

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут прикладної фізики НАН України

Наукова робота, представлена

на здобуття щорічної премії Президента України для молодих учених

**ТРАНСПОРТНІ ТА РЕЛАКСАЦІЙНІ ВЛАСТИВОСТІ СТОХАСТИЧНИХ
СИСТЕМ ІЗ АНОМАЛЬНО ПОВІЛЬНОЮ ЕВОЛЮЦІЄЮ**

Бистрик Юрій Сергійович – кандидат фізико-математичних наук, завідувач лабораторії інтегрованого моделювання механічних властивостей конструкційних матеріалів під дією опромінення Інституту прикладної фізики НАН України

Реферат

2021

Актуальність теми. Результати дослідження статистичних, динамічних та структурних особливостей складних систем показують, що багатьом природним явищам притаманна повільна недебаївська релаксація та аномальні дифузійні властивості. Теоретично та експериментально доведено, що режими, які проявляють зазначену поведінку, грають ключову роль у різноманітних процесах, які спостерігаються у таких матеріалах, як скло, рідкі кристали, колоїдні розчини, полімери, протеїни і, навіть, у цілих біологічних організмах та екосистемах. Через значне розповсюдження систем із аномальними властивостями важливою проблемою є розвинення методів їх опису та аналізу. Численні результати показують, що особливо ефективним для цих цілей є формалізм неперервних у часі випадкових блукань (continuous time random walks). Основою цього підходу є ідея про те, що розглядуваний стохастичний процес характеризується певними випадковими величинами, які відповідають за час між двома послідовними переходами системи із одного стану в інший та величиною (мірою) даного переходу. Простота цієї ідеї разом із потужністю та гнучкістю у застосуванні дає можливість ефективно описувати процеси, які на значних часових масштабах мають негауссову статистику.

Найбільш розповсюджені аномальні дифузійні явища характеризуються нелінійним у часі степеневим ростом дисперсії процесу. Однак дисперсія може бути нескінченною, і тоді доцільно говорити не про дифузійні процеси, а про процеси переносу (транспортні процеси). Наприклад, це спостерігається у випадку польотів Леві (Levy flights), для яких дисперсія кожного стрибка частинки, а тому і її результуючого положення, є нескінченною. Встановлено, що польоти Леві описують такі явища, як індуковані спалахами світла чи імпульсами напруги транзитні токи в аморфних середовищах, розповсюдження фотонів в атмосфері та склі Леві, міграцію тварин, рух бактерій, обмін речовин всередині живих клітин, сейсмічну активність, а також моделюють інші явища фізичної, біологічної та фінансової природи. Водночас аномальні недебаївські

релаксаційні залежності в тілах зі складною структурою часто виражені більш повільним, ніж експоненціальним, законом Кольрауша-Уільямса-Уоттса (уповільненою експоненціальною функцією), а у деяких випадках взагалі степеневим спаданням релаксаційної функції. Так, недебаєвські режими релаксації спостерігаються в неупорядкованих середовищах, діелектриках, колоїдних системах, аморфних тілах, поліанілінових плівках, надохолоджених рідинах, білкових амінокислотах тощо.

Існує клас надповільних аномальних процесів, для яких еволюція системи відбувається навіть повільніше, ніж степеневим чином. Найчастіше масштабні властивості таких процесів характеризуються логарифмічним зростанням дисперсії (якщо вона існує) та оберненим логарифмічним спаданням релаксаційної функції. Проте надповільні процеси не обмежуються лише подібною поведінкою. Зокрема, в рамках підходу неперервних у часі випадкових блукань описано модель надповільної дифузії, яка узагальнює відомі до цього часу закони дифузії такого типу. Актуальним завданням є побудова теоретичних моделей та подальший розвиток методів вивчення надповільних транспортних та релаксаційних процесів, чия поведінка виходить за рамки дифузійної (навіть аномального типу) та типової релаксаційної. Такі дослідження розширюють відомі знання про клас аномальних процесів та в подальшому можуть бути використані для аналізу фізичних систем з відповідною поведінкою.

Метою дослідження є послідовне теоретичне вивчення еволюції надповільних польотів Леві та аномальних релаксаційних процесів у дворівневих системах за допомогою підходу неперервних у часі випадкових блукань, а також розвинення методів опису та аналізу нерівноважних систем з аномальними властивостями, параметри стану яких піддаються випадковим флуктуаціям.

Для досягнення поставленої мети вирішено наступні наукові задачі:

- Узагальнено метод неперервних у часі випадкових блукань на випадок важких хвостів розподілу довжин стрибків процесу та надважких хвостів розподілу часів очікування між ними.

- Знайдено всі можливі граничні густини ймовірності та відповідні їм масштабуючі функції часу, що визначено асимптотичну поведінку надповільних польотів Леві.

- Проведено класифікацію граничних густин ймовірності та масштабуючих функцій залежно від параметрів розподілів довжин стрибків та часів очікування між ними.

- Знайдено альтернативні представлення граничних густин ймовірності, з їх допомогою детально проаналізувано властивості цих густин та порівняно аналітичні результати з результатами чисельного моделювання.

- У рамках моделі неперервних у часі випадкових блукань отримано рівняння релаксації для дворівневих систем, структурні елементи яких є незалежними і еволюціонують у відповідності з дихотомічним процесом.

- Визначено всі можливі асимптотичні закони релаксації у дворівневих системах для випадків, коли розподіли часів перебування дихотомічного процесу у двох своїх станах мають важкі та/або надважкі хвости;

- Знайдено точні розв'язки релаксаційного рівняння та порівняти їх, а також асимптотичні закони релаксації, з отриманими шляхом чисельного моделювання результатами.

Об'єкт досліджень. Процеси еволюції в нерівноважних системах, параметри стану яких описуються повільними та надповільними випадковими блуканнями з неперервним часом.

Предмет досліджень. Статистичні властивості стохастичних систем із аномально повільною поведінкою.

Методи досліджень. У циклі робіт проведено дослідження аномально повільних транспортних та релаксаційних процесів на основі методів

статистичної та математичної фізики, теорії стохастичних систем, методів числового моделювання.

Наукова новизна. Серед основних наукових результатів, одержаних в циклі праць «Транспортні та релаксаційні властивості стохастичних систем із аномально повільною еволюцією», можна виділити наступні:

- Вперше запропоновано теорію надповільних польотів Леві, що базується на неперервних у часі випадкових блуканнях, для яких розподіли часів очікування між послідовними стрибками характеризуються надважкими хвостами, а розподіли довжин стрибків – важкими хвостами.

- Вперше знайдено всі граничні густини ймовірності для надповільних польотів Леві та проведено їх повну класифікацію в залежності від параметрів розподілів довжин стрибків та часів очікування між ними.

- Визначено різні форми представлення граничних густин ймовірності для надповільних польотів Леві, що використовують інтегральні перетворення, *H*-функції Фокса та швидко збіжні степеневі ряди, за допомогою яких вперше проведено детальний аналіз поведінки цих густин, а в окремих випадках знайдено їх явні вирази в термінах простих спеціальних функцій.

- У рамках теорії неперервних у часі випадкових блукань вперше побудовано модель релаксаційних процесів у дворівневих системах, структурні елементи яких незалежні і змінюються згідно з дихотомічним процесом, розподіли часів перебування якого у рівноважних станах характеризуються важкими та/або надважкими хвостами.

- Вперше знайдено всі асимптотичні закони релаксації для дворівневих систем з важкими та/або надважкими хвостами зазначених розподілів, проведено їх класифікацію, а в окремих випадках отримано точні закони релаксації.

Практична значимість. Одержані у циклі праць результати поглиблюють фундаментальні уявлення про статистичні властивості систем із аномально

повільною поведінкою та розвивають методи їх опису. Зокрема, у роботі досліджено транспортні властивості надповільних польотів Леві, для яких є характерними довгі стрибкоподібні переходи між станами, а їх еволюція – набагато повільніша за степеневу. Крім того, детально розглянуто перебіг релаксаційних процесів у дворівневих системах, що змінюються згідно з дихотомічним процесом. Такі дворівневі системи апроксимують велику кількість більш складних систем і особливо зручні для їх аналізу у разі повільної степеневі та надповільною поведінки їх структурних елементів. Як наслідок, коло досліджених аномальних транспортних та релаксаційних процесів розширено до класу тих, що проявляють надповільну еволюцію.

Результати роботи можуть бути застосовані при моделюванні та прогнозуванні поведінки широкого кола систем із аномальною еволюцією, а також при обробці відповідної статистичної інформації. В окремих випадках отримані результати описують залежності, що спостерігаються для аномально повільних релаксаційних процесів, пов'язаних із динамікою спіна в магнітних системах, ущільненням гранульованих матеріалів та адсорбцією-десорбцією речовин поверхнями субстратів. До того ж отримані результати можуть бути використані при моделюванні дифузійних та транспортних процесів в конструкційних матеріалах, дослідженні особливостей руху дефектів у неоднорідних та багатокомпонентних середовищах, їх захопленні дислокаціями, зокрема, для вирішення проблем ядерної фізики та енергетики, пов'язаних із прогнозуванням властивостей матеріалів реакторної техніки при понаднормовому періоді експлуатації.

Отримані результати можуть бути використані в Інституті фізики конденсованих систем НАН України; Інституті монокристалів НАН України; Національному науковому центрі «Харківський фізико-технічний інститут»; Національному технічному університеті України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»; The Max Planck Institute for the Physics of

Complex Systems; Humboldt University of Berlin; Institute for Physics and Astronomy, University of Potsdam; Institute of Physics, University of Augsburg; Tel Aviv University та в інших наукових центрах, де проводяться дослідження статистичних властивостей систем з аномальними властивостями.

Обґрунтованість та вірогідність наукових результатів забезпечується застосуванням загальноновизнаних методів теоретичної фізики. Усі знайдені результати відповідають загальним положенням сучасної теоретичної та експериментальної фізики щодо процесів із аномальною поведінкою. Нові результати в часткових випадках зводяться до вже відомих, а всі аналітичні розрахунки підтверджені числовим моделюванням.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Цикл наукових праць «Транспортні та релаксаційні властивості стохастичних систем із аномально повільною еволюцією» виконаний на кафедрі електроніки, загальної та прикладної фізики Сумського державного університету та у відділі квантової електродинаміки сильних полів Інституту прикладної фізики НАН України. Результати роботи отримано під час виконання держбюджетних науково-дослідних робіт: «Вимушена та спонтанна магнітна динаміка систем одноосних наночастинок», за підтримки МОН України (№ 010U001379, 2009 – 2011 рр.); «Аномальні дифузійні та релаксаційні властивості класичних та квантових блукань з неперервним часом», за підтримки МОН України (№ 0112U001383, 2012 – 2014 рр.); «Магнітні, теплові та транспортні властивості періодично збуджених систем феромагнітних наночастинок», за підтримки МОН України (№ 0116U002622, 2016 – 2018 рр.); «Спрямований транспорт та дисипація енергії в системах феромагнітних наночастинок і магнітних скірміонів», за підтримки МОН України (№ 0119U100772, 2019 – 2021 р.); «Інтегроване багаторівневе моделювання і експериментальна перевірка радіаційної стійкості конструкційних матеріалів реакторів на період

експлуатації понад 60 років», за підтримки НАН України (№ К-1-17-10, 2019 – 2021 рр.).

Апробація результатів. Основні наукові результати роботи оприлюднено та обговорено на наступних конференціях і семінарах: Proceedings of the 3rd International Conference «Quantum Electrodynamics and Statistical Physics» (Kharkiv, 2011 р.); Науково-технічній конференції «Фізика, електроніка, електротехніка» (Суми, 2011, 2012, 2013, 2015 рр.); The 2nd International Conference «Nanomaterials: Applications and Properties» (Alushta, 2012 р.); Школа-семінар «Багатомасштабне моделювання фізичних процесів у конденсованих середовищах» (Суми, 2014 р.); Науково-технічній конференції «Інформатика, математика, автоматика» (Суми, 2019 р.).

Публікації. Результати циклу праць опубліковані у 18 наукових працях, із них: 6 статей у провідних фахових журналах, що індексуються наукометричними базами Scopus та Web of Science: Physical Review E (Impact Factor (IF) = 2.389; SCImago Journal & Country Rank (SJR): Q1, H-Index = 76; 3 статті); Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation (IF = 4.115; SJR: Q1, H-Index = 105); Physica A (IF = 2.924; SJR: Q2, H-Index = 151); Acta Physica Polonica B (IF = 0.875; SJR: Q2, H-Index = 58); 2 статті у провідному фаховому журналі, що індексується наукометричною базою Scopus: Journal of Nano- and Electronic Physics (SJR: Q3, H-Index = 15); 1 стаття у матеріалах Міжнародної наукової конференції та 9 тез доповідей на конференціях. Загальна кількість цитувань публікацій згідно бази даних Scopus складає 52, згідно бази даних Google Scholar – 77, згідно бази даних Web of Science – 49; *h*-індекс автора згідно бази даних Scopus – 3, згідно бази даних Google Scholar – 4, згідно бази даних Web of Science – 3.

За результатами дослідження 05 грудня 2019 р. в Інституті прикладної фізики НАН України Бистриком Ю.С. було захищено дисертацію на здобуття

наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

Цикл робіт присвячено дослідженню аномальних транспортних властивостей стохастичних систем, чия поведінка характеризується статистикою Леві та надповільною еволюцією, а також вивченню аномальних релаксаційних процесів у дворівневих системах, властивості структурних елементів яких змінюються відповідно до дихотомічного процесу.

У роботі проведено дослідження польотів Леві, для яких є характерними довжини стрибків випадкових блукань із важкими розподілами та часи очікування процесу в поточному положенні із надважкими розподілами. Стохастичний процес описано в межах теорії неперервних у часі випадкових блукань, при цьому густина ймовірності значення даного процесу (положення блукаючої частинки) задовольняє рівняння Монтролла-Вейсса. Використавши дане рівняння та асимптотики розподілів довжин стрибків та часів очікування, знайдено асимптотичні у часі розв'язки для усіх можливих випадків досліджуваного процесу. Отримані розв'язки являють собою граничні (у часі) густини ймовірності спеціальним чином масштабованого положення частинки, які мають вигляд оберненого перетворення Фур'є та явно не залежать від часу. Показано, що ці граничні густини ймовірності задаються тільки параметрами розподілів довжин стрибків частинки, а відповідні масштабуючі функції також і розподілами часів очікування. В залежності від параметрів розподілів довжин стрибків, граничні густини ймовірності будуть суттєво відрізнятися і являти собою одно- або двосторонні розподіли з гілками, які мають важкі хвости або являються виключно експоненціальними функціями. Водночас одержані масштабуючі функції буде віднесено до класу функцій, які повільно змінюються на нескінченності. Таким чином, досліджувані польоти Леві завжди будуть демонструвати надповільну еволюцію.

У роботі здійснено всебічний аналіз граничних густин ймовірності масштабованого положення частинки. Із огляду на представлення граничних густин у вигляді перетворення Фур'є, отримано їх запис у формі оберненого перетворення Мелліна та споріднених з ним H -функцій Фокса, які відіграють важливу роль в описанні аномальних процесів. Окрім цього, граничні розподіли отримано у вигляді степеневих рядів, що є зручними для практичних розрахунків, а також у формі перетворення Лапласа. Останнє представлення дозволяє отримати повний асимптотичний розклад граничних густин ймовірності, а також показує, що граничні розподіли є нормованими на одиницю, невід'ємними та унімодальними функціями. Одержано альтернативне знаходження граничних густин ймовірності, яке базується не на прямому використанні рівняння Монролла-Вейсса, а має зв'язок з узагальненими центральними граничними теоремами. До того ж наведено зв'язок досліджуваного процесу із системою субординаційних рівнянь Ланжевена та розглянуто альтернативний метод опису певного класу стрибкоподібних процесів, що полягає в використанні рівняння Ланжевена з білим шумом Пуассона. Зокрема, виведено рівняння Колмогорова-Феллера для густин ймовірності таких стрибкоподібних стохастичних процесів в обмеженому інтервалі, а для деяких випадків проведено аналітичне та числове знаходження точних розподілів. Знайдено уточнення до асимптотичної поведінки розподілів оригінального (немасштабованого) положення частинки, завдяки чому вдається коректно описати їх хвости у випадках, якщо граничні густини ймовірності є експоненціальними. На додаток розроблено метод комп'ютерного моделювання для розрахунку граничних густин ймовірності. Цей метод, пов'язаний із статистикою масштабованого положення частинки за умови великих значень часу, дозволив чисельно розрахувати значення граничних розподілів у всіх розглянутих випадках. Як наслідок, показано, що результати числового

моделювання знаходяться у дуже добрій відповідності із аналітичними передбаченнями.

На основі теорії неперервних у часі випадкових блукань вивчено процес релаксації для широкого класу дворівневих систем, структурні елементи яких є незалежними один від одного, а їх властивості змінюються згідно з дихотомічним процесом. Отримано інтегральне рівняння для законів релаксації у випадку довільних густин ймовірності часів очікування системи в «верхньому» та «нижньому» положенні. Дане рівняння показує, що у загальному випадку для дворівневих систем процес релаксації є нелокальним та проявляє ефекти пам'яті. За умови, що густини ймовірності часу перебування системи в «верхньому» і «нижньому» положеннях мають важкі та/або надважкі хвости, використовуючи перетворення Лапласа і тауберову теорему Карамати, знайдено поведінку законів релаксації при великих значеннях часу. Із дослідження випливає, що відповідні релаксаційні процеси демонструватимуть різноманітні аномальні режими, яким властива повільна або надповільна поведінка. Вказано дробові релаксаційні рівняння, для яких отримані степеневі релаксаційні функції є розв'язками при великих значеннях часу.

З-поміж іншого, увагу зосереджено на дослідженні точних результатів щодо релаксаційних процесів у дворівневих системах. Такі результати важливі можливістю аналітичного аналізу поведінки досліджуваних процесів не лише з огляду на асимптотичний режим, а й за умови будь-яких значень часу. Крім того, вони дозволяють перевіряти коректність отриманих асимптотичних розв'язків та використаних апроксимаційних числових схем. Знаходження точних релаксаційних законів здійснено для випадків, коли часи очікування системи в рівноважних положеннях розподілені згідно з експоненціальними густинами ймовірності, а також мають важливі в теорії стохастичних процесів розподіли Ерланга, Міттаг-Леффлера та Леві. Показано, що відповідні розподіли можуть описувати дебаєвську релаксацію, аномальну релаксацію із

складним осцилюючим характером чи типовою для процесів Леві ступеневою поведінкою. Одержано рівняння типу Монтролла-Вейсса для густини ймовірності різниці часу перебування процесу в «верхньому» та «нижньому» положеннях. Знайдено точні розв'язки цього рівняння і моменти першого та другого порядку для випадку, якщо дихотомічний процес є узагальненим телеграфним процесом. Часткові випадки таких релаксаційних процесів є корисними для дослідження середньої намагніченості феромагнітної наночастинки, чия намагніченість описується системою ефективних рівнянь Ланжевена та відповідним рівнянням Фоккера-Планка. На додаток проведено числові розрахунки (комп'ютерне моделювання та розв'язок відповідних інтегральних рівнянь), які цілком відповідають усім аналітично знайденим результатам.

ОСНОВНІ ВИСНОВКИ

У циклі робіт, використовуючи концепцію неперервних у часі випадкових блукань, вперше вивчено транспортні та релаксаційні властивості широкого кола стохастичних систем з надповільною еволюцією. Зокрема, отримано наступні основні наукові результати:

1. Вперше досліджено процес надповільних польотів Леві, що характеризуються важкими хвостами розподілу довжин стрибків випадкових блукань та надважкими хвостами розподілу часів очікування між стрибками. Використовуючи рівняння Монтролла-Вейсса та тауберову теорему Карамати, знайдено всі можливі граничні густини ймовірності та відповідні їм масштабуючі функції часу, що визначають асимптотичну поведінку масштабованих надповільних польотів Леві. Проведено повну класифікацію граничних густин ймовірності та масштабуючих функцій в залежності від параметрів розподілів довжин стрибків та часів очікування між ними. Показано, що на відміну від масштабуючих функцій, вид яких залежить від параметрів обох розподілів, граничні густини визначаються лише параметрами розподілу

довжин стрибків і можуть мати або важкі хвости, або бути одно/двосторонніми експоненціальними функціями.

2. Знайдено представлення граничних густин ймовірності для масштабованих польотів Леві у вигляді (1) оберненого перетворення Фур'є, (2) оберненого перетворення Мелліна, (3) перетворення Лапласа, (4) H -функцій Фокса та (5) швидко збіжних степеневих рядів. За їх допомогою досліджено не тільки асимптотичну поведінку граничних густин ймовірності, але й показано, що в багатьох випадках граничні густини можуть бути виражені в термінах простих спеціальних функцій. Шляхом числового моделювання випадкових блукань, узагальненого на випадок статистичних розподілів з надважкими хвостами, підтверджено існування усіх типів граничних густин, передбачених теоретично.

3. Побудовано модель релаксаційних процесів у дворівневих системах, структурні елементи яких еволюціонують незалежно один від одного у відповідності з дихотомічним процесом. В рамках теорії неперервних у часі випадкових блукань отримано інтегральне рівняння, що описує релаксацію таких систем у загальному випадку довільних розподілів часів перебування їх структурних елементів у «верхньому» та «нижньому» станах. За допомогою цього рівняння вперше визначено асимптотичні закони релаксації при наявності важких та/або надважких хвостів зазначених розподілів. Показано, що в цих випадках релаксація відбувається за аномальними (повільними та надповільними) законами, які є універсальними для зазначених систем.

4. Знайдено точні закони релаксації дворівневих систем, для яких час перебування їх структурних елементів у «верхньому» та «нижньому» станах характеризується (1) експоненціальними розподілами, (2) розподілами Ерланга, (3) розподілами Міттаг-Леффлера та (4) односторонніми розподілами Леві. Встановлено, що у першому випадку відбувається дебаївська релаксація, у другому випадку релаксація має осцилюючий характер, а у третьому та

четвертому випадках реалізуються аномально повільні режими релаксації. Усі закони релаксації дворівневих систем, як точні, так і асимптотичні, підтверджені шляхом числового моделювання.

Претендент:

Зав. лаб. ПФ НАН України, к.ф.-м.н.

Ю.С. Бистрик

Учений секретар ПФ НАН України,
к.ф.-м.н.



О.І. Ворошило