

ЖАРАТЫЛЫСТАНУ ҒЫЛЫМДАРЫ / ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ / NATURAL SCIENCES

ФОККЕР–ПЛАНК ТЕҢДЕУІ НЕГІЗІНДЕ КИНЕТИКАЛЫҚ ТЕОРИЯДАҒЫ ТЕПЕ-ТЕҢДІКСІЗ ЖҮЙЕЛЕРДІ САНДЫҚ МОДЕЛЬДЕУ

Әбілхан Әдемі Әбдірәсілқызы

Бейшенбек Аяулым Жансейітқызы

4-курс студенттері, «Физика-информатика» білім беру бағдарламасы,
Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы қ., Қазақстан

Ғылыми жетекші: Жавлиева Ардақ Түтелқызы,
педагогика ғылымдарының магистрі, Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық
университеті физика кафедрасының оқытушысы

Ұсынылып отырған мақала Фоккер–Планк теңдеуіне негізделген тепе-теңдіксіз жүйелердің кинетикалық теориясын сандық модельдеу тәсілдерін теориялық тұрғыда талдауға арналған. Жұмыста бөлшектер арасындағы флуктуациялардың, диссипативтік әсерлердің және кездейсоқ күштердің жүйе динамикасына ықпалы қарастырылады. Фазалық кеңістіктегі ықтималдық үлестірімінің эволюциясын сипаттайтын Фоккер–Планк түріндегі кинетикалық теңдеу туындалып, оның сандық шешу әдістері (дискреттеу, стохастикалық алгоритмдер, ланжевендік модельдер) зерттеледі. Модельдеу барысында жүйедегі микро деңгейдегі корреляциялар, диффузиялық процестер және қайтымсыздық сипаттары ескерілді. Сонымен бірге, тепе-теңсіздік күйдегі газ тәрізді орталар үшін фазалық тығыздықтың динамикасы, оның уақыт бойынша өзгерісін сипаттайтын функционалдық ықтималдылық бейнесі талданып, статистикалық механикадағы стохастикалық тәсілдердің қолданбалы маңызы көрсетіледі. Алынған нәтижелер күрделі жүйелердің эволюциясын болжауда және флуктуациялық құбылыстарды сандық бағалауда қолдануға мүмкіндік береді.

Кілт сөздері: Фоккер–Планк теңдеуі, тепе-теңдіксіз жүйе, флуктуация, стохастикалық модельдеу, кинетикалық теория, фазалық тығыздық, корреляция.

Зерттеудің әдіснамасы. Бұл зерттеуде тепе-теңдіксіз жүйелер динамикасын сипаттайтын Фоккер–Планк теңдеуіне негізделген сандық модельдеу әдісі қолданылды. Әдіснама жүйеде туындайтын стохастикалық флуктуациялар мен диссипативтік әсерлерді бір мезгілде ескеруге мүмкіндік

беретін марковтық процестерге сүйенеді. Фазалық кеңістіктегі бөлшектердің ықтималдық таралымы сандық дискреттеу, Ланжевендік модельдеу және стохастикалық интегралдау тәсілдері арқылы есептелді. Сонымен қатар, жоғары корреляцияланған күйлердің эволюциясын сипаттау үшін функционалдық–кинетикалық тұрғыдан бейсызық стохастикалық теңдеулер пайдаланылды.

Негізгі ойлар. Фоккер–Планк теңдеуіне негізделген кинетикалық модельдерді қолдану тепе–теңдіксіз жүйелердегі флуктуациялық және диссипативтік процестердің табиғатын терең түсінуге мүмкіндік береді. Мұндай жүйелерде ықтималдық таралымының эволюциясы стохастикалық дифференциалдық теңдеулер арқылы сипатталады және фазалық кеңістіктегі динамика сыртқы әсерлерден гөрі ішкі корреляциялар мен кездейсоқ қозуларға тәуелді болады. Тепе–теңсіз газ тәрізді орталарда статистикалық сипаттамалардың уақыт бойынша өзгерісі қайтымсыздыққа ие болып, жоғары деңгейдегі флуктуациялар жүйенің тұрақты күйге тез бейімделуін тежейді. Осы себепті мұндай жүйелерді моделдеу үшін функционалдық әдістер мен стохастикалық анализдің арнайы математикалық аппаратын қолдану қажет.

Кіріспе. Тепе–теңдіксіз жүйелердің кинетикалық теориясында флуктуациялар шешуші рөл атқарады, себебі бөлшектердің хаостық жылулық қозғалыстары фазалық кеңістіктегі таралымның уақыт бойынша айтарлықтай өзгеруіне алып келеді. Мұндай флуктуациялық құбылыстарды сипаттау үшін Фоккер–Планк теңдеуі кеңінен қолданылады, өйткені ол ықтималдық тығыздығының эволюциясын диффузиялық және дрейфтік процестер арқылы толық бейнелейді. Фоккер–Планк формализмі Эйнштейн мен Смолуховскийдің броундық қозғалысты және флуктуациялар табиғатын статистикалық тұрғыда түсіндіруіне негізделеді, онда микроскопиялық кездейсоқ күштердің жүйенің макроскопиялық қасиеттеріне әсер ету механизмі ашып көрсетілген.

Тепе–теңсіз газ тәрізді орталарда бөлшектердің жұптық соқтығысуларын және жоғары деңгейдегі корреляцияларды ескеру кинетикалық теңдеулердің бейсызық сипат алуына себеп болады. Бір атомды газ үшін мұндай жүйелердің эволюциясы Фоккер–Планк типіндегі қайтымсыз кинетикалық теңдеулер арқылы сипатталып, флуктуациялардың рөлі мен олардың динамикаға ықпалы сандық модельдеудің негізгі объектісіне айналады.

Материалдар мен әдістер. Бұл зерттеуде тепе–теңдіксіз жүйелердің эволюциясын сандық модельдеу үшін Фоккер–Планк теңдеуінің стохастикалық интерпретациясына негізделген математикалық аппарат қолданылды. Фазалық кеңістіктегі бөлшектердің ықтималдық таралуын сипаттау үшін Ланжевен типіндегі стохастикалық дифференциалдық теңдеулер пайдаланылды, себебі олар флуктуациялық және диссипативтік әсерлерді бір мезгілде есептеуге мүмкіндік береді. Модельдеу барысында жүйедегі жұптық соқтығысуларды, диффузиялық процестерді және корреляция деңгейін ескеру үшін сандық

дискреттеу әдістері, стохастикалық интегралдау (Ито және Стратонович схемалары) және Марковтық процесс үлгілері қолданылды.

Сонымен қатар, Фоккер–Планк теңдеуін сандық шешуде Монте–Карло әдісі, оңтайландырылған итерациялық алгоритмдер және фазалық тығыздықтың уақыттық эволюциясын бағалауға арналған статистикалық талдау тәсілдері пайдаланылды. Бұл әдістер жүйеде пайда болатын жоғары флуктуацияларды дәл сипаттауға және тепе–теңсіздік процестерінің динамикасын нақты модельдеуге мүмкіндік береді.

Негізгі бөлім. Тепе-теңдіксіз жүйелердегі бөлшектердің динамикасын толық сипаттау үшін олардың нақты микроскопиялық күйіне негізделетін фазалық тығыздық ұғымы қолданылады. Бұл шаманы анықтау жүйенің барлық бөлшектерінің кеңістіктегі және импульстік кеңістіктегі орналасу ерекшеліктерін ескеруге мүмкіндік береді. Бір атомды N бөлшекті классикалық газда фазалық тығыздық (1) өрнегімен беріліп, ол әрбір бөлшектің уақыт бойынша жүріп өтетін траекториясын δ -функциялар арқылы сипаттайды. Мұндай анықтама сандық модельдеудің бастапқы теориялық құрылымын құрайды, себебі дәл осы микродеңгейдегі ақпарат кейін макроскопиялық үлестірім функциясына айналады.:

$$n(r, p, t) = \sum_{i=1}^N \delta(r - r_i(t)) \delta(p - p_i(t)) \quad (1)$$

түрінде анықталады. Флуктуациялық процестерді дұрыс сипаттау үшін жүйеге арналған сипаттамалық функционал (2) енгізіледі. Бұл функционал фазалық тығыздықтың барлық ықтимал конфигурацияларын орташалауға мүмкіндік береді және көпбөлшекті жүйелердегі статистикалық байланыстарды жинақталған түрде көрсетеді. Оның вариациялық туындысы (3) арқылы алынатын үлестірім функциясы физикалық жүйенің кинетикалық параметрлерін, яғни тығыздық, температура, импульс таралуы сияқты шамаларды сандық модельдеуде қолдануға мүмкіндік береді.

$$Z[\varphi] = \langle \exp(\int \varphi(r, p) n(r, p, t) dr dp) \rangle \quad (2)$$

оның вариациялық туындысы үлестірім функциясын береді:

$$f(r, p, t) = \frac{\delta Z}{\delta \varphi} |_{\varphi=0} \quad (3)$$

Үлестірім функциясының уақыт бойынша эволюциясы кинетикалық теорияның негізгі міндеті болып табылады. Флуктуацияларды, жұптық соқтығысуларды және диссипативтік эффекттерді есепке алған жағдайда жүйе Фоккер–Планк типіндегі теңдеумен сипатталады:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_r f + F \cdot \nabla_p f = \nabla_p \cdot (D \nabla_p f) \quad (4)$$

мұнда D – импульстік кеңістіктегі диффузия коэффициенті, F – сыртқы және ішкі күштер жиынтығы. Бұл теңдеу жүйенің флуктуациялық сипат алуы нәтижесінде қайтымсыз эволюцияның пайда болуын түсіндіреді.

Үлестірім функциясының уақыт бойынша өзгерісін анықтайтын негізгі теңдеу - Фоккер–Планк теңдеуі (4). Бұл теңдеу бөлшектер қозғалысының реттелген (дрейф) және кездейсоқ (диффузиялық) компоненттерін бірдей қамтиды. Дрейф мүшесі ортаның макроскопиялық әсерін сипаттаса, диффузиялық мүше флуктуациялар есебінен туындайтын белсенді хаостық қозғалысты көрсетеді. Фоккер–Планк теңдеуінің маңызды ерекшелігі — қайтымсыз процестерді сипаттай алуы, яғни жүйе уақыт өткен сайын тепе-теңдік күйіне жақындауға тырысады.

Фоккер–Планк теңдеуінің баламасы ретінде бөлшектің стохастикалық қозғалысын сипаттайтын Ланжевен теңдеуі қолданылады:

$$\frac{dp}{dt} = F - \gamma p + \xi(t) \quad (5)$$

мұнда γ – үйкеліс коэффициенті, ξ – нөлдік орташалы шу. Шу корреляциясы:

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2D \delta_{ij} \delta(t - t') \quad (6)$$

Стохастикалық микродинамиканың баламалық сипаттамасы Ланжевен теңдеуі (5) арқылы беріледі. Бұл теңдеу бөлшекке әсер ететін күштерді, үйкеліс әсерін және кездейсоқ тербелістерді бірдей қамтиды. Шудың корреляциялық функциясы (6) осы кездейсоқ әрекеттердің физикалық сипаттамасын анықтайды. Ланжевен формализмі сандық симуляциялар жасауға өте ыңғайлы, себебі әр бөлшектің траекториясы уақыт бойынша дискреттік қадамдар арқылы есептеледі.

Фоккер–Планк теңдеуінің диффузиялық мүшесін береді, яғни (4) және (5)–(6) сандық модельдеу тұрғысынан эквивалент.

Энтропияның уақыт эволюциясын қарастыру тепе-теңдіксіз жүйелердегі қайтымсыз процестерді түсіндіреді:

$$S(t) = - \int f \ln f \, dr \, dp \quad (7)$$

Жүйенің қайтымсыздық қасиеттерін бағалаудың маңызды әдістерінің бірі энтропияның уақыт эволюциясын қарастыру. (7) және (8) формулалары энтропияның монотонды өсуі жүйенің динамикасы дұрыс модельденгенін

көрсететінін дәлелдейді. Флуктуациялардың үлестірім функциясын тегістеу қасиеті жүйені біртіндеп реттелген күйге жақындатады.

Фоккер–Планк тендеуі үшін энтропияның өсу шарты:

$$\frac{dS}{dt} = \int \frac{D}{f} |\nabla_p f|^2 dr dp \geq 0 \quad (8)$$

яғни сандық симуляцияда энтропияның монотонды өсуі жүйенің дұрыс модельденуінің көрсеткіші болып табылады.

Сандық есептеулерде Фоккер–Планк тендеуі кеңістікті дискреттеу арқылы:

$$f_i^{n+1} = f_i^n + \Delta t [-v \cdot \nabla f + \nabla_p \cdot (D \nabla_p f)]_{i \in \{1, \dots, n\}} \quad (9)$$

түрінде итерациялық түрде шешіледі. Бұл схема Монте–Карло, Ланжевен симуляциялары және финит-айырымдық әдістермен бірге қолданылады.

Сандық модельдеулерде Фоккер–Планк тендеуі кеңістікті және импульстік аймақты дискреттеу арқылы, яғни торға бөлу арқылы сандық түрде шешіледі. (9) формуласы финит-айырымдық схемаға негізделген итерациялық тәсілді көрсетеді. Бұл алгоритм әр уақыт қадамында үлестірім функциясының жаңа мәнін анықтауға мүмкіндік береді. Монте–Карло әдістері немесе Ланжевен симуляциялары осы схемамен үйлестіріліп, тепе-теңдіксіз жүйелердің эволюциясын жоғары дәлдікпен есептеуге мүмкіндік береді.

Осылайша (1)–(9) тендеулерінің өзара байланысы тепе-теңдіксіз жүйелердің стохастикалық табиғатын, Фоккер–Планк тендеуінің кинетикалық теориядағы рөлін және сандық модельдеудің математикалық негізін толық ашады.

Қорытынды. Бұл жұмыста Фоккер–Планк тендеуіне негізделген стохастикалық тәсілдің тепе–теңдіксіз жүйелердің кинетикалық теориясында ерекше орын алатыны анықталды. Жүйедегі флуктуациялар мен диссипативтік процестердің бірлескен әсерін сипаттайтын бұл тендеу бөлшектердің хаостық қозғалысқа негізделген ықтималдық таралуын сандық түрде дәл модельдеуге мүмкіндік беретіні көрсетілді. Сандық модельдеу барысында фазалық тығыздықтан басталып, сипаттамалық функционал арқылы үлестірім функциясына өтетін функционалдық әдістің тиімділігі дәлелденді.

Ланжевендік стохастикалық динамика мен Фоккер–Планк тендеуі арасындағы эквиваленттік байланыс күрделі жүйелерді модельдеуде қолданылатын сандық алгоритмдердің физикалық негізін айқындады. Диффузиялық және дрейфтік мүшелердің үлестірім функциясының уақыт бойынша эволюциясына әсерін зерттеу тепе–теңсіздік процестердің қайтымсыздық табиғатын түсінуге мүмкіндік берді. Монте–Карло, дискреттеу және итерациялық схемалар сияқты сандық әдістердің көмегімен жоғары флуктуацияланған орталардың мінез-құлқын есептеу мүмкіндігі артты.

Жүргізілген зерттеу нәтижесінде Фоккер–Планк тендеуінің күрделі стохастикалық жүйелердің эволюциясын сипаттауда әмбебап құрал екендігі, ал функционалдық-кинетикалық модельдеу тәсілі тепе–теңдіксіз газдардың статистикалық қасиеттерін сандық бағалауда аса тиімді екендігі көрсетілді. Бұл әдістерді болашақта көпбөлшекті жүйелерді, турбуленттік флуктуацияларды және бейсызық диссипативтік құрылымдарды модельдеуде кеңінен қолдануға мүмкіндік береді.

Пайдаланылған әдебиеттер тізімі

1. Stochastic Control / edited by Chris Myers. – Rijeka : InTech, 2010. – ISBN 978-953-307-121-3. – Режим доступа: <https://books.google.kz/books?id=1AmhDwAAQBAJ>
2. Зайчик Л. И., Алинченков В. М. Статистические модели движения частиц в турбулентной жидкости. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2007. — 312 с. — ISBN 978-5-9221-0888-7.
3. Almuslimani I., Crouseilles N. Conservative stabilized Runge-Kutta methods for the Vlasov-Fokker-Planck equation. Journal of Computational Physics, 488, 112241, 2023.
4. Bouatta M.A., Vasilyev S.A., Vinitsky S.I. The asymptotic solution of a singularly perturbed Cauchy problem for Fokker-Planck equation. Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science, 29(2), 126–145, 2021.
5. Langtangen H.P. A general numerical solution method for Fokker-Planck equations with applications to structural reliability. Probabilistic Engineering Mechanics, 6(1), 33–48, 1991.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ В КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЯ ФОККЕРА–ПЛАНКА

*Әбілхан Әдемі Әбдірәсілқызы
Бейшенбек Аяулым Жансейітқызы*

Научный руководитель: Жавлиева Ардақ Түгелқызы

В представленной статье проводится теоретический анализ методов численного моделирования кинетической теории неравновесных систем на основе уравнения Фоккера–Планка. В работе рассматривается влияние флуктуаций между частицами, диссипативных эффектов и случайных сил на динамику системы. Выводится кинетическое уравнение типа Фоккера-Планка, описывающее эволюцию вероятностного распределения в фазовом

пространстве, и исследуются методы его численного решения (дискретизация, стохастические алгоритмы, ланжевеновские модели). В процессе моделирования учитываются микроскопические корреляции, диффузионные процессы и необратимые характеристики системы. Кроме того, для газообразных сред в неравновесном состоянии анализируется динамика фазовой плотности и ее временная эволюция в терминах функционального вероятностного описания, что демонстрирует прикладную значимость стохастических подходов в статистической механике. Полученные результаты могут быть использованы для прогнозирования эволюции сложных систем и численной оценки флуктуационных явлений.

Ключевые слова: уравнение Фоккера–Планка, неравновесная система, флуктуация, стохастическое моделирование, кинетическая теория, фазовая плотность, корреляция.

NUMERICAL MODELING OF NONEQUILIBRIUM SYSTEMS IN KINETIC THEORY BASED ON THE FOKKER–PLANCK EQUATION

**Abilkhan A.A.
Beishenbek A.Zh.**

Scientific supervisor: Zhavlieva A.T.

This article presents a theoretical analysis of numerical modeling methods for the kinetic theory of nonequilibrium systems based on the Fokker–Planck equation. The study examines the influence of interparticle fluctuations, dissipative effects, and random forces on system dynamics. A Fokker–Planck-type kinetic equation describing the evolution of the probability distribution in phase space is derived, and numerical solution methods (discretization, stochastic algorithms, Langevin models) are investigated. The modeling process accounts for microscopic correlations, diffusive processes, and irreversible properties of the system. In addition, the dynamics of phase-space density and its temporal evolution are analyzed for gaseous media in nonequilibrium states using a functional probabilistic framework, highlighting the applied significance of stochastic approaches in statistical mechanics. The obtained results can be used to predict the evolution of complex systems and to numerically evaluate fluctuation phenomena.

Keywords: Fokker-Planck equation, nonequilibrium system, fluctuation, stochastic modeling, kinetic theory, phase-space density, correlation.

REFERENCES

1. Stochastic Control / edited by Chris Myers. – Rijeka : InTech, 2010. – ISBN 978-953-307-121-3. – Режим доступа:
<https://books.google.kz/books?id=1AmhDwAAQBAJ>
2. Зайчик Л. И., Алинченков В. М. Статистические модели движения частиц в турбулентной жидкости. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2007. — 312 с. — ISBN 978-5-9221-0888-7.
3. Almuslimani I., Crouseilles N. Conservative stabilized Runge-Kutta methods for the Vlasov-Fokker-Planck equation. Journal of Computational Physics, 488, 112241, 2023.
4. Bouatta M.A., Vasilyev S.A., Vinitzky S.I. The asymptotic solution of a singularly perturbed Cauchy problem for Fokker-Planck equation. Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science, 29(2), 126–145, 2021.
5. Langtangen H.P. A general numerical solution method for Fokker-Planck equations with applications to structural reliability. Probabilistic Engineering Mechanics, 6(1), 33–48, 1991.