

布朗运动理论一百年¹⁾

郝柏林

(1 中国科学院理论物理研究所 北京 100190)

(2 复旦大学物理系 上海 200433)

摘要 文章基于作者在 2005 年纪念爱因斯坦奇迹年的香山会议上的综述报告,扼要叙述了从布朗运动到统计涨落场论的发展历程,特别提及了与中国物理学家有关的贡献.

关键词 布朗运动,随机行走,广义朗之万方程,维纳路径积分,涨落场论,随机量子化

A hundred years of the theory of Brownian motion

HAO Bai-Lin

(*Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

(*Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China*)

Abstract This is a reprint of a 2005 talk given at a Fragrant Hill Conference devoted to the centenary of the Einstein Miracle Year. It briefly reviewed the development of stochastic approach in physics with some emphasis on contributions related to Chinese physicists.

Keywords Brownian motion, random walk, generalized Langevin equations, Wiener path integral, fluctuation field theory, stochastic quantization

由爱因斯坦、斯莫卢霍夫斯基 (M. Smoluchowski) 等人在 20 世纪初开始的布朗运动理论,在一百年间发展出内容丰富的众多学科分支,现在正在成为分析生物细胞内分子机器运作原理的有力工具. 爱因斯坦在 1905 年发表的 5 篇论文中,关于布朗运动的文章可能人们知道得最少,而实际上它被引用的次数却超过了狭义相对论.

1 我们从布朗运动本身开始回顾

英国植物学家罗伯特·布朗在 1828 年和 1829 年的《哲学》杂志上发表了两篇文章,描述自己在 1827 年夏天在显微镜下观察到花粉颗粒在液体中的不停顿的运动. 他最初曾经以为是看到了生命运动,但后来确认这种运动对细小的有机和无机颗粒都存在,因而不是生命现象所致. 布朗认为运动的原因在于这些颗粒包含着“活性分子”(active molecules),而与所处的液体没有关系.

事实上,布朗并不是观察到这类运动的第一人.

他在上述两篇文章里就曾提到了约十位前人,包括做过大量观察的制作显微镜的巧手列文胡克 (Antonnie von Leeuwenhock).

2 爱因斯坦的扩散长度公式

爱因斯坦在 1901—1905 年间致力于博士论文研究. 他在 1905 年发表的头一篇文章——《分子大小的新测定》就基于其博士论文. 爱因斯坦考察了液体中悬浮粒子对渗透压的贡献,把流体力学方法和扩散理论结合起来,建议了测量分子尺寸和阿伏伽德罗常数的新办法. 这样的研究同布朗运动发生关

1) 编者说明:本文原是郝柏林院士在 2005 年第 263 次香山科学会议上所作的一篇综述报告,曾发表在香山科学会议主编的《科学前沿与未来》第十集第 1—17 页(此书于 2006 年由北京的中国环境科学出版社出版). 在这篇文章中,作者概括总结了由爱因斯坦、斯莫卢霍夫斯基 (M. Smoluchowski) 等人在 20 世纪初开始的布朗运动理论百年来的进展和面临的新问题,文中特别提到中国学者所起的作用. 由于上述文集发行量有限,广大读者不易读到,我们特征得作者同意,在本刊转载发表,以飨读者.

系是很自然的. 然而, 他在 1905 年 5 月撰写的第二篇论文的题目并没有提及布朗运动. 这篇题为《热的分子运动论所要求的静止液体中悬浮小粒子的运动》的文章, 一开始就说: “可能, 这里所讨论的运动就是所谓的布朗分子运动; 可是, 关于后者我所能得到唯一的资料是如此的不准确, 以致在这个问题上我无法形成判断.”

爱因斯坦确实建立了布朗运动的分子理论, 并且开启了借助随机过程描述自然现象的数理科学发展方向.

我们不在此重复爱因斯坦当年对扩散系数 D 的推导, 直接从熟知的(一维)扩散方程出发:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} .$$

假定在 $t=0$ 时刻粒子位于 $x=0$ 处, 即 $\rho(x, 0) = \delta(x)$, 扩散方程的解是:

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} ,$$

即粒子的密度遵从高斯分布. 对于固定的时刻 t , x 和 x^2 的平均值分别是:

$$\langle x \rangle = 0, \quad \langle x^2 \rangle = 2Dt .$$

于是得到扩散长度的公式

$$\sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{2Dt} ,$$

这里出现了著名的爱因斯坦的 $1/2$ 指数.

3 无规行走问题

如果把时间离散化为步长 Δt 的小段, 令 $t = n\Delta t$, 同时保持 Δt 适当大, 使得每小段时间头尾的运动彼此无关, 于是行走 n 步的结果 x_n 就是 n 个独立随机变量之和. 自然,

$$\langle x_n \rangle = 0, \quad \langle x_n^2 \rangle \propto n .$$

可见, 均方距离并不是正比于步数 n , 而是:

$$\sqrt{\langle x_n^2 \rangle} \propto n^{\frac{1}{2}} ,$$

这里的 $1/2$ 幂次出现在高分子构象统计等许多涉及随机运动的理论中.

离散的无规行走问题本身早已经发展成一个活跃的研究领域. 最简单的等步长的无规行走问题, 除了 $\langle x_n \rangle = 0$ 和 $\langle x_n^2 \rangle \propto n$ 以外, 还有一个重要的特征量: 从原点出发再次返回原点的概率. 它与空间维数有关. 一维行走返回原点的概率为 1; 二维行走返回原点的概率也是 1; 但三维行走返回原点的概率小于 1, 仅为 $0.3405373296 \dots$ (Pólya 常数).

纯无规行走对于走过的点没有记忆. 非随机性

表现为对历史的某种记忆. 可以通过考察 $\langle x_n^2 \rangle$ 同 n 的关系, 来判断所研究的过程偏离完全随机的程度. 如果走过的点都不许再碰, 称为自回避行走(英文缩写是 SAW). 这是对溶液中高分子链的很好描述. 一种二维的、只是第一步不许返回的无规行走问题, 导致统计物理学中著名的二维伊辛(Ising)模型的严格解, 但相应的三维推广只给出了一个封闭的高温近似解^[1].

试问平面中 n 步正向 SAW 有多少种? 这个种类数 m 是没有封闭解但存在具体答案的计数问题的实例(见表 1).

表 1 正向 n 步自回避行走的种类数 m

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	...
m	1	2	5	12	30	73	183	456	1151	...

这是《整数序列全书》^[2] 中的第 A046170 号序列. 我们再看一个无规行走的“现代”应用: DNA 行走.

对很长的由 4 个字母组成的 DNA 序列, 令 A, C, G, T 对应上下左右 4 个方向. 从 2 维格子的原点和序列的最左端出发, 每见到一个字母移动一格. 这不是随机行走, 因为每个序列对应一个特定的实现, 不能随机重复和取平均值, 然而可以随着 n 增加, 问行走 n 步之后, 到原点的距离 r_n 的平均值和平方平均值如何随 n 变化? 自然, $\langle r_n \rangle = 0$, 但 $\langle r_n^2 \rangle \propto n^\alpha$ 中的指数 α 是大于、小于还是等于 $1/2$?

1992 年发表在英国《自然》杂志上的一篇文章^[3] 考察了一维的 DNA 行走, 即只区分两个左右方向: 遇嘌呤(A 或 G)向左一步、遇嘧啶(C 或 T)向右一步. 他们的结论是 $\alpha > 1/2$, 而且编码段比非编码段更随机. 这篇文章引起了几百篇后继论文, 正反参半.

4 皮兰实验和诺贝尔奖

爱因斯坦并没有因为布朗运动理论而得到诺贝尔奖, 但法国物理学家皮兰(Jean Baptiste Perrin, 1870—1942)却因为 1908 年以来证实爱因斯坦理论的实验研究获得了 1926 年的诺贝尔物理学奖. 获奖说明是“为了他关于物质离散结构特别是沉积平衡的发现”.

当时布朗运动实验的主要意义在于它证明了分子的存在, 并且提供了测量阿伏伽德罗常数的一种新办法. 沉积平衡的直观实例发生在超速离心机中. 在高速旋转的处于水平位置的试管里, 大小不同的

颗粒在离心力作用下沿径向往外运动,越往外离心力也越大,但所受到的液体的黏滞阻力也越大,于是在一定半径处达到平衡.这是现代分子生物学实验室里分离大小分子集团的重要手段之一.由沉积平衡定义的沉积系数 S ,在分子生物学中作为分子量的度量一直沿用至今.例如,23S rRNA 确实比16S rRNA 大,但并不成简单比例关系.

有趣的是,同年的诺贝尔化学奖颁给了瑞典人斯维德堡(Theodor Svedberg,1884—1971),理由是“为了他关于弥散系统的工作”,而斯维德堡的诺贝尔演讲题目却是“超速离心机”.沉降系数 S 又称斯维德堡单位,并没有因为皮兰而改用 P .

5 朗之万方程

法国物理学家朗之万(Paul Langevin,1872—1946)是中国物理学界的朋友.他在1931年作为国际物理学联合会的代表来到当时的北平,协助建立了中国物理学会,并且当选为中国物理学会的第一位外籍会员.他是我国声学前辈汪德昭先生的老师.朗之万晚年成为法国共产党人和反法西斯抵抗运动的斗士.

爱因斯坦用统计物理和流体力学方法,考察多个布朗粒子的分布,导出了扩散长度公式.朗之万在1908年写出了单个粒子在“随机力” $F(t)$ 作用下的“牛顿方程”:

$$\frac{dv}{dt} = -k\nu + F(t) \quad ,$$

其中摩擦系数由斯托克斯公式 $k = 6\pi\eta a/m$ 给出,这里 η 是液体的黏性, a 是球形粒子的半径,而 m 是粒子质量.

这是历史上第一个随机微分方程.我们先不把随机力 $F(t)$ 具体化,直接对线性的朗之万方程求积分:

$$\nu(t) = \nu_0 e^{-kt} + \int_0^t dT e^{-k(t-T)} F(T) \quad .$$

重要的不是各种物理量的瞬时值,而是它们的时间平均值,例如:

$$\langle \nu(t) \rangle = \nu_0 e^{-kt} + \int_0^t dT e^{-k(t-T)} \langle F(T) \rangle \quad ,$$

$$\langle \nu(t)\nu(t) \rangle = \nu_0^2 e^{-2kt} + 2 \int_0^t dT e^{-k(t-T)} \nu_0 \langle F(T) \rangle$$

$$+ \int_0^t dT' \int_0^t dT e^{-k(2t-T-T')} \langle F(T)F(T') \rangle \quad ,$$

上面各式中的尖括号表示对随机力的分布求平均值.

很自然地假定

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad ,$$

$$\langle F(t)F(t') \rangle = 2D\delta(t-t') \quad .$$

于是在 $t \rightarrow \infty$ 的极限下,速度的平均值为零,而速度的自关联也极短.

朗之万方程肇始了整个随机微分方程的数学理论.我们主要沿三条线对后来的发展稍作说明:

(1)朗之万方程的各种推广:广义朗之万方程;

(2)决定朗之万随机变量分布函数的方程:福克—普朗克方程;

(3)朗之万解空间上的连续积分.

6 广义朗之万方程

线性的朗之万方程后来结合各种应用被大踏步地推广.广义朗之万方程可以写成

$$\frac{\partial \Psi_i}{\partial t} = K_i(\Psi) + \xi_i(t) \quad ,$$

其中非随机力 K_i 由两项组成:

$$K_i(\Psi) = -\sigma_{ij} \frac{\partial V}{\partial \Psi_j} + M_i(\Psi) \quad ,$$

第一项是可以由位势 V 微分得到的广义力, σ_{ij} 的对称部分对应耗散,而反称部分对应保守的正则力;第二项是不能由位势得到的正则力,例如磁矩在磁场中所受的力.这就是川崎恭治手工加进去的“模模耦合项”

$$M_i(\Psi) = \lambda \sum_j \left[\frac{\partial}{\partial \Psi_i} A_{ij} - A_{ij}(\Psi) \frac{\partial V}{\partial \Psi_j} \right] \quad ,$$

其中 A_{ij} 是反称的泊松括号或对易子.

对随机力做高斯分布假定:

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0 \quad ,$$

$$\langle \xi_i(t)\xi_j(t') \rangle = 2\sigma_{ij}\delta(t-t') \quad ,$$

上式中 σ_{ij} 与非随机力中的 σ_{ij} 的对称部分相同,这是涨落耗散定理的后果.

7 涨落耗散定理

其实,出现在线性的朗之万方程或广义朗之万方程中的两个常数,摩擦系数 k 和涨落力的关联强度 D (或前面 σ_{ij} 的对称部分)并不能随便给定.它们的关系要由“终值条件”决定:时间无穷长时,布朗粒子要与所处环境达到热平衡,也遵从能量均分定理,因而联系这两个量的关系中含有温度 T .这个关系式也出现在爱因斯坦1905年的论文中.这是涨落耗散定理的一个实例.涨落耗散定理的另一个早期实

例是电路中电流噪声和电阻的关系. 这两个例子代表着两类涨落耗散定理. 线性输运过程框架内的涨落耗散定理的一般理论, 是在 20 世纪 50 年代建立的.

涨落耗散定理是接近平衡态的非平衡理论的重要内容. 接近平衡但又处于不平衡的系统有三种最基本的过程, 这就是趋向平衡、线性输运和涨落. 这三种过程本质上密切相关. 假定液体中某处的溶质浓度忽然比附近高, 那么局部就偏离平衡, 下一时刻就会产生粒子流, 使得多余的溶质向浓度低的方向扩散. 扩散流比例于浓度梯度. 扩散引起耗散, 不过耗散是正比于扩散流的平方的二阶效应. 无论局部的浓度增加是由于从外界注入了溶质, 还是来自内部涨落, 随后发生的扩散过程都是一样的. 这是涨落耗散定理的物理基础.

微分方程的初值问题在物理学中处理简单问题时比比皆是, 司空见惯. 涨落耗散定理出现在求解朗之万方程所加的终值条件中. 我们在讨论布朗运动这样的复杂现象时常常遇到“终值条件”. 生物学家们描述更复杂的生命现象时有时使用“目的论”(teleology)的语言就更不足为奇了.

8 输运系数对称原理

既然提到了线性输运过程, 我们就再说几句, 以便后面讲到涨落场论特别是其非线性推广时, 有所对比.

首先是广义力和广义流的概念. 电位差导致电流, 浓度差导致扩散流, 温度差导致热流, 等等. 可以定义广义势 V , 它的势差给出广义力 F_i , 而广义力导致广义流 J_i . 这是“对角项”. 还可以存在非对角的交叉项: 电位差可以导致热流, 温度差可以引起电流, 等等. 在线性范围内可以写成

$$\begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \\ \dots \\ J_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \dots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \dots & \sigma_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \dots & \sigma_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \dots \\ F_n \end{pmatrix},$$

上式中 σ_{ij} 称为输运系数. 恰当定义输运系数后, $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, 这就是输运系数对称原理或“倒易关系”. 历史上最早的倒易关系是 19 世纪汤姆孙 (Thomson) 为热电系数和电热系数导出的, 他当时巧妙地利用了一个热循环做论据. 1968 年, 昂萨格 (Lars Onsager, 1903—1976) 因在 1931 年提出输运系数对称

原理而获得诺贝尔化学奖. 顺便提一句, 所谓“恰当”定义输运系数, 就是考察决定总耗散的二次型, 把它对角化以后的平方项的系数适当地归入原来线性输运系数的定义中. 通常, 这就是补上温度 T 的一定幂次.

9 欧尔斯坦—乌伦别克过程

其实, 前面依据物理直观写出的朗之万方程或广义朗之万方程, 在数学上很成问题. 随机项使得它们的解可能变得无界, 所涉及的导数也可能不存在. 由此在随机微分方程理论中引出了整个新篇章, 如所谓的伊藤清 (Itô) 算法和 Stratonovich 算法, 它们在数学上等价, 但数值计算时的方便程度不同. 我们不去涉足这些数学理论, 只指出朗之万方程的一种研究得比较好的极限情况, 是定常、高斯、马可夫和连续概率分布条件下的随机过程, 即欧尔斯坦—乌伦别克 (OU) 过程.

我们不进入 OU 过程的理论本身, 而只借此提及非平衡统计理论中几代人的故事. 欧尔斯坦 (L. S. Orstein, 1880—1941) 同乌伦别克 (George E. Uhlenbeck, 1900—1988) 在 1930 年撰写的综述^[4]是爱因斯坦最初文章之后 25 年布朗运动理论的总结. 又过了 15 年, 乌伦别克和他的中国女学生王明贞 (1906—) 又撰写了综述的第二部分^[5]. 这两篇文章至今仍是钻研经典布朗运动理论的入门必读. 今年 99 岁高龄的王明贞女士是清华大学的退休教授 (王明贞教授在 2010 年去世——编者注).

乌伦别克的另一位中国女学生是已故的王承书 (1912—1994) 院士. 她在流体力学基本方程的统计推导和高阶声波的研究方面有过重要贡献.

10 福克—普朗克方程

朗之万方程可以看成从随机变量 $\xi(t)$ 向随机变量 $v(t)$ 的变换关系. 假定随机变量 ξ 的初始分布函数为

$$P(r(t), v(t); r_0, v_0; t=0) = \delta(r - r_0) \delta(v - v_0),$$

随机变量 v 的分布函数 $P(r, v; r_0, v_0; t)$ 由福克 (A. D. Fokker) 在 1914 年和普朗克 (M. Planck) 在 1917 年研究的方程决定:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \Psi_i} (K_i P) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \Psi_i \Psi_j} (D_{ij} P),$$

这里 K_i 是漂移项的系数, D_{ij} 是扩散项的系数矩阵,

而 Ψ_i 是支撑起随机过程的空间中的“场”量,例如坐标或速度.

从每个朗之万方程可以推导出一个福克-普朗克方程,而每个福克-普朗克方程对应无穷多个朗之万方程.这是因为无穷多组随机变量可以遵从同一种概率分布,它们是随机等价的.随机等价与规范场理论中的规范等价有一些相似性.如果从技术上追究这种多值性的原因,则它源于矩阵开方的多值性.

如果福克-普朗克方程的解不随时间变化,即 $\partial P/\partial t=0$,则这是一个定态解.漂移系数 K_i 和扩散系数 D_{ij} 必须满足一定条件,才能保证存在定态解,而且这个定态解可以通过位势函数 V 表示: $P \propto e^{-V/kT}$,这就是“位势条件”.冯·坎本(von Kampen)在1958年,哈肯(H. Haken)等在1970年都研究过位势条件.位势条件的背后是细致平衡原理,细致平衡原理的基础是时间反演不变性.因此,位势条件不仅适用于满足细致平衡原理的近平衡态,还适用于某些远离平衡的非平衡定态.

如果在福克-普朗克方程中把时间 t 换成“虚”时间 it (作一个“维克旋转”),就得到形式上与量子力学中薛定谔方程结构类似的方程.中国科学院理论物理研究所郑伟谋曾利用此种联系,前后为福克-普朗克方程和薛定谔方程各找到一组包含双阱位势的严格解^[6].

11 维纳连续积分

朗之万方程的解依赖于随机变量的分布,因而不是一条轨道,而是无穷多条轨道的集合:

$t_0 \quad t_1 \quad t_2 \quad \dots \quad t_N \quad t$
 $x(t_0)=x_0 \quad x(t_1)=x_1 \quad x(t_2)=x_2 \quad \dots \quad x(t_N)=x_N \quad x(t)=x$

令相邻时刻之差 $t_{i+1}-t_i=\epsilon$ 足够大,以致前后两点独立,每点遵从高斯分布.整个轨道是许多个独立分布的联合分布:

$$\frac{1}{(4\pi D\epsilon)^{\frac{N+1}{2}}} \exp\left\{-\frac{1}{4D\epsilon} \sum_{j=0}^N (x_{j+1}-x_j)^2\right\} \prod_{j=1}^{N+1} dx_j \quad .$$

同时要求相邻时刻之差 $t_{i+1}-t_i=\epsilon$ 足够小,使得指数上的求和可以换成积分:

$$\exp\left\{-\frac{1}{4D} \int_{t_0}^t \left(\frac{dx}{dT}\right)^2 dT\right\} \quad .$$

于是有

$\int_{x_0, t_0}^{x, t} \exp\left\{-\frac{1}{4D} \int_{t_0}^t \left(\frac{dx}{dT}\right)^2\right\} d[x(T)] \quad ,$

物理量是对一切可能运动轨道平均的结果.这是一

个无穷维泛函空间中的连续积分.控制论的创始人维纳(Nobert Wiener, 1894—1964)早在1921—1923年间就引入了这种无穷维的连续积分.

量子场论中的费曼连续积分出现于1948年,那是拉格朗日形式的积分.相应的哈密顿形式的连续积分,到1959年才由顾茨维勒(M. C. Gutzwiller)引入.

维纳的连续积分是哈密顿形式的.拉格朗日形式的维纳连续积分直到1953年才出现,这就是对应线性朗之万方程的昂萨格-马克乐普(Machlup)泛函.它的非线性推广,导致与量子场论高度并行的涨落场论的出现.

12 量子布朗运动

布朗粒子所受到的摩擦力和随机力都来自“环境”.包含无穷自由度的环境没有精确的描述方式,它的一种模型是无穷多个谐振子组成的“热浴”.正是对环境的热平衡假定把温度引进了涨落耗散定理的表述中.1960年以后,激光的发展把量子噪声的研究提上了日程.量子耗散的描述也同“热浴”相关.这就促进了量子布朗运动理论的发展和对量子涨落耗散定理的证明.纳米结构中粒子的运动更使得量子涨落和统计涨落必须同时研究.

布朗运动是一种无规的“永动”.正是对宏观系统和无穷长时间大量粒子运动的完全随机的假定,才避免了布朗运动理论和热力学第二定律的矛盾.然而在纳米结构和小时间尺度下,热力学第二定律的偏离也成为可以检验的事实.量子布朗粒子和“热浴”量子态纠缠,成为“退相干”的原因之一.这是量子计算和量子通信必须面对的困难.这一切使量子布朗运动成为1990年以来的前沿研究课题.量子朗之万方程和量子连续积分的理论也都有所发展.

13 无序系统和随机模拟

像玻璃或“自旋玻璃”这样的无序固体是不同于晶体的一大类物质.它们的理论研究自然地和随机过程有密切联系.另一方面,许多优化和识别问题需要在极其复杂的高维的“能量”地形图中寻求最大或最小值,就像是自旋玻璃寻找能量最小的基态.这类问题不可能用穷举或比较一切情况来获取答案,因为其计算量超过任何现在和未来的计算机的承受能力.较为有效的办法是设计适当的随机过程,来探

索地形分布. 因而随机模拟成了重要的计算方法, 这里要用到布朗运动理论武库中的许多工具和概念.

14 涨落场论

我们用一种极为简单但并不严格的方法, 引入对应广义朗之万方程的涨落场论. “一生二、二生三、三生万物”. 我们可以从“1 的分解”开始推导.

先把普通的一维 δ 函数

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1 \quad ,$$

推广成无穷维的连续积分形式:

$$\int \delta[x] d[x] = 1 \quad .$$

现在用它来保证无穷多个涨落场分量所满足的广义朗之万方程成立:

$$\int \delta \left[\frac{\partial \Psi_i}{\partial t} - K_i(\Psi) - \xi_i(t) \right] \Delta[\Psi] d[x] = 1 \quad ,$$

这里由于从连续变量 $x(T)$ 换成由广义朗之万方程决定的 Ψ , 因而出现了泛函雅可比行列式:

$$\Delta[\Psi] = \exp^{-\frac{1}{2} \int \frac{\delta K[\Psi]}{\delta \Psi} dx dt} \quad ,$$

好在它已经“指数化”(Graham, 1973)了.

利用泛函 δ 函数的积分定义

$$\delta[x] = \frac{1}{2\pi} \int e^{i\psi x} d[\hat{\Psi}] \quad ,$$

把前面的 δ 函数提升到指数上去:

$$\int d[\hat{\Psi}] d[\frac{\hat{\Psi}}{2\pi}] e^{i(\Psi[K[\Psi]-\xi]-\frac{1}{2}\frac{\delta K}{\delta \Psi})} = 1 \quad .$$

在上式中, 补入与场量 Ψ 和共轭场 $\hat{\Psi}$ 相耦合的流 J 与对偶流 \hat{J} :

$$\exp[i(J\Psi + \hat{J}\hat{\Psi}) dx dt] \quad ,$$

这就使归一化条件 $Z_\xi[0, 0] = 1$ 成为依赖于随机过程 ξ 的生成泛函:

$$Z_\xi[J, \hat{J}] = \int d[\Psi] d[\frac{\hat{\Psi}}{2\pi}] e^{i(\Psi[K[\Psi]-\xi-\frac{1}{2}\frac{\delta K}{\delta \Psi}] + J\Psi + \hat{J}\hat{\Psi})} \quad .$$

它对于 J 和 \hat{J} 的各阶变分导数给出了种种复合算子的平均值, 即物理量.

15 MSR 场论

Martin, Siggia 和 Rose 三人在 1973 年为经典的流体力学基本方程组(即 Navier-Stokes 方程)写出了变分原理. 对于简单流体, 一共有 5 个场量 $\phi_i, i=1, \dots, 5$. 然而, 还必须引入 5 个同 ϕ_i 不对易的共轭场 $\hat{\phi}_i$, 才能使得相应的 Euler-Lagrange 方

程就是原来的流体力学方程组.

后来知道, MSR 的共轭场 $\hat{\phi}_i$ 相当于切矢场 $\partial/\partial\phi$. 换言之, 不能只用基底空间, 还必须把切空间引进来. 非线性动力学中求李亚彭诺夫指数也是切空间中的计算.

MSR 场论当时的主要贡献是把克莱奇南(R. H. Kraichnan)用类似费曼图的办法对湍流做微扰描述时高阶图的数目弄清楚. 直到最近还有人把 MSR 场论继续用于湍流研究. 周光召等发展的统一描述平衡和非平衡现象的闭路格林函数理论^[7,8], 则更便于用拉格朗日形式的随机泛函论证 MSR 场论, 使其与维纳连续积分更为接近.

16 闭路格林函数

在涨落场论中, 场量是对称性和守恒性的携带者, 而物理量是复合算子的平均值. 场量本身并不出现在最后的物理结果中. 这在闭路格林函数的理论框架^[7,8]中看得很清楚. 所谓“闭路”是指时间轴从负无穷大发展到正无穷大, 然后再回到负无穷大. 由于正负时间支的选取, 每个 N 点费曼图都对应 2^N 个积分. 任何多点格林函数都有三套: 一套用于同量子场论高度平行的理论表示; 一套用于实际计算; 一套用于表示最终需要的物理量. 三套格林函数之间存在明确定义的变换.

闭路格林函数方法用于动态临界现象的分析, 直接导致原来用广义朗之万方程实现的各种模型^[7,8]. 从这一理论自然看出, 前面提到的“模模耦合项”乃是量子场论中熟知的 Ward-Takahashi 恒等式, 这是由对称性引起的, 后来许多作者在不同的问题中都发现过“模模耦合项”的此种本质.

非平衡现象的各种较为普遍的数学表述, 都有一个共同特点, 那就是已经无穷多的自由度还要“双倍化”: 闭路格林函数方法中的正负时间支, MSR 场论中的基本场和共轭场, 普里高津(I. Prigogine)理论中的超算子所作用的超空间, 都是这样. 目前还没有对此问题的一般性分析.

17 随机量子化

规范场量子化时对辅助场的连续积分, 导致法捷耶夫-波波夫(Faddeev-Popov)“鬼”, 它们会违反自旋和统计关系, 带来一些理论困难. 意大利理论物理学家帕里西(G. Parisi)建议把 4 维时空中的规

范场方程放入 5 维空间,引入随第 5 维“时间”变化的随机力,使它们成为 5 维时空中的广义朗之万方程.当第 5 维“时间”趋向无穷时,系统达到与“时间”无关的定态,其“位势”由相应的福克-普朗克方程决定.这样就避开了法捷耶夫-波波夫“鬼”.1980 年,帕里西和吴咏时在中国科学院理论物理研究所完成的这一工作发表于《中国科学》^[9],它肇始了规范场理论中随机量子化的研究方向.

18 布朗马达和分子马达

布朗运动理论最新、最积极的应用,可能在于对细胞中各种分子“机器”作用原理的认识.

布朗粒子从极小时间尺度上的无规涨落获取能量,实现各种较大尺度上的无规运动,斯莫鲁霍夫斯基早在 1912 年就考虑过能否利用布朗运动实现定向运动的问题.费曼(R. Feynman)在 1963 年提出的“棘齿和棘爪”(ratchet and pawl)模型,原则上可以从两个不同的“热浴”获得能量,缓慢地做定向机械功.这是一种布朗马达.

细胞中有各种高效地把化学能转变为机械功的分子马达.例如,生物化学过程所需的能量存储在称为“腺三磷”(三磷酸腺苷即 ATP)的小分子的三磷酸键中,ATP 贡献能量后成为 ADP(腺二磷),需要重新“充电”成 ATP.实现充电的蛋白质机器 ATP 合成酶,真是一种具有转动部分的小机器.还有许多长着蛋白质双脚或单腿的小膜泡,沿细胞骨架行走以输送各种物质,这些是线性分子马达.许多人尝试用布朗马达来解释分子马达.小分子在微观涨落上“冲浪”,它们以极高的效率消耗能量,并不违反热力学定律.本书(指香山科学会议主编的《科学前沿与未来》(第十集)一书——编者注)中欧阳钟灿的文章《布朗运动:从花粉无规行走到生物大分子的有序运动》会继续介绍布朗运动理论与生物学有关的发展^[10].

其实,从广义上讲,达尔文的进化论就是描述随机突变背景上的定向演化.可以参看英国《自然》杂志的一篇题为《达尔文马达》的短文^[11].

对液体中小悬浮粒子无规运动的研究,1905 年以前主要是通过实验观察和事实积累来逐步形成基本认识.从 1905 年到 1950 年,理论和实验的重心在

于证明原子和分子的存在.这一时期布朗运动理论成为非平衡态统计物理的重要组成部分,也成为随机微分方程和随机过程理论的试金石.1950—1990 年是涨落场论的形成阶段,这一理论的广泛应用尚有待开拓.1990 年以来,量子布朗运动理论进一步发展,对纳米结构中粒子运动和生物细胞中分子机器的认识可能成为布朗运动理论最重要和最富于建设性的应用.

在结束本文之前,我们把布朗运动理论放在更一般的背景上.现代数理科学描述自然界,有三种基本的“逼近”模式:周期、随机和混沌.周期模式以二体问题为典范,可以从开普勒行星运动三定律、牛顿力学、狭义和广义相对论、从玻尔到狄拉克的氢原子模型,一直研究到杨氏对称关系(Yangian).混沌模式以一维非线性映射为可解实例,横跨尺度变换下的不变性、标度律、对称破缺、临界指数、符号动力学、分形与分维,乃至重正化群等重要概念.随机模式以布朗运动为试金石,涉及本文提到和没有提到的方方面面.目前在我国的数理和工程科学的高等教育中,对后两种模式还没有给予充分注意.愿这篇短文能起到一点促进作用.

参考文献

- [1] 石赫,许以超,郝柏林.物理学报,1978,29:47[Shi H, Xu Y C, Hao B L. Acta Physica Sinica, 1978,29:47(in Chinese)]
- [2] Sloane N J A, Plouffe S. The Encyclopedia of Integer Sequences, New York: Academic Press, 1995
- [3] Peng C K, Buldyrev S V, Goldberger A L *et al.* Nature, 1992,365:168
- [4] Uhlenbeck G E, Orstein L S. Phys. Rev., 1930,36:823
- [5] Wang M C, Uhlenbeck G E. Rev. Mod. Phys., 1945,17:323
- [6] Zheng W M, Physica, 1983,122A:431; J. Math. Phys., 1984,25:88
- [7] Zhou G Z, Su Z B, Hao B L, Yu L. Phys. Reports, 1985,118:1
- [8] Zhou G Z, Su Z B, Hao B L, Yu L. Phys. Rev. B, 1980,22:3385
- [9] Parisi G, Wu Y S. 中国科学,1981,24:483
- [10] 欧阳钟灿. 布朗运动:从花粉无规则行走到生物大分子的有序运动.见:香山科学会议主编,《科学前沿与未来》(第十集:相对论物理 100 年:发展与展望).北京:中国环境科学出版社,2006 年 10 月.18—24
- [11] Oster G. Nature, 2002,417:25