ҒТАХР 29.17.43

10.51889/2959-5894.2026.93.1.004

А.М. Татенов[1], А.Т. Жавлиева[1],
Г.Ж. Жаналиева[1], А.Ә. Қамбаш[1*], А. Файзуллина[1]

[1] Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті, Алматы қ., Қазақстан
*e-mail: kambash2107@gmail.com

КИНЕТИКАЛЫҚ ТЕОРИЯДАҒЫ ТЕПЕ–ТЕҢСІЗДІК ЖҮЙЕЛЕРДІ СТОХАСТИКАЛЫҚ ЖӘНЕ ФУНКЦИОНАЛДЫҚ МОДЕЛДЕР АРҚЫЛЫ ЗЕРТТЕУ

Аңдатпа

Ұсынылып отырған мақала корреляциялы флуктуацияланған газдағы тепе–теңсіздік процестердің кинетикалық теориясының ықтималдылық қырын теориялық тұрғыда зерттеуге арналған. Дәлірек айтқанда, жүйенің фазалық тығыздығына арналған стохастикалық сипаттағы кинетикалық теңдеу, оның үлестірімі мен сипаттамалық функционалға арналған теңдеулер, туындаушы функционалға арналған теңдеу үлестірім функциясы үшін жазылатын қайтымсыз кинетикалық теңдеуге ұқсас (эквивалент) түрде шығарылып көретілген. Бұл теңдеуді шығарып алу кезінде бір атомды газдағы бөлшектердің жұптық соқтығысулары мен жүйедегі ауқымды флуктуацияларды ескерілді. Сонымен бірге, статистикалық жүйедегі динамикалық траекториялар жиыны және бір бөлшекті күй тығыздығының орташаланбаған мәндері Гиббстің фазалық кеңістігінде қарастырылды. Жүйе күйлерінің осы кеңістіктегі үлестірімі (таралымы) арқылы стохастикалық әдіске негіз бола алатын классикалық статистикалық механиканың функционалдылы ықтималдылық келбеті (бет–бейнесі) ашылып көрсетілді. Фазалық тығыздыққа арналған стохастикалық теңдеуді марктік секірмелі процестер моделі бойынша Лиувилл теңдеуінен де шығарып алуға болатындығы дәлелденді. Аталған теңдеу Больцман теңдеуіне ұқсас болғанымен, бұл теңдеуге сызықтық емес «флуктуация көзі» рөліндегі қосымша мүше қосылған. Алынған теңдеудің статистикалық сипаттамалары анықталды. Жүйенің фазалық тығыздығына арналған стохастикалық теңдеу жүйенің диссипативтік және флуктуациялық қасиеттерін тұтастай ескере алады және Больцман–Ланжевен теңдеуінің тепе–теңсіз газдың орнықсыз күйлері үшін жалпыланған түрі болып табылады. Гидродинамикалық айнымалылар мен стохастикалық теңдеулер арқылы корреляциялық жүйенің тұйық гидродинамикалық сипаттамасы берілді. Сипаттауыш функционалдың дербес үлестірім функциялар жүйесіне арналған туындауыш функционалмен байланысы интегралдық теңдеулер арқылы беріліп, олардың бастапқы шарттарға сәйкес келетін дербес шешімдері көрсетілді.

Түйін сөздер: фазалық тығыздық, тепе–теңсіз процестер, флуктуация, стохастика, кинетикалық теңдеу, корреляция, функционалдылық, модель.

А.М. Татенов[1], А.Т. Жавлиева[1], Г.Ж. Жаналиева[1], А.А. Камбаш[1*], А. Файзуллина[1]
[1] Казахский национальный женский педагогичесий университет, г. Алматы, Казахстан

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ В КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СТОХАСТИЧЕСКИХ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ

Аннотация

Предлагаемая статья посвящена теоретическому исследованию вероятностного аспекта кинетической теории процессов неравновесных процессов в коррелированном флуктуированном газе. Точнее, кинетическое уравнение стохастической природы для фазовой плотности системы, уравнения для ее распределения и характеристического функционала, уравнение для производного функционала, эквивалентно выводится аналогично необратимому кинетическому уравнению для функции распределения. При выводе этого уравнения учитывались парные столкновения частиц в одноатомном газе и крупномасштабные флуктуации в системе. При этом в фазовом пространстве Гиббса рассматривались множество динамических траекторий в статистической системе и не усредненные значения плотности одночастичного состояния. С помощью этого пространственного распределения состояний системы раскрывает функционально вероятностное представление классической статистической механики, который служит основой для стохастического метода. Стохастическое уравнение для фазовой плотности выведено из уравнения Лиувилля по модели марковских скачкообразных процессов. Хотя это уравнение эквивалентно уравнению Больцмана, к нему добавлен дополнительный член, называемый нелинейным «источником флуктуации». Определены статистические характеристики полученного уравнения. Стохастическое уравнение для фазовой плотности системы может учитывать диссипативные и флуктуационные свойства системы в целом и является обобщенной формой уравнения Больцмана-Ланжевена для неустойчивых состояний равновесного газа. С помощью гидродинамических переменных и стохастических уравнений была дана замкнутая гидродинамическая характеристика корреляционной системы. Связь характеристического функционала с производящим функционалом для системы частных функций распределений задается интегральными уравнениями и показаны их частные решения, соответствующие начальным условиям.

Ключевые слова: фазовая плотность, неравновесные процессы, флуктуация, стохастика, кинетическое уравнение, корреляция, функциональность, модель.

A.M. Tatenov[1], A.T. Zhavliyeva, G.J. Zhanaliyeva[1], A.A. Kambash[1*], A. Faizullina[1]
[1] Kazakh National Women's Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan

STUDY OF NONEQUILIBRIUM SYSTEMS IN KINETIC THEORY USING STOCHASTIC AND FUNCTIONAL MODELS

Abstract

This paper is devoted to the theoretical investigation of the probabilistic aspect of the kinetic theory of nonequilibrium processes in a correlated fluctuating gas. More specifically, a stochastic kinetic equation for the phase density of the system, together with the corresponding equations for its distribution and characteristic functional, as well as the equation for the generating functional, is consistently derived in a form equivalent to the irreversible kinetic equation for the distribution function. In deriving this equation, pair collisions of particles in a monoatomic gas and large-scale fluctuations in the system are considered. Within the Gibbs phase space, a multitude of dynamical trajectories in the statistical system are considered, along with non-averaged values of the single-particle state density. This spatial representation of system states reveals a functional–probabilistic formulation of classical statistical mechanics that forms the basis of the stochastic approach. The stochastic equation for the phase density is derived from the Liouville equation using a model of Markov jump processes. Although this equation is equivalent to the Boltzmann equation, it includes an additional term referred to as the nonlinear “fluctuation source.” The statistical characteristics of the resulting equation are established. The stochastic equation for the phase density of the system accounts for both dissipative and fluctuation properties and represents a generalized form of the Boltzmann–Langevin equation for unstable states of an equilibrium gas. Using hydrodynamic variables and stochastic equations, a closed hydrodynamic description of the correlation system is obtained. The relationship between the characteristic functional and the generating functional for the hierarchy of partial distribution functions is formulated through integral equations, and particular solutions corresponding to the initial conditions are presented.

Keywords: phase density, nonequilibrium processes, fluctuations, stochasticity, kinetic equation, correlation, functional formulation, model.

Кіріспе

Негізгі ойлар

Стохастикалық процестерді зерттеп, зерделеу үшін тепе–теңсіз жүйелердің кинетикалық теориясы мен ықтималдылықтар теориясының әдістері, сонымен бірге стохастикалық интегралдар мен дифференциалдық теңдеулер секілді арнайы математикалық аппараттарды қолдану қажет болады. Қайтымсыз тепе–теңсіз процестер кезіндегі статистикалық шамалардың уақыт бойынша өзгерісі сыртқы ықпалдарға тәуелді емес, яғни статикалық тепе–теңділік күйлер секілді тұрақтылыққа икемделмеген. Статистикалық физика мен физикалық кинетикадағы функционалдық зерттеу моделдері өте көп бөлшектерден тұратын жүйедегі құбылыстарды сипаттаудың математикалық және концепциялық құралдары болып табылады. Ол үшін бөлшектер арасындағы күрделі әсерлесулерді қарастыратын моделді теңдеулер қолданылады. Тепе–теңсіздік процестерге ұқсас көптеген процестердің ішінен Марковтік стохастикалық процестерді атап өтуге болады. Бұл процесс жүйенің келесі күйдегі жағдайы оның қазіргі күйінің параметрлеріне тәуелді болуымен ерекшеленеді. Жүйе өзінің күйлерін кездейсоқ түрде өзгертіп отырады (марктік тізбек).

Термодинамикадағы, статистикалық физикадағы және физикалық кинетикадағы ауқымды флуктуациялар бөлшектердің жылулық қозғалыстарына негізделген, яғни әрбір бөлшектің бейберекет тербелістерінің сипаты бүкіл жүйедегі ауқымды макроскопиялық өзгерістерге себепші болады. Флуктуациялар теориясының негізін қалаушылар Альберт Эйнштейн мен Мариан Смолуховскийдің броундық қозғалыс және флуктуациялар теориясына арналған зерттеулерінде термодинамиканың екінші бастамасының статистикалық түсіндірмесі мен бастаманың қолданылу шекарасына қатысты мәтың мәліметтер келтірілген. Аталған еңбектерде флуктуация ұғымы, оны есептеу тәсілдері және олардың термодинамикалық параметрлермен байланысы туралы да баяндалған. Флуктуацияларға заттың атомдық құрылымы мен жылулық қозғалыстардың хаостылық сипатының дәлелі деп қарасақ болады және ол статистикалық физиканың негізгі принциптері болып табылады.

Жалпы жағдайда, жұптылық соқтығысулар жуықтауларында ауқымды флуктуацияларды ескеретін бір атомды газдың эволюциясының кинетикалық дәуірі бөлшектік үлестірім функциясына арналған қайтымсыз кинетикалық теңдеулермен сипатталады:

$$\frac{\partial F_s}{\partial t}=\sum_{j=1}^{s}\left[H_1\left(x_j\right);F_s\right]+\sum_{i\le j=1}^{s}I_{x_i x_j}\left[F_s\right]+n\sum_{j=1}^{s}\int dx_{s+1}I_{x_j x_{s+1}}\left[F_{s+1}\right], \tag{1}$$

мұндағы

$$I_{x_j}=\int dx_i I_{x_i x_j}=\int dx_i I_{x_j x_i} \tag{2}$$

Больцмандық соқтығысу интегралы; $x_j\equiv\left(\vec{r}_j,\vec{p}_j\right)$; H_1–бір бөлшектік гамильтониан; *N* және *V*–бөлшектер саны мен жүйенің көлемі; $[..;..]$ – Пуассон жақшасы. (1)–теңдеуде кинетикалық теориядағы маңызы бар уақыт аралығында орташа еркін өту жолының ұзындығынан өте аз болатын радиустағы флуктуациялар өшіп отыратындығы ескерілген [2]. Бұл жағдай больцманның молекулалық хаос болжамын алмастыра алатын корреляцияның бөліктік әлсіреуі шарты болып табылады. Осы тұрғыдан алғанда молекулалық хаос шарты тек орнықты тепе–теңсіз күйлер үшін ғана орындалады. Жүйе күйінің бір бөлшектік тығыздығының ($N_i\left(x\right)$) өзгерісі кездейсоқтық сипатта өтетін болғандықтан, флуктуацияларды кеңістіктік–уақытты масштабтарда ескеруге мәжбүр боламыз, яғни $N_t\left(x\right)$–ге арналған Больцманның газдыкинетикалық теңдеуінің орнына (1)-теңдеулер жүйесіне эквивалент болатын бір бөлшекті стахостикалық кинетикалық теңдеу қолданылатын болады. Ал, орнықты тепе–теңсіздік күйлердегі мардымсыз флуктуациялар үшін мұндай теңдеу ретінде $\delta N_t=N_t-\overline{N_t}$ түрдегі гаусстық флуктуацияларға арналған ланжевендік теңдеуді қолданамыз.

Ұсынылып отырған мақала корреляциялы флуктуациялық газдағы тепе–теңсіздік процестердің кинетикалық теориясының ықтималдылық қырына (апекттеріне) арналған. Дәлірек айтқанда, жүйенің $N_t\left(x\right)$ фазалық тығыздығына арналған стохастикалық сипаттағы кинетикалық теңдеуді, оның үлестірімі мен сипаттамалық функционалына арналған теңдеулерді және туындаушы функционалға арналған теңдеулерді (1)-теңдеуге ұқсас (эквивалент) түрде шығарып алу мақсатындағы есептеулер орындалатын болады. Бұл ретте статистикалық жүйедегі фазалық траекториялар жиыны бір бөлшекті күй тығыздығының орташаланбаған мәндерінің J кеңістігінде қарастырылатын болады. Жүйе күйлерінің осы кеңістіктегі үлестірімі (таралымы) арқылы стохастикалық әдістің негізін құрайтын классикалық статистикалық механиканың функционалдылы ықтималдылық келбеті (бет-бейнесі) ашылатын болады. $N_t(x)$-ге арналған стохастикалық теңдеуді марктік секірмелі процестер моделі бойынша Лиувилл теңдеуінен шығарып алу жағдайлары қарастырылған. Бұл теңдеу Больцман теңдеуіне ұқсас болғанымен, бұл теңдеуге сызықтық емес «флуктуация көзі» болып табылатын қосымша мүше қосылады. Алынған теңдеудің статистикалық сипаттамалары анықталды. Сонымен бірге, жүйенің фазалық тығыздығына арналған стохастикалық теңдеу жүйенің диссипативтік және флуктуациялық қасиеттерін тұтас түрде ескеруге мүміндік береді және Больцман–Ланжевен теңдеуінің тепе–теңсіз газдың орнықсыз күйлері үшін жалпыланған түрі болып табылады.

Зерттеу әдіснамасы

Бөлшектері жұптасып соқтығысатын корреляциялы флуктуациялық газдағы тепе–теңсіздік процестердің кинетикалық теориясы стохастикалық әдіске негізделген. Бұл зерттеу әдісі тепе–теңсіздік жүйелердің флуктуациялық және диссипативтік қасиеттерін бірмезгілде тұстастай қарастыра (ескерек) алатын кеңістіктік–уақытты масштабтағы (ауқымдағы) марктік процестерге ұқсас. Сонымен бірге, осы әдіске сүйенетін функционалдық–кинетикалық моделде де тепе–теңсіздік жүйенің аса жоғары флуктуацияланған және күшті корреляцияланған күйлері сызықтық емес стохастикалық теңдеулер арқылы сипатталады [1]. Функционалдық моделде жүйенің жағдайын молекулалық–кинетикалық құрылым тұрғысында қарастыратын математикалық теңдеулер жүйесі кинетикалық–стохастикалық процестерді болжауға және талдауға мүмкіндік береді. Әрине, мұндай теңдеулердің табиғаты кездейсоқтық немес анықталмағандық секілді түсініктерге сәйкес келгенімен, оның грек тіліндегі баламасы мақсат, болжау дегенді білдіреді. Біздің зерттеу жағдайымызға «болжау» нұсқасы сәйкес келетін сияқты. Себебі, жүйедегі стохастикалық сипаттағы процестер шектеулі заңдылықтар шеңберінде қалып қоймайды, яғни жүйенің күйлері болжамды немесе кездейсоқ шамалар арқылы сипатталатын болады.

Зерттеу өзектілігі

Статистикалық жүйелердегі тепе–теңсіздік процестерді зерттеудің өзектілігі ең алдымен Жаратылыстың эволюциясын түбегейлі түсінумен тікелей байланысты. Жүргізіліп жатқан тәжірибелік және теориялық зерттеулер жүйенің реттілік күйден хаосқа және кері бағытта өту тетіктерін, қарапайым элементтерден күрделі құрылымдардың пайда болу себептерін және осы процестердің термаодинамикамен және физиканың басқа да заңдылықтармен байланысын түсіндіруге мүмкіндік береді. Тепе–теңсіздік процестер әсіресе плазма физикасында, гидродинамикада, астрофизикада, биология мен химияда шешуші рөл атқара отырып күрделі жүйелерді басқару, жаңа материалдар жасау, технологиялық үрдісті оңтайландыру секілді қолданбалы мәселелерді де шешуге қауқарлы. Сонымен бірге, моделдеу және талдау тәсілдері арқылы жүйелердегі реттіліктің шегін анықтап бере алады.

Материалдар мен әдістер

Математикадағы ықтималдылықтар теориясы және математикалық статистика секілді бөлімдерде кездейсоқ шамалар мен процестердің заңдылықтары қарастырылып, олардың басқа салаларда әдістемелік аппарат ретінде қолданылу ерекшеліктері көрсетіледі. Мысалы, оңтайландыру әдістері арқылы кездейсоқ процестер мен мәліметтер статистикалық тұрғыдан өңделеді, ал жаратылыстану ғылымында газдың қысымын модельдеуге арналған Винерлік процестер кезінде молекулалар шоғырының қозғалысын есептеп шығаруға және оның сипатын алдын–ала болжауға көмектеседі. Осы секілді математикалы–статистикалық модельдер мен әдістер қазіргі заманға ғылыми зерттеулердің негізін құрайды, мысалы: корреляциялық және регрессиялық модельдер, негізгі компоненттер тәсілі, кластерлік талдау, статистикалық сынақтар (Монте–Карло) әдісі. Стохастикалық теорияны физиканың барлық бөлімдеріне қолданса болады, әсіресе оның статистикалық физика, конденсрлік күй физикасы, қатты денелер физикасы, элементар бөлшектер физикасы мен стохастық резонанс атты құбылыс үшін маңызы ерекше.

Тепе–теңсіздік процестердің кинетикалық теориясында Больцман теңдеуі мен оның жуықтаулары (мысалы, Чепмен–Энской теңдеуі) секілді әдістер де қолданылады. Олар жүйедегі бөлшектердің қозғалыстары мен соқтығысу сипаттарына қатысты барлық теориялық мәліметтерге талдаулар жасап бере алады. Ал материалдарға физикалық нысандар емес, керісінше концепциялық математикалық құралдар жатады, мысалы: кинетикалық теңдеулер, үлестірім функциялары және статистикалық моменттер (тығыздық, жылдамдық және температура).

Негізгі бөлім. Статистикалық жүйенің микроскопиялық тығыздығы мен оның үлестірімі. Орталық әсерлесу потенциалы $U_{r_i r_j} = U\left(\left|r_i - r_j\right|\right)$ болатын N бөлшекті бір атомды классикалық газды қарастырайық. Жүйенің динамикалық жағдайын анықтау үшін ең алдымен бізге микроскопиялық фазалық тығыздықтың кез–келген уақыт мезетіндегі мәні белгілі болуы қажет [3]:

$$N_t\left(x\right) = N\left(x;\Gamma_i\right) = \sum_{i=1}^{N} \delta\left(x - x_i\left(t\right)\right) \tag{3}$$

$$\Gamma = \left(x_1,...,x_N\right), \quad x_i = \left(\vec{r}_i, \vec{p}_i\right)$$

мұндағы $\Gamma_i -$Гиббстің фазалық кеңістігіндегі динамикалық траектория. Айталық, $\Omega-$ үзіліссіз шектелген $\varphi = \varphi\left(x\right)$, $x = \left(\vec{r}, \vec{p}\right)$ функциялар кеңістігі болсын. Жүйенің Ω кеңістіктегі динамикалық траекториясын (N_t) төмендегі теңдеудің $N_0\left(x\right) = N\left(x;\Gamma_0\right)$ шартына сәйкес шешу арқылы табуға болады:

$$\frac{\partial N_t\left(x\right)}{\partial t} = \left[H_1\left(x\right);N_t\left(x\right)\right] + \int d\tilde{x}\left[U_{r\tilde{r}};N_t\left(x\right)N_t\left(\tilde{x}\right)\right] \equiv Q\left[N_t\right] \tag{4}$$

Жүйенің бастапқы уақыт мезетіндегі кездейсоқ $\Gamma_0\left(\omega\right)$ күйінің $P_N\left(\Gamma\right)$ таралым (үлестірім) тығыздығы Ω кеңістіктегі $N_0\left(x;\omega\right) = N\left(x;\Gamma_0\left(\omega\right)\right)$ шамасы мен оның

$$\rho_0\left[B\right] = \left\langle \Delta_{N_0(\omega)}\left[B\right]\right\rangle = \int d\Gamma P_N\left(\Gamma\right)\Delta_{N(\Gamma)}\left[B\right] \tag{5}$$

таралымын анықтап бере алады. Бұл өрнектегі $B-\Omega$ кеңістіктегі σ алгебралар жиыны; $\Delta_f\left[B\right]-f$ нүктеде шоғырланған (жинақталған) өлшем. Егер $\rho_t\left[B\right]-t$ уақыт мезетінде жүйе фазалық тығыздығы $f\left(x\right)\in B$ күйде болу ықтималдылығы болса [4], онда Лиувилл теңдеуінің орнын баса алатын теңдеу ретінде осы $\rho_t\left[B\right]$–ға арналған теңдеуді қолдануымызға әбден болады:

$$\rho_t\left[B\right] = \int \rho_0\left[df_0\right]P\left[t,B,0,f_0\right], \quad P\left[t,B,0,f_0\right] = \Delta_{N_t[f_0]}\left[B\right] \tag{6}$$

Бұл жерде $P\left[t,B,0,f_0\right]-$ t уақыт мезетіндегі фазалық тығыздықтың $N_0\left(x\right) = f_0\left(x\right)$ шарты бойынша таралымы, ал $N_t\left[x,f_0\right]-$ (4)–теңдеудің $N_0\left[x,f_0\right] = f_0\left(x\right)$ шартына сәйкес келетін шешімі. $\rho_t[B]$–ға арналған теңдеуді тікелей (4) және (6)–теңдеулерден оңай шығарып алуға болады:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_t[df] = -\int dx \frac{\delta}{\delta f(x)} Q_x[f]\rho[df] \equiv -L_f\rho_t[df] \tag{7}$$

Мұнда $df \in B$, $\frac{\delta}{\delta f(x)} - \Omega$ кеңістіктегі $G[f] = G[f,\varphi]$ түрдегі функционалдар үшін анықталған вариациялық туындылар [5]. Осы жерде төмендегі түрдегі сипаттауыш функционалды енгізген орынды болмақ:

$$\Phi_t[\varphi] = \int \rho_t[df]\exp[i(f,\varphi)], \ (f,\varphi) = \int dx f(x)\varphi(x) \tag{8}$$

Бұның дербес үлестірім функциялардың $\{F(t)_s\}$ түрдегі жүйесіне арналған туындауыш функционалмен байланысы төмендегідей теңдікпен беріледі:

$$F_s(t, x_1, ..., x_s) = V^s \int dx_{s+1...} dx_N P_N(t, \Gamma)$$

$n = \frac{N}{V}$ қатынасын, $1 + \frac{u(x)}{n} = \exp[i\varphi(x)]$ түрлендіруін және

$$L_t[u] = \Phi_i\left[\frac{1}{i}\ln\left(1 + \frac{u}{n}\right)\right] \tag{9}$$

белгілеуін пайдалана отырып, (5) пен (8)–ден мынаны аламыз:

$$F_s(t, x_1, ..., x_s) = \frac{N^{s-1}}{(N-1)...(N-s+1)} \frac{\delta^* L_t[u]}{\delta u(x_1)...\delta u(x_s)}$$

Егер, төмендегі

$$\frac{\delta}{i\delta\varphi(x)}\Phi_i = n\left[1 + \frac{u(x)}{n}\right]\frac{\delta}{\delta u(x)} L_i$$

өрнегін пайдаланар болсақ, онда L_t –ге арналған теңдеуді шығарып алуға болады:

$$\frac{\partial}{\partial t} L_t = \int dx u_x \left[H_1, \frac{\delta L_t}{\delta u_x}\right] + \frac{1}{2}\int dx d\tilde{x} \left(u_x u_{\tilde{x}} + n u_x + n u_{\tilde{x}}\right)\left[\Phi_{\tilde{r}\tilde{r}}, \frac{\delta^2 L_t}{\delta u_x \delta u_{\tilde{x}}}\right]$$

(8) және (9) формулалары $L_t[u]$ – туындаушы функционалды ықтималды $\rho_t[df]$ өлшеммен байланыстырады. (7)–теңдеу уақыт түрлендірулеріне қарағанда инварианттылықты сақтап қалады және ол жүйе қозғалысын $N_t(x)$ траекториялар жиынында қарастыратын болғандықтан бастапқы $\rho_0[df]$ шарттар бойынша анықталатын энтропия уақыт бойынша тұрақты шамаға айналады [6,7]. Осыған байланысты, фазалық траекториялардың стохастикалық сипат алуына байланысты энтропиясы өсетін қайтымсыз процестердің уақыт бойынша эволюциясын қарастыру өте маңызды сипат ала бастайды. Қайтымсыздық–жүйенің

ішкі қасиеті емес, керісінше макроскопиялық өлшемдер мен жүйенің ерекшелігіне байланысты болатын ұғым.

Стохастикалық модель. Әлсіз біртексіз сиретілген газды ұяшықтық құрылымда қарастыру ыңғайлы. Бір координаталық ұяшықтағы жұптық әсерлесулерге түсетін бөлшектерді p_1, p_2 күйлерден $\tilde{p}_1, \tilde{p}_2$ күйлерге өтуін бірлік уақыттағы $W = W\left(p_1, p_2 \mid \tilde{p}_1, \tilde{p}_2\right)$ өту ықтималдылығымен сипаттауға болады, ал ірі құрылымдық фазалық тығыздықты $N_t\left(x, \omega\right)$ түрдегі кездейсоқ марктік процесс деп қарастыру мүмкіндігі бар. Осы жағдайларға сәйкес, ірі құрылымдық фазалық тығыздықтың үлестіріміне арналған теңдеу мына түрде жазылады:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_t\left[df\right] = \int \rho_t\left[df_1\right] R\left[f_1, df\right]$$

$$R\left[f_1, df\right] = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{P\left[t + \Delta t, df; t, f_1\right] - \Delta_{f_1}\left[df\right]}{\Delta t}$$

Қазіргі біздің міндетіміз– $P\left[t + \Delta t, df; t, f_1\right]$ өту ықтималдылығын Δt мүшелерге дейінгі дәлдікпен есептеу. Бірбөлшекті күй тығыздығының уақыт бойынша өзгерісі екі түрлі процесс бойынша анықталады: 1) координаталық кеңістіктің әртүрлі ұяшықтарындағы бөлшектердің жүйелі түрдегі қозғалыстыры; 2) кез–келген ұяшыққа келіп түсетін бөлшек күйлерінің импульсті стохастикалық өзгерістері. Бұл жағдайлар жүйе эволюциясының марктік сипатта болуы мүмкін деген болжаммен байланысты екендігі даусыз [8,9]. Осыған сәйкес, өту ықтималдылығын төмендегі бейнеде алатын боламыз:

$$P\left[t + \Delta t, df; t, f_1\right] = \left(1 - \Delta t \nu\left[f_1^{\Delta t}\right]\right)\Delta_{f_1}^{\Delta t}\left[df\right] + \Delta t K\left[f_1^{\Delta t} \mid df\right] + O\left(\Delta t\right)$$

Бұл теңдеудегі бірінші мүше Δt уақыты аралығында барлық бөлшектер әртүрлі координаталық ұяшықтарда болады деген шарттағы өту ықтималдылығына сәйкес келеді. Ал, екінші мүше Δt уақыты аралығында екі бөлшек бір ұяшықта болу ықтималдылығын анықтап береді. $\nu\left[f_1\right]$– фазалық тығыздығы $f_1\left(x\right)$ жүйедегі соқтығысу жиілігі; $K\left[f_1 \mid df\right]$– кез–келген екі бөлшектің соқтығысу салдарынан бірлік уақыт ішінде жүйенің фазалық тығыздығы $f_1\left(x\right)$ күйден фазалық тығыздығы $f \in df$ болатын күйге өту ықтималдылығы; $f_1^t\left(x\right)$– төмендегі Власов теңдеуінің $f_1^0\left(x\right) = f_1\left(x\right)$ шарттардағы шешімі:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_1^t\left(x\right) = \tilde{Q}_x\left[f_1^t\right]$$

Бастапқы уақыт мезетінде фазалық тығыздығы $f_1\left(x\right)$ болатын күйдегі жүйе кездейсоқ $\tau\left[f_1; \omega\right]$ уақыты ішінде $f_1^t\left(x\right)$ еркін траекториямен қозалады. Фазалық тығыздығы $f_1\left(x\right)$ күйдегі бөлшектердің соқтығысу жиіліктерін мынадай өрнекпен анықтаймыз:

$$\nu\left[f_1\right] = \frac{1}{2}\int dx_1 dx_2 d\tilde{x}_1 d\tilde{x}_2 W\left(x_1, x_2 \mid \tilde{x}_1, \tilde{x}_2\right) f_1\left(x_1\right) f_1\left(x_2\right)$$

мұндағы

$$W\left(x_1, x_2 \mid \tilde{x}_1, \tilde{x}_2\right) = \delta\left(\vec{r}_1 - \vec{r}_2\right)\delta\left(\vec{r}_1 - \vec{\tilde{r}}_1\right)\delta\left(\vec{r}_2 - \vec{\tilde{r}}_2\right) W\left(\vec{p}_1, \vec{p}_2 \mid \vec{\tilde{p}}_1, \vec{\tilde{p}}_2\right) \qquad (10)$$

Бөлшектер өзара соқтығыса отырып x_1, x_2 күйден $\tilde{x}_1, \tilde{x}_2$ күйге өткен кезде жүйенің $f_1(x)$ фазалық тығыздығы мынадай шамаға өзгереді:

$$\delta_{x_1 x_2 \tilde{x}_1 \tilde{x}_2}(x) = -\delta(x - x_1) - \delta(x - x_2) + \delta(x - \tilde{x}_1) + \delta(x - \tilde{x}_2)$$

Соқтығысулардан кейінгі фазалық тығыздықтың үлестірімі $\Delta_{f_1 + \delta x_1 x_2 \tilde{x}_1 \tilde{x}_2}[df]$ арқылы есептелетін болады. (10)–ды ескеріп $K[f_1 \mid df]$ үшін төмендегідей теңдеуді аламыз:

$$K[f_1 \mid df] = \frac{1}{2}\int dx_1 dx_2 d\tilde{x}_1 d\tilde{x}_2 W f_1(x_1) f_1(x_2) \Delta_{f_1 + \delta x_1 x_2 \tilde{x}_1 \tilde{x}_2}[df]$$

Бұл шамадан алынған интеграл жүйедегі соқтығысулардың жиілігене тең: $\int K[f_1 \mid df] = \nu[f_1]$.

Бір бөлшектік тығыздыққа арналған стохастикалық кинетикалық теңдеу. Тепе–теңсіз жүйенің қозалыстары төмендегі стохастикалық кинетикалық теңдеудің шешімдері арқылы анықталатындығын қарастыратын боламыз:

$$\frac{\partial}{\partial t} N_t(x) - Q_x[N_t] = J_x[N_t] + S_t[N_t; x; \omega] \tag{11}$$

мұндағы $S_t[f; x; \omega]$–нөлдік орташа мәнді пуассондық процесс:

$$\left\langle S_{t_1}[f; x_1] \ldots S_{t_k}[f; x_1] \right\rangle = \frac{1}{k} D_k[f; x_1, \ldots, x_k] \prod_{j=2}^{k} \delta(t_j - t_{j-1}) \tag{12}$$

$S_t[f; x; \omega]$ түрдегі кездейсоқ процестің $\psi_t[\upsilon; f]$ сипаттамалық функционалы мына түрде анықталады:

$$\psi_t[\upsilon; f] = \left\langle \exp\left\{ i \int_0^t d\tilde{t} \int d\tilde{x} \upsilon_{\tilde{t}}(\tilde{x}) S_{\tilde{t}}[f; \tilde{x}; \omega] \right\} \right\rangle = \exp \theta_t[\upsilon; f] \tag{13}$$

$$\theta_t[\upsilon; f] = \int_0^t d\tilde{t} \int K[f \mid df_1] \left(\exp\left\{ i(f_1 - f, \upsilon_{\tilde{t}}) \right\} - 1 - i(f_1 - f, \upsilon_{\tilde{t}}) \right)$$

$N_t(x; \omega)$ процестің марктік қасиеттері S_t кездейсоқ мүшенің (12)–түрдегі уақыт бойынша корреляциалық қасиеттерінен келіп шығады. Сондақтан да, (11)–теңдеудің шешімдерінің үлестіріміне арналған теңдеуді төмендегіше жазуымызға болады:

$$\rho_t[df] = \left\langle \Delta_{N_t(\omega)}[df] \right\rangle \equiv \left\langle \sigma_t[df; \omega] \right\rangle$$

Орташаланбаған үлестірімге арналған кездейсоқ операторы бар теңдеу

$$\frac{\partial}{\partial t} \sigma_t[df; \omega] \equiv \left(l[f] + \tilde{l}[f; \omega] \right) \sigma_t[df; \omega] \tag{14}$$

Мұндағы

$$l[f]=-\int dx\frac{\delta}{\delta f(x)}\left[Q_x[f]+J_x[ff]\right]$$

$$\tilde{l}_t[f;\omega]=-\int dx\frac{\delta}{\delta f(x)}S_t[f;x;\omega]$$

(14)–ші теңдеудің кездейсоқ бастапқы шарттарға сәйкес келетін және S_t–ға тәуелсіз орташаланған шешімі төмендегідей:

$$\rho_t[df]=U_t[df]\exp\left\{\left\langle\exp\left\{\int_0^t d\tilde{t}\,\Lambda_{\tilde{t}}[f;\omega]\right\}-1\right\rangle\right\}\rho_0[df] \tag{15}$$

Бұл өрнекте

$$U_t[f]=\exp\{tl[f]\},\quad \Lambda_t[f;\omega]=U_t^{-1}[f]\tilde{l}[f;\omega]U_t[f]$$

(15)–тің екі жағынан уақыт бойынша туынды алып, $\rho_t[df]$–ке арналған тұйықталған теңдеу аламыз:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\tilde{L}_t\right)\rho_t[df]=\left(I_t[f]+L_t[f]\right)\rho_t[df] \tag{16}$$

$$L_t[f]=\rho_t[df]=U_t[f]\left[\frac{\partial}{\partial t}\left\langle\exp\left\{\int_0^t d\tilde{t}\,\Lambda_{\tilde{t}}[f;\omega]\right\}\right\rangle\right]U_t^{-1}[f]$$

(11)–теңдеуде флуктуация көзі жоқ деп санасақ, яғни $S_t=0$, онда ол теңдеу Больцманның газдыкинетикалық теңдеуіне сәйкес келеді. Флуктуация көзінің кез–келген уақыт мезетіндегі ағыны дәл сол уақыттағы фазалық тығыздықтың мәніне тәуелді болады [10].

Кездейсоқ таралымдардың функционалдық моделі. Сиретілген, әлсіз әсерлесулер жүйесіндегі марктік $N_t(x)$ диффузиялық процестердің функционалдық моделінде бөлшектердің жылдамдықтары өте аз ε шамаға өзгереді, яғни $\vartheta_{1,2}=\tilde{\vartheta}_{1,2}-\varepsilon\Delta\vartheta_{1,2}$. Осыған сәйкес, Ω кеңістіктегі $G[f]=G[f,\varphi]$ түрдегі функционалдарды4 (16)–ғы

$$I_f\approx-\int dx\frac{\delta}{\delta f(x)}A_x[f]+\frac{1}{2}\int dxd\tilde{x}\frac{\delta^2}{\delta f(x)\delta f(\tilde{x})}B_{x\tilde{x}}[f] \tag{17}$$

Операторлар арқылы өрнектелуіндегі $D_k[f;x_1,...,x_k;\varepsilon]$

$$D_k[f;x_1,...,x_k;\varepsilon]=\sum_{j=k}^{\infty}\varepsilon^j D_k^l[f;x_1,...,x_k]$$

коэффициенттердің $\tilde{\vartheta}_{1,2}=\vartheta_{1,2}$ нүкте маңында Тейлор қатарына жіктеуі қолданылады. Бұлар (17)–гі A және B мүшелеріне де әсер етеді, яғни $A_x[f]=D_1^{(1)}[f;x]+D_1^{(2)}[f;x]$, $D_2^{(2)}[f;x,\tilde{x}]=B_{x\tilde{x}}[f]$. Жіктеу тек екінші ретті мүшелермен шектеледі:

$$D_1^{(1)}\left[f;x_1\right]=-\frac{\partial}{\partial\vartheta_1}\nu_1\left[f;x_1\right]f\left(x_1\right)$$

$$D_1^{(2)}\left[f;x_1\right]=\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\vartheta_1^2}\nu_2\left[f;x_1\right]f\left(x_1\right)$$

$$D_2^{(2)}\left[f;x_1,x_2\right]=\delta\left(\vec{r}_1-\vec{r}_2\right)\frac{\partial^2}{\partial\vartheta_1\partial\vartheta_2}[\nu_2\left[f;x_1\right]]\delta\left(\vartheta_1-\vartheta_2\right)-\phi\left(\vartheta_1\,|\,\vartheta_2\right)f\left(x_1\right)f\left(x_2\right)$$

Мұндағы

$$\nu_1\left[f;x_1\right]=\frac{\partial}{\partial\vartheta_1}\nu_2\left[f;x_1\right],\ \nu_2\left[f;x_1\right]=\int d\vartheta_2\phi\left(\vartheta_1\,|\,\vartheta_2\right)f\left(\vec{r}_1,\vartheta_2\right),\ \phi=\int d\omega\left|\vartheta_1-\vartheta_2\right|\Delta\vartheta_2\Delta\vartheta_2$$

Қарастырылып отырған моделде жүйедегі поляризациялық эффекттер бөлшектердің ұжымдық әсерлесулері үшін L_t операторында ескеріледі. Бұл жағдайда тұйықталған кинетикалық теңдеулер тізбегі поляризациялық жуықтауда шектеліп қалады. Марктік тектес процестердің стахостикалық сипаты тепе–теңсіздік жүйелердегі жұптық әсерлесулер жуықтауында фазалық тығыздықтың үлестіріміне арналған кинетикалық теңдеулер арқылы қарастырылатындығына көз жеткіздік.

Қорытынды

Марктік тектес процестердің стахостикалық сипаты тепе–теңсіздік жүйелердегі жұптық әсерлесулер жуықтауында фазалық тығыздықтың үлестіріміне арналған кинетикалық теңдеулер арқылы қарастырылатындығына көз жеткіздік. Ең бастысы, соқтығысу интегралдарының операторлық көріністе қолданылуы мақала тақырыбында келтірілген функционалдық моделінде өзін жақсы қырынан таныта білді. Сиретілген газдарды координаталық ұяшықтар түрінде моделдеу стохастикалық процестің табиғатын ашуға математикалық тұрғыда жеңілдеді. Әсерлесулерге жасайтын бөлшектердің бір күйден басқа бір күйге ауысуының ықтималдылық сипатты ірі құрылымдық фазалық тығыздықты $N_t\left(x,\omega\right)$ түрдегі кездейсоқ марктік процеспен байланыстыру арқылы іске асатындығына көз жеткізілді. Үлестірімдік функциялардың тепе–теңсіздік жүйеге арналған туындауыш функционалмен байланысы да стохастикалық моделдің кинетикалық қасиеттерді терең айқындауда маңызды рөл атқаратыны көрсетілді. Бұл ретте статистикалық жүйедегі фазалық траекториялар жиыны бір бөлшекті күй тығыздығының орташаланбаған мәндерінің кеңістігінде қарастырылды және жүйе күйлерінің осы кеңістіктегі үлестірімі (таралымы) арқылы стохастикалық әдістің негізін құрайтын классикалық статистикалық механиканың функционалдылы ықтималдылық бет–бейнесі айқындалды.Фазалық тығыздыққа арналған стохастикалық теңдеу марктік секірмелі процестер моделіне сәйкес Лиувилл теңдеуінен шығарып алу жолдары көрсетілді.

Пайдаланылған дереккөздер тізімі

[1] Мартынов Г. А. Фазовые переходы и флуктуации в классической статистической механике // Теплофизика высоких температур. 2017. №4. С. 627-630. https://doi.org/10.7868/S0040364417040123

[2] Narkevich, I. I., and E. V. Farafontova. 2019. "Two-Level Statistical Description of Structure of Homogeneous Macroscopic System and Spherical Crystalline Nanoparticles." Nanoscience and Technology: An International Journal 10 (4): 365–376. https://doi.org/10.1615/NanoSciTechnolIntJ.2020032017

[3] Бирюков А. А. Модель стохастического процесса в пространстве случайных совместных событий // Вестник СГТУ. 2021. № 4. С. 787–796. https://doi.org/10.14498/vsgtu 1865

[4] Karachanskaya, E. V. 2020. "Programmed Control with Probability 1 for Stochastic Dynamical Systems." Journal of Mathematical Sciences 248 (1): 67–79. https://doi.org/10.1007/s10958-020-04856-4

[5] Bevia, V. J., S. Blanes, J. C. Cortés, N. Kopylov, and R. J. Villanueva. 2025. "A GPU-Accelerated Lagrangian Method for Solving the Liouville Equation in Random Differential Equation Systems." Applied Numerical Mathematics 208 (B): 231–255. https://doi.org/10.1016/j.apnum.2024.09.021

[6] Tavangar, Tooran, and Nick A. Eaves. 2025. "Evidence of Plasma-Driven Nonequilibrium Chemistry in Graphene Formation from Gas-Phase Kinetic Modeling." Carbon Trends. Published November 17, 2025. https://doi.org/10.1016/j.cartre.2025.100592

[7] Wang, Yamei, Haonan Jin, Jiefeng Cao, Rui Yu, Junqin Li, Wei Tong, Junmin Xu, Fangyuan Zhu, Yong Wang, Lei Zhang, and Renzhong Tai. 2025. "Nonequilibrium Spin Dynamics in the Chiral Soliton Lattice Host $YbNi_3Al_9$*." Results in Physics 75: 108336. https://doi.org/10.1016/j.rinp.2025.108336*

[8] Tang, Junsong, William Chow, and Bernard Shizgal. 2025. "Nonequilibrium Effects for Reactions with Activation Energy: Convergence of the Expansions of Solutions of the Boltzmann and Lorentz Fokker–Planck Equations with Sonine and Maxwell Polynomials as Basis Functions." Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications 668: 130522. https://doi.org/10.1016/j.physa.2025.130522

[9] Biščević, Helena, and Raffaele D'Ambrosio. 2025. "Time Integration of Dissipative Stochastic PDEs." Applied Numerical Mathematics. Published November 17, 2025. https://doi.org/10.1016/j.apnum.2025.11.005

[10] Charles, Mfano, Sayoki G. Mfinanga, G. A. Lyakurwa, Delfim F. M. Torres, and Verdiana G. Masanja. 2025. "Evaluating the Effectiveness of Stochastic CTMC and Deterministic Models in Correlating Rabies Persistence in Human and Dog Populations." Franklin Open 13: 100397. https://doi.org/10.1016/j.fraope.2025.100397

References

[1] Martynov G. A. (2017) Fazovye perehody i fluktuacii v klassicheskoj statisticheskoj mehanike [Phase Transitions and Fluctuations in Classical Statistical Mechanics]. Teplofizika vysokih temperatur. №4, 627-630. (In Russian) https://doi.org/10.7868/S0040364417040123

[2] Narkevich, I. I., and E. V. Farafontova. 2019. "Two-Level Statistical Description of Structure of Homogeneous Macroscopic System and Spherical Crystalline Nanoparticles." Nanoscience and Technology: An International Journal 10 (4): 365–376. https://doi.org/10.1615/NanoSciTechnolIntJ.2020032017

[3] Birjukov A. A. (2021) Model' stohasticheskogo processa v prostranstve sluchajnyh sovmestnyh sobytij [A stochastic process model in the space of random joint events]. Vestnik SGTU. № 4, 787–796. (In Russian) https://doi.org/10.14498/vsgtu 1865

[4] Karachanskaya, E. V. 2020. "Programmed Control with Probability 1 for Stochastic Dynamical Systems." Journal of Mathematical Sciences 248 (1): 67–79. https://doi.org/10.1007/s10958-020-04856-4

[5] Bevia, V. J., S. Blanes, J. C. Cortés, N. Kopylov, and R. J. Villanueva. 2025. "A GPU-Accelerated Lagrangian Method for Solving the Liouville Equation in Random Differential Equation Systems." Applied Numerical Mathematics 208 (B): 231–255. https://doi.org/10.1016/j.apnum.2024.09.021

[6] Tavangar, Tooran, and Nick A. Eaves. 2025. "Evidence of Plasma-Driven Nonequilibrium Chemistry in Graphene Formation from Gas-Phase Kinetic Modeling." Carbon Trends. Published November 17, 2025. https://doi.org/10.1016/j.cartre.2025.100592

[7] Wang, Yamei, Haonan Jin, Jiefeng Cao, Rui Yu, Junqin Li, Wei Tong, Junmin Xu, Fangyuan Zhu, Yong Wang, Lei Zhang, and Renzhong Tai. 2025. "Nonequilibrium Spin Dynamics in the Chiral Soliton Lattice Host $YbNi_3Al_9$*." Results in Physics 75: 108336. https://doi.org/10.1016/j.rinp.2025.108336*

[8] Tang, Junsong, William Chow, and Bernard Shizgal. 2025. "Nonequilibrium Effects for Reactions with Activation Energy: Convergence of the Expansions of Solutions of the Boltzmann and Lorentz Fokker–Planck Equations with Sonine and Maxwell Polynomials as Basis Functions." Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications 668: 130522. https://doi.org/10.1016/j.physa.2025.130522

[9] Biščević, Helena, and Raffaele D'Ambrosio. 2025. "Time Integration of Dissipative Stochastic PDEs." Applied Numerical Mathematics. Published November 17, 2025. https://doi.org/10.1016/j.apnum.2025.11.005

[10] Charles, Mfano, Sayoki G. Mfinanga, G. A. Lyakurwa, Delfim F. M. Torres, and Verdiana G. Masanja. 2025. "Evaluating the Effectiveness of Stochastic CTMC and Deterministic Models in Correlating Rabies Persistence in Human and Dog Populations." Franklin Open 13: 100397. https://doi.org/10.1016/j.fraope.2025.100397