УДК 519.21

В. А. Дубко

О МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ПОДСИСТЕМЫ В МНОГОЭЛЕМЕНТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ СИСТЕМАХ И ПОСТРОЕНИЕ СТОХАСТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ САМОДИФФУЗИИ

Установлено уравнение для диффузионного приближения процесса самодиффузии. Это приближение основано на динамическом уравнении Ланжевена.

Ключевые слова: уравнения Ланжевена, уравнение Ито, самодиффузия.

Поиск возможностей и разработка методов аппроксимации динамики состояния (решения) конкретной подсистемы — одна из основных задач теории многоэлементных системы.

Такая возможность, как показывает опыт применения методов статистической физики, реализуется на основе определения макропеременных, удовлетворяющих своей системе уравнений. Динамика подсистемы в этом случае описывается системой уравнений, коэффициенты которых зависят от этих макропеременных и текущего состояния подсистемы.

Сложность и неопределённость, появляющаяся при моделировании взаимодействия между системами окружения (термостатом) и подсистемой, отображается путём введения случайных взаимодействий подсистемы с системой, то есть динамика подсистемы рассматривается как случайный процесс.

Существует широкий класс случайных процессов, которым можно сопоставить решения системы стохастических дифференциальных уравнений. Причём требования-ограничения к таким процессам не жёсткие. Так, например, в работе [2] доказана теорема, что если случайный процесс $\xi(t) \in \mathrm{R}^n, t \in [0;T]$ — непрерывный квазимартингал, то есть

$$\xi(t) = \alpha(t) + \mu(t),$$

где $\alpha(t)$ — процесс ограниченной вариации, $\mu(t)$ — непрерывный локальный мартингал, то при ограничениях на математические ожидания

Дубко Валерий Алексеевич — доктор физико-математических наук, профессор (Нежинский агротехнический институт Национального университета биоресурсов и природопользования Украины, Нежинск, Украина); e-mail: doobko2008@yandex.ru.

для вторых смешанных моментов компонент $\mu(t)$ и «естественного» требования к их интегральному представлению, процесс $\xi(t)$ соответствует решению стохастического дифференциального уравнения с неупреждающими коэффициентами.

Это утверждение может служить основанием для построения моделей динамики подсистем на основе уравнений Ито, уравнений Ито с пуассоновскими возмущениями. Подобный выбор класса модельных уравнений для исследования не является существенным ограничением в силу сказанного выше.

Следующий вопрос связан с выбором коэффициентов стохастического дифференциального уравнения. Эффективным оказался подход, предложенный Ланжевеном. Подход Ланжевена трактуется как принцип согласованности, заключающийся в требовании совпадения осреднённых значений микрохарактеристик с их аналогами на макроуровне. Это позволяет выбрать коэффициенты реакции на случайные процессы-возмущения, обеспечивающие выполнение принципа согласованности.

В данной работе рассмотрим вариант построения уравнения самодиффузии, исходя из динамических уравнений частицы в форме Ито.

Будем полагать, что в перемножениях по индексам, которые встречаются дважды, ведётся суммирование.

Модель динамического процесса самодиффузии.

Опираясь на метод согласования Ланжевена, построим диффузионного приближения явления самодиффузии, опираясь на стохастическое уравнение динамики частиц.

Исследование уравнения динамики броуновской частицы в неоднородной среде было выполнено в [3], [4]. Было отмечено, что коэффициент вязкости для стоксового трения в уравнении Ланжевена пропорционален плотности среды окружения, что приводит к требованию: коэффициенты при случайных возмущениях пропорциональны корню из вязкости.

Учитывая выводы предыдущих работ, рассмотрим ситуацию, когда наблюдаемые — частицы самой среды.

Под уравнением самодиффузии, для выделенной частицы облака тождественных по физическим свойствам частиц, будем понимать систему стохастических уравнений Ланжевена вида:

$$\begin{cases} \varepsilon d\upsilon_\varepsilon(t) = -\lambda(\rho(x_\varepsilon(t);t)+\gamma)\upsilon_\varepsilon(t)dt + \\ \qquad\qquad - F(x_\varepsilon(t);t)dt + (\rho(x_\varepsilon(t);t)+\gamma)^{0,5} b_k dw_k(t) \\ dx_\varepsilon(t) = \upsilon_\varepsilon(t)dt \end{cases} \tag{1}$$

где параметры $\lambda > 0$, $\gamma > 0$, $\varepsilon > 0$; b_k — постоянные, ортогональные векторы, $|b_k| = b\sqrt{\lambda}$, $k = 1,2,3$; $F(x;t) \in \mathbb{R}^3$ – вектор, моделирующий поле сил,

$w_k(t),\ k=\overline{1,3}$ – независимые винеровские процессы, $\rho(t;x)$ – распределение превышения средней плотности γ, тождественных по размерам частиц.

ε рассматривается как малый параметр и, как было показано в [3], появляется при переходе к безразмерным величинам в уравнении Ланжевена для броуновской частицы. Выбор же стоксового торможения для частицы молекулярных размеров связан с тем, что сопротивление «для малых шариков, имеющих размеры растворителя, снижается лишь на 40 % по сравнению с шариками гораздо больших размеров» [1, с. 66].

На основании теорем из работы [3] об асимптотическом поведении $x_\varepsilon(t), \varepsilon\downarrow 0$, с учётом вида коэффициентов (1), приходим к такому уравнению для аппроксимирующей переменной $x(t)$:

$$dx(t)=-0,5[\rho(x(t);t)+\gamma]^{-2}\lambda^{-2}\{(b_k,b_k)\nabla_x[\rho(x(t);t)+\gamma]dt+ \\ -\frac{1}{\lambda}[\rho(x(t);t)+\gamma]^{-1}F(x(t);t)\}dt+b_k\lambda^{-1}[\rho(x(t);t)+\gamma]^{-0,5}dw_k(t) \tag{2}$$

Соответствующее (2) уравнение Колмогорова имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x;t)=\{0,5\lambda^{-2}(\nabla_x,(b_k,b_k)(\rho(x;t)+\gamma)^{-2}\rho(x;t)\nabla_x[\rho(x;t)+\gamma])+ \\ +\frac{1}{\lambda}(\nabla_x\rho(x;t)[\rho(x;t)+\gamma]^{-1},F(x;t))\}+ \\ +0,5\lambda^{-2}\nabla_x^2\{(b_k,b_k)(\rho(x;t)+\gamma)^{-1}\rho(x;t)\}; \\ \rho(x;t)|_{t=0}=\rho_0(x)\in C_0^2. \tag{3}$$

Так как

$$\nabla_x\{(b_k,b_k)(\rho(x;t)+\gamma)^{-1}\rho(x;t)\}=-(b_k,b_k)\rho(x;t)(\rho(x;t)+\gamma)^{-2}\nabla_x(\rho(x;t)+\gamma)+ \\ +(\rho(x;t)+\gamma)^{-1}(b_k,b_k)\nabla_x(\rho(x;t),$$

то от (3) можно перейти к такой записи:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x;t)=(\nabla_x,\{0,5\lambda^{-2}(b_k,b_k)(\rho(x;t)+\gamma)^{-1}\nabla_x\rho(x;t)+ \\ +\frac{1}{\lambda}\rho(x;t)[\rho(x;t)+\gamma]^{-1}F(x;t))\}),$$

или:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x;t)=(\nabla_x,u(x;t)\rho(x;t)),\quad \rho(x;0)=\rho_0(x)\in C_2^0, \tag{4}$$

где

$$u(x;t) = (\rho(x;t) + \gamma)^{-1}\{0,5\lambda^{-2}(b_k, b_k)\nabla_x \rho(x;t) + \frac{1}{\lambda}\rho(x;t)F(x;t)\}. \quad (5)$$

При требовании

$$\lim_{t\to\infty} F(x;t) = F(x),$$

непрерывности $F(x)$ по x существует стационарное решение (4):

$$\lim_{t\to\infty} \rho(x;t) = \rho(x).$$

При переходе к стационарному распределению для вектора $u(x;t)$ должно выполняться требование:

$$\lim_{t\to\infty} u(x;t) = 0$$

Обращаясь к уравнению (5) и учитывая эти условия, приходим к равенству:

$$0,5\lambda^{-2}(b_k, b_k)\nabla_x \ln \rho(x) = -\frac{1}{\lambda}F(x),$$

которое совпадает по виду с формулой в [5, с. 68].

Для $F(x) = \nabla_x Q(x)$ решение его, с учётом требований к b_k в (1), имеет вид:

$$\rho(x) = C\exp\{-\frac{2}{3b^2}\ Q(x)\}.$$

Постоянную C выбираем из требования нормировки. Если $2Q(x) = g\,|\,x_1|$, то это распределение переходит в распределение типа Больцмана.

Список литературы

1. *Алдер Б. Дж, Алли У. Э.* Обобщённая гидродинамика // Физика за рубежом. Серия А. Исследования. Вып. 86А. М: Мир, 1986. С. 52—72.
2. *Гихман И. И.* О представлении непрерывных случайных процессов с помощью процессов с независимыми приращениями // Теория случайных процессов и её применение. 1975. № 3. С. 28.
3. *Дубко В. А.* Вопросы теории и применения стохастических дифференциальных уравнений. Владивосток: ДВО АН СССР, 1989. 185 с.
4. *Дубко В. А., Дубко А. В.* Уравнения Ланжевена, согласованные с классическими и неклассическими моделями диффузии // Вiсник АМУ. Серiя «Технiка». 2015. Випуск 2 (10). С. 34—46.
5. *Франк Ф., Мизес Р.* Дифференциальные и интегральные уравнения математической физики. Л.; М.: ОНТИ; Гл. ред. общетех. литературы, 1937. 996 с.

* * *

Doobko Valeriy A.

ON THE MODELING OF THE DYNAMICS OF THE SUBSYSTEM IN MULTI INTERACTING SYSTEMS AND SELF-DIFFUSION STOCHASTIC EQUATION CONSTRUCTION

(Nizhyn Agrotechnical Institute of the National University of Life and Environmental Sciences of Ukraine)

The equations for the diffusion approximation of self-diffusion process are constructed. This approximation is based on the Langevin dynamic equations.

Keywords: Langevin equations, Ito equation, self-diffusion.

REFERENCES

1. Alder B. Dzh, Alli U. E. Generalized hydrodynamics [Obobshchennaya gidrodinamika], *Fizika za rubezhom,* 1986, vol. 86A, pp. 52—72.
2. Gikhman I. I. On the representation of continuous random processes with the help of processes with independent increments [O predstavlenii nepreryvnykh sluchaynykh protsessov s pomoshch'yu protsessov s nezavisimymi prirashcheniyami], *Teoriya sluchaynykh protsessov i ee primenenie,* 1975, no. 3, pp. 28.
3. Doobko V. A. *Voprosy teorii i primeneniya stokhasticheskikh differentsial'nykh uravneniy* (Questions of the theory and application of stochastic differential equations), Vladivostok: Far Eastern Branch of the USSR Academy of Sciences Publ., 1989. 185 p.
4. Dubko V. A., Dubko A. V. Langevin equations agreed with classical and non-classical model of diffusion [Uravneniya Lanzhevena, soglasovannye s klassicheskimi i neklassicheskimi modelyami diffuzii', *Visnik AMU*. Series: *Tekhnika*, 2015, vol. 2 (10), pp. 34—46.
5. Frank F., Mises R. *Differentsial'nye i integral'nye uravneniya matematicheskoy fiziki* (Differential and integral equations of mathematical physics), Leningrad, Moscow, ONTI Publ., Glavnaya redaktsiya obshchetekhnicheskoy literatury Publ., 1937. 996 p.

* * *