حل عددی معادلات دیفرانسیل تصادفی

علی نجفی
najafi@znu.ac.ir

۲۷ آبان ۱۳۹۳

می‌خواهیم معادله‌ی دیفرانسیل تصادفی زیر را حل کنیم:

$$\boxed{\begin{aligned} &\frac{d}{du}S(u) = f(S(u)) + \eta(u), \qquad S(u=0) = S_0, &&(۱\text{آ})\\ &\langle \eta(u) \rangle = 0, \quad \langle \eta(u)\eta(u') \rangle = 2D\delta(u-u'). &&(۱\text{ب})\end{aligned}}$$

که در آن $f(S)$ یک تابع دلخواه و $\eta(u)$ نویز سفید با مشخصات آماری داده شده است. متوسط این تابع تصادفی صفر و تابع همبستگی آن با تابع دلتای دیرک داده می‌شود. در فضای فوریه، تمام مدهای فرکانسی در تابع تصادفی سهمی یکسان دارند، به همین سبب به آن نویز سفید گفته می‌شود. حل معادله‌ی دیفرانسیل بالا با شرط اولیه‌ی $S(0) = S_0$ دارای یک جواب یکتا است.

قدم اول در حل عددی هر معادله‌ی دیفرانسیلی، به دست آوردن یک رابطه‌ی تحلیلی برای تغییرات متغیرها در یک قدم بی‌نهایت کوچک است. به این عمل گسسته سازی معادله‌ی دیفرانسیل گفته می‌شود. برای این منظور از طرفین معادله‌ی بالا،از $u = 0$ تا $u = \Delta u$ انتگرال می‌گیریم:

$$\int_0^{\Delta u} \frac{d}{du'}S(u')du' = \int_0^{\Delta u} \left(f(S(u')) + \eta(u')\right) du',$$

سمت چپ رابطه‌ی بالا نمو $S(u)$ را می‌دهد:

$$S(\Delta u) - S_0,$$

سمت راست اندکی محاسبه لازم دارد. برای این منظور چون Δu کوچک است پس انتگرال‌ده را بر حسب u' و حول $u' = 0$ بسط می‌دهیم:

$$f(S(u')) = f(S_0 + S_0' u' + \mathcal{O}(u')^2) = f_0 + S_0' f_0' u' +_{\mathcal{O}} (u')^2,$$

که در آن $S_0' = \frac{d}{du}S(u=0)$ و $f_0' = \frac{d}{du}f(u=0)$. با انتگرال‌گیری از آن داریم:

$$\int_0^{\Delta u} f(S(u'))du' = f_0 \Delta u + \frac{(\Delta u)^2}{2} f_0 f_0' + \mathcal{O}(u')^3,$$

که معمولاً به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\int_0^{\Delta u} f(S(u'))du' = \frac{1}{2}\Delta u[f_0 + f(\Delta u f_0)] + \mathcal{O}(u')^3,$$

برای انتگرال‌گیری از نویز، قرار می‌دهیم:

$$\int_{۰}^{\Delta u} \eta(u')du' = \Gamma_{\Delta u'},$$

با استفاده از مشخصات آماری نویز، به سهولت می‌توان نشان داد که:

$$\langle \Gamma_{\Delta u} \rangle = ۰,$$

از طرف دیگر، واریانس این متغیر تصادفی برابر می‌شود با:

$$\langle \Gamma_{\Delta u}^{۲} \rangle = \int_{۰}^{\Delta u} du' \int_{۰}^{\Delta u} du'' \langle \eta(u')\eta(u'') \rangle = ۲D\Delta u.$$

اکنون تغییری متغیری به صورت زیر انجام می‌دهیم:

$$\gamma = \frac{\Gamma_{\Delta u}}{\sqrt{۲D\Delta u}},$$

به سهولت می‌بینیم که متغیر تصادفی جدید γ، یک عدد تصادفی است که متوسط آن صفر و واریانس آن برابر با یک است. با ترکیب نتایج اخیر و نگاه داشتن جملات مرتبه‌ی اول بر حسب Δu تغییر بی‌نهایت کوچک برابر می‌شود با:

$$S(\Delta u) = S_{۰} + \Delta u f_{۰} + \sqrt{۲D\Delta u} \times \gamma. \qquad (۲)$$

این رابطه، اساس گسسته سازی اویلر برای معادلات تصادفی است.

برای بالا بردن دقت، می‌توانیم محاسبات را تا مرتبه‌ی دوم Δu ادامه دهیم. این تقریب که به روش رانج‌ـ کوتای مرتبه‌ی دو معروف است به معادله‌ی نموی زیر می‌انجامد [۱]:

$$S(\Delta u) = S(۰) + \frac{۱}{۲}\Delta u[f(۰) + f(\Delta u f(۰) + \sqrt{۲D\Delta u} \times \gamma)] + \sqrt{۲D\Delta u} \times \gamma, \qquad (۳)$$

که در آن γ مجموعه‌ای از اعداد تصادفی است با متوسط صفر و واریانس یک:

$$\langle \gamma \rangle = ۰, \quad \langle \gamma^{۲} \rangle = ۱. \qquad (۴)$$

به طور خلاصه، تمام آنچه در روش اویلر برای حل معادله‌ی ۱ لازم است در مستطیل زیر گردآوری شده است:

$$\boxed{\begin{aligned} &S(\Delta u) = S_{۰} + \Delta u f_{۰} + \sqrt{۲D\Delta u} \times \gamma, \\ &\langle \gamma \rangle = ۰, \quad \langle \gamma^{۲} \rangle = ۱. \end{aligned}} \qquad (۵آ)$$

دقت روش اویلر تا مرتبه‌ی اول عدد کوچک Δu است. جزییات روش رانج‌ـ کوتای مرتبه‌ی دو که تا تقریب $(\Delta u)^{۲}$ صحت دارد به‌صورت زیر است:

$$\boxed{\begin{aligned} &S(\Delta u) = S_{۰} + \frac{۱}{۲}\Delta u[f_{۰} + f(\Delta u f_{۰} + \sqrt{۲D\Delta u} \times \gamma)] + \sqrt{۲D\Delta u} \times \gamma, \\ &\langle \gamma \rangle = ۰, \quad \langle \gamma^{۲} \rangle = ۱. \end{aligned}} \qquad (۶آ)$$

معادله‌ی لانژون

به عنوان یک مثال می‌خواهیم معادله‌ی حرکت یک ذره‌ی کروی‌شکل افت‌وخیز کننده به جرم m و شعاع a که به فنری به قدرت k متصل است را بررسی کنیم. این ذره در شاره‌ای وشکسان حرکت می‌کند که ضریب اصطکاک در آن برابر با ξ است. معادله‌ی حرکت این ذره به معادله‌ی لانژون معروف است که به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$m\ddot{x}(t) + \xi\dot{x}(t) + kx(t) = w(t), \tag{۷}$$

که در آن $w(t)$ نیروی تصادفی ناشی از برخوردهای تصادفی مولکول‌های شاره است. این نیروی تصادفی دارای متوسط صفر و همبستگی به صورت زیر است:

$$\langle w(t)\rangle = ۰, \quad \langle w(t)w(t')\rangle = ۲k_BT\xi\delta(t-t'), \tag{۸}$$

که در آن k_BT انرژی متوسط افت‌وخیزهای گرمایی محیط است.

پیش از حل عددی این معادله، باید آن را بدون بعد کنیم. دقت کنید که بدون بعد سازی برای این صورت می‌گیرد که کمیت‌های فیزیک به متغیرهای ریاضی تبدیل شوند. کامپیوتر تنها متغیرهای ریاضی عددی را می‌شناسد. برای بدون بعد سازی، ابتدا با تشخیص یک طول و یک زمان مشخصه، تمامی طول‌ها و زمان‌ها را نسبت به آنها می‌سنجیم. در مساله‌ی حاضر از شعاع گلوله‌ی کروی شکل به عنوان طول مشخصه استفاده می‌کنیم. علاوه بر آن دقت کنید که ترکیبی به صورت $\tau = \frac{\xi}{k}$ دارای بُعد زمان است. از τ به عنوان زمان مشخصه استفاده می‌کنیم. داریم:

$$S := \frac{x}{a}, \qquad u := \frac{t}{\tau}, \tag{۹}$$

و از آنجا معادله‌ی لانژون به شکل زیر در می‌آید:

$$\mathcal{R}e\ddot{S} + \dot{S} + S = \eta(u)$$

که در آن نیروی تصادفی با $\eta(u) = \sqrt{\frac{\tau}{\xi k a^۲}}w(t)$ جایگزین شده و عدد بدون بعد به صورت زیر تعریف شده‌اند:

$$\mathcal{R}e = \frac{m}{\xi\tau}, \tag{۱۰}$$

نیروی تصادفی جدید دارای متوسط صفر و همبستگی به صورت زیر است:

$$\langle \eta(u)\rangle = ۰, \quad \langle \eta(u)\eta(u')\rangle = ۲D\delta(u-u'), \tag{۱۱}$$

که در آن ضریب D به صورت زیر است:

$$D = \frac{k_BT}{ka^۲}.$$

معادله‌ی لانژون با مقادیر اولیه‌ی داده شده برای $S(۰) = S.$ و $\dot{S}(۰) = \dot{S}.$ دارای جواب یکتایی است. برای حل گسسته سازی معادله‌ی لانژون ابتدا تابع کمکی $T(u) = \dot{S}(u)$ را تعریف می‌کنیم. اکنون معادلات گسسته شده تا مرتبه‌ی اول عدد

کوچک Δu به صورت زیر می‌شوند:

$$\boxed{\begin{aligned} &T(\Delta u) = T_0 + \mathcal{R}e^{-1}\left(-T_0\Delta u - S_0\Delta u\right) + \mathcal{R}e^{-1}\sqrt{2D\Delta u} \times \gamma, \\ &S(\Delta u) = S_0 + T_0\Delta u, \\ &\langle \gamma \rangle = 0, \quad \langle \gamma^2 \rangle = 1. \end{aligned}} \tag{۱۲آ}$$

آیا می‌توانید معادله‌ی لانژون را تا مرتبه‌ی دو Δu حل کنید؟

مسأله ظاهراً با چهار پارامتر، جرم، ضریب اصطکاک، ثابت فنر و دمای سامانه تعریف شده است. چرا پس از بدون بعد سازی، مسأله تنها با دو عدد بدون بعد $\mathcal{R}e$ و D مشخص می‌شود؟

مراجع

[1] R. L. Honeycutt, *Stochastic Runge-Kutta algorithms. I. White noise*, Phys. Rev. A **45**, 600 (1992).