

Российская академия наук  
Институт проблем машиноведения

**НЕЛИНЕЙНЫЕ ПРОБЛЕМЫ  
ТЕОРИИ КОЛЕБАНИЙ  
И ТЕОРИИ УПРАВЛЕНИЯ.  
ВИБРАЦИОННАЯ МЕХАНИКА**

К 80-летию со дня рождения  
Ильи Израилевича Блехмана

Под редакцией  
чл.-кор. РАН В.В.Белецкого, чл.-кор. РАН Д.А. Индейцева,  
д-ра техн. наук, проф. А.Л.Фрадкова

Санкт-Петербург  
Наука  
2009

# ПРИНЦИП СКОРОСТНОГО ГРАДИЕНТА В ОПИСАНИИ ДИНАМИКИ СИСТЕМ, ПОДЧИНЯЮЩИХСЯ ПРИНЦИПУ МАКСИМУМА ЭНТРОПИИ

А. М. Кривцов, А. Л. Фрадков

*Институт проблем машиноведения РАН \**

Предлагается использование экстремального принципа скоростного градиента для описания динамики систем, подчиняющихся принципу максимума энтропии. Получена система эволюционных уравнений, описывающих динамику функции распределения и ее выход на стационарное состояние. Исследуются нестационарные процессы, описываемые методом динамики частиц (молекулярной динамики) и дается сравнение теоретического предсказания и результатов компьютерного моделирования.

## 1. Введение

В различных областях естествознания получили признание экстремальные и вариационные принципы построения моделей систем. Широко известно изречение Л.Эйлера: «В мире не происходит ничего, что не имело бы смысл стремления к какому-либо максимуму или минимуму». О важной роли экстремальных и вариационных принципов в физике и механике неоднократно упоминается в работах И.И.Блехмана [1–3].

В теории управления вариационный подход лег в основу целого направления: *теории оптимального управления*, в которой минимизация функционала используется для нахождения подходящего в заданном смысле закона управления технической системой. В свою

---

\*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 08-01-00775-а, 08-01-00865-а, 09-01-12096-офи-м), Совета по грантам Президента РФ для поддержки молодых ученых и ведущих научных школ (проект НШ-2387.2008.1), Межсекционной программы фундаментальных исследований ОЭММПУ РАН 2 «Проблемы управления и безопасности энергетики и технических систем».

очередь, методы оптимального управления (динамическое программирование Беллмана, принцип максимума Понтрягина и др.), являющиеся развитием методов классического вариационного исчисления, могут быть применены к построению моделей динамики механических [4], термодинамических [5] и других систем в природе и обществе. Г. Розенброк [6, 7], продемонстрировал вывод основных уравнений квантовой механики на основе принципов оптимального управления, показав, что уравнение Шредингера оказывается непосредственным следствием принципа оптимальности Гамильтона—Якоби—Беллмана.

В настоящей работе описывается один из вариационных принципов, ведущий происхождение от методов синтеза систем управления: принцип скоростного градиента [10–12]. Принцип применяется для предсказания переходных процессов в системах, установившееся движение которых подчиняется принципу максимума энтропии (принципу Гиббса-Джейнса). Исследуется динамика нестационарных процессов метода частиц и дается сравнение теоретического предсказания и результатов компьютерного моделирования.

## 2. Вариационные принципы. Принцип скоростного градиента

Рассмотрим класс открытых физических систем, модели динамики которых описываются системами дифференциальных уравнений

$$\dot{x} = f(x, u, t), \quad (1)$$

где  $x \in \mathbb{R}^n$  — вектор состояния системы,  $u$  — вектор входных (свободных) переменных,  $t \geq 0$ . Задача моделирования (построения модели) системы может быть поставлена как нахождение закона изменения (эволюции)  $u(t)$ , удовлетворяющего некоторому критерию «естественности» ее поведения и придающего создаваемой модели свойства, наблюдаемые у реальной физической системы.

Построение такого критерия на основе экстремальных и вариационных принципов обычно предполагает задание некоторого интегрального функционала (например, функционал действия в принципе наименьшего действия [8]), характеризующего поведение системы. Минимизация функционала определяет реально возможные траектории системы  $\{x(t), u(t)\}$  как точки в соответствующем функциональном пространстве. Для явного определения закона динамики системы используется развитый аппарат вариационного исчисления.

Кроме интегральных, были предложены и дифференциальные (локальные по времени) принципы, такие, как принцип наименьшего

принуждения Гаусса, принцип минимальной диссипации энергии и др. Как отмечал М. Планк [9], локальные принципы имеют некоторое преимущество перед интегральными, поскольку они не ставят в зависимость текущее состояние и движение системы от ее позднейших состояний и движений. Следуя [10–12], сформулируем еще один локальный вариационный принцип, основанный на методе скоростного градиента.

**Принцип скоростного градиента:** *среди всех возможных движений в системе реализуются лишь те, для которых входные переменные изменяются пропорционально скоростному градиенту от некоторого «целевого» функционала  $Q_t$ .*

Принцип скоростного градиента предлагает исследователю на выбор два типа моделей динамики систем: А) модели, следующие из алгоритмов скоростного градиента в дифференциальной форме

$$\dot{u} = -\Gamma \nabla_u \dot{Q}_t, \quad (2)$$

В) модели, следующие из алгоритмов скоростного градиента в конечной форме

$$u = -\Gamma \nabla_u \dot{Q}_t. \quad (3)$$

Здесь  $\dot{Q}_t$  — скорость изменения целевого функционала вдоль траектории системы (1). Опишем схему применения принципа в простейшем (но и важнейшем) случае, когда класс моделей динамики (1) задан соотношением

$$\dot{x} = u. \quad (4)$$

Соотношение (4) означает всего лишь, что мы ищем закон изменения скоростей переменных состояния системы. В соответствии с принципом скоростного градиента прежде всего нужно ввести целевой функционал (функцию)  $Q(x)$ . Выбор  $Q(x)$  должен быть основан на физике реальной системы и отражать наличие в ней тенденции к уменьшению текущего значения  $Q(x(t))$ . После этого закон динамики может быть немедленно выписан в виде (2) или (3).

При этом задание закона динамики в виде (2) порождает дифференциальные уравнения движения второго порядка, которые инвариантны относительно замены времени  $t$  на  $(-t)$ , т. е. соответствуют обратимым процессам. Напротив, выбор конечной формы (3) соответствует, как правило, необратимым процессам.

Проиллюстрируем введенный принцип примером. Другие примеры можно найти в [11, 12].

**Пример. Движение материальной точки в потенциальном поле.** В качестве первого примера рассмотрим задачу описания движения материальной точки в потенциальном поле. Переменными состояния здесь являются координаты точки, т. е.  $x = \text{col}\{x_1, x_2, x_3\}$ . Выберем в качестве целевой функции потенциал поля  $Q(x)$  и выведем скоростно-градиентный закон движения в дифференциальной форме. Вычислим скоростной градиент:

$$\dot{Q} = [\nabla_x Q(x)]^T u, \quad \nabla_u \dot{Q} = \nabla_x Q(x).$$

Выбирая диагональную положительно-определенную матрицу  $\Gamma$  в виде  $\Gamma = m^{-1}I_3$ , где  $m > 0$  — параметр,  $I_3$  — единичная  $3 \times 3$  матрица, приходим к классическому закону динамики Ньютона:  $\dot{u} = -m^{-1}\nabla_x Q(x)$ , или

$$m\ddot{x} = -\nabla_x Q(x). \quad (5)$$

При этом параметр  $m$  интерпретируется как масса точки.

Пример допускает далеко идущие обобщения. Для систем, движущихся под действием потенциальных сил потенциал поля может играть роль целевой функции  $Q(x)$ , а матрица инерции определяет матрицу коэффициентов усиления в алгоритме. При этом, если инерционные свойства системы различны в различных точках конфигурационного пространства, то метрика в пространстве скоростей (управляющих переменных) будет переменной. Таким образом можно строить модели динамики сложных механических систем, описываемых уравнениями Лагранжа 2-го рода.

Принцип скоростного градиента применим и к построению моделей динамики распределенных систем, описываемых в бесконечномерных пространствах состояний. В частности,  $x$  может быть вектором гильбертова пространства  $\mathcal{X}$ , а  $f(x, u, t)$  — нелинейным оператором, определенным на плотном множестве  $D_F \subset \mathcal{X}$  (при этом решения уравнения (1) понимаются как обобщенные решения).

Другие примеры вывода уравнений динамики механических, электрических и других систем можно найти в [11, 12]. Принцип скоростного градиента применим к описанию широкого класса физических систем, находящихся под действием потенциальных или диссипативных сил. С другой стороны, к системам, совершающим вихревые движения, например, к механическим системам, находящимся под действием гироскопических сил, принцип скоростного градиента, по-видимому, не применим.

Еще раз подчеркнем, что принцип носит двойственный характер: дифференциальная форма закона скоростного градиента, как правило, соответствует обратимым, тогда как конечная форма — необратимым процессам. Выбор между ними, так же как и выбор цели и целевого функционала целиком лежит в области физики. В каких-то случаях этот выбор не однозначен: например, процесс, обратимый на одних масштабах времени может быть необратимым на других масштабах. Таким образом, принцип не решает за физика вопрос о построении модели системы, а лишь помогает сузить множество вариантов при принятии решения и выявить целенаправленность в поведении системы.

**Динамика и цель.** Отметим, что, хотя подход к построению уравнений динамики физических систем на основе экстремальных принципов хорошо известен, он обычно не увязывается в физике с понятием цели, поставленной как достижение экстремума целевого функционала. В этом проявляется различие подходов в физике и инженерных науках, где оптимальность как цель создания искусственной (технической) системы обычно ставится во главу угла. В физике же и в других естественных науках использование понятий цели и целесообразности поведения системы, наоборот, подвергалось сомнению рядом ученых. Наиболее ярко такие взгляды выразил А. Эйнштейн [13]:

«... Для ученого есть только “существующее”, но нет желаемого, нет оценивающего, нет добра, нет зла, нет цели».

Г. Розенброк критикует позицию А. Эйнштейна, приводя аргументы в пользу того, что понятие цели естественно как для живой, так и для неживой природы. Он отмечает, что неприятие цели является реакцией на конфликт XVII столетия между церковью и зарождающейся наукой и на сегодняшний день не является актуальной. В XX—XXI столетиях машины, действующие целенаправленно и воплощающие цели, заложенные в них человеком, распространились повсеместно и уже стали частью окружающей нас среды! Это заставляет придавать более серьезное значение понятию цели и в физике как науке о наиболее общих закономерностях систем окружающей среды: живых, неживых и искусственных, созданных человеком. Г. Розенброк пишет:

«... Живые организмы, очевидно, имеют свои цели, и, если субстрат квантово-механических частиц, из которых состоит все живое, описываются как не имеющий целей,

то возникает вопрос: как может цель возникнуть из бесцельного субстрата?»

Описанный выше локальный принцип эволюции на основе скоростного градиента опирается на понятие цели еще в большей степени, чем интегральные экстремальные принципы. Поэтому в тех случаях, когда понятия цели и целевой функции возникают естественным образом, он может оказаться более удобным и полезным для построения моделей динамики систем. Кстати, принцип скоростного градиента согласуется и с известным биологическим принципом, по которому организмы и популяции развиваются так, чтобы обеспечить максимальный прирост своей биомассы [14].

### 3. Скоростной градиент и принцип максимума энтропии

Подчеркнем, что принцип скоростного градиента порождает уравнения для переходных (нестационарных) режимов функционирования систем, т.е. дает ответ на вопрос **как** система будет эволюционировать? Этим он отличается от принципов максимума энтропии, максимума Фишеровской информации и др., характеризующих установившиеся процессы и дающих ответ на вопросы: **куда?** и **как далеко?** СГ-принцип можно использовать для анализа устойчивости и скорости затухания переходных процессов, оценки максимального отклонения от предельных режимов и т.д. Попробуем применить СГ-принцип к задаче максимизации энтропии.

В соответствии с 2-м законом термодинамики и принципом максимума энтропии Гиббса-Джейнса [15] энтропия любой физической системы стремится возрасти до тех пор, пока она не достигнет своего максимального значения при ограничениях, накладываемых другими физическими законами. Очевидно, это утверждение дает представление о виде предельного поведения состояний системы, т.е. об асимптотическом поведении системы при  $t \rightarrow \infty$  и не говорит о том, как система стремится к асимптотике. Для получения уравнений движения системы в переходном режиме применим СГ-принцип.

Рассмотрим систему, состоящую из  $N$  идентичных частиц, распределенных по  $m$  ячейкам. Обозначим через  $N_i$  число частиц в  $i$ -й ячейке и запишем закон сохранения массы:

$$\sum_{i=1}^m N_i = N. \quad (6)$$

Предположим, что частицы могут перемещаться между ячейками, и нас интересует поведение системы как в установившемся, так

и в переходном режиме. Установившееся состояние определяется из принципа максимума энтропии: если ничего более о системе неизвестно, ее предельное поведение будет максимизировать ее энтропию [15]. Определим энтропию как логарифм от числа возможных состояний:

$$S = \ln \frac{N!}{N_1! \dots N_m!}. \quad (7)$$

Если других ограничений, кроме условия нормировки (6) нет, предельное распределение имеет вид  $N_i^* = N/m$ . Для достаточно больших  $N$  используют приближенное соотношение Стирлинга  $N_i! \approx (N_i/e)^{N_i}$ . Тогда

$$S \approx N \ln \frac{N}{e} - \sum_{i=1}^m N_i \ln \frac{N_i}{e} = N \ln N - \sum_{i=1}^m N_i \ln N_i = - \sum_{i=1}^m N_i \ln \frac{N_i}{N},$$

что с точностью до постоянного множителя  $N$  совпадает с обычным определением энтропии  $S = - \sum_{i=1}^m p_i \ln p_i$ , если понимать вероятности  $p_i$  как частоты  $N_i/N$ .

Для построения движения в переходном режиме применим СГ-принцип, выбрав в качестве максимизируемой целевой функции приближенную энтропию  $S(X) = N \ln N - \sum_{i=1}^m N_i \ln N_i$ , где  $X = \text{col}(N_1, \dots, N_m)$  — вектор состояния системы. Для простоты предположим, что движение во времени непрерывно и числа  $N_i$  также меняются непрерывно, т.е.  $N_i$  не обязательно целые (для больших  $N_i$  это ограничение несущественно). Тогда искомым закон движения можно представить в виде

$$\dot{N}_i = u_i, \quad i = 1, \dots, m, \quad (8)$$

где  $u_i = u_i(t)$ ,  $i = 1, \dots, m$  — управления — вспомогательные функции, подлежащие определению. В соответствии с СГ-принципом требуется вычислить скорость изменения энтропии (7) в силу системы (8), затем вычислить градиент этой скорости по отношению к вектору управлений  $u_i$ , рассматриваемых как замороженные параметры и, наконец, определить действительные управления пропорционально проекции градиента на поверхность ограничений (6). Вычисление  $\dot{S}$  дает

$$\dot{S} = - \sum_{i=1}^m \left( u_i \ln N_i + N_i \frac{u_i}{N_i} \right) = - \sum_{i=1}^m u_i (\ln N_i + 1).$$

Из (6) следует, что  $\sum_{i=1}^m u_i = 0$ , откуда  $\dot{S} = - \sum_{i=1}^m u_i \ln N_i$ . Вычисление скоростного градиента дает  $\partial \dot{S} / \partial u_i = - \ln N_i$  и СГ-закон



движения принимает вид  $u_i = \gamma(-\ln N_i + \lambda)$ ,  $i = 1, \dots, m$ , где множитель Лагранжа  $\lambda$  выбирается из условия удовлетворения ограничению  $\sum_{i=1}^m u_i = 0$ , т.е.  $\lambda = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \ln N_i$ . Окончательно уравнения динамики системы имеют вид:

$$\dot{N}_i = \frac{\gamma}{m} \sum_{i=1}^m \ln N_i - \gamma \ln N_i, \quad i = 1, \dots, m. \quad (9)$$

В соответствии с СГ-принципом уравнение (9) определяет динамику переходного процесса в системе. Для проверки найдем равновесный режим, вычисляя асимптотическое поведение переменных  $N_i$ . Для этого заметим, что в точке равновесия  $\dot{N}_i = 0$  и  $\sum_{i=1}^m \ln N_i = m \ln N_i$ . Следовательно, все  $N_i$  равны:  $N_i^* = N/m$  что соответствует состоянию максимальной энтропии и согласуется с термодинамикой.

Следующий шаг — исследование устойчивости равновесия. Для этого можно использовать энтропийную функцию Ляпунова  $V(X) = S_{\max} - S(X) \geq 0$ , где  $S_{\max} = N \ln N$ . Вычисление производной в силу системы  $\dot{V}$  дает

$$\dot{V} = -\dot{S} = \sum_{i=1}^m u_i \ln N_i = \frac{\gamma}{m} \left[ \left( \sum_{i=1}^m \ln N_i \right)^2 - m \sum_{i=1}^m (\ln N_i)^2 \right].$$

Из неравенства Коши—Буняковского следует, что  $\dot{V}(X) \leq 0$ , причем равенство  $\dot{V}(X) = 0$  достигается тогда и только тогда, когда все значения  $N_i$  равны, т.е. когда состояние максимума энтропии достигнуто. Таким образом, закон (9) обеспечивает глобальную асимптотическую устойчивость состояния максимальной энтропии. Физический смысл закона (9) состоит в движении в направлении максимальной скорости производства (скорости роста) энтропии.

Аналогично рассматриваются задачи с несколькими ограничениями. Рассмотрим систему (6), в которой, кроме закона сохранения массы действует закон сохранения энергии. Пусть  $E_i$  — энергия частицы в  $i$ -й ячейке и полная энергия  $E = \sum_{i=1}^m N_i E_i$  сохраняется. Закон сохранения энергии

$$E = \sum_{i=1}^m N_i E_i \quad (10)$$

выступает как дополнительная связь. Вычисляя скоростной градиент энтропии, приходим к закону (9), который нуждается к модификации для соблюдения закона сохранения энергии (10). В соответ-

ствии с СГ-принципом нужно спроектировать направление движения на поверхность (в нашем случае — подпространство размерности  $m - 2$ ), определяемую соотношениями

$$\sum_{i=1}^m u_i E_i = 0, \quad \sum_{i=1}^m u_i = 0. \quad (11)$$

Это значит, что закон эволюции должен иметь форму

$$u_i = \gamma(-\ln N_i) + \lambda_1 E_i + \lambda_2, \quad i = 1, \dots, m, \quad (12)$$

где  $\lambda_1, \lambda_2$  определены подстановкой (12) в (11). Полученные уравнения линейны по  $\lambda_1, \lambda_2$ , а их решения даются формулами

$$\begin{cases} \lambda_1 = \frac{\gamma m (\sum_{i=1}^m E_i \ln N_i) - \gamma (\sum_{i=1}^m E_i) (\sum_{i=1}^m \ln N_i)}{m \sum_{i=1}^m E_i^2 - (\sum_{i=1}^m E_i)^2}, \\ \lambda_2 = \frac{\gamma}{m} \sum_{i=1}^m \ln N_i - \frac{\lambda_1}{m} \sum_{i=1}^m E_i. \end{cases} \quad (13)$$

Решение (13) определено при  $m \sum_{i=1}^m E_i^2 - (\sum_{i=1}^m E_i)^2 \neq 0$ , что нарушается только если все  $E_i$  равны (вырожденный случай).

Определим точку равновесия системы (8), (12) и исследуем ее устойчивость. В равновесии выполняются следующие равенства:  $\gamma(-\ln N_i) + \lambda_1 E_i + \lambda_2 = 0$ ,  $i = 1, \dots, m$ . Следовательно,

$$N_i = C \exp(-\mu E_i), \quad i = 1, \dots, m, \quad (14)$$

где  $\mu = \lambda_1/\gamma$  и  $C = \exp(-\lambda_2/\gamma)$ . Как видно из выражений (13) положение равновесия не зависит от  $\gamma$ .

Значение  $C$  удовлетворяет также условию нормировки  $C = N(\sum_{i=1}^m \exp(-\mu E_i))$ . Таким образом, равновесие системы с учетом сохранения энергии соответствует распределению Гиббса, что согласуется с классической термодинамикой. Снова заметим, что физический смысл закона (9) состоит в движении в направлении максимальной скорости производства (скорости роста) энтропии. Как и в предыдущем случае, легко показать, что функция  $V(X) = S_{\max} - S(X)$  является функцией Ляпунова для системы и что распределение Гиббса является единственным устойчивым равновесием системы в невырожденном случае. Подстановка  $\lambda_1, \lambda_2$  из (13) в уравнение (12) дает общую форму закона эволюции для частот в форме

$$\frac{d}{dt} X(t) = \gamma A \ln X(t), \quad (15)$$

где логарифм вектора понимается покомпонентно, а симметричная  $m \times m$ -матрица  $A$  определена следующим образом:

$$a_{ij} = -\delta_{ij} + \frac{1}{m} + \tilde{E}_i \tilde{E}_j, i, j = 1, \dots, m,$$

где  $\delta_{ij} = 1$ , если  $i = j$ ,  $\delta_{ij} = 0$ , если  $i \neq j$ ,  $\tilde{E}_i = E_i - \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m E_i$ . Матрица  $A$  зависит от вектора энергий  $\bar{E} = (E_1, \dots, E_m)^T$  и всегда имеет два нулевых собственных числа. Коэффициент пропорциональности  $\gamma > 0$  определяет темп переходного процесса и является параметром модели. Вычисление производной от функции Ляпунова показывает, что уравнение (15) на подпространстве, определенном тождествами (6), (10), имеет единственное относительное равновесие, соответствующее распределению Гиббса.

#### 4. Исследование эволюции функции распределения методом динамики частиц

Для иллюстрации проведем исследование системы с большим числом степеней свободы на основе изложенной выше методики. В качестве такой системы выберем совокупность взаимодействующих частиц, используемую при моделировании физико-механических процессов методом динамики частиц [16]. В данном случае будем рассматривать простейшую систему и подход, соответствующий классической молекулярной динамике. Подобная система удовлетворяет принципу максимума энтропии. Кроме того, для нее выполняются законы сохранения числа частиц и энергии. Следовательно, она полностью соответствует изложенной выше постановке. Развитый аппарат метода динамики частиц позволяет легко исследовать происходящие в такой системе статистические процессы при большом количестве степеней свободы, что делает ее удобным объектом для применения принципа скоростного градиента (СГ-принципа).

##### 4.1. Методика расчета

Рассматривается множество частиц, взаимодействующих посредством парного потенциала  $\Pi(r)$ . Уравнения движения частиц имеют вид

$$m\ddot{\mathbf{r}}_k = \sum_{n=1}^N \frac{f(|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|)}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n|} (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_n), \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (16)$$

где  $\mathbf{r}_k$  — радиус-вектор  $k$ -й частицы,  $m$  — масса частицы,  $N$  — общее число частиц,  $f(r) = -\Pi'(r)$  — сила взаимодействия между частицами. Для задания взаимодействия частиц выберем потенциал Леннарда-Джонса

$$\Pi(r) = D \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{a}{r} \right)^6 \right], \quad (17)$$

где  $D$  — энергия связи,  $a$  — длина связи (расстояние, соответствующее минимуму потенциала). Данный потенциал является простейшим видом взаимодействия, позволяющим качественно описать многие физико-механические процессы в твердых телах, поэтому он широко используется для моделирования в задачах общетеоретического характера.

В начальный момент времени частицы равномерно заполняют кубическую область, для которой задаются периодические граничные условия. Частицы внутри области изначально упорядочены в гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку. Шаг решетки выбирается таким образом, чтобы обеспечить заданное значение относительной плотности вещества  $\rho$ , которая рассчитывается по отношению к плотно упакованному состоянию, при котором расстояние между ближайшими атомами равно  $a$ . Для задания начального распределения скоростей частиц выберем два закона: шаровой и сферический, для которых вершина вектора скорости равномерно распределена, соответственно, в объеме шара или по поверхности сферы радиуса  $v_{\text{rand}}$ .

Введем ряд параметров. Жесткость связи  $C$  для потенциала (17) равна

$$C \stackrel{\text{def}}{=} \Pi''(a) = 72D/a^2. \quad (18)$$

Период  $T_0$  малых колебаний частицы массы  $m$  при наличии упругой силы с жесткостью  $C$  равен

$$T_0 \stackrel{\text{def}}{=} 2\pi\sqrt{m/C}. \quad (19)$$

Величину  $T_0$  удобно брать в качестве микроскопического масштаба времени в системе. Скорость диссоциации (минимальная скорость, которую надо сообщить частице, находящейся в равновесии в потенциальном поле (17), чтобы она могла уйти на бесконечность) равна

$$v_d = \sqrt{\frac{2D}{m}}. \quad (20)$$

Величину  $v_{\text{rand}}$ , используемую для задания начального теплового движения в системе, удобно сравнивать со скоростью диссоциации  $v_d$ . В таблице 4.1. приведены значения основных параметров, использованных при моделировании.

Таблица 1

Параметры расчета

Параметр	Символ	Значение
Число частиц	$N$	$500 \div 256\,000$
Относительная плотность вещества	$\rho$	0.125
Удельная кинетическая энергия	$K_0$	$5.8 D$
Радиус обрезания потенциала	$a_{\text{cut}}$	$2.1 a$
Шаг интегрирования	$\Delta t$	$0.01 T_0$
Продолжительность расчета	$t_{\text{max}}$	$8 T_0$
Начальное расположение частиц		ГЦК решетка
Граничные условия		периодические

Используемое значение относительной плотности вещества  $\rho = 0.125 = 2^{-3}$  соответствует конфигурации, расстояния между частицами которой в два раза увеличены по сравнению с плотно упакованным состоянием. Радиус обрезания потенциала  $a_{\text{cut}}$  представляет собой максимальное расстояние, на котором учитывается взаимодействие между частицами. Под удельной кинетической энергией  $K_0$  понимается отношение суммарной кинетической энергии системы к общему числу частиц в начальный момент времени. Она равна удельной тепловой энергии, так как в начальном состоянии отсутствуют тепловые смещения и, следовательно, не возникает вклада потенциальной энергии в тепловую. Справедливо простое соотношение между энергиями и скоростями

$$\frac{K_0}{D} = \kappa \frac{v_{\text{rand}}^2}{v_d^2}, \quad (21)$$

где  $\kappa = 1$  для сферического и  $\kappa = 3/5$  для шарового распределения скоростей.

#### 4.2. Результаты расчета

Начальный этап расчета конфигурации, содержащей 36 000 частиц, показан на рис. 1а, где изображена исходная конфигурация, имеющая правильную кристаллическую (ГЦК) структуру. Однако

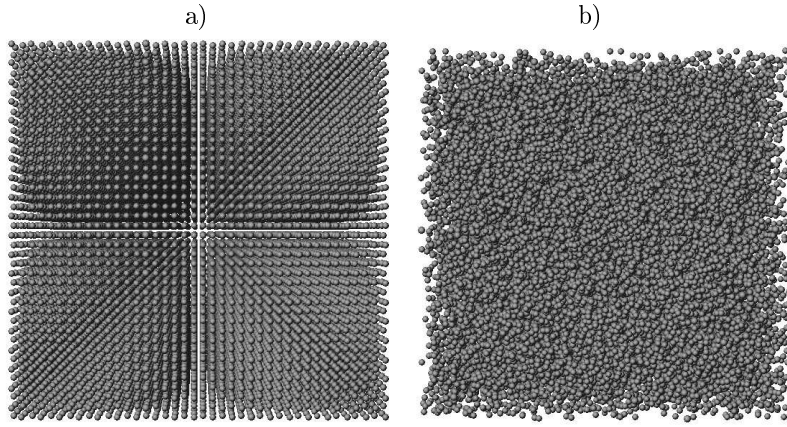


Рис. 1. Хаотизация положений частиц: а)  $t = 0$ ; б)  $t = 0.4T_0$ .

уже через  $0.4T_0$  порядок в положении частиц нарушается, и в дальнейшем их расположение можно считать хаотическим (рис. 1б). Согласно таблице 4.1., плотность пространственного распределения частиц составляет 12.5% от плотной упаковки. Кинетическая энергия теплового движения  $K_0 = 5.8D$  значительно превосходит энергию взаимодействия  $D$ , поэтому вещество находится в газообразном состоянии. Для задания масштаба энергии введем величину

$$K_{\max} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{5}{3} K_0, \quad (22)$$

представляющую собой максимальную начальную кинетическую энергию частицы при шаровом распределении скоростей.

На рис. 2 приведены гистограммы плотности вероятности для кинетической энергии частиц (или, что то же самое, для квадрата их скорости). Гистограммы получены при расчете конфигурации, содержащей 256 000 частиц. Гистограмма рис. 2а соответствует шаровому распределению скоростей в начальный момент времени. По горизонтали отложена кинетическая энергия в единицах  $K_{\max}/20$ . По вертикали — плотность вероятности  $\Delta N/\Delta K$  в единицах  $N/K_{\max}$ . Кривая, огибающая гистограмму на рис. 2а — соответствует квадратному корню, что справедливо для равномерного в шаре распределения:

$$P(K) = \frac{v^3}{v_{\text{rand}}^3} = \frac{K^{3/2}}{K_{\max}^{3/2}} \Rightarrow p(K) = P'(K) = \frac{3}{2K_{\max}^{3/2}} \sqrt{K}, \quad (23)$$

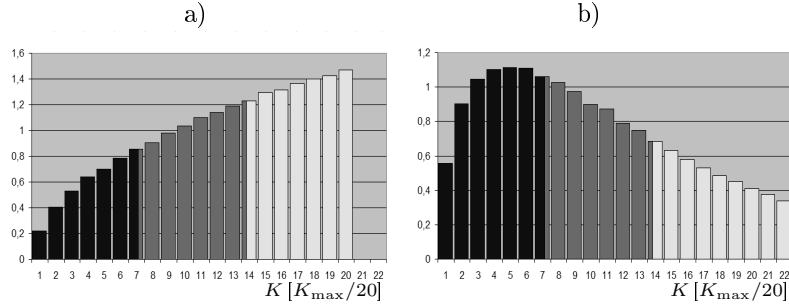


Рис. 2. Плотность распределения частиц: а)  $t = 0$ , б)  $t = 8T_0$ .

где  $P(K)$  функция распределения по кинетической энергии,  $p(K)$  — соответствующая плотность вероятности. Отношение кубов скоростей в формуле (23) для функции распределения получено из отношения объемов соответствующих шаров в пространстве скоростей. На рис. 2 приведена равновесная плотность распределения, установившаяся при  $t = 8T_0$ . Полученная гистограмма качественно соответствует плотности распределения Максвелла по кинетической энергии

$$p_M(K) = 2\sqrt{\frac{K}{\pi k^3 T^3}} \exp\left(-\frac{K}{kT}\right), \quad (24)$$

где  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура. Полагая, что удельная кинетическая энергия в рассматриваемый момент времени  $\langle K \rangle = \frac{3}{2}kT$ , перепишем эту формулу в виде

$$p_M(K) = 3\sqrt{\frac{3K}{2\pi\langle K \rangle^3}} \exp\left(-\frac{3K}{2\langle K \rangle}\right), \quad (25)$$

Так как в силу относительно низкой плотности конфигурации только незначительная часть кинетической энергии переходит в потенциальную, можно приближенно считать  $\langle K \rangle = K_0$ .

Область энергий разбита на три интервала:

$$I_1 = \left[0, \frac{1}{3}K_{\max}\right), \quad I_2 = \left[\frac{1}{3}K_{\max}, \frac{2}{3}K_{\max}\right), \quad I_3 = \left[\frac{2}{3}K_{\max}, +\infty\right), \quad (26)$$

отличающихся на рис. 2 различной степенью зачернения.

График на рис. 3 показывает изменение во времени  $N_i$  — количество частиц, попадающих в интервал  $I_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Значения на графике показаны в процентах по отношению к полному числу частиц  $N$ . Из графика видно, что при  $t = 8T_0$  функция распределения

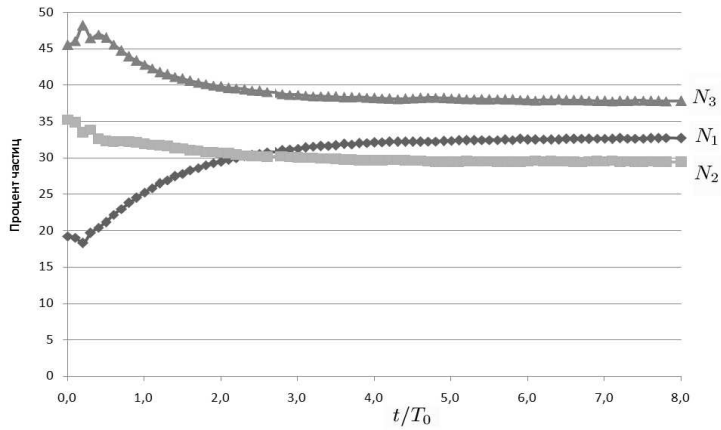


Рис. 3: Динамика распределения частиц по интервалам при шаровом начальном распределении скоростей.

выходит на стационарное состояние, существенно отличающееся от начального. Величины  $N_i$  связаны тождеством

$$N_1 + N_2 + N_3 = N, \quad (27)$$

где  $N$  — общее число частиц, остающееся неизменным. Соотношение (27) задает плоскость в пространстве переменных  $N_1, N_2, N_3$  (см. рис. 4), которую будем называть указательной плоскостью. Введем

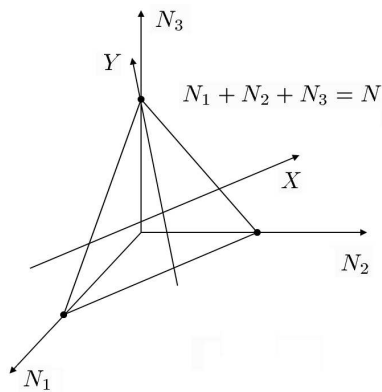


Рис. 4: Указательная плоскость  $X, Y$  в пространстве переменных  $N_1, N_2, N_3$ .



на ней координаты

$$X = \frac{1}{\sqrt{2}}(N_2 - N_1), \quad Y = \frac{1}{\sqrt{6}}(2N_3 - N_2 - N_1). \quad (28)$$

Тогда изменению состояния системы будет отвечать перемещение изображающей точки на указательной плоскости — рис. 5. Значения

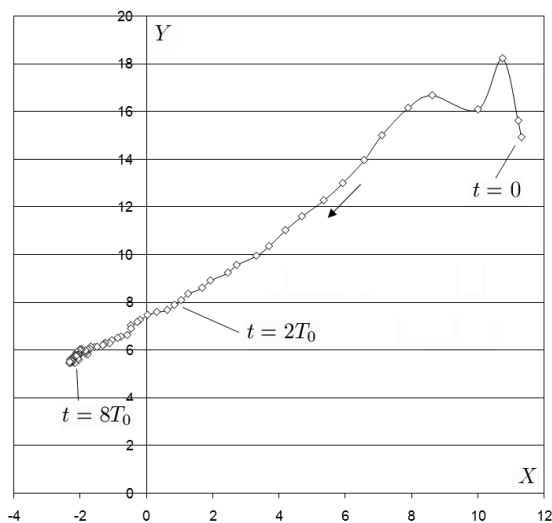


Рис. 5: Движение изображающей точки на указательной плоскости при шаровом начальном распределении частиц.

$X$  и  $Y$  на графике показаны в процентном отношении к общему числу частиц  $N$ . Расстояниям между соседними маркерами на кривой соответствует интервал времени  $0.1T_0$ . Движение изображающей точки вначале происходит быстро по криволинейной траектории, что соответствует переходному процессу в начальный момент времени. Затем движение замедляется и принимает прямолинейный характер, заканчиваясь в точке, соответствующей равновесному распределению скоростей.

Рассмотрим теперь сферическое начальное распределение скоростей. Плотность вероятности в начальный момент времени представляет собой дельта-функцию  $\delta(v_{\text{rand}})$ . Значение  $v_{\text{rand}}$  выбирается из условия, чтобы удельная кинетическая энергия была такая же, как в случае шарового распределения. Для этого она должна составлять  $\sqrt{3/5}$  от значения  $v_{\text{rand}}$  при шаровом распределении. Динамика изменения плотности вероятности при  $0 \leq t \leq 8T_0$  показана на рис. 6.

Отметим, что масштабный параметр  $K_{\max}$ , как и в случае шарово-

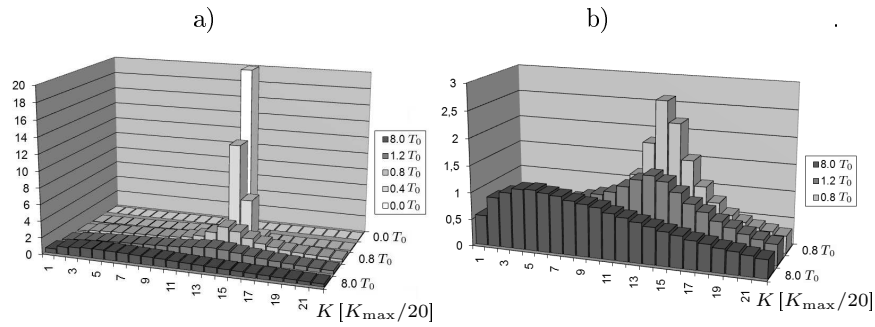


Рис. 6: Изменение плотности распределения: а)  $0 \leq t \leq 8T_0$ , б)  $0.8T_0 \leq t \leq 8T_0$ .

го распределения, вычисляется по формуле (22), что позволяет оба случая привести к одному масштабу. Из рисунков видно, что динамика функции плотности вероятности может быть разбита на два этапа: быстрое уменьшение максимума при  $0 \leq t \leq T_0$  (рис. 6а) и значительно более медленное смещение максимума при  $T_0 \leq t \leq 8T_0$  в область меньших скоростей (рис. 6б). Равновесная плотность вероятности идентична таковой при шаровом начальном распределении, и достигается приблизительно за то же время  $8T_0$ . Динамика распределения частиц по интервалам  $I_k$  (26) показана на рис. 7, а

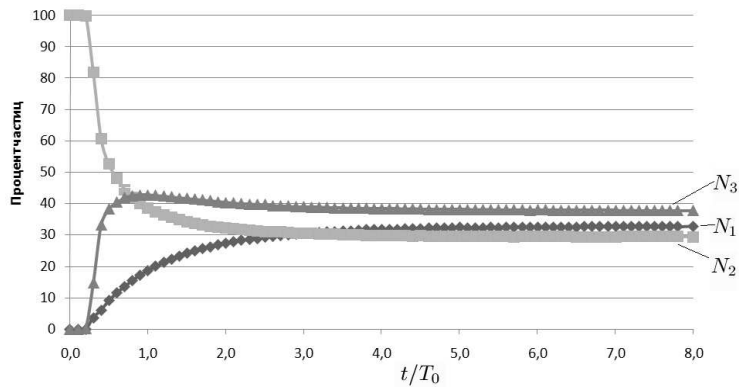


Рис. 7: Динамика распределения частиц по интервалам при сферическом начальном распределении скоростей.

перемещение изображающей точки на указательной плоскости — на

рис. 8. Из сравнения графиков рис. 5 и рис. 8b видно, что для двух

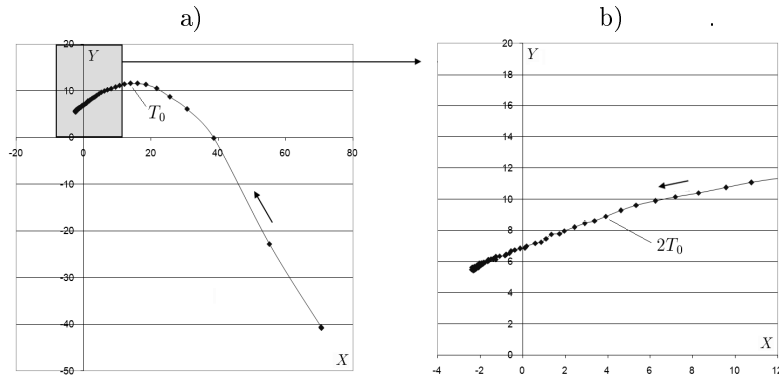


Рис. 8: Движение изображающей точки на указательной плоскости при сферическом начальном распределении частиц: а)  $0 \leq t \leq 8T_0$ , б)  $1.3T_0 \leq t \leq 8T_0$ .

различных начальных распределений — шарового и сферического, как равновесное состояние, так и направление подхода к нему оказываются одинаковыми.

### 5. Исследование эволюции функции распределения методом скоростного градиента

Применим теперь для описания эволюции функции распределения энтропийный СГ-принцип. Пусть  $m = 3$ , т.е. частицы, входящие в систему могут находиться в трех возможных состояниях (энергетических уровнях, ячейках), с энергиями  $E_1 = 0.34, E_2 = 0.83, E_3 = 1.4$ , соответствующим средним энергиям в интервалах  $I_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  для равновесной плотности распределения, см. рис.рис. 2. Пусть  $N_i(t)$ ,  $t \geq 0$  — число частиц в  $i$ -м состоянии,  $i = 1, 2, 3$ , причем эволюция чисел  $N_i(t)$  подчиняется законам сохранения массы (числа частиц) (6) и энергии (10). В соответствии с принципом максимума энтропии система должна стремиться к состоянию  $(N_1^*, N_2^*, N_3^*)$ , обладающему наибольшей энтропией при условии выполнения ограничений (6) и (10). Для удобства вычислений пронормируем числа  $N_i(t)$  на общее число частиц  $N = N_1(t) + N_2(t) + N_3(t)$  так, что  $N_i(t)$  будет иметь смысл доли частиц, находящихся на энергетическом уровне  $E_i$ . Обозначим через  $E(t) = N_1(t)E_1 + N_2(t)E_2 + N_3(t)E_3$  полную энергию системы. Поскольку  $N = 1$ , полная энергия совпадает со средней энергией, приходящейся на одну частицу  $\bar{E}(t) = E(t)/N$ .

Зададим следующее начальное распределение частиц:  $N_1(0) = 0.367; N_2(0) = 0.023; N_3(0) = 0.61$  так, чтобы полная энергия системы  $E$  равнялась единице. Численное интегрирование уравнения (15) показывает, что в этом случае траектория системы стремится к предельному состоянию  $N_1^* = 0.213; N_2^* = 0.309; N_3^* = 0.478$ , см. рис.9,а.

Переходя к «указательной» плоскости, получим, что  $X(t) \rightarrow X^*, Y(t) \rightarrow Y^*$  при  $t \rightarrow \infty$ , где  $X^* = -0.068, Y^* = 0.1767$ . Как видно из рис.9,б, траектория лежит на прямой с углом наклона  $K = \Delta Y / \Delta X \approx 0.52$ . Сходимость к предельному распределению экспоненциальна, что следует и из аналитических рассмотрений.

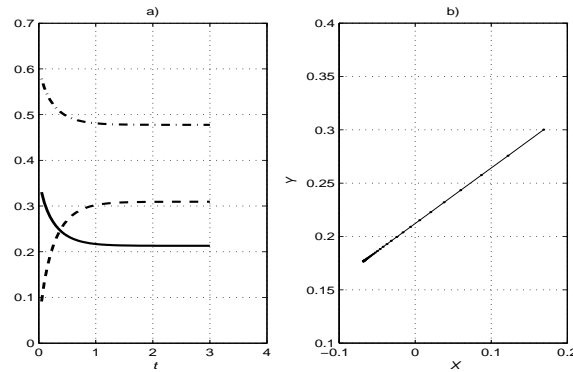


Рис. 9: а). Динамика численностей:  $N_1(t)$  — сплошная линия,  $N_2(t)$  — пунктирная,  $N_3(t)$  — штрих-пунктирная. б). Динамика координат на указательной плоскости.

## 6. Анализ и обсуждение

Приведенные выше результаты получены при числе частиц  $N = 256\,000$ . Расчеты при различном числе частиц показали, что гладкость графиков улучшается при увеличении числа частиц, однако основные тенденции остаются неизменными.

Подытожим результаты компьютерных экспериментов. Согласно проведенным расчетам, быстрые переходные процессы, сопровождающиеся существенным изменением функции распределения, происходят при  $t < T_0$ . Далее происходит медленная трансформация функции распределения, практически завершающееся при  $t = 4T_0$ .

Окончательное распределение качественно соответствует Максвелловскому и не зависит от начального. Перемещение изображающей точки в указательной плоскости позволяет наглядно описать изменение функции распределения. При  $t > T_0$  траектория изображающей точки становится практически прямолинейной, что совпадает с прогнозом на основе энтропийного СГ-принципа.

Сравнение с результатами расчетов, проведенных на основе энтропийного СГ-принципа для трех ячеек энергии, показывает, что основные тенденции оказываются одинаковыми. Система выходит на стационарное состояние, не зависящее от начального распределения; после завершения быстрых переходных процессов стремление к стационарному состоянию на изображающей плоскости происходит по прямолинейной траектории. Сравнение характеристик стационарного состояния (помечены звездочками) даны в табл. 1.

Метод	$N_1^*$	$N_2^*$	$N_3^*$	$X^*$	$Y^*$	$\Delta Y/\Delta X$
СГ-принцип	0.213	0.309	0.478	-0.068	0.1767	0.52
Динамика частиц	0.33	0.29	0.38	-0.024	0.055	$0.67 \div 0.78$

Таблица 1. Сравнение результатов расчетов различными методами

Величины  $N_i^*$  даны в отношении к общему числу частиц  $N$ . Из таблицы видно, что значения  $N_i^*$ , полученные разными методами, оказываются близки. Незначительные расхождения связаны, видимо, со способом установления соответствия между системами, которое осуществлялось выбором энергетических уровней  $E_i$  при расчете на основе энтропийного СГ-принципа. Величины  $X^*$ ,  $Y^*$  более чувствительны к указанным расхождениям, так как определяются по разности значений  $N_i^*$ , однако близость значений  $X^*$ ,  $Y^*$  к нулю в обоих случаях указывает на согласие между подходами. Различие в значении углового коэффициента  $\Delta Y/\Delta X$  составляет 20% – 30%. Приведенные в таблице значения этого коэффициента, полученные методом частиц, отвечают сферическому и шаровому начальному распределению скоростей, соответственно. Их различие невелико и находится в пределах погрешности расчета. Таким образом, результаты анализа рассматриваемой системы с большим числом степеней свободы показали хорошее согласие с результатами анализа системы низкого порядка и выводами предлагаемой теории. Это свидетельствует о полезности применения метода скоростного градиента для качественного анализа динамики процессов в методе частиц.

## 7. Заключение

Экстремальный принцип скоростного градиента представляет собой простое, но полезное дополнение к классическим результатам термодинамики и статистической механики. В то время как классические результаты позволяют ответить на вопрос «Куда идет система?», СГ-принцип отвечает на вопросы «Как она движется и как она достигает установившегося состояния?». СГ-принцип предлагает законы, потенциальные по отношению к скорости роста (производству) некоторой целевой функции. Эта идея может быть применена также к вычислению неравновесных стационарных состояний и изучению эволюции внутренней структуры системы [17], описанию медленных переходных процессов в вибрационной механике и т.д. Если в качестве целевой функции выступает энтропия системы, то СГ-принцип дополняет принцип максимума энтропии Гиббса-Джейнса и позволяет установить направление эволюции системы при приближении к состоянию максимальной энтропии. Это направление соответствует максимальной скорости производства (скорости роста) энтропии, что согласуется с принципом максимума производства энтропии Циглера [18, 19]. Другими словами, если уж природа стремится к наиболее неопределенному состоянию, то вполне естественно, что делает она это с наибольшей возможной скоростью.

Отметим, что если энтропию трактовать как меру неопределенности состояния системы, то ее производство есть не что иное как информация, генерируемая системой, или (с обратным знаком) информация о системе, поступающая наблюдателю. Это замечание дает пищу для новых интерпретаций СГ-принципа.

Результатом данной работы является, с одной стороны, экспериментальная проверка СГ-принципа, а с другой стороны — демонстрация возможности прогнозировать с его помощью динамику процессов в методе частиц.

Авторы пользуются случаем выразить благодарность Илье Израилевичу Блехману за постоянную моральную поддержку и внимание к их работам.

## Список литературы

1. *Блехман И.И., Мышкис А.Д., Пановко Я. Г.* Механика и прикладная математика / Логика и особенности приложений математики. - М.: Наука, 1983.
2. *Блехман И.И.* Вибрационная механика. - М.: Наука, 1994.

3. *Блехман И.И.* Загадки теории динамических систем: на границе механики, философии и теологии. // Вестник научно-технического развития. 2008 №3 (7), [www.vntr.ru](http://www.vntr.ru).
4. *Беллман Р., Дрейфус С.* Прикладные методы динамического программирования. М.: Физматлит, 1965.
5. *Миронова В.А., Амелькин С.А., Цирлин А.М.* Математические методы термодинамики при конечном времени. М.: Химия, 2000. 384 с.
6. *Rosenbrock H.H.* A stochastic variational principle for quantum mechanics // *Phys. Lett. A.* 1986. V. 110. P. 343–346.
7. *Rosenbrock H.H.* Doing quantum mechanics with control theory // *IEEE Trans. Aut. Contr.* 2000. V. AC-45, №1, P. 73–77.
8. *Ланцош К.* Вариационные принципы механики. М.: Физматлит, 1965.
9. *Планк М.* Принцип наименьшего действия // Единство физической картины мира. М.: Наука, 1966.
10. *Фраджов А.Л.* Схема скоростного градиента и ее применения в задачах адаптивного управления // *Автоматика и телемеханика.* 1979. № 9. С. 90-101.
11. *Фраджов А.Л.* Адаптивное управление в сложных системах. М.: Наука, 1990. 292 с.
12. *Фраджов А.Л.* Кибернетическая физика. Принципы и примеры. СПб: Наука, 2003. 208 с.
13. *Einstein A.* Out of my later years. N.Y.: Thames and Hudson. 1950. P. 114.
14. *Свирижев Ю.М., Логофет Д.О.* Устойчивость биологических сообществ. М.: Наука. 1978. 352 с.
15. *Jaynes, E. T.* Information Theory and Statistical Mechanics, I, II // *Phys. Rev.* **1957**, 106 , 620
16. *Кривцов А.М.* Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит. 2007. 304 с.

17. *Khantuleva T. A.* Internal control in nonequilibrium transport. // Proc. Intern. Conf. on Physics and Control, St.Petersburg. 2005, P. 41.
18. *Циглер Г.* Экстремальные принципы термодинамики необратимых процессов и механика сплошной среды. М.: Мир, 1966. 134 с.
19. *Мартюшев Л.М., Селезнев В.Д.* Принцип максимальности производства энтропии в физике и смежных областях. Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2006.



# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ “НЕРЕШАЕМЫХ” ЗАДАЧ

П. С. Ланда<sup>1</sup>, А. С. Гиневский<sup>2</sup>

*Московский государственный университет,  
физический факультет,*

*Центральный аэрогидродинамический институт  
им. Н.Е. Жуковского, Московский филиал \**

## Аннотация

На двух примерах показано, что использование математических моделей, описывающих основное явление, происходящее в исследуемой системе, некоторыми известными модельными уравнениями (в общем случае, не изоморфными исходным уравнениям), позволяет объяснить механизм интересующих нас сложных процессов и записать решаемую математическую модель. Более того, в ряде случаев этот подход обладает свойством предсказания поведения системы. Такое моделирование названо "построением модели явления".

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Общим принципам построения математических моделей различных систем во многом посвящена книга [1]. В ней перечисляются следующие виды моделирования: геометрическое, физическое, аналоговое математическое и имитационное. При этом утверждается, что “у них общая основа — изоморфизм”<sup>1</sup>. В книге [2] также рассматриваются некоторые принципы построения математических моделей. В ней дается следующее определение: “объект  $a'$  является моделью объекта  $a$ ..., если  $a'$  строится (или выбирается) для имитации  $a$  по этим характеристикам.” Очевидно, что это определение гораздо более общее, чем первое. С ним следует согласиться, если термин

---

\* © П.С. Ланда, А.С. Гиневский, 2009 г.

<sup>1</sup>Достаточно полное определение изоморфизма дается в книге [1].