSM-2023-0046

征^[48]和湍流的空间多尺度特性(无特征长度)^[31]. 输运(或弛豫)的时间多尺度主要体现在两次发生电子跳跃(或缺陷移动等)的等待时间,即非晶态半导体中的电荷输运. 由于许多时间尺度共存,所以这种服从长尾等待时间分布的输运也称为色散. 可能由于细胞质极其拥挤的环境,分子在活细胞中的运动呈现时间上的多尺度特征^[24]. 分子马达的定向输运行为也可能导致空间多尺度动力学特征. 为什么多尺度特征在生命系统中如此常见? 它的生物学意义是什么? 可能对细胞的功能有益吗? 等等^[2]. 这一系列问题成为生命科学中的重要课题. 各种新的多尺度动力学现象也在生命化学学科中不断涌现,如具有聚合/解聚过程的高分子聚合物呈现出的 Brown 非 Gauss 动力学特征^[42]. 在生态学中,多尺度动力学现象也非常普遍,尤其是动物的运动模式,如海鸥的觅食策略等^[66],也为随机最优搜索策略提供了仿生学的启示. 在数学学科如概率论和动力系统(混沌动力学)等中,无特征尺度问题也是重要的研究课题.

Newton 力学试图给出精确预测,预测可通过观测和实验验证. 早期将概率分布应用到自然科学问题时,主要关注均值和方差有界的分布. 均值代表着大量重复实验后最可能的值,而方差主要刻画观测的不确定性. 当出现 Maxwell-Boltzmann 分布后,整个分布有了物理意义,偏离均值不再意味着误差,大方差也不再意味着不精确的测量(参见文献[31]). 本文所讨论的反常与非遍历多尺度动力学是通过概率分布来描述的. 整个分布便是一个预测. 反常与非遍历多尺度动力学通常不再具有特征时间和/或特征空间尺度. 本文首先建立微观模型,即随机过程. 本文建立的随机过程包括连续随机游走模型^[62]、Langevin 类型的方程^[7-12,14]、时变的随机过程^[13]、多内部状态的 Lévy 游走^[63]、多内部状态的连续随机游走模型^[64]、交替的随机过程^[60,61]和非静止介质中的 Lévy 游走^[67]等. 本文对这些随机过程进行涨落动力学统计分析,包括分析各阶矩、计算首次通过时间、逃逸概率、所对应的泛函和遍历性分析等,讨论了占据比例的波动、半平面停留时间、位置时间平均的波动,也进行了随机分析. 基于分析结果,本文拓展了这些微观模型的工程和物理应用.

文献[13,16,18,19,58,62]推导出一系列宏观统计量(如粒子位置、泛函和平均首次退出时间等)的概率密度及逃逸概率满足的宏观方程. 文献[43-45,50,54]研究了推导出的偏微分方程解的正则性和计算方法,包括有限差分方法、卷积积分方法和变分方法等.

本文余下内容结构如下. 第2节讨论微观模型(建立的随机过程),推导出各种宏观统计量的概率密度满足的方程,并进行一些统计分析和应用. 第3节讨论方程的正则性和计算方法. 最后两节讨论该领域的研究前景及后续研究课题,包括非静止介质中的反常与非遍历多尺度动力学,跨尺度的反常与非遍历多尺度动力学,以及流形上的反常与非遍历动力学.

2 微观模型和宏观方程

本节建立反常与非遍历动力学的微观模型,即随机过程,包括连续随机游走模型、Langevin 类型的方程、时变的随机过程、交替的随机过程和非静止介质中的 Lévy 游走等;同时推导出这些微观模型的一些宏观统计量的概率密度满足的方程,并给出一些统计分析和应用.

2.1 连续随机游走模型及粒子位置概率密度满足的方程

随机游走模型在 20 世纪 60 年代被提出(参见文献[41]). 随机游走模型含有两个随机变量:跳跃步长 ξ_i 和两次发生跳跃的等待时间(时间间隔) τ_i ,它们满足概率密度函数 $\phi(x,t)$. 跳跃步长和等待时间的概率密度分别为 $\eta(x) = \int_0^{+\infty} \phi(x,t)dt$ 和 $\psi(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(x,t)dx$ (参见文献[40]). 因此, $\eta(x)dx$

为跳跃长度在区间 $(x, x + dx)$ 内的概率, $\psi(t)dt$ 为等待时间在区间 $(t, t + dt)$ 内的概率. 若等待时间和跳跃步长互相独立, 则有解耦形式 $\phi(x, t) = \eta(x)\psi(t)$. 接下来讨论解耦情形. 图 1 为连续随机游走模型的示意图. 连续随机游走模型可以按特征等待时间 $T = \int_0^{+\infty} t\psi(t)dt$ 和/或跳跃步长的二阶矩 $\Sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\eta(x)dx$ 有界或无界进行分类. 本文所关注的是 T 和 Σ^2 至少有一个是无界的情形. 记粒子在时刻 t 恰好到达位置 x 的概率密度为 $\rho(x, t)$, 则

$$\rho(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int_0^{+\infty} dt' \rho(x', t') \phi(x - x', t - t') + \delta(x)\delta(t), \quad (2.1)$$

其建立了 $\rho(x, t)$ 与 $\rho(x', t')$ 之间的关系, 上式右端第二项表示初始条件为 $\delta(x)$. 因此, t 时刻粒子在位置 x 的概率密度为

$$W(x, t) = \int_0^t dt' \rho(x, t') \varphi(t - t'), \quad (2.2)$$

即在时刻 t' 到达位置 x 后还没有移动, 其中 $\varphi(t) = 1 - \int_0^t \psi(t')dt'$ 为在时间间隔 $(0, t)$ 内没有发生跳跃的概率. 对方程 (2.1) 和 (2.2) 作 Fourier 变换和 Laplace 变换后整理可得

$$W(k, u) = \frac{1 - \psi(u)}{u} \cdot \frac{1}{1 - \phi(k, u)}, \quad (2.3)$$

称上式为 Montroll-Weiss 方程. 因此, 当 $\eta(x)$ 和 $\psi(t)$ 都给出时, 基于方程 (2.3) 便可推导出粒子概率密度 $W(x, t)$ 满足的方程. 若粒子运动有特征等待时间 $T = \tau$ 且跳跃步长各向同性有有限二阶矩 $\Sigma^2 = 2\sigma^2$, 则

$$\psi(u) = 1 - u\tau + O(u^2), \quad (2.4)$$

$$\eta(k) = 1 - \sigma^2 k^2 + O(k^4). \quad (2.5)$$

取 $W(x, t = 0) = W_0(x) = \delta(x)$, 将方程 (2.4) 和 (2.5) 代入方程 (2.3), 并舍去高阶项便可得

$$W(k, u) = \frac{1}{u + (\sigma^2/\tau)k^2}. \quad (2.6)$$

对方程 (2.6) 作逆 Fourier 变换和 Laplace 变换可得

$$\begin{cases} \frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = \left(\frac{\sigma^2}{\tau}\right) \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2}, \\ W(x, t = 0) = \delta(x). \end{cases} \quad (2.7)$$

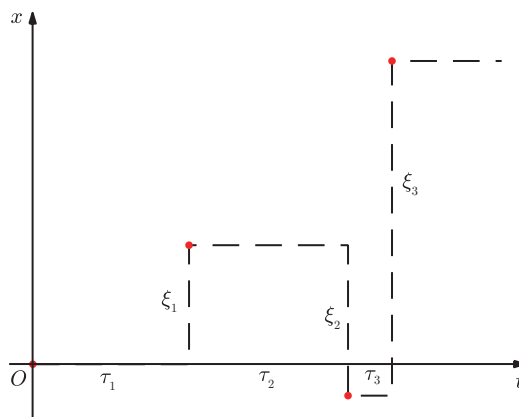


图 1 (网络版彩图) 连续随机游走模型

当等待时间的一阶矩发散时,

$$\psi(u) = 1 - u^\alpha \tau^\alpha + o(u^\alpha), \quad (2.8)$$

其中, τ^α 是尺度因子, $\alpha \in (0, 1)$. 而跳跃步长取为方程 (2.5), 则可得粒子位置概率密度满足的方程

$$\begin{cases} \frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = {}_0D_t^{1-\alpha} \left(\frac{\sigma^2}{\tau^\alpha} \right) \frac{\partial^2 W(x, t)}{\partial x^2}, \\ W(x, t=0) = \delta(x), \end{cases} \quad (2.9)$$

其中 ${}_0D_t^{1-\alpha} W(x, t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t dt' \frac{W(x, t')}{(t-t')^{1-\alpha}}$. 当跳跃步长的二阶矩发散时,

$$\eta(k) = 1 - \sigma^\mu |k|^\mu + o(|k|^\mu), \quad (2.10)$$

其中, σ^μ 是尺度因子, $\mu \in (1, 2)$. 而等待时间的分布取为方程 (2.8), 则可得粒子位置概率密度满足的方程

$$\begin{cases} \frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = {}_0D_t^{1-\alpha} \left(\frac{\sigma^\mu}{\tau^\alpha} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^\mu W(x, t), \\ W(x, t=0) = \delta(x), \end{cases} \quad (2.11)$$

其中

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^\mu W(x, t) = \frac{\mu \Gamma((\mu+1)/2)}{2^{2-\mu} \pi^{1/2} \Gamma(1-\mu/2)} \int_R \frac{W(x+y, t) + W(x-y, t) - 2W(x, t)}{y^{\mu+1}} dy.$$

2.2 连续随机游走模型的尺度极限及粒子位置概率密度满足的方程

在连续随机游走模型中, 若忽略跳跃步长 ξ_i , 只关注独立同分布的等待时间 τ_i , 则可得到一个更新过程. 从这个角度来看, 连续随机游走模型也可理解为复合的更新过程. 考虑复合的 Poisson 过程 $\mathbf{x}(t) = \sum_{j=0}^{N(t)} \xi_j$ (参见文献 [16]), 即 τ_i 的概率密度为 $\lambda e^{-\lambda t}$, $N(t)$ 为 Poisson 过程. $\mathbf{x}(t)$ 的特征函数可按如下方式计算:

$$\begin{aligned} W(\mathbf{k}, t) &= E(e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}(t)}) = \sum_{j=0}^{+\infty} E(e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}(t)} | N(t) = j) P(N(t) = j) \\ &= \sum_{j=0}^{+\infty} E(e^{i\mathbf{k} \cdot (\xi_0 + \xi_1 + \dots + \xi_j)} | N(t) = j) P(N(t) = j) \\ &= \sum_{j=0}^{+\infty} \eta(\mathbf{k})^j \frac{(\lambda t)^j}{j!} e^{-\lambda t} \\ &= e^{\lambda t(\eta(\mathbf{k}) - 1)}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

其中, $\mathbf{k}$ 表示空间跳跃步长可以是向量, i 表示虚数单位. 因此, 若 $\mathbf{x}(t)$ 是对称的随机过程, 则 $W(\mathbf{k}, t)$ 满足方程

$$\begin{cases} \frac{dW(\mathbf{k}, t)}{dt} = \lambda(\eta(\mathbf{k}) - 1)W(\mathbf{k}, t), \\ W(\mathbf{k}, t=0) = 1. \end{cases} \quad (2.13)$$

令 $S(t)$ 是一个 Laplace 特征指数为 $\tau^\alpha u^\alpha$ ($\alpha \in (0, 1)$) 的严格递增的从属过程, $E(t) := \inf\{\zeta > 0 : S(\zeta) > t\}$ 是相应的逆从属过程. 从而 $P(E(t) \leq \zeta) = P(S(\zeta) \geq t)$, 因此,

$$p_e(\zeta, t) = \frac{\partial P(E(t) \leq \zeta)}{\partial \zeta} = \frac{\partial}{\partial \zeta} [1 - P(S(\zeta) < t)] = -\frac{\partial}{\partial \zeta} \int_0^t p_s(y, \zeta) dy.$$

对上式两端关于 t 作 Laplace 变换可得

$$p_e(\zeta, u) = -\frac{\partial}{\partial \zeta} u^{-1} e^{-\zeta \tau^\alpha u^\alpha} = \tau^\alpha u^{\alpha-1} e^{-\zeta \tau^\alpha u^\alpha}. \quad (2.14)$$

这时, 随机过程 $\mathbf{x}(t) = \mathbf{y}(E(t))$ 的概率密度为

$$W(\mathbf{x}, t) = \int_0^{+\infty} W_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, \zeta) p_e(\zeta, t) d\zeta, \quad (2.15)$$

其中 $W_{\mathbf{y}}(\mathbf{x}, \zeta)$ 为随机过程 $\mathbf{y}(t)$ 在 ζ 时刻、 $\mathbf{x}$ 位置的概率密度. 若在方程 (2.13) 中取 $\eta(\mathbf{k}) = 1 - \sigma^2 |\mathbf{k}|^2$, 更新强度 $\lambda = \frac{1}{\tau}$, 则可得

$$\begin{cases} \frac{\partial W(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left(\frac{\sigma^2}{\tau}\right) \Delta W(\mathbf{x}, t), \\ W(\mathbf{x}, t=0) = \delta(\mathbf{x}). \end{cases} \quad (2.16)$$

此方程对应着方程 (2.7), 即此时随机过程 $\mathbf{x}(t) = \sum_{j=0}^{N(t)} \xi_j$ 是等待时间均值为 τ 、跳跃步长方差为 $2\sigma^2$ 的连续随机游走模型的尺度极限. 若取 $\eta(\mathbf{k}) = 1 - \sigma^\mu |\mathbf{k}|^\mu$ ($\mu \in (1, 2)$), 则可得

$$\begin{cases} \frac{\partial W(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\left(\frac{\sigma^\mu}{\tau}\right) (-\Delta)^{\mu/2} W(\mathbf{x}, t), \\ W(\mathbf{x}, t=0) = \delta(\mathbf{x}), \end{cases} \quad (2.17)$$

其中

$$\begin{aligned} -(-\Delta)^{\mu/2} W(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{2} c_{n,\mu} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{W(\mathbf{x} + \mathbf{y}, t) + W(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t) - 2W(\mathbf{x}, t)}{|\mathbf{y}|^{\mu+n}} d\mathbf{y} \\ &= -c_{n,\mu} \text{P.V.} \int_{\mathbb{R}^n} \frac{W(\mathbf{x}, t) - W(\mathbf{y}, t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{\mu+n}} d\mathbf{y}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

这里, $c_{n,\mu} = \frac{\mu \Gamma((\mu+n)/2)}{2^{1-\mu} \pi^{n/2} \Gamma(1-\mu/2)}$, P.V. 表示 Cauchy 主值. 若在方程 (2.15) 中, 取随机过程 $\mathbf{y}(t) = \sum_{j=0}^{N(t)} \xi_j$ (这里 $N(t)$ 的更新强度 λ 等于 1), ξ_j 的特征函数为 $\eta(\mathbf{k}) = 1 - \sigma^\mu |\mathbf{k}|^\mu$, 则随机过程 $\mathbf{x}(t) = \mathbf{y}(E(t))$ 的概率密度满足方程

$$\begin{cases} \frac{\partial W(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\left(\frac{\sigma^\mu}{\tau^\alpha}\right)_0 D_t^{1-\alpha} (-\Delta)^{\mu/2} W(\mathbf{x}, t), \\ W(\mathbf{x}, t=0) = \delta(\mathbf{x}). \end{cases} \quad (2.19)$$

2.3 基于连续随机游走模型刻画的粒子轨迹的泛函分布满足的方程

所谓粒子的轨迹就是随机过程的样本路径, 其泛函定义为

$$A = \int_0^t U(x(t')) dt', \quad (2.20)$$

其中, $U(x)$ 是一个给定的函数, $x(t)$ 是随机过程. 若在时刻 t , 粒子的位置和泛函值为 (x, A) , 则基于连续随机游走模型, 在时刻 $t - t'$ (最后一次跳跃发生的时间), 粒子的位置和泛函值应为 $(x, A - t'U(x))$. 记 $Y(x, A, t)dt$ 为粒子在时刻 $(t, t + dt)$ 跳入位置和泛函值为 (x, A) 的概率, 则有 (参见文献 [62])

$$G(x, A, t) = \int_0^t \varphi(t')Y(x, A - t'U(x), t - t')dt', \quad (2.21)$$

其中 $\varphi(t') = 1 - \int_0^{t'} \psi(t'')dt''$ 为在时间间隔 $(0, t')$ 内粒子没有发生跳跃的概率. 这里 $G(x, A, t)$ 为在时刻 t 粒子位置在 x 、泛函值为 A 的概率密度. 对上式两端作 Fourier 变换 $A \rightarrow p$, $x \rightarrow k$ 和 Laplace 变换 $t \rightarrow s$, 并应用积分变换的平移性质和 $\mathcal{F}\{xf(x); k\} = -i\frac{\partial}{\partial k}f(k)$, 可得

$$G(k, p, s) = \varphi\left(s + ipU\left(-i\frac{\partial}{\partial k}\right)\right)Y(k, p, s), \quad (2.22)$$

其中 $U(-i\frac{\partial}{\partial k})$ 对应 $U(x)$ 以 $-i\frac{\partial}{\partial k}$ 为参数. 下面计算 $Y(x, A, t)dt$, 考虑粒子在一维格点上跳跃, 相邻格点之间的距离为 a , 粒子向左和向右跳跃的概率各为 $\frac{1}{2}$. 注意到粒子要在时刻 t 到达 (x, A) , 一定是在等待了时间 t' 后, 以 $\frac{1}{2}$ 的概率从 $(x + a, A - t'U(x + a), t - t')$ 或 $(x - a, A - t'U(x - a), t - t')$ 跳过来的. 因此, 可得

$$\begin{aligned} Y(x, A, t) &= \delta(x)\delta(A)\delta(t) + \frac{1}{2} \int_0^t \psi(t')(Y(x + a, A - t'U(x + a), t - t') \\ &\quad + Y(x - a, A - t'U(x - a), t - t'))dt', \end{aligned} \quad (2.23)$$

其中 $\delta(x)\delta(A)\delta(t)$ 为初始条件, 表示在 0 时刻粒子的位置为 $x = 0$ 、泛函值为 $A = 0$ 的概率为 1. 对上式两端作 Fourier 变换 $A \rightarrow p$, $x \rightarrow k$ 和 Laplace 变换 $t \rightarrow s$, 可得

$$\begin{aligned} Y(k, p, s) &= 1 + \frac{1}{2}e^{-ika} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\psi(s + ipU(x))Y(x, p, s)dx \\ &\quad + \frac{1}{2}e^{-ika} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}\psi(s + ipU(x))Y(x, p, s)dx \\ &= 1 + \cos(ka)\psi\left(s + ipU\left(-i\frac{\partial}{\partial k}\right)\right)Y(k, p, s). \end{aligned} \quad (2.24)$$

注意 $\cos(ka)$ 和 $\psi(s + ipU(-i\frac{\partial}{\partial k}))$ 是不可互换的, 这个顺序很重要. 重新整理 (2.24), 并代入方程 (2.22) 可得

$$G(k, p, s) = \frac{1 - \psi(s + ipU(-i\frac{\partial}{\partial k}))}{s + ipU(-i\frac{\partial}{\partial k})} \cdot \frac{1}{1 - \cos(ka)\psi(s + ipU(-i\frac{\partial}{\partial k}))}. \quad (2.25)$$

取 $\psi(u) = 1 - u\tau$, 将其代入 (2.25), 应用 $\cos(ka) \simeq 1 - \frac{a^2k^2}{2}$ 并作逆 Fourier 变换和 Laplace 变换, 可得

$$\begin{cases} \frac{\partial G(x, p, t)}{\partial t} = \frac{a^2}{2\tau} \frac{\partial^2 G(x, p, t)}{\partial x^2} - ipU(x)G(x, p, t), \\ G(x, p, t = 0) = \delta(x). \end{cases} \quad (2.26)$$

取 $\psi(u) = 1 - u^\alpha\tau^\alpha$, 将其代入 (2.25), 可得

$$\frac{\partial G(x, p, t)}{\partial t} = \frac{a^2}{2\tau^\alpha} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathcal{D}_t^{1-\alpha} G(x, p, t) - ipU(x)G(x, p, t), \quad (2.27)$$

其中分数阶物质导数为

$$\mathcal{D}_t^{1-\alpha} G(x, p, t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left(\frac{\partial}{\partial t} + ipU(x) \right) \int_0^t \frac{e^{-(t-t') \cdot ipU(x)}}{(t-t')^{1-\alpha}} G(x, p, t') dt'. \quad (2.28)$$

方程 (2.27) 称为向前的 Feynman-Kac 方程. 接下来, 继续推导以粒子起始位置 x_0 为参数的粒子轨迹泛函 A 的概率密度 $G_{x_0}(A, t)$ 所对应的方程. 粒子从 x_0 起始, 在时刻 t' 发生第一次跳跃后以 $\frac{1}{2}$ 的概率位于 $x_0 + a$ 或 $x_0 - a$, 或在观测时间区间 $(0, t)$ 内, 粒子未发生运动, 这时有

$$G_{x_0}(A, t) = \int_0^t dt' \psi(t') \frac{1}{2} \{ G_{x_0+a}(A - t'U(x_0), t - t') + G_{x_0-a}(A - t'U(x_0), t - t') \} + \varphi(t) \delta(A - tU(x_0)). \quad (2.29)$$

对上式两边作 Fourier 变换和 Laplace 变换后可得

$$G_k(p, s) = \psi \left(ipU \left(-i \frac{\partial}{\partial k} \right) + s \right) \cos(ka) G_k(p, s) + \varphi \left(ipU \left(-i \frac{\partial}{\partial k} \right) + s \right) \delta(k). \quad (2.30)$$

取 $\psi(u) = 1 - u^\alpha \tau^\alpha$, 将其代入 (2.30), 并作逆 Fourier 变换和 Laplace 变换, 可得

$$\begin{cases} \frac{\partial G_{x_0}(p, t)}{\partial t} = \frac{a^2}{2\tau^\alpha} \mathcal{D}_t^{1-\alpha} \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} G_{x_0}(p, t) - ipU(x_0) G_{x_0}(p, t), \\ G_{x_0}(p, t = 0) = 1. \end{cases} \quad (2.31)$$

方程 (2.31) 称为向后的 Feynman-Kac 方程.

2.4 Langevin 类型的方程及宏观方程

Einstein 关于随机过程现代研究方法的开创性工作 [21] 发表 3 年后, 1908 年 Langevin 基于 Newton 第二定律给出了数学上不同、物理上等价的 Brown 运动的刻画 (参见文献 [34]), 本质上就是随机物理版本的 “ $F = ma$ ”, 如今称为 Langevin 方程:

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\nabla V(x, t) - m\gamma \frac{dx}{dt} + \mu \xi_1(t), \quad (2.32)$$

其中, m 是粒子的质量, $V(x, t)$ 是外部势, γ 是摩擦系数, $\xi_1(t)$ 是白噪声. 若考虑到摩擦力的延迟效应, 则可得 Langevin 方程的一个自然推广, 即所谓的广义 Langevin 方程

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -\nabla V(x, t) - m \int_0^t \gamma(t-t') u(t') dt' + \mu \xi_2(t). \quad (2.33)$$

特别注意在方程 (2.32) 和 (2.33) 中的 $\xi_1(t)$ 和 $\xi_2(t)$ 是不同的, 但由于都是内部噪声, 由涨落耗散定理 [32] (摩擦力和随机驱动力来自相同的源) 可得它们的关联函数分别对应 $\delta(t)$ ($= \frac{m}{k_B \mu T} E(\xi_1(t') \xi_1(t' + t))$) 和 $\gamma(t)$ ($= \frac{m}{k_B \mu T} E(\xi_2(t') \xi_2(t' + t))$), 即相应的摩擦项, 其中, k_B 是 Boltzmann 常数, T 是绝对温度. 同一个随机过程既可用连续随机游走模型去刻画也可用 Langevin 类型的方程去描述, 但若考虑外部势的影响, 则用 Langevin 类型的方程描述更方便. 文献 [22] 给出了基于连续随机游走模型的连续 Lévy 飞行的 Langevin 类型方程的刻画.

接着基于 Langevin 类型的方程推导出向前的 Feynman-Kac 方程 (在参数 p 取为 0 时, 其便退化为粒子位置概率密度满足的方程) [5, 58]. 接下来讨论过阻尼形式

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t), t) + g(x(t), t) \xi(t), \quad (2.34)$$

其中, $f(x(t), t)$ 是外力, $\xi(t)$ 是外部环境波动带来的噪声项 (这里取为 Lévy 噪声), $g(x(t), t)$ 是乘性噪声项. 记 $L(t)$ 为 Lévy 过程, $\xi(t)$ 是它的形式导数, 即 $L(t)$ 的增量 $\delta L(t) = L(t+\tau) - L(t)$ 可定义为 $\xi(t)$ 的时间积分, $\delta L(t) = \int_t^{t+\tau} \xi(t') dt'$. 类似地, 满足方程 (2.34) 的 $x(t)$ 的增量 $\delta x(t) = x(t+\tau) - x(t)$ 在时间区间 τ ($\tau \rightarrow 0$) 内满足

$$\delta x(t) = f(x(t), t)\tau + g(x(t), t)\delta L(t), \quad (2.35)$$

这是对方程 (2.34) 的 Itô 解释. 由于 Lévy 过程 $L(t)$ 的增量具有独立平稳性, 所以 $\delta L(t)$ 和 $L(\tau)$ 具有相同的特征函数 $\langle e^{-ikL(\tau)} \rangle = e^{\tau\eta_0(k)}$, 其中 $\langle \cdot \rangle$ 表示系综平均. 下面对于具体的 Lévy 噪声有具体的形式, 如 Gauss 白噪声 $\eta_0(k) = -k^2$, 非 Gauss 的 β 稳定的 Lévy 噪声 $\eta_0(k) = -|k|^\beta$ ($0 < \beta < 2$). 粒子的位置 x 和轨迹泛函 A 的联合概率密度 $G(x, A, t)$ 的 Fourier 变换 ($x \rightarrow k, A \rightarrow p$) 为

$$G(k, p, t) = \langle e^{-ikx(t)} e^{-ipA(t)} \rangle. \quad (2.36)$$

在时间区间 τ ($\tau \rightarrow 0$) 内, 轨迹泛函的增量为 $\delta A(t) = A(t+\tau) - A(t) = U(x(t))\tau$. 考虑 $G(x, A, t)$ 在 Fourier 空间的增量

$$\delta G(k, p, t) = G(k, p, t+\tau) - G(k, p, t) = \langle e^{-ikx(t+\tau)} e^{-ipA(t+\tau)} \rangle - \langle e^{-ikx(t)} e^{-ipA(t)} \rangle. \quad (2.37)$$

将 $\delta x(t)$ 和 $\delta A(t)$ ($\tau \rightarrow 0$) 代入上式可得

$$\begin{aligned} \delta G(k, p, t) &= \langle e^{-ikx(t)} e^{-ipA(t)} (e^{-ikg(x(t), t)\delta L(t)} - 1) \rangle \\ &\quad - ik\tau \langle e^{-ikx(t)} e^{-ipA(t)} f(x(t), t) \rangle - ip\tau \langle e^{-ikx(t)} e^{-ipA(t)} U(x(t)) \rangle. \end{aligned} \quad (2.38)$$

由于 $\delta L(t)$ 独立于粒子轨迹 $x(t)$, 方程 (2.38) 右端第一项应用双期望公式和 $\delta L(t)$ 的特征函数, 可得

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} \langle e^{-ikg(x(t), t)\delta L(t)} - 1 \rangle = \eta_0(g(x(t), t)k). \quad (2.39)$$

方程 (2.38) 右端第二和第三项是 $G(x, A, t)$ 与其他函数乘积的 Fourier 变换, 即

$$ik \langle e^{-ikx(t)} e^{-ipA(t)} f(x(t), t) \rangle = \mathcal{F}_x \mathcal{F}_A \left\{ \frac{\partial}{\partial x} (f(x, t) G(x, A, t)) \right\} \quad (2.40)$$

和

$$ip \langle e^{-ikx(t)} e^{-ipA(t)} U(x(t)) \rangle = ip \mathcal{F}_x \mathcal{F}_A \{ U(x) G(x, A, t) \}. \quad (2.41)$$

基于方程 (2.39)–(2.41), 方程 (2.38) 两边除以 τ , 并令 $\tau \rightarrow 0$, 可得

$$\frac{\partial G(k, p, t)}{\partial t} = \mathcal{F}_x \{ \eta_0(kg(x, t)) G(x, p, t) \} - \mathcal{F}_x \left\{ \frac{\partial}{\partial x} (f(x, t) G(x, p, t)) + ip U(x) G(x, p, t) \right\}. \quad (2.42)$$

当 $\eta_0(kg(x, t)) = -(kg(x, t))^2$, 即 $\xi(t)$ 为白噪声时, 对方程 (2.42) 关于 x 作逆 Fourier 变换, 可得

$$\frac{\partial G(x, p, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (f(x, t) G(x, p, t)) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} (g^2(x, t) G(x, p, t)) - ip U(x) G(x, p, t). \quad (2.43)$$

当 $\eta_0(kg(x, t)) = -|kg(x, t)|^\beta$, 即 $\xi(t)$ 为 Lévy 噪声时, 对方程 (2.42) 关于 x 作逆 Fourier 变换, 可得

$$\frac{\partial G(x, p, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (f(x, t) G(x, p, t)) + \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^\beta (|g(x, t)|^\beta G(x, p, t)) - ip U(x) G(x, p, t). \quad (2.44)$$

接下来继续基于 Langevin 类型的方程 (2.34) (但 f 不再显含 t , g 是常数, 取为 1, 即加性噪声) 推导向后的 Feynman-Kac 方程. 注意到这时的初始位置 x_0 是确定性变量. 下面建立在时间区间 τ ($\tau \rightarrow 0$) 内, 泛函 A 与 x_0 之间的关系:

$$A(t+\tau)|_{x_0} = \int_0^\tau U(x(t'))dt' + \int_\tau^{t+\tau} U(x(t'))dt' = U(x_0)\tau + A(t)|_{x(\tau)}, \quad (2.45)$$

其中 $A(t+\tau)|_{x_0}$ 表示初始位置在 x_0 的随机过程 $x(t)$ 在 $t+\tau$ 时刻的泛函. 在方程 (2.35) 中, 令 $t \rightarrow 0$, 可得

$$x(\tau) = x_0 + f(x_0)\tau + L(\tau). \quad (2.46)$$

在 Fourier 空间中, $G_{x_0}(A, t)$ 可表示为

$$G_{x_0}(p, t) = \langle e^{-ipA(t)|_{x_0}} \rangle. \quad (2.47)$$

进一步地, 由方程 (2.45) 可得

$$G_{x_0}(p, t+\tau) = \langle \langle e^{-ipA(t)|_{x(\tau)}} \rangle e^{-ipU(x_0)\tau} \rangle. \quad (2.48)$$

增量 $\delta G_{x_0}(p, t)$ 可表示为

$$\delta G_{x_0}(p, t) = G_{x_0}(p, t+\tau) - G_{x_0}(p, t) = \langle \langle e^{-ipA(t)|_{x(\tau)}} \rangle e^{-ipU(x_0)\tau} - \langle e^{-ipA(t)|_{x_0}} \rangle \rangle. \quad (2.49)$$

在方程 (2.49) 中, 令 $\tau \rightarrow 0$, 并忽略 τ 的高阶项, 可得

$$\delta G_{x_0}(p, t) = \langle \langle e^{-ipA(t)|_{x(\tau)}} \rangle - \langle e^{-ipA(t)|_{x_0}} \rangle - ipU(x_0)\tau \langle e^{-ipA(t)|_{x_0}} \rangle \rangle. \quad (2.50)$$

对 $\langle e^{-ipA(t)|_{x_0}} \rangle$ 关于 x_0 作 Fourier 变换, 可得 $G_{k_0}(p, t)$. 记 $T_L = \langle e^{-ipA(t)|_{x(\tau)}} \rangle$, 则 $\langle T_L \rangle$ 的 Fourier 变换 ($x_0 \rightarrow k_0$) 为

$$\mathcal{F}_{x_0}\{\langle T_L \rangle\} = \left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0x(\tau)} T_L e^{ik_0[f(x_0)\tau+L(\tau)]} dx_0 \right\rangle. \quad (2.51)$$

基于方程 (2.46), 将上式 dx_0 替换为 $dx(\tau)$, 可得

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{x_0}\{\langle T_L \rangle\} &= \left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0x(\tau)} T_L e^{ik_0[f(x_0)\tau+L(\tau)]} dx(\tau) \right\rangle \\ &\quad - \left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0x(\tau)} T_L e^{ik_0[f(x_0)\tau+L(\tau)]} \frac{df(x_0)}{dx_0} \tau dx_0 \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.52)$$

由于上式中所有 x_0 和 $f(x_0)$ 都乘以 τ , 因此可以用 $x(\tau)$ 替换所有 x_0 (其中产生的关于 τ 的高阶项可以被忽略). 同时应用 $e^{ik_0f(x_0)\tau} \simeq 1 + ik_0f(x_0)\tau$, 则可得方程 (2.52) 右边第一项

$$\left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0x(\tau)} T_L e^{ik_0L(\tau)} dx(\tau) \right\rangle + ik_0\tau \left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0x(\tau)} T_L f(x(\tau)) dx(\tau) \right\rangle,$$

其中加号右边项等于 $\tau \mathcal{F}_{x_0}\left\{\frac{\partial}{\partial x_0}(f(x_0)G_{x_0}(p, t))\right\}$. 方程 (2.52) 右边第二项等于

$$-\tau \left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0x(\tau)} T_L \frac{df(x(\tau))}{dx(\tau)} dx(\tau) \right\rangle = -\tau \mathcal{F}_{x_0}\left\{\frac{df(x_0)}{dx_0} G_{x_0}(p, t)\right\}. \quad (2.53)$$

因此, 在方程 (2.50) 中, $\langle \langle e^{-ipA(t)|_{x(\tau)}} \rangle \rangle - \langle e^{-ipA(t)|_{x_0}} \rangle$ 的 Fourier 变换为

$$\left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik_0 y} T_L(e^{ik_0 L(\tau)} - 1) dy \right\rangle + \tau \mathcal{F}_{x_0} \left\{ f(x_0) \frac{\partial G_{x_0}(p, t)}{\partial x_0} \right\},$$

即

$$\tau \eta_0(-k_0) G_{k_0}(p, t) + \tau \mathcal{F}_{x_0} \left\{ f(x_0) \frac{\partial G_{x_0}(p, t)}{\partial x_0} \right\},$$

其中用到了方程 (2.39). 在方程 (2.50) 两边同时除以 τ 并令 $\tau \rightarrow 0$, 可得在 Fourier 空间中的向后的 Feynman-Kac 方程

$$\frac{\partial G_{k_0}(p, t)}{\partial t} = \eta_0(-k_0) G_{k_0}(p, t) + \mathcal{F}_{x_0} \left\{ f(x_0) \frac{\partial G_{x_0}(p, t)}{\partial x_0} - ipU(x_0) G_{x_0}(p, t) \right\}. \quad (2.54)$$

如果 $\xi(t)$ 是白噪声 $\eta_0(-k_0) = -k_0^2$, 则可得向后的 Feynman-Kac 方程

$$\frac{\partial G_{x_0}(p, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} G_{x_0}(p, t) + f(x_0) \frac{\partial G_{x_0}(p, t)}{\partial x_0} - ipU(x_0) G_{x_0}(p, t). \quad (2.55)$$

如果 $\xi(t)$ 是 Lévy 噪声 $\eta_0(-k_0) = -|k_0|^\beta$ ($0 < \beta < 2$), 则可得向后的 Feynman-Kac 方程

$$\frac{\partial G_{x_0}(p, t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial x_0} \right)^\beta G_{x_0}(p, t) + f(x_0) \frac{\partial G_{x_0}(p, t)}{\partial x_0} - ipU(x_0) G_{x_0}(p, t). \quad (2.56)$$

2.5 时变的随机过程及宏观方程

对已有随机过程作时变, 也是一种有效的建模方式 (参见文献 [13, 58]). 令 $S(t)$ 是一个 Laplace 特征指数为 cu^α ($\alpha \in (0, 1)$) 的严格递增的从属过程, $E(t) := \inf\{\zeta > 0 : S(\zeta) > t\}$ 是相应的逆从属过程. 从而 $P(E(t) \leq \zeta) = P(S(\zeta) \geq t)$. 取 $S(t)$ 和 $E(t)$ 为时变过程. 若 $y(t)$ 是扩散系数为 σ^2 的 Brown 运动, 在 $S(t)$ 中取 $c = 1/\tau$ 和 $\alpha = \mu/2$, 则对 $y(t)$ 作了时变后的过程 $x(t) = y(S(t))$ 的位置的概率密度满足方程 (2.17) [16]. 若在 $E(t)$ 所对应的 $S(t)$ 中取 $c = \tau^\alpha$, 则对 $y(t)$ 作了时变后的过程 $x(t) = y(E(t))$ 的位置的概率密度满足方程 (2.9). 若这时 $S(t)$ 的形式导数记为 $\theta(t)$ (独立于 $\xi(s)$), 则 Langevin 方程

$$\begin{cases} \frac{dx(s)}{ds} = f(x(s)) + g(x(s))\xi(s), \\ \frac{dt(s)}{ds} = \theta(s) \end{cases} \quad (2.57)$$

可表示为 $y(t) = x(E(t))$, 因此方程 (2.57) 可重新写为

$$\frac{dy(t)}{dt} = f(y(t)) \frac{dE(t)}{dt} + g(y(t))\xi(E(t)) \frac{dE(t)}{dt}. \quad (2.58)$$

基于 Itô 积分的解释, 关于 $y(t)$ 的增量可表示为

$$\delta y(t) = f(y(t))\delta E(t) + g(y(t))\delta L(E(t)), \quad (2.59)$$

其中, $\delta E(t) = E(t + \tau) - E(t)$, $\delta L(E(t)) = L(E(t + \tau)) - L(E(t))$. 类似于 (2.37) 和 (2.38) 的推导, 此时 $G(y, A, t)$ 在 Fourier 空间的增量为

$$\delta G(k, p, t) = \langle e^{-iky(t) - ipA(t)} (e^{-ikg(y(t))\delta L(E(t))} - 1) \rangle - ik \langle e^{-iky(t) - ipA(t)} f(y(t))\delta E(t) \rangle$$

$$-ip\tau\langle e^{-iky(t)-ipA(t)}U(y(t))\rangle. \quad (2.60)$$

应用双期望公式可得上式右端第一项为 $\langle e^{-iky(t)-ipA(t)}\eta_0(kg(y(t)))\delta E(t)\rangle$. 在方程 (2.60) 两边同时除以 τ , 并令 $\tau \rightarrow 0$, 可得

$$\begin{aligned} \frac{\partial G(k, p, t)}{\partial t} &= \left\langle e^{-iky(t)-ipA(t)}\eta_0(kg(y(t)))\frac{dE(t)}{dt} \right\rangle - ik \left\langle e^{-iky(t)-ipA(t)}f(y(t))\frac{dE(t)}{dt} \right\rangle \\ &\quad - ip\langle e^{-iky(t)-ipA(t)}U(y(t))\rangle \\ &=: Q_1 + Q_2 + Q_3. \end{aligned} \quad (2.61)$$

关于 Q_3 作逆 Fourier 变换 ($k \rightarrow y$) 自然有 $-ipU(y)G(y, p, t)$. 为处理 Q_1 , 本文技术性地在其中添加 $\delta(y - y(t))$, 将其表示为 $Q_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iky}\eta_0(kg(y))\langle e^{-ipA(t)}\delta(y - y(t))\frac{dE(t)}{dt} \rangle dy$. 将泛函 $A(t)$ 表示为一个从属过程 $A(t) = V(E(t))$, $V(s) = \int_0^s U(x(s'))\theta(s')ds'$. 将 $y(t) = x(E(t))$ 和 $A(t) = V(E(t))$ 代入 Q_1 的中间项, 可得

$$\left\langle e^{-ipV(E(t))}\delta(y - x(E(t)))\frac{dE(t)}{dt} \right\rangle = \int_0^{+\infty} \langle e^{-ipV(s)}\delta(y - x(s))\delta(t - S(s)) \rangle ds. \quad (2.62)$$

对方程 (2.62) 作 Laplace 变换 ($t \rightarrow u$) 后代入 Q_1 得

$$Q_1(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iky}\eta_0(kg(y))\langle e^{-ipV(s)-uS(s)}\delta(y - x(s)) \rangle dy. \quad (2.63)$$

同时, $G(y, p, t)$ 可表示为

$$G(y, p, t) = \langle e^{-ipV(E(t))}\delta(y - x(E(t))) \rangle = \int_0^{+\infty} \langle e^{-ipV(s)}\delta(s - E(t))\delta(y - x(s)) \rangle ds. \quad (2.64)$$

则上式的 Laplace 变换为

$$G(y, p, u) = \int_0^{+\infty} \langle e^{-ipV(s)-uS(s)}\theta(s)\delta(y - x(s)) \rangle ds. \quad (2.65)$$

在方程 (2.65) 中, 注意到 $\theta(s)$ 和 $x(s)$ 独立, 因此可得 (参见文献 [5])

$$\begin{aligned} \langle e^{-ipV(s)-uS(s)}\theta(s) \rangle &= \langle \theta(s)e^{-\int_0^s ipU(x(s'))\theta(s')+u\theta(s')ds'} \rangle \\ &= -\frac{1}{u + ipU(x(s))} \frac{\partial}{\partial s} \langle e^{-\int_0^s ipU(x(s'))\theta(s')+u\theta(s')ds'} \rangle \\ &= -\frac{1}{u + ipU(x(s))} \frac{\partial}{\partial s} e^{-\tau^\alpha \int_0^s (ipU(x(s'))+u)^\alpha ds'} \\ &= \frac{\tau^\alpha (u + ipU(x(s)))^\alpha}{u + ipU(x(s))} \langle e^{-\int_0^s ipU(x(s'))\theta(s')+u\theta(s')ds'} \rangle. \end{aligned} \quad (2.66)$$

将 (2.66) 代入方程 (2.65), 可得

$$G(y, p, u) = \tau^\alpha (u + ipU(x(s)))^{\alpha-1} \int_0^{+\infty} \langle e^{-ipV(s)-uS(s)}\delta(y - x(s)) \rangle ds. \quad (2.67)$$

比较 (2.67) 和 (2.63), 可得

$$Q_1(u) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iky}\eta_0(kg(y))\tau^{-\alpha}(u + ipU(x(s)))^{1-\alpha}G(y, p, u)dy. \quad (2.68)$$

对于 Q_2 , 与 Q_1 的计算过程相同, 可得

$$Q_2(u) = -ik \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iky} f(y) \tau^{-\alpha} (u + ipU(x(s)))^{1-\alpha} G(y, p, u) dy. \quad (2.69)$$

将 (2.68) 和 (2.69) 及 Q_3 代入方程 (2.61) 得到 Fourier 空间中的向前的 Feynman-Kac 方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial G(k, p, t)}{\partial t} = & \mathcal{F}_y \{ \tau^{-\alpha} \eta_0(kg(y)) \mathcal{D}_t^{1-\alpha} G(y, p, t) \} \\ & - \mathcal{F}_y \left\{ \tau^{-\alpha} \frac{\partial}{\partial y} f(y) \mathcal{D}_t^{1-\alpha} G(y, p, t) + ipU(y) G(y, p, t) \right\}. \end{aligned} \quad (2.70)$$

2.6 交替和多内部状态的随机过程及宏观方程

在复杂的物理和生物过程中经常会观测到强反常扩散现象 (参见文献 [61]), 即对于随机过程 (模型) $x(t)$, $\langle |x|^q \rangle \sim t^{qv(q)}$, 其中 $v(q)$ 不是常数. Lévy 游走^[47] 含有两个尺度, 分别是扩散尺度和弹道尺度. 若等待时间的概率密度为 $\psi(t) \sim t^{-1-\alpha}$ ($1 < \alpha < 2$), 则当 $q < \alpha$ 时, $\langle |x|^q \rangle \sim t^{q/\alpha}$; 而当 $q > \alpha$ 时, $\langle |x|^q \rangle \sim t^{q+1-\alpha}$. Lévy 游走和 Brown 运动交替的两状态随机过程具有更丰富的强反常动力学特征^[61], 是有效的间歇搜索过程. 若在 Lévy 游走和 Brown 运动阶段的逗留时间分别服从指数为 α_+ 和 α_- 的幂律分布 ($0 < \alpha_{\pm} < 2$), 则 3 个不同的尺度会共存, 即 $u \sim k$ 、 $u \sim |k|^2$ 和 $u \sim |k|^{\alpha_+/\alpha_-}$. 不同于纯粹的 Lévy 游走, 若 $\alpha_- < \alpha_+$, 则即使 Lévy 游走逗留时间指数 $\alpha_+ < 1$, 仍可观测到强反常扩散现象.

本文通过引入多个内部状态来刻画一些自然现象^[63,64], 如非晶半导体中的陷阱和细胞膜中的离子电流等. 每个内部状态对应一个等待时间的分布, 内部状态的转换由转移矩阵为 M 的 Markov 链描述. 矩阵 M 的维数为 $n \times n$, 其中 n 为内部状态的个数. 矩阵 M 的元素 m_{ij} 表示从状态 i 到 j 的转移概率. 借用量子力学中的记号, 用 $\langle \cdot |$ 和 $|\cdot \rangle$ 分别表示行向量和列向量. 周期链和遍历链会存在平衡分布, 记为 $\langle \text{eq}_M |$, 同时会有性质 $\langle \text{eq}_M | M = \langle \text{eq}_M |$. 转移矩阵 M 的最大特征值是 1, 相对应的右特征向量的所有分量为 1, 记为 $|\Sigma \rangle$. 也就是说 $M|\Sigma \rangle = |\Sigma \rangle$. 若 M 不可约, 则其次大特征值严格小于 1. 用 $|\text{init} \rangle$ 表示内部状态的初始列分布. 显然 $\langle \Sigma | \text{init} \rangle$ 和 $\langle \Sigma | \text{eq}_M \rangle$ 都为 1. 等待时间和跳跃步长的分布矩阵可分别记为 $\Psi(t) = \text{diag}(\psi^{(1)}(t), \psi^{(2)}(t), \dots, \psi^{(n)}(t))$ 和 $\Lambda(\mathbf{x}) = \text{diag}(\eta^{(1)}(\mathbf{x}), \eta^{(2)}(\mathbf{x}), \dots, \eta^{(n)}(\mathbf{x}))$.

随机过程的初始状态由初始分布得到. 在确定了初始状态后, 如状态 i , 等待时间和跳跃步长则分别由分布 $\psi^{(i)}(t)$ 和 $\eta^{(i)}(t)$ 得到. 新的内部状态则由分布 $M|\text{init} \rangle$ 确定. 此过程可不断重复. 用 $w^{(i)}(\mathbf{x}, t)$ ($i = 1, 2, \dots, n$) 表示在 t 时刻 d 维空间中, 处于第 i 个内部状态的粒子位于位置 $\mathbf{x}$ 的概率密度. 记 $|W(\mathbf{x}, t) \rangle$ 为列向量 $\{w^{(i)}(\mathbf{x}, t), i = 1, 2, \dots, n\}$. 取 $|W(\mathbf{x}, 0) \rangle = \delta(\mathbf{x})\delta(t)|\text{init} \rangle$. 用 $q_j^{(i)}(\mathbf{x}, t)$ 表示在第 j 步后时间 t 粒子恰好在内部状态 i 到达位置 $\mathbf{x}$. $|Q_j(\mathbf{x}, t) \rangle$ 表示分量为 $q_j^{(i)}(\mathbf{x}, t)$ ($i = 1, 2, \dots, n$) 的列向量. 这时的存活概率矩阵为

$$\bar{\varphi}(t) = \text{diag} \left(\int_t^{+\infty} \psi^{(1)}(t') dt', \int_t^{+\infty} \psi^{(2)}(t') dt', \dots, \int_t^{+\infty} \psi^{(n)}(t') dt' \right) = I - \int_0^t \Psi(t') dt',$$

其中 I 表示单位矩阵. 上式的 Laplace 变换为 $\bar{\varphi}(u) = \frac{1}{u}(I - \Psi(u))$. 这时

$$|W(\mathbf{x}, t) \rangle = \int_0^t \bar{\varphi}(t') \sum_{j=0}^{+\infty} |Q_j(\mathbf{x}, t-t') \rangle dt'. \quad (2.71)$$

对于 $q_j^{(i)}(\mathbf{x}, t)$, 有

$$q_j^{(i)}(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^n \int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} m_{ji} \phi^{(j)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t-t') q_{j-1}^{(j)}(\mathbf{y}, t') d\mathbf{y} dt',$$

其中 $\phi^{(j)}(\mathbf{x}, t)$ 表示在第 j 个内部状态等待时间和跳跃步长的联合概率密度. 该方程也可以等价地写成如下矩阵形式:

$$|Q_j(\mathbf{x}, t)\rangle = \int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} M^T \Phi(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - t') |Q_{j-1}(\mathbf{y}, t')\rangle d\mathbf{y} dt', \quad (2.72)$$

其中 $\Phi(\mathbf{x}, t) = \text{diag}(\phi^{(1)}(\mathbf{x}, t), \phi^{(2)}(\mathbf{x}, t), \dots, \phi^{(n)}(\mathbf{x}, t))$. 若等待时间和跳跃步长是独立的, 则 $\Phi(\mathbf{x}, t) = \Lambda(\mathbf{x})\Psi(t)$. 对方程 (2.71) 和 (2.72) 两边分别作 Fourier 变换和 Laplace 变换, 可得

$$|W(\mathbf{k}, u)\rangle = \frac{I - \Psi(u)}{u} (I - M^T \Phi(\mathbf{k}, u))^{-1} |\text{init}\rangle. \quad (2.73)$$

取 $\Psi(u) = \text{diag}(1 - \tau^{\alpha_1} u^{\alpha_1}, 1 - \tau^{\alpha_2} u^{\alpha_2}, \dots, 1 - \tau^{\alpha_n} u^{\alpha_n})$, 其中 $\alpha_j \in (0, 1)$, $j = 1, 2, \dots, n$. 取 $\Lambda(\mathbf{k}) = (1 - \sigma^2 |\mathbf{k}|^2)I$. 将它们代入 (2.73) 并作逆变换, 可得

$$\begin{aligned} M^T \frac{\partial}{\partial t} |W(\mathbf{x}, t)\rangle &= (M^T - I) \text{diag}(\tau^{-\alpha_1}, \tau^{-\alpha_2}, \dots, \tau^{-\alpha_n}) \text{diag}({}_0D_t^{1-\alpha_1}, {}_0D_t^{1-\alpha_2}, \dots, {}_0D_t^{1-\alpha_n}) |W(\mathbf{x}, t)\rangle \\ &\quad + M^T \text{diag}(\sigma^2 \tau^{-\alpha_1}, \sigma^2 \tau^{-\alpha_2}, \dots, \sigma^2 \tau^{-\alpha_n}) \text{diag}({}_0D_t^{1-\alpha_1}, {}_0D_t^{1-\alpha_2}, \dots, {}_0D_t^{1-\alpha_n}) \Delta |W(\mathbf{x}, t)\rangle. \end{aligned} \quad (2.74)$$

结合本节前半部分及第 2.3 小节的推导思路可得向前的粒子轨迹泛函分布满足的方程 (参见文献 [63])

$$\begin{aligned} M^T \frac{\partial}{\partial t} |G(\mathbf{x}, p, t)\rangle &= (M^T - I) \text{diag}(\tau^{-\alpha_1}, \tau^{-\alpha_2}, \dots, \tau^{-\alpha_n}) \text{diag}({}_0D_t^{1-\alpha_1}, {}_0D_t^{1-\alpha_2}, \dots, {}_0D_t^{1-\alpha_n}) |G(\mathbf{x}, p, t)\rangle \\ &\quad + M^T \text{diag}(\sigma^2 \tau^{-\alpha_1}, \sigma^2 \tau^{-\alpha_2}, \dots, \sigma^2 \tau^{-\alpha_n}) \Delta \text{diag}({}_0D_t^{1-\alpha_1}, {}_0D_t^{1-\alpha_2}, \dots, {}_0D_t^{1-\alpha_n}) |G(\mathbf{x}, p, t)\rangle \\ &\quad - ipU(\mathbf{x}) M^T |G(\mathbf{x}, p, t)\rangle \end{aligned} \quad (2.75)$$

以及向后的粒子轨迹泛函分布满足的方程

$$\begin{aligned} M \frac{\partial}{\partial t} |G_{\mathbf{x}_0}(p, t)\rangle &= \text{diag}(\tau^{-\alpha_1}, \tau^{-\alpha_2}, \dots, \tau^{-\alpha_n}) \text{diag}({}_0D_t^{1-\alpha_1}, {}_0D_t^{1-\alpha_2}, \dots, {}_0D_t^{1-\alpha_n}) (M - I) |G_{\mathbf{x}_0}(p, t)\rangle \\ &\quad + \text{diag}(\sigma^2 \tau^{-\alpha_1}, \sigma^2 \tau^{-\alpha_2}, \dots, \sigma^2 \tau^{-\alpha_n}) \text{diag}({}_0D_t^{1-\alpha_1}, {}_0D_t^{1-\alpha_2}, \dots, {}_0D_t^{1-\alpha_n}) \Delta M |G_{\mathbf{x}_0}(p, t)\rangle \\ &\quad - ipU(\mathbf{x}_0) M |G_{\mathbf{x}_0}(p, t)\rangle. \end{aligned} \quad (2.76)$$

另外, 由于这时粒子有 n 个内部状态, 自然可以定义这样的泛函 $A_s = \int_0^t U(i(\tau)) d\tau$, 其中 $i(\tau)$ 表示粒子在时间 τ 位于状态 i , 且取值于 $\{1, 2, \dots, n\}$. 用 $g_s^{(i)}(A_s, t)$ 表示泛函值为 A_s 、状态为 i 、在时刻 t 的联合概率密度. 记 $|G_s(A_s, t)\rangle$ 为列向量 $\{g_s^{(i)}(A_s, t), i = 1, 2, \dots, n\}$. 类似于 (2.71), 这时有

$$|G_s(A_s, t)\rangle = \begin{pmatrix} g_s^{(1)}(A_s, t) \\ \vdots \\ g_s^{(n)}(A_s, t) \end{pmatrix} = \int_0^t \bar{\varphi}(t') \sum_{j=0}^{+\infty} \begin{pmatrix} q_{s,j}^{(1)}(A_s - t'U(1), t - t') dt' \\ \vdots \\ q_{s,j}^{(n)}(A_s - t'U(n), t - t') dt' \end{pmatrix}, \quad (2.77)$$

其中

$$q_{s,j+1}^{(i)}(A_s, t) = \int_0^{+\infty} m_{1i} q_{s,j}^{(1)}(A_s - U(1)t', t - t') \psi_1(t') dt' + \dots + \int_0^{+\infty} m_{ni} q_{s,j}^{(1)}(A_s - U(n)t', t - t') \psi_n(t') dt'.$$

通过 Laplace 变换求解方程 (2.77), 最后再作逆 Laplace 变换可得

$$M^T \frac{\partial}{\partial t} |G_s(p_s, t)\rangle = (M^T - I) \text{diag}(\tau^{-\alpha_1}, \tau^{-\alpha_2}, \dots, \tau^{-\alpha_n}) \text{diag}({}_0\mathfrak{D}_t^{1-\alpha_1}, {}_0\mathfrak{D}_t^{1-\alpha_2}, \dots, {}_0\mathfrak{D}_t^{1-\alpha_n}) |G_s(p_s, t)\rangle \\ - \text{i} p_s M^T \text{diag}(U(1), U(2), \dots, U(n)) |G_s(p_s, t)\rangle, \quad (2.78)$$

其中 ${}_0\mathfrak{D}_t^{1-\alpha_j} g_s^{(j)}(p_s, t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha_j)} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \text{i} p_s U(j) \right) \int_0^t \frac{e^{-(t-t') \cdot \text{i} p_s U(j)}}{(t-t')^{1-\alpha_j}} g_s^{(j)}(p_s, t') dt'$.

2.7 简单运动介质中的 Lévy 游走及宏观方程

在许多领域中, 介质是非静止的, 如生命科学和宇宙学^[33, 67, 68]. 本小节讨论最简单的介质运动模式 (非静止介质不按动理学方程运动), 即 $y = a(t)x$, 其中 $a(t_0) = 1$. 特别地, 对于膨胀的宇宙, $a(t)$ 称为尺度因子. 在连续随机游走的框架下, 记 t_j 和 t_{j+1} 为粒子连续发生两次跳跃的时间, $x(t_j)$ 和 $y(t_j)$ 分别为粒子在 t_j 时刻的共动坐标和物理坐标, 则在 $t \in (t_j, t_{j+1}]$ 时刻, 相应的物理位置为 $y(t) = a(t)x(t_j)$, 共动位置为 $x(t) = x(t_j)$. 在 $j+1$ 步跳跃后的位置为 $y(t_{j+1}) = \frac{a(t_{j+1})}{a(t_j)} y(t_j) + \xi_{j+1}$, 其中 ξ_{j+1} 满足跳跃步长的概率密度 $\eta(y)$. 显然, 在共动坐标系下, 粒子跳跃步长的概率密度依赖于时间, 即 $\eta(x | t) = \eta(y) \frac{dy}{dx} = a(t) \eta(a(t)x)$. 因此, 在共动坐标系下, 跳跃步长和等待时间的联合概率密度为 $\phi(x | t, t-t') = \eta(x | t) \psi(t-t') = a(t) \eta(a(t)x) \psi(t-t')$, 其中 $t' (< t)$ 是最近一次发生跳跃的时间. 当等待时间和跳跃步长的分布在频域空间 (即 $\psi(u)$ 和 $\eta(k)$) 分别取为 (2.8) 和 (2.10) 时, 则 $\eta(k | t) = \eta(k/a(t)) = 1 - \sigma^\mu |k|^\mu / a^\mu(t) + o(|k|^\mu)$. 将 $\psi(u)$ 和 $\eta(k | t)$ 的 Laplace 变换代入方程 (2.3), 可得

$$uW(k, u) - 1 = -|k|^\mu \frac{\sigma^\mu}{\tau^\alpha} \mathcal{L} \left\{ \frac{1}{a^\mu(t)} \mathcal{L}^{-1}(u^{1-\alpha} W(k, s)) \right\}. \quad (2.79)$$

对上式两边作逆 Laplace 变换和逆 Fourier 变换, 可得

$$\begin{cases} \frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = - \left(\frac{1}{a^\mu(t)} \right) \cdot \left(\frac{\sigma^\mu}{\tau} \right) \cdot (-\Delta)^{\mu/2} {}_0D_t^{1-\alpha} W(x, t), \\ W(x, t=0) = \delta(x). \end{cases} \quad (2.80)$$

2.8 首次通过时间、逃逸概率和最大位移

首次通过时间, 即一个随机变量首次达到某个值的一个自然的应用场景, 是投资者在股票价格波动时买入或卖出股票的决定. 更多的应用场景发生在物理化学领域, 例如, 化学物质经过碰撞或其他方式在能量达到临界值时会发生化学反应. 逃逸概率和最大位移是与首次通过时间紧密相关的概念, 有相似的应用场景. 考虑如下随机过程 (参见文献 [19]):

$$\begin{cases} \frac{dX(s)}{ds} = F(X(s)) + \sigma(X(s))\xi(s), \\ \frac{dt(s)}{ds} = \theta(s), \end{cases} \quad (2.81)$$

其中, $\theta(s)$ 和 $\xi(s)$ 相互独立, $t(s)$ 是回火的单边 α 稳定的 Lévy 过程 ($\theta(s)$ 是相应的噪声), 其特征函数为 $\langle e^{-ut(s)} \rangle = e^{-s((u+\lambda)^\alpha - \lambda^\alpha)}$, 当调控因子 $\lambda (\geq 0)$ 趋于 0 时, 则得到单边 α 稳定的 Lévy 过程. $F(x)$ 是定义在 $\mathbb{R}^d$ 中的有界区域 D 上的光滑向量场. $\sigma(x)$ 是一个 $d \times m$ 光滑噪声系数矩阵, $\xi(s)$ 是

m 维噪声项. 如第 2.5 小节, 记 $E(t)$ 为 $t(s)$ 相对应的逆从属过程, 则 Langevin 方程 (2.81) 可表示为 $Y(t) = X(E(t))$. 从空间区域 D 首次通过的时间定义为

$$t_e(\mathbf{x}) := \inf\{t \geq 0, Y_{\mathbf{x}}(t) \notin D\},$$

其中 $Y_{\mathbf{x}}(t)$ 表示随机过程 $Y(t)$ 的起始位置在 $\mathbf{x}$. 转移概率密度函数定义为

$$W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t) d\mathbf{y} \equiv \Pr\{Y_{\mathbf{x}}(t) \in \mathbf{y} + d\mathbf{y} \mid Y_{\mathbf{x}}(0) = \mathbf{x}\}. \quad (2.82)$$

在 Langevin 方程 (2.81) 中, 当 $\xi(s)$ 是均值为 0、方差为 t 的 m 维 Brown 运动的形式导数时, $W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t)$ 满足如下向后的 Kolmogorov 方程^[4]:

$$\frac{\partial}{\partial t} W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t K(t-t', \lambda) \mathbb{L}_{\mathbf{x}}^* W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t') dt', \quad (2.83)$$

其中, 记忆核的 Laplace 变换 $K(u, \lambda) = 1/((u + \lambda)^\alpha - \lambda^\alpha)$, 算子

$$\mathbb{L}_{\mathbf{x}}^* = \sum_{j=1}^d F^j(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x^j} + \sum_{j,k=1}^d B^{j,k}(\mathbf{x}) \frac{\partial^2}{\partial x^j \partial x^k},$$

扩散矩阵 $B(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sigma(\mathbf{x}) \sigma^T(\mathbf{x})$. 给方程 (2.83) 赋予初始条件

$$W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, 0) = \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \quad (2.84)$$

和边界条件

$$W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t)|_{\mathbf{x} \in D, \mathbf{y} \in \partial D} = 0 \quad (2.85)$$

后, 我们可以基于方程的解计算平均首次通过区域 D 的时间. 边界条件 (2.85) 意味着粒子在首次到达边界 ∂D 后, 即 $t = t_e(\mathbf{x})$ 时, 便被吸收了, 同时也意味着

$$W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t)|_{\mathbf{x} \in \partial D, \mathbf{y} \in D} = 0.$$

显然首次通过边界的时间 $t_e(\mathbf{x})$ 独立于随机过程在边界的行为, 因为当 $t < t_e(\mathbf{x})$ 时, 对于不同的边界行为, 随机过程都服从相同的动力学过程 (2.81). 对于一个在边界会被吸收的随机过程, 直到时间 t 没有通过边界的概率与 t 时刻在区域 D 中的某个点 $\mathbf{y}$ 找到它的概率相同, 即

$$\Pr\{t_e > t \mid \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}\} = \int_D W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t) d\mathbf{y}, \quad (2.86)$$

其中 $W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t)$ 为方程 (2.83) 在初始条件 (2.84) 和边界条件 (2.85) 下的解. 随机过程起始于位置 $\mathbf{x} \in D$, 其首次通过区域 D 的边界的平均时间为

$$e(\mathbf{x}) = - \int_0^\infty t dt \Pr\{t_e > t \mid \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}\} = \int_0^\infty \Pr\{t_e > t \mid \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}\} dt = \int_0^\infty \int_D W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t) d\mathbf{y} dt. \quad (2.87)$$

定义 $\mathcal{W}_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t) = \int_0^t W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t') dt'$, 在此式两边作 Laplace 变换得 $\mathcal{W}_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, u) = u W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, u)$. 再由 Laplace 变换的终值定理可得

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \mathcal{W}_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t) = \int_0^{+\infty} W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t') dt' = \lim_{u \rightarrow 0} u W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, u) = \lim_{u \rightarrow 0} W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, u). \quad (2.88)$$

在初始条件 (2.84) 下, 对方程 (2.83) 两边作 Laplace 变换可得

$$uW_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, u) = \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) + uK(u, \lambda)\mathbb{L}_{\mathbf{x}}^*W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, u). \quad (2.89)$$

结合 (2.88) 和 (2.89), 并令 $u \rightarrow 0$, 可得

$$\mathbb{L}_{\mathbf{x}}^* \int_0^{+\infty} W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t) dt = -\alpha\lambda^{\alpha-1}\delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}). \quad (2.90)$$

对上式两边在区域 D 上积分可得, 对于任意 $\mathbf{x} \in D$, 有

$$\mathbb{L}_{\mathbf{x}}^*e(\mathbf{x}) = -\alpha\lambda^{\alpha-1} \quad (2.91)$$

以及边界条件

$$e(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial D.$$

若考虑方程 (2.91) 的一维情形, 对于算子 $\mathbb{L}_{\mathbf{x}}^*$, 取 $F(\mathbf{x}) = 0$, $B(\mathbf{x}) = 1$, $D = (-r, r)$, 则它的解为

$$e(\mathbf{x}) = \alpha\lambda^{\alpha-1} \frac{r^2 - x^2}{2}.$$

由上式可得, 若 $\lambda \rightarrow 0$, 则 $e(\mathbf{x}) \rightarrow +\infty$. 这与我们的直观认识一致, 这是因为随机过程 (2.81) 在连续随机游走模型的框架下, 等待时间的一阶矩是发散的. 另外, 也可以看到随着 λ 的递增, 平均首次通过时间在递减, 这是因为随着 λ 的递增, 每一步的平均等待时间在减小. 对于高维情形也有类似的结论, 如二维情形, 若取

$$F(\mathbf{x}) = 0, \quad B(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \{\mathbf{x} : |\mathbf{x}| < r\},$$

这时 $e(\mathbf{x}) = \alpha\lambda^{\alpha-1} \frac{r^2 - |\mathbf{x}|^2}{4}$. 若将随机过程 (2.81) 中的 ξ 取为 d 维 Lévy 过程 L 的形式导数 (同时取 $\sigma = 1$), 则其样本路径不再连续, 这时不但可以讨论平均通过时间, 而且还可以研究逃逸概率. 记 Lévy 过程 $L(t)$ 的特征为 $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \nu)$, 则其相应的 Lévy 标记为

$$\eta(\mathbf{k}) = i(\mathbf{a}, \mathbf{k}) - \frac{1}{2}(\mathbf{k}, \mathbf{b}\mathbf{k}) + \int_{\mathbb{R}^d \setminus \{0\}} (e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{y})} - 1 - i(\mathbf{k}, \mathbf{y})\chi_{\{|\mathbf{y}| < 1\}})\nu(d\mathbf{y}), \quad (2.92)$$

其中, χ_I 是集合 I 上的示性函数, $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^d$, $\mathbf{b}$ 是一个 $d \times d$ 对称正定矩阵, ν 是一个在 $\mathbb{R}^d \setminus \{0\}$ 上的 σ -有限 Lévy 测度并满足 $\int_{\mathbb{R}^d \setminus \{0\}} (\mathbf{y}^T \mathbf{y})\nu(d\mathbf{y}) < +\infty$. 这时在 (2.81) 中, $X(s)$ 的生成元为

$$\begin{aligned} (\mathbb{A}_{\mathbf{x}}g)(\mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^d F^j(\mathbf{x}) \frac{\partial g(\mathbf{x})}{\partial x^j} + \sum_{j=1}^d \mathbf{a}^j \frac{\partial g(\mathbf{x})}{\partial x^j} + \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^d \mathbf{b}^{jk} \frac{\partial^2 g(\mathbf{x})}{\partial x^j \partial x^k} \\ &\quad + \int_{\mathbb{R}^d \setminus \{0\}} \left(g(\mathbf{x} + \mathbf{y}) - g(\mathbf{x}) - \sum_{j=1}^d \mathbf{y}^j \frac{\partial g(\mathbf{x})}{\partial x^j} \Big|_{\chi_{\{|\mathbf{y}| < 1\}}} \right) \nu(d\mathbf{y}), \end{aligned}$$

其中, $g(\mathbf{x}) \in C_c^\infty(\mathbb{R}^d)$, $\nu(d\mathbf{y}) = \frac{\beta\Gamma(\frac{m+\beta}{2})}{2^{1-\beta}\pi^{m/2}\Gamma(1-\beta/2)} |\mathbf{y}|^{-\beta-m} d\mathbf{y}$. 此时转移概率密度满足向后的 Kolmogorov 方程^[4]

$$\frac{\partial}{\partial t} W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t K(t-t', \lambda) \mathbb{A}_{\mathbf{x}} W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t') dt', \quad (2.93)$$

其中记忆核的 Laplace 变换 $K(u, \lambda) = 1/((u + \lambda)^\alpha - \lambda^\alpha)$. 类似于方程 (2.86)–(2.91) 的分析, 首次通过区域 D 的边界的平均时间满足

$$\mathbb{A}_{\mathbf{x}}^* e(\mathbf{x}) = -\alpha \lambda^{\alpha-1} \quad (2.94)$$

以及“边界”条件 (体积约束)

$$e(\mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in D^c = \mathbb{R}^d \setminus D.$$

这种赋“边界”条件 (体积约束) 的方式是由于样本路径的不连续性 (参见文献 [16]). 考虑球形区域 $D = \{\mathbf{x} : |\mathbf{x}| < r\}$, 并取 $F(\mathbf{x}) = \mathbf{a} = \mathbf{b} = \mathbf{0}$, 则方程 (2.94) 的解为 (参见文献 [23])

$$e(\mathbf{x}) = \alpha \lambda^{\alpha-1} \frac{\Gamma(m/2)(r^2 - |\mathbf{x}|^2)^{\beta/2}}{2^\beta \Gamma(1 + \beta/2) \Gamma(m/2 + \beta/2)}.$$

由于这时研究的随机过程是跳过程, 因此还可以讨论从区域 D 跳到区域 $\Omega \subset D^c$ 的概率 P_Ω . 类似于方程 (2.90), 有

$$\mathbb{A}_{\mathbf{x}} \int_0^{+\infty} W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t) dt = -\alpha \lambda^{\alpha-1} \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}). \quad (2.95)$$

对上式两端在 Ω 上积分, 可得

$$\mathbb{A}_{\mathbf{x}} P_\Omega(\mathbf{x}) = \mathbb{A}_{\mathbf{x}} \int_\Omega \int_0^{+\infty} W_{\mathbf{x}}(\mathbf{y}, t) dt = \int_\Omega -\alpha \lambda^{\alpha-1} \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) d\mathbf{y} = 0.$$

因此, 解如下方程可求得逃逸概率:

$$\begin{cases} \mathbb{A}_{\mathbf{x}} P_\Omega(\mathbf{x}) = 0, & \mathbf{x} \in D, \\ P_\Omega(\mathbf{x})|_{\mathbf{x} \in \Omega} = 1, & P_\Omega(\mathbf{x})|_{\mathbf{x} \in D^c \setminus \Omega} = 0. \end{cases} \quad (2.96)$$

若取 $F(\mathbf{x}) = \mathbf{a} = \mathbf{b} = 0$, $D = (-r, r)$, $\Omega = [r, +\infty)$, 则 (参见文献 [3])

$$P_\Omega(\mathbf{x}) = \frac{(2r)^{1-\beta} \Gamma(\beta)}{(\Gamma(\beta/2))^2} \int_{-r}^x (r^2 - y^2)^{\beta/2-1} dy, \quad \mathbf{x} \in D. \quad (2.97)$$

由于随机过程和考虑的区域都是对称的, 因此, 由方程 (2.97) 可得当 $\mathbf{x} = 0$ 时, $P_\Omega(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}$. 对于固定的 $\mathbf{x}$, 若其小于 0, 则随着 β 的递减, $P_\Omega(\mathbf{x})$ 在递增; 反过来, 若 $\mathbf{x}$ 大于 0, 则随着 β 的递减, $P_\Omega(\mathbf{x})$ 在递减. 随着 β 的递减, 边界层现象越来越明显.

从以上对带有回火参数 λ 的随机动力学的平均首次通过时间和逃逸概率的计算, 可以发现: (1) 在方程 (2.81) 中, 若 $X(t)$ 的平均首次通过时间为 $e(\mathbf{x})$, 则 $X(E(t))$ 的平均首次通过时间为 $\alpha \lambda^{\alpha-1} e(\mathbf{x})$; (2) 逃逸概率 $P_\Omega(\mathbf{x})$ 不依赖于随机过程等待时间的分布. 事实上, 对于前一个发现有更一般性的结果, 其陈述及证明如下: 令 $X(t)$ 是一个一般的 Markov 过程, $Z(t)$ 是一个独立于 $X(t)$ 的严格递增的 Lévy 过程 (记其特征指数为 $\gamma(u) = \int_0^\infty (e^{iuy} - 1) \nu(dy)$), $E(t)$ 是对应于 $Z(t)$ 的逆从属过程, 即 $E(t) := \inf\{\tau > 0, Z(\tau) > t\}$. 记 $Y(t) = X(E(t))$, 则首次通过时间为

$$\begin{aligned} t_e^Y(\mathbf{x}) &:= \inf\{t \geq 0, Y(t) \notin D \mid Y(0) = \mathbf{x}\} \\ &= \inf\{t \geq 0, X(E(t)) \notin D \mid X(0) = \mathbf{x}\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \inf\{t \geq 0, E(t) > t_e^X(\mathbf{x}) \mid X(0) = \mathbf{x}\} \\
&= \inf\{t \geq 0, t > Z(t_e^X(\mathbf{x})) \mid X(0) = \mathbf{x}\} \\
&= Z(t_e^X(\mathbf{x})).
\end{aligned}$$

因此 $E(t_e^Y(\mathbf{x})) = E(Z(t_e^X(\mathbf{x}))) = \int_0^\infty E(Z(t))\Pr(t_e^X(\mathbf{x}) = t)dt$. 由 $E(e^{-uZ(t)}) = e^{-t\gamma(u)}$, 可得 $E(Z(t)) = (-\frac{\partial}{\partial u}E(e^{-uZ(t)}))|_{u=0} = t\gamma'(0)$. 所以有

$$E(t_e^Y(\mathbf{x})) = \int_0^\infty \gamma'(0)t\Pr(t_e^X(\mathbf{x}) = t)dt = \gamma'(0)E(t_e^X(\mathbf{x})).$$

方程 (2.81) 中对应的 $\gamma(u) = (u + \lambda)^\alpha - \lambda^\alpha$, $\gamma'(0) = \alpha\lambda^{\alpha-1}$.

关于最大位移 (或首次通过时间) 的分布, 也可以通过求解向后的 Feynman-Kac 方程 (如方程 (2.7)、(2.55) 或 (2.56)) 得到, 即通过求解方程计算 $\lim_{p \rightarrow +\infty} G_{x_0}(p, t)$. 记随机过程 $x(t)$ 在 $[0, t]$ 时间区间内的最大位移为 $x_m \equiv \max_{0 \leq \tau \leq t} x(\tau)$. 当 $x > b$ 时, 令 $U(x) = 1$; 而当 $x \leq b$ 时, $U(x) = 0$. 令泛函 $A = \int_0^t U(x(t'))dt'$, 则

$$\Pr\{x_m < b\} = \lim_{p \rightarrow +\infty} G_{x_0}(p, t),$$

其中 $G_{x_0}(p, t)$ 是泛函 A 的概率密度函数 $G_{x_0}(A, t)$ 的 Laplace 变换. 显然,

$$\Pr\{x_m < b\} = \lim_{A \rightarrow 0} \int_0^A G_{x_0}(A', t)dA'.$$

进一步地, 由 Laplace 变换的初值定理可得

$$\lim_{A \rightarrow 0} \int_0^A G_{x_0}(A', t)dA' = \lim_{p \rightarrow +\infty} p\mathcal{L}\left\{\int_0^A G_{x_0}(A', t)dA'\right\} = \lim_{p \rightarrow +\infty} \left\{p \frac{G_{x_0}(p, t)}{p}\right\} = \lim_{p \rightarrow +\infty} G_{x_0}(p, t).$$

3 宏观方程的正则性和计算方法

本节讨论以上推导出的宏观方程解的正则性, 然后给出计算格式及在相应正则性下解的误差估计.

3.1 欠扩散类型的 Fokker-Planck 方程

令 Ω 是具有光滑边界的凸区域, $-\Delta$ 定义在 Ω 上并有齐次 Dirichlet 边界条件. $\lambda_j > 0$ ($j \geq 1$) 是 $-\Delta$ 的非减特征值序列, ψ_j ($j \geq 1$) 是其相应的特征函数. 对于 $r \geq 0$, 记空间 $\dot{H}^r(\Omega) = \{v \in L^2(\Omega) : (-\Delta)^{r/2}v \in L^2(\Omega)\}$, 其范数为 $\|v\|_{\dot{H}^r(\Omega)}^2 = \sum_{j=1}^\infty \lambda_j^r(v, \psi_j)^2$. 这时有 $\dot{H}^0(\Omega) = L^2(\Omega)$, $\dot{H}^1(\Omega) = H_0^1(\Omega)$, $\dot{H}^2(\Omega) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$.

对于经典扩散方程

$$\begin{cases} \frac{\partial W(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \Delta W(\mathbf{x}, t), & \mathbf{x} \in \Omega, \\ W(\mathbf{x}, t) = 0, & \mathbf{x} \in \partial\Omega, \\ W(\mathbf{x}, t = 0) = W_0(\mathbf{x}), \end{cases} \quad (3.1)$$

其解可表示为 $W(\mathbf{x}, t) = \mathcal{W}(t)W_0(\mathbf{x}) := \sum_{j=1}^{\infty} e^{-t\lambda_j} (W_0(\mathbf{x}), \psi_j) \psi_j(\mathbf{x})$ ($\mathcal{W}(t)$ 是解算子). 这时 $W(\mathbf{x}, t)$ 有正则性 $\|(-\Delta)^l \mathcal{W}(t)W_0(\mathbf{x})\|_{\dot{H}^q(\Omega)} \leq C^{1/2} t^{-(q-p)/2-l} \|W_0(\mathbf{x})\|_{\dot{H}^p(\Omega)}$, 其中 $0 \leq p \leq q, l \geq 0$ [55]. 事实上,

$$\begin{aligned} \|(-\Delta)^l \mathcal{W}(t)W_0(\mathbf{x})\|_{\dot{H}^q(\Omega)}^2 &= \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j^{q+2l} e^{-2t\lambda_j} (W_0(\mathbf{x}), \psi_j)^2 \\ &\leq C t^{-(q-p)-2l} \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j^p (W_0(\mathbf{x}), \psi_j)^2 \\ &= C t^{-(q-p)-2l} \|W_0(\mathbf{x})\|_{\dot{H}^p(\Omega)}^2, \end{aligned}$$

其中 $C = \sup_{x>0} (x^{q-p+2l} e^{-2x})$. 这意味着在时间 $t > 0$ 后, 方程的解 $W(\mathbf{x}, t)$ 在空间方向可以有任意好的正则性.

而对于欠扩散方程

$$\begin{cases} \frac{\partial W(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = {}_0D_t^{1-\alpha} \Delta W(\mathbf{x}, t), & \mathbf{x} \in \Omega, \\ W(\mathbf{x}, t) = 0, & \mathbf{x} \in \partial\Omega, \\ W(\mathbf{x}, t=0) = W_0(\mathbf{x}), \end{cases} \quad (3.2)$$

其解可表示为 $W(\mathbf{x}, t) = \mathcal{W}(t)W_0(\mathbf{x}) := \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda_j t^\alpha)^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} (W_0(\mathbf{x}), \psi_j) \psi_j(\mathbf{x})$. 此时, 有

$$\|(-\Delta)^l \mathcal{W}(t)W_0(\mathbf{x})\|_{\dot{H}^q(\Omega)} \leq C t^{-\alpha} \|W_0(\mathbf{x})\|_{\dot{H}^p(\Omega)},$$

其中, $0 \leq p \leq q + 2l \leq p + 2, l \geq 0$; 当 $p = q + 2l$ 时, 还有 $\|(-\Delta)^l \mathcal{W}(t)W_0(\mathbf{x})\|_{\dot{H}^q(\Omega)} \leq C \|W_0(\mathbf{x})\|_{\dot{H}^p(\Omega)}$. 这表明在时间 $t > 0$ 后, 方程的解 $W(\mathbf{x}, t)$ 在空间方向的正则性相对于初始条件最多只能提高二阶 (二次导数), 显著不同于经典的扩散方程. 事实上, 对于 Mittag-Leffler 函数, 有估计 $|\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda_j t^\alpha)^k}{\Gamma(\alpha k + 1)}| \leq \frac{C(\alpha)}{1 + \lambda_j t^\alpha}$ (参见文献 [46]). 因此,

$$\begin{aligned} \|(-\Delta)^l \mathcal{W}(t)W_0(\mathbf{x})\|_{\dot{H}^q(\Omega)}^2 &= \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j^{q+2l} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda_j t^\alpha)^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} \right)^2 (W_0(\mathbf{x}), \psi_j)^2 \\ &\leq \sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{C(\alpha) \lambda_j}{1 + \lambda_j t^\alpha} \right)^2 \lambda_j^{q+2l-2} (W_0(\mathbf{x}), \psi_j)^2 \\ &\leq C^2(\alpha) t^{-2\alpha} \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j^{q+2l-2} (W_0(\mathbf{x}), \psi_j)^2 \\ &= C^2(\alpha) t^{-2\alpha} \|W_0(\mathbf{x})\|_{\dot{H}^{q+2l-2}(\Omega)}^2 \\ &\leq C^2(\alpha) t^{-2\alpha} \|W_0(\mathbf{x})\|_{\dot{H}^p(\Omega)}^2. \end{aligned}$$

若 $p = q + 2l$, 则

$$\begin{aligned} \|(-\Delta)^l \mathcal{W}(t)W_0(\mathbf{x})\|_{\dot{H}^q(\Omega)}^2 &= \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j^{q+2l} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda_j t^\alpha)^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} \right)^2 (W_0(\mathbf{x}), \psi_j)^2 \\ &\leq C^2(\alpha) \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j^{q+2l} (W_0(\mathbf{x}), \psi_j)^2 \end{aligned}$$

$$= C^2(\alpha) \|W_0(\mathbf{x})\|_{\dot{H}^{q+2l}(\Omega)}^2.$$

基于以上分析及 Mittag-Leffler 函数的性质 $\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda_j t^\alpha)^k}{\Gamma(\alpha k + 1)} = 1 - t^\alpha / \Gamma(1 - \alpha) + O(t^{2\alpha})$ [49] 可得, 当 $W_0(\mathbf{x}) \in \dot{H}^2(\Omega)$ 时, $u \in C^\alpha([0, T]; L^2(\Omega))$. 接下来讨论方程 (3.2) 的时间方向算子的离散格式, 其也可等价地表示为

$$\begin{cases} {}_0D_t^\alpha(W(\mathbf{x}, t) - W_0(\mathbf{x})) = \Delta W(\mathbf{x}, t), & \mathbf{x} \in \Omega, \\ W(\mathbf{x}, t) = 0, & \mathbf{x} \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (3.3)$$

基于卷积积分的算子离散 [39] 当 $t \leq 0$ 时, 函数 $W(t) = 0$. 对时间方向的算子作 Laplace 变换 $\mathcal{L}_t\{{}_0D_t^\alpha W(t); u\} = u^\alpha W(u)$. 在时间方向作一致剖分, 取时间步长为 ς . 对 u^α 给出一阶精度的离散, 即 $u^\alpha = (\frac{1-e^{-u\varsigma}}{\varsigma})^\alpha + \frac{\alpha}{2}u^{\alpha+1}\varsigma - \frac{3\alpha^2+\alpha}{24}u^{\alpha+2}\varsigma^2 + \dots$; 进一步地, $(\frac{1-e^{-u\varsigma}}{\varsigma})^\alpha = \varsigma^{-\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} \omega_j^\alpha e^{-ju\varsigma}$, 其中

$$\omega_j^\alpha = (-1)^j \binom{\alpha}{j},$$

并满足 $\omega_0^\alpha = 1$, $\omega_j^\alpha = (1 - \frac{\alpha+1}{j})\omega_{j-1}^\alpha$. 这时便可得 ${}_0D_t^\alpha(W(t) - W_0)$ 的离散算子

$$\begin{aligned} {}_0\bar{D}_t^\alpha(W(t) - W_0)|_{t=t_n} &= \mathcal{L}_u^- \left(\left(\frac{1-e^{-u\varsigma}}{\varsigma} \right)^\alpha \left(W(u) - \frac{W_0}{u} \right) \right) \Big|_{t=t_n} \\ &= \varsigma^{-\alpha} \sum_{j=0}^{\infty} \omega_j^\alpha (W(t_n - j\varsigma) - W_0). \end{aligned} \quad (3.4)$$

当函数 $\alpha + 1$ 次可微时, 该离散的截断误差为一阶精度. 方程的解通常 α 次可微, 但用该离散得到的计算格式通常一阶收敛 (参见文献 [26]).

基于分片多项式插值的算子离散 [37] (**L1 离散**) 用分片线性多项式逼近函数, 作一致剖分 ($t_j = j\varsigma$):

$$\begin{aligned} {}_0D_t^\alpha(W(t_n) - W_0) &= \left(\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t (t-s)^{-\alpha} (W(s) - W_0) ds \right) \Big|_{t=t_n} \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^{t_n} \frac{\partial(W(s) - W_0)}{\partial s} (t_n - s)^{-\alpha} ds \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^{n-1} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \frac{\partial(W(s) - W(0))}{\partial s} (t_n - s)^{-\alpha} ds \\ &\approx \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{W(t_{j+1}) - W(t_j)}{\varsigma} \int_{t_j}^{t_{j+1}} (t_n - s)^{-\alpha} ds \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} \omega_{n-j-1}^\alpha \frac{W(t_{j+1}) - W(t_j)}{\varsigma^\alpha} \\ &= \varsigma^{-\alpha} \left(\omega_0^\alpha W(t_n) - \omega_{n-1}^\alpha W_0 + \sum_{j=1}^{n-1} (\omega_j^\alpha - \omega_{j-1}^\alpha) W(t_{n-j}) \right) \\ &=: {}_0\bar{D}_t^\alpha(W(t_n) - W_0), \end{aligned} \quad (3.5)$$

其中 $\omega_j^\alpha = ((j+1)^{1-\alpha} - j^{1-\alpha})/\Gamma(2-\alpha)$ ($j = 0, 1, 2, \dots, n-1$). 在函数二次可微时, $L1$ 离散的截断误差为 $2-\alpha$ 阶精度. 方程的解通常 α 次可微, 但用该离散得到的计算格式通常一阶收敛 (参见文献 [27, 28]).

快速算法 [52] 由于时间方向的算子是非局部的, 相对于经典算子 $O(n)$ 的计算量, 此时的计算量是 $O(n^2)$ 的. 利用快速算法, 有望在保证精度的情形下, 将计算量从 $O(n^2)$ 降到 $O(n)$. 应用等式 $\frac{1}{t^\beta} = \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_0^\infty e^{-ts} s^{\beta-1} ds$, $\beta > 0$, 可得

$$\begin{aligned} {}_0D_t^\alpha W(t) &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \frac{W(\xi)}{(t-\xi)^\alpha} d\xi = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \frac{W(t-\xi)}{\xi^\alpha} d\xi \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)\Gamma(\alpha)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t W(t-\xi) \int_0^\infty e^{-\xi s} s^{\alpha-1} ds d\xi \\ &= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)\Gamma(\alpha)} \int_0^\infty s^{\alpha-1} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t W(t-\xi) e^{-\xi s} d\xi ds. \end{aligned}$$

对上式两端作 Laplace 变换, 可得

$$u^\alpha = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)\Gamma(\alpha)} \int_0^\infty s^{\alpha-1} \frac{u}{s+u} ds. \quad (3.6)$$

由以上分析知, 若用卷积积分离散, 则取 $u = (1 - e^{-u\varsigma})/\varsigma$ 可得一阶精度的截断误差 (取 $u = ((1 - e^{-u\varsigma}) + (1 - e^{-u\varsigma})^2)/\varsigma$ 可得二阶精度的截断误差).

将 $u = (1 - e^{-u\varsigma})/\varsigma$ 代入方程 (3.6) 两端, 可得

$$\left(\frac{1 - e^{-u\varsigma}}{\varsigma}\right)^\alpha = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)\Gamma(\alpha)} \int_0^\infty s^{\alpha-1} \left(1 - \frac{\varsigma s}{\varsigma s + 1 - e^{-u\varsigma}}\right) ds.$$

注意到 $(\frac{1 - e^{-u\varsigma}}{\varsigma})^\alpha = \varsigma^{-\alpha} \sum_{j=0}^\infty \omega_j^\alpha e^{-ju\varsigma}$, 同时

$$\frac{\varsigma s}{\varsigma s + 1 - e^{-u\varsigma}} = \frac{\varsigma s}{1 + \varsigma s} \sum_{j=0}^\infty \left(\frac{e^{-u\varsigma}}{1 + \varsigma s}\right)^j,$$

可得

$$\begin{aligned} \omega_0^\alpha &= \frac{\varsigma^\alpha}{\Gamma(1-\alpha)\Gamma(\alpha)} \int_0^\infty s^{\alpha-1} \left(1 - \frac{\varsigma s}{\varsigma s + 1}\right) ds, \\ \omega_j^\alpha &= -\frac{\varsigma^\alpha}{\Gamma(1-\alpha)\Gamma(\alpha)} \int_0^\infty s^{\alpha-1} \frac{\varsigma s}{(\varsigma s + 1)^{j+1}} ds, \quad j \geq 1. \end{aligned}$$

当 $j \geq 2$ 时, 其还可表示为

$$\omega_j^\alpha = -\frac{1}{4\Gamma(1-\alpha)\Gamma(\alpha)} \int_{-1}^1 (1-s)^\alpha (1+s)^{1-\alpha} \left(\frac{s+1}{2}\right)^{j-2} ds. \quad (3.7)$$

能够实现快速算法的关键是 $(\frac{s+1}{2})^{j-2}$ 关于 $j \geq 2$ 构成等比序列. 对于方程 (3.7), 可用 Gauss-Jacobi 求积公式来计算

$$\omega_j^\alpha = \sum_{i=1}^{N_p} \tilde{\omega}_i \left(\frac{s_i^\alpha + 1}{2}\right)^{j-2} + \varepsilon_j^\alpha, \quad (3.8)$$

其中, $\tilde{\omega}_i$ 是 Gauss-Jacobi 求积公式的系数, s_i^α 是节点, N_p 是节点个数, ε_j^α 是误差. 根据求积公式的性质, 当 $2 \leq j \leq 2N_p + 1$ 时, $\varepsilon_j^\alpha = 0$. 这时用 (3.4) 解方程时, 计算量便可从 $O(n^2)$ 降为 $O(nN_p)$.

3.2 同时具有超扩散和欠扩散动力学的 Fokker-Planck 方程

考虑具有光滑边界的凸区域 Ω 上的齐次约束条件下的方程 (2.19), 即

$$\begin{cases} \frac{\partial W(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -{}_0D_t^{1-\alpha}(-\Delta)^{\mu/2}W(\mathbf{x}, t), & \mathbf{x} \in \Omega, \\ W(\mathbf{x}, t) = 0, & \mathbf{x} \in \Omega^c, \\ W(\mathbf{x}, t=0) = W_0(\mathbf{x}). \end{cases} \quad (3.9)$$

对于 $r \in (0, 1)$, 记空间

$$H^r(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) : |v|_{H^r(\Omega)} = \left(\int \int_{\Omega^2} \frac{|v(\mathbf{x}) - v(\mathbf{y})|^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{n+2r}} d\mathbf{x} d\mathbf{y} \right)^{1/2} \right\},$$

相应的范数 $\|\cdot\|_{H^r(\Omega)} = \|\cdot\|_{L^2(\Omega)} + |\cdot|_{H^r(\Omega)}$. 若 $r > 1$ 且不是整数, 则 r 可写成 $r = m + \sigma$, 其中 m 是正整数且 $\sigma \in (0, 1)$. 这时相应的空间和范数分别为

$$H^r(\Omega) = \{v \in H^m(\Omega) : |D^\beta v|_{H^\sigma(\Omega)} < \infty \text{ 对所有满足 } |\beta| = m \text{ 的 } \beta \text{ 成立}\}$$

和 $\|\cdot\|_{H^r(\Omega)} = \|\cdot\|_{H^m(\Omega)} + |\cdot|_{H^\sigma(\Omega)}$. 记空间 $\tilde{H}^r(\Omega) = \{v \in H^r(\mathbb{R}^d) : \text{supp } v \subset \bar{\Omega}\}$.

椭圆正则性 [25] 对于齐次问题

$$\begin{cases} (-\Delta)^{\mu/2}W(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega, \\ W(\mathbf{x}) = 0, & \mathbf{x} \in \Omega^c, \end{cases} \quad (3.10)$$

有正则性: 令 $f(\mathbf{x}) \in H^\sigma(\Omega)$, $\sigma \geq -\frac{\mu}{2}$, $W(\mathbf{x}) \in \tilde{H}^{\mu/2}(\Omega)$ 是方程 (3.10) 的解, 则

$$|W(\mathbf{x})|_{H^{\mu/2+\gamma}(\mathbb{R}^d)} \leq C\|f(\mathbf{x})\|_{H^\sigma(\Omega)},$$

其中, $\gamma = \min\{\mu/2 + \sigma, 1/2 - \varepsilon\}$, $\varepsilon > 0$ 任意小.

关于发展方程 (3.9), 有正则性 [44]: 当 $\frac{\mu}{2} \in [1/2, 1)$ 时, $\|W(\mathbf{x}, t)\|_{\tilde{H}^{\mu/2+1/2-\varepsilon}(\Omega)} \leq Ct^{-\alpha}\|f(\mathbf{x})\|_{L^2(\Omega)}$; 当 $\frac{\mu}{2} \in (0, 1/2)$ 时, $\|W(\mathbf{x}, t)\|_{\tilde{H}^{\mu/2+\gamma}(\Omega)} \leq Ct^{-\alpha}\|f(\mathbf{x})\|_{\tilde{H}^\sigma(\Omega)}$. 在方程 (3.9) 中, 时间方向的算子同样可表示为 ${}_0D_t^\alpha(W(\mathbf{x}, t) - W_0(\mathbf{x}))$, 其离散方式也如同上节中给出.

差分算法 对于算子 $(-\Delta)^{\mu/2}$, 在一维情形下可以利用文献 [56] 中给出的有限差分离散; 文献 [18] 中的方程 (22) 包含与算子 $(-\Delta)^{\mu/2}$ 紧密相关的高维算子, 它同样可以利用文献 [56] 中给出的有限差分方法进行离散. 对于高维算子 $(-\Delta)^{\mu/2}$, 可以利用分片多项式插值来离散 [20, 51].

变分算法 [1, 65] 基于算子 $(-\Delta)^{\mu/2}$ 的定义 (2.18), 可得如下双线性型:

$$B(W(\mathbf{X}), V(\mathbf{Y})) = \frac{1}{2}c_{n,\mu} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{(W(\mathbf{X}) - W(\mathbf{Y}))(V(\mathbf{X}) - V(\mathbf{Y}))}{|\mathbf{X} - \mathbf{Y}|^{n+\mu/2}} d\mathbf{X} d\mathbf{Y}. \quad (3.11)$$

事实上,

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} (-\Delta)^{\mu/2}W(\mathbf{X})V(\mathbf{X})d\mathbf{X} &= c_{n,\mu} \text{P.V.} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{W(\mathbf{X}) - W(\mathbf{Y})}{|\mathbf{X} - \mathbf{Y}|^{n+\mu/2}} V(\mathbf{X})d\mathbf{X} d\mathbf{Y} \\ &= -c_{n,\mu} \text{P.V.} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{W(\mathbf{X}) - W(\mathbf{Y})}{|\mathbf{X} - \mathbf{Y}|^{n+\mu/2}} V(\mathbf{Y})d\mathbf{X} d\mathbf{Y} \\ &= \frac{1}{2}c_{n,\mu} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{(W(\mathbf{X}) - W(\mathbf{Y}))(V(\mathbf{X}) - V(\mathbf{Y}))}{|\mathbf{X} - \mathbf{Y}|^{n+\mu/2}} d\mathbf{X} d\mathbf{Y}. \end{aligned}$$

在一维情形下的时空谱方法可参见文献 [36].

3.3 欠扩散类型的 Feynman-Kac 方程

在第 2.3-2.6 小节中, 我们推导出了粒子位置和粒子轨迹泛函的联合分布满足的向前的 Feynman-Kac 方程 (2.27) 及粒子轨迹泛函分布满足的向后的 Feynman-Kac 方程 (2.31). 从方程的形式上看, 它们的区别仅在于一个是应用算子 $\Delta \mathcal{D}_t^{1-\alpha}$, 另一个是应用算子 $\mathcal{D}_t^{1-\alpha} \Delta$. 由于物质导数 $\mathcal{D}_t^{1-\alpha}$ 是时空耦合的算子, 一般而言, 其与算子 Δ 的不同作用顺序会得到不同的结果, 即使被作用函数有充分的正则性.

考虑向后的 Feynman-Kac 方程 (2.31)

$$\begin{cases} \frac{\partial G_{\mathbf{x}_0}(p, t)}{\partial t} = \mathcal{D}_t^{1-\alpha} \Delta G_{\mathbf{x}_0}(p, t) - ipU(\mathbf{x}_0)G_{\mathbf{x}_0}(p, t), & \mathbf{x}_0 \in \Omega, \\ G_{\mathbf{x}_0}(p, t) = 0, & \mathbf{x}_0 \in \partial\Omega, \\ G_{\mathbf{x}_0}(p, 0) = G_{\mathbf{x}_0}(0), \end{cases} \quad (3.12)$$

其可重新表示为 (参见文献 [6])

$$\begin{cases} {}^C_0 D_t^{\alpha, \mathbf{x}_0} G_{\mathbf{x}_0}(p, t) = \Delta G_{\mathbf{x}_0}(p, t), & \mathbf{x}_0 \in \Omega, \\ G_{\mathbf{x}_0}(p, t) = 0, & \mathbf{x}_0 \in \partial\Omega, \\ G_{\mathbf{x}_0}(p, 0) = G_{\mathbf{x}_0}(0), \end{cases} \quad (3.13)$$

其中 ${}^C_0 D_t^{\alpha, \mathbf{x}_0}$ 是 Caputo 分数阶物质导数 [35], 定义为

$${}^C_0 D_t^{\alpha, \mathbf{x}_0} G_{\mathbf{x}_0}(p, t) = e^{-iptU(\mathbf{x}_0)} {}_0 D_t^{\alpha} (e^{iptU(\mathbf{x}_0)} G_{\mathbf{x}_0}(p, t) - G_{\mathbf{x}_0}(p, 0)). \quad (3.14)$$

方程 (3.13) 与 (3.2) 有相似的正则性, 即若 $U(\mathbf{x}_0)$ 在 $\bar{\Omega}$ 上有界, $G_{\mathbf{x}_0}(0) \in L^2(\Omega)$ 且 $G_{\mathbf{x}_0}(p, t)$ 是方程 (3.13) 的解, 则有估计 $\|G_{\mathbf{x}_0}(p, t)\|_{\dot{H}^q(\Omega)} \leq Ct^{-q\alpha/2} \|G_{\mathbf{x}_0}(0)\|_{L^2(\Omega)}$, $q \in [0, 2]$ (参见文献 [53]). (3.14) 中的算子 ${}_0 D_t^{\alpha}$ 可用 (3.4) 中给出的一阶卷积离散逼近, 同样可用相应的高阶离散格式对其进行逼近.

关于向前的 Feynman-Kac 方程 (2.27)

$$\begin{cases} \frac{\partial G(\mathbf{x}, p, t)}{\partial t} = \Delta \mathcal{D}_t^{1-\alpha} G(\mathbf{x}, p, t) - ipU(\mathbf{x})G(\mathbf{x}, p, t), & \mathbf{x} \in \Omega, \\ G(\mathbf{x}, p, t) = 0, & \mathbf{x} \in \partial\Omega, \\ G(\mathbf{x}, p, t) = G(\mathbf{x}, p, 0), \end{cases} \quad (3.15)$$

其正则性及计算格式的数值分析会困难一些. 方程 (3.15) 中的分数阶物质导数 $\mathcal{D}_t^{1-\alpha}$ 见定义 (2.28), 也可等价地表示为

$$\mathcal{D}_t^{1-\alpha} G(\mathbf{x}, p, t) = e^{-iptU(\mathbf{x})} {}_0 D_t^{1-\alpha} (e^{iptU(\mathbf{x})} G(\mathbf{x}, p, t)). \quad (3.16)$$

(3.16) 中的算子 ${}_0 D_t^{1-\alpha}$ 可用 (3.4) 中给出的一阶卷积离散逼近, 方程 (3.15) 中 $\frac{\partial}{\partial t}$ 可用向后差分离散. 在频域空间中作数值分析, 其中证明方程 (3.15) 的预解算子

$$((ipU(\mathbf{x}) + u) - \Delta(ipU(\mathbf{x}) + u)^{1-\alpha})^{-1}$$

及预解算子所对应的离散算子的有界性很关键 (参见文献 [15]).

3.4 稳态方程 (有关首次通过时间和逃逸概率)

第 2.8 小节讨论了反常动力学的首次通过时间和逃逸概率. 考虑对称 μ -稳定的 Lévy 过程^[23], 其平均首次通过区域 Ω 的概率满足方程

$$\begin{cases} -(-\Delta)^{\frac{\mu}{2}} p(\mathbf{x}) = -1, & \mathbf{x} \in \Omega, \\ p(\mathbf{x}) = 0, & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \setminus \Omega; \end{cases} \quad (3.17)$$

从 Ω 中逃逸到 $E \subset \mathbb{R}^d \setminus \Omega$ 的概率满足方程

$$\begin{cases} -(-\Delta)^{\frac{\mu}{2}} p(\mathbf{x}) = 0, & \mathbf{x} \in \Omega, \\ p(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \setminus \Omega, \end{cases} \quad (3.18)$$

其中对于 $\mathbf{x} \in E$, 有 $g(\mathbf{x}) = 1$, 而对于 $\mathbf{x} \in (\mathbb{R}^d \setminus \Omega) \setminus E$, 有 $g(\mathbf{x}) = 0$. 对于方程 (3.17) 和 (3.18), 它们的右端项不连续, 类似于 (3.10) 给出的正则性结果, 这时它们的正则性很有限. 可以采用双线性型 (3.11) 给出方程的弱形式, 应用 Lax-Milgram 定理便可以证得方程的适定性, 基于弱形式可以给出方程的有限元格式 (参见文献 [65]).

方程中出现了算子 $-(-\Delta)^{\frac{\mu}{2}}$ (具体定义参见 (2.18), 也称为积分定义的分数量 Laplace 算子), 通常其解的正则性比较低, 这在一定程度上限制了高效计算方法的使用. 同时, 通过内估计, 常常可证得方程的解在区域内部有很好的正则性, 因此一种途径是采用基于物理过程的随机算法计算边界层, 在内部区域采用高阶格式.

另一种数学上经常讨论的分数量 Laplace 算子是基于 Laplace 算子的谱定义的, 这时方程的解通常会有好的正则性. 谱定义和积分定义的分数量 Laplace 算子对应不同的物理过程, 若应用第 2.5 小节时变的建模方式, 则积分定义的分数量 Laplace 算子对应于对 Brown 运动作时变的过程, 而谱定义的分数量 Laplace 算子对应于在 Brown 运动首次离开 Ω 区域被“消灭”后作时变 (参见文献 [38]).

4 非静止介质中的反常与非遍历多尺度动力学

在静止介质中的反常与非遍历多尺度动力学的研究框架已经建立, 其中包括模型、分析、算法和应用. 目前, 这一领域还有许多重要的有待攻克的难题, 各种新观测到的现象也正在不断涌现. 更多的粒子动力学发生在非静止介质中, 尤其在生命科学和宇宙学中, 在我们的日常生活中也同样普遍. 流体是最具代表性的非静止介质. Navier-Stokes 方程、Boltzmann 方程和 Euler 方程等是其中的主要宏观方程, 还有一些微观的动理学方程. 下面列举几个具体的问题.

细胞、细菌和微生物对外界化学物质浓度的变化常常会产生一种趋向性运动. 细胞、细菌和微生物向着化学物质浓度高的地方运动被称为正趋化 (吸引型), 向着化学物质浓度低的地方运动被称为负趋化 (排斥型). 相应的正趋化中的化学物质称为化学引诱物, 而负趋化中的化学物质称为化学排斥物. 在农业领域, 可利用趋化性防治害虫; 在生物学中, 可利用生物寻找食物和远离有害化学物质. 在数学上描述生物趋化性的模型有很多, 其中最典型的是由 Keller 和 Segel^[30] 提出的趋化模型. 该模型描述的生物过程是指黏菌菌落受外界化学物质的影响而产生的聚集现象, 在流体中其所对应的反常与非遍

历环境下的方程的具体形式为

$$\begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} + U \cdot \nabla n = -(-\Delta)^{\frac{\alpha+1}{2}} n - \nabla \cdot (n\chi(c)) \nabla^\alpha c, & \mathbf{x} \in \Omega, \\ \frac{\partial c}{\partial t} + U \cdot \nabla c = -(-\Delta)^\beta n - nf(c), & \mathbf{x} \in \Omega, \\ \frac{\partial U}{\partial t} = \Delta U + (U \cdot \nabla)U + \nabla p + n \nabla \phi, & \mathbf{x} \in \Omega, \end{cases} \quad (4.1)$$

其中, n 表示细胞密度, c 表示氧气浓度, U 表示流体速度, p 表示压强, 它们是 4 个未知函数; ϕ 表示重力势能, $\chi(c)$ 表示趋化敏感系数, $f(c)$ 表示氧气的耗散速率, 它们是 3 个已知函数, $\alpha \in (0, 1)$, $\beta \in (1, 2)$. 在方程 (4.1) 中, 速度场满足 Navier-Stokes 方程. 有时速度场也可以由随机过程刻画, 这时便有

$$\begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} + U \cdot \nabla n = -(-\Delta)^{\frac{\alpha+1}{2}} n - \nabla \cdot (n\chi(c)) \nabla^\alpha c, & \mathbf{x} \in \Omega, \\ \frac{\partial c}{\partial t} + U \cdot \nabla c = -(-\Delta)^\beta n - nf(c), & \mathbf{x} \in \Omega, \end{cases} \quad (4.2)$$

其中 U 是一个给定的随机过程.

一种全新的甚至似乎有违经典结论 (中心极限定理) 的动力学现象在自然界中被观测到, 包括脂质管上扩散的微珠, 网络中胶体和聚合物或活性悬浮液中的示踪剂运动, 在生物细胞中异质群体中个体的运动, 如线虫. 这些在软物质、生物和其他复杂系统中出现的动力学现象具有线性增长的均方位移, 但是它的位移的概率密度函数是指数形式的 (非 Gauss 形状). 由于这类动力学现象保留了 Brown 运动的第一条特性 (线性增长的均方位移), 同时丢失了 Brown 运动的第二条特性 (Gauss 的概率密度函数), 人们称之为 Brown 非 Gauss 现象, 也称之为聚合物扩散现象 (参见文献 [42]). 聚合/解聚过程在生物系统中非常重要, 如肌肉肌动蛋白和细菌鞭毛蛋白等. 假定系统为化学状态, 单体的化学势保持固定, 在已有的 Rouse 模型、Zimm 模型和蠕动模型的基础上结合生灭过程, 可得在流体中的聚合/解聚动力学耦合格点系统

$$\begin{cases} \frac{\partial c_m}{\partial t} = U \cdot \nabla c_m + L_m c_m + \frac{D}{m + m_{\min}} \Delta c_m + f(c_m), & \mathbf{x} \in \Omega, \\ \frac{\partial U}{\partial t} = \Delta U + (U \cdot \nabla)U + \nabla p + n \nabla \phi, & \mathbf{x} \in \Omega. \end{cases} \quad (4.3)$$

若速度场由随机过程刻画, 则

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} = U \cdot \nabla c_m + L_m c_m + \frac{D}{m + m_{\min}} \Delta c_m + f(c_m), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (4.4)$$

其中 U 是一个给定的随机过程; $L_m c_m = \mu c_{m-1} + \lambda(m) c_{m+1} - (\mu + \lambda(m)) c_m$ ($m = 1, 2, \dots, f(c_m)$) 是反应项, 这里 μ 和 $\lambda(m)$ 是正常数. 事实上, 这里算子 L_m 及 μ 和 λ_m 来源于生灭过程 $N(t) \in \{0, 1, 2, \dots\}$, 其转移概率为

$$P(N(s + \tau) = j \mid N(s) = i) = \begin{cases} \lambda(i)\tau, & j = i + 1, \\ \mu\tau, & j = i - 1, \\ 1 - \lambda(i)\tau - \mu\tau, & j = i. \end{cases}$$

若反常与非遍历动力学由微观模型 (随机过程) $\mathbf{Y}(t)$ 描述, 则在速度场 $V(\mathbf{X}, t)$ 作用下的微观模型为

$$d\mathbf{X}(t) = V(\mathbf{X}, t)dt + d\mathbf{Y}(t), \quad (4.5)$$

其中 $V(\mathbf{X}, t)$ 可以是给定的随机过程, 也可以是相应的确定性流体方程的解.

方程 (4.1)–(4.5) 给出了几个具体的在速度场作用下的反常与非遍历动力学模型. 类似地, 可以给出更多在流体中的反常与非遍历动力学模型, 如描述粒子轨迹泛函分布的 Feynman-Kac 方程等 (参见文献 [17]).

5 展望

反常与非遍历现象在自然界中无处不在, 在复杂性科学中更加普遍, 对其潜在机理的研究会促进数学学科的发展, 会揭示/解释自然规律. 我们期望其在化学尤其是生命化学科学中散发出更加灿烂的光芒. 随机分析、概率论、微分方程和科学计算等无疑对不同尺度反常与非遍历现象开展研究工作提供了重要手段和建模方式. 除了需要开展非静止介质中的反常与非遍历多尺度动力学研究外, 跨尺度的反常与非遍历多尺度动力学也是重要的研究课题; 在小尺度上可作精细研究, 但其巨大的计算量需求常常使其变得不可行. 而在大尺度上开展研究常常更加经济高效, 但同时也存在很多问题, 例如, 在部分区域失效, 大尺度模型缺乏信息或数据, 因此此时同时需要小尺度模型, 至少在局部范围内 (参见文献 [29]). 另外, 无论是促进数学理论的发展还是更多实际应用的需要, 流形上的反常与非遍历动力学也是值得研究的课题. 对各种不同尺度上的微观和宏观模型、跨尺度模型, 需要开展传统方法与基于神经网络和机器学习融合的算法研究, 助力这些模型在自然科学和工程实际中的应用.

参考文献

- 1 Acosta G, Bersetche F M, Borthagaray J P. Finite element approximations for fractional evolution problems. *Fract Calc Appl Anal*, 2019, 22: 767–794
- 2 Barkai E, Garini Y, Metzler R. Strange kinetics of single molecules in living cells. *Phys Today*, 2012, 65: 29–35
- 3 Blumenthal R M, Gettoor R K, Ray D B. On the distribution of first hits for the symmetric stable processes. *Trans Amer Math Soc*, 1961, 99: 540–554
- 4 Cairoli A, Baule A. Anomalous processes with general waiting times: Functionals and multipoint structure. *Phys Rev Lett*, 2015, 115: 110601
- 5 Cairoli A, Baule A. Feynman-Kac equation for anomalous processes with space- and time-dependent forces. *J Phys A*, 2017, 50: 164002
- 6 Chen M H, Deng W H. High order algorithm for the time-tempered fractional Feynman-Kac equation. *J Sci Comput*, 2018, 76: 867–887
- 7 Chen Y, Deng W H. Lévy-walk-like Langevin dynamics affected by a time-dependent force. *Phys Rev E*, 2021, 103: 012136
- 8 Chen Y, Wang X D, Deng W H. Localization and ballistic diffusion for the tempered fractional Brownian-Langevin motion. *J Stat Phys*, 2017, 169: 18–37
- 9 Chen Y, Wang X D, Deng W H. Resonant behavior of the generalized Langevin system with tempered Mittag-Leffler memory kernel. *J Phys A*, 2018, 51: 185201
- 10 Chen Y, Wang X D, Deng W H. Tempered fractional Langevin-Brownian motion with inverse β -stable subordinator. *J Phys A*, 2018, 51: 495001
- 11 Chen Y, Wang X D, Deng W H. Langevin dynamics for a Lévy walk with memory. *Phys Rev E*, 2019, 99: 012135
- 12 Chen Y, Wang X D, Deng W H. Langevin picture of Lévy walk in a constant force field. *Phys Rev E*, 2019, 100: 062141
- 13 Chen Z Q, Deng W H, Xu P B. Feynman-Kac transform for anomalous processes. *SIAM J Math Anal*, 2021, 53: 6017–6047
- 14 Deng W H, Barkai E. Ergodic properties of fractional Brownian-Langevin motion. *Phys Rev E*, 2009, 79: 011112
- 15 Deng W H, Li B Y, Qian Z, et al. Time discretization of a tempered fractional Feynman-Kac equation with measure data. *SIAM J Numer Anal*, 2018, 56: 3249–3275
- 16 Deng W H, Li B Y, Tian W Y, et al. Boundary problems for the fractional and tempered fractional operators. *Multiscale Model Simul*, 2018, 16: 125–149

- 17 Deng W H, Wang X D, Nie D X, et al. Distribution of Statistical Observables for Anomalous and Nonergodic Diffusions. New York: CRC Press, 2022
- 18 Deng W H, Wang X D, Zhang P W. Anisotropic nonlocal diffusion operators for normal and anomalous dynamics. Multiscale Model Simul, 2020, 18: 415–443
- 19 Deng W H, Wu X C, Wang W L. Mean exit time and escape probability for the anomalous processes with the tempered power-law waiting times. Europhys Lett, 2017, 117: 10009
- 20 Duo S W, van Wyk H W, Zhang Y Z. A novel and accurate finite difference method for the fractional Laplacian and the fractional Poisson problem. J Comput Phys, 2018, 355: 233–252
- 21 Einstein A. On the movement of small particles suspended in stationary liquids demanded by the molecular-kinetic theory of heat. Ann Phys, 1905, 17: 549–560
- 22 Fogedby H C. Langevin equations for continuous time Lévy flights. Phys Rev E, 1994, 50: 1657–1660
- 23 Gettoor R K. First passage times for symmetric stable processes in space. Trans Amer Math Soc, 1961, 101: 75–90
- 24 Golding I, Cox E C. Physical nature of bacterial cytoplasm. Phys Rev Lett, 2006, 96: 098102
- 25 Grubb G. Fractional Laplacians on domains, a development of Hörmander’s theory of μ -transmission pseudodifferential operators. Adv Math, 2015, 268: 478–528
- 26 Jin B T, Lazarov R, Zhou Z. Two fully discrete schemes for fractional diffusion and diffusion-wave equations with nonsmooth data. SIAM J Sci Comput, 2016, 38: A146–A170
- 27 Jin B T, Lazarov R, Zhou Z. Numerical methods for time-fractional evolution equations with nonsmooth data: A concise overview. Comput Methods Appl Mech Engrg, 2019, 346: 332–358
- 28 Jin B T, Li B Y, Zhou Z. Numerical analysis of nonlinear subdiffusion equations. SIAM J Numer Anal, 2018, 56: 1–23
- 29 Jin S. Asymptotic-preserving schemes for multiscale physical problems. Acta Numer, 2022, 31: 415–489
- 30 Keller E F, Segel L A. Initiation of slime mold aggregation viewed as an instability. J Theoret Biol, 1970, 26: 399–415
- 31 Klafter J, Shlesinger M F, Zumofen G. Beyond Brownian motion. Phys Today, 1996, 49: 33–39
- 32 Kubo R. The fluctuation-dissipation theorem. Rep Progr Phys, 1966, 29: 255–284
- 33 Le Vot F, Abad E, Yuste S B. Continuous-time random-walk model for anomalous diffusion in expanding media. Phys Rev E, 2017, 96: 032117
- 34 Lemons D S, Gythiel A. Paul Langevin’s 1908 paper “On the Theory of Brownian Motion” [“Sur la théorie du mouvement brownien,” C. R. Acad. Sci. (Paris) 146, 530–533 (1908)]. Amer J Phys (11), 1997, 65: 1079–1080
- 35 Li C, Deng W H, Zhao L J. Well-posedness and numerical algorithm for the tempered fractional differential equations. Discrete Contin Dyn Syst Ser B, 2019, 24: 1989–2015
- 36 Li X J, Xu C J. Existence and uniqueness of the weak solution of the space-time fractional diffusion equation and a spectral method approximation. Commun Comput Phys, 2010, 8: 1016–1051
- 37 Lin Y M, Xu C J. Finite difference/spectral approximations for the time-fractional diffusion equation. J Comput Phys, 2007, 225: 1533–1552
- 38 Liu X, Deng W H. Numerical approximation for fractional diffusion equation forced by a tempered fractional Gaussian noise. J Sci Comput, 2020, 84: 21
- 39 Lubich C. Discretized fractional calculus. SIAM J Math Anal, 1986, 17: 704–719
- 40 Metzler R, Klafter J. The random walk’s guide to anomalous diffusion: A fractional dynamics approach. Phys Rep, 2000, 339: 1–77
- 41 Montroll E W, Weiss G H. Random walks on lattices. II. J Math Phys, 1965, 6: 167–181
- 42 Nampoothiri S, Orlandini E, Seno F, et al. Brownian non-Gaussian polymer diffusion and queuing theory in the mean-field limit. New J Phys, 2022, 24: 023003
- 43 Nie D X, Deng W H. A unified convergence analysis for the fractional diffusion equation driven by fractional Gaussian noise with Hurst index $H \in (0, 1)$. SIAM J Numer Anal, 2022, 60: 1548–1573
- 44 Nie D X, Sun J, Deng W H. Numerical algorithm for the space-time fractional Fokker-Planck system with two internal states. Numer Math, 2020, 146: 481–511
- 45 Nie D X, Sun J, Deng W H. Strong convergence order for the scheme of fractional diffusion equation driven by fractional Gaussian noise. SIAM J Numer Anal, 2022, 60: 1879–1904
- 46 Podlubny I. Fractional Differential Equations. San Diego: Academic Press, 1999
- 47 Rebenshtok A, Denisov S, Hänggi P, et al. Non-normalizable densities in strong anomalous diffusion: Beyond the central limit theorem. Phys Rev Lett, 2014, 112: 110601
- 48 Scher H, Shlesinger M F, Bendler J T. Time-scale invariance in transport and relaxation. Phys Today, 1991, 44: 26–34
- 49 Stynes M. Too much regularity may force too much uniqueness. Fract Calc Appl Anal, 2016, 19: 1554–1562
- 50 Sun J, Deng W H, Nie D X. Numerical approximations for the fractional Fokker-Planck equation with two-scale diffusion. J Sci Comput, 2022, 91: 34
- 51 Sun J, Deng W H, Nie D X. Finite difference method for inhomogeneous fractional Dirichlet problem. Numer Math

- Theory Methods Appl, 2022, 15: 744–767
- 52 Sun J, Nie D X, Deng W H. Fast algorithms for convolution quadrature of Riemann-Liouville fractional derivative. Appl Numer Math, 2019, 145: 384–410
 - 53 Sun J, Nie D X, Deng W H. Error estimates for backward fractional Feynman-Kac equation with non-smooth initial data. J Sci Comput, 2020, 84: 6
 - 54 Sun J, Nie D X, Deng W H. High-order BDF fully discrete scheme for backward fractional Feynman-Kac equation with nonsmooth data. Appl Numer Math, 2021, 161: 82–100
 - 55 Thomée V. Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems. New York: Springer, 2006
 - 56 Tian W Y, Zhou H, Deng W H. A class of second order difference approximations for solving space fractional diffusion equations. Math Comp, 2015, 84: 1703–1727
 - 57 Todhunter I. A History of the Mathematical Theory of Probability. New York: Chelsea, 1949
 - 58 Wang X D, Chen Y, Deng W H. Feynman-Kac equation revisited. Phys Rev E, 2018, 98: 052114
 - 59 Wang X D, Chen Y, Deng W H. Lévy-walk-like Langevin dynamics. New J Phys, 2019, 21: 013024
 - 60 Wang X D, Chen Y, Deng W H. Aging two-state process with Lévy walk and Brownian motion. Phys Rev E, 2019, 100: 012136
 - 61 Wang X D, Chen Y, Deng W H. Strong anomalous diffusion in two-state process with Lévy walk and Brownian motion. Phys Rev Res, 2020, 2: 013102
 - 62 Wu X C, Deng W H, Barkai E. Tempered fractional Feynman-Kac equation: Theory and examples. Phys Rev E, 2016, 93: 032151
 - 63 Xu P B, Deng W H. Lévy walk with multiple internal states. J Stat Phys, 2018, 173: 1598–1613
 - 64 Xu P B, Deng W H. Fractional compound Poisson processes with multiple internal states. Math Model Nat Phenom, 2018, 13: 1–12
 - 65 Zhang Z J, Deng W H, Karniadakis G E. A Riesz basis Galerkin method for the tempered fractional Laplacian. SIAM J Numer Anal, 2018, 56: 3010–3039
 - 66 Zhou T, Trajanovski P, Xu P B, et al. Generalized diffusion and random search processes. J Stat Mech Theory Exp, 2022, 2022: 093201
 - 67 Zhou T, Xu P B, Deng W H. Lévy walk dynamics in non-static media. J Phys A, 2022, 55: 025001
 - 68 Zhou T, Xu P B, Deng W H. Lévy walk dynamics in an external constant force field in non-static media. J Stat Phys, 2022, 187: 9

Anomalous and nonergodic multiscale modeling, analyses and algorithms

Weihua Deng

Abstract Anomalous and nonergodic phenomena are ubiquitous in nature. With the development of experimental technology, various new experimental phenomena are still emerging. To explain the phenomena/reveal the mechanism, we establish the microscopic models (i.e., random processes) and conduct the stochastic analysis and statistical analysis on the microscopic model. At the same time, we derive the macroscopic equation that the probability distribution of some macroscopic statistical observables (such as the particle position, functional of the particle's trajectory, escape probability, and first passage time) satisfies, and then study the regularity of the solution of the equations and the numerical computational method of the equations. Anomalous and nonergodic multiscale dynamics in non-static media will be a research topic with important theoretical values and application prospects in natural science. Anomalous and nonergodic dynamics on manifolds are also worth studying. Cross-scale anomalous and nonergodic dynamics in all cases are important research topics too.

Keywords computable modeling, nonequilibrium statistical physics, non-static media, analysis and algorithm

MSC(2020) 82C10, 82-10, 65M12

doi: 10.1360/SSM-2023-0046