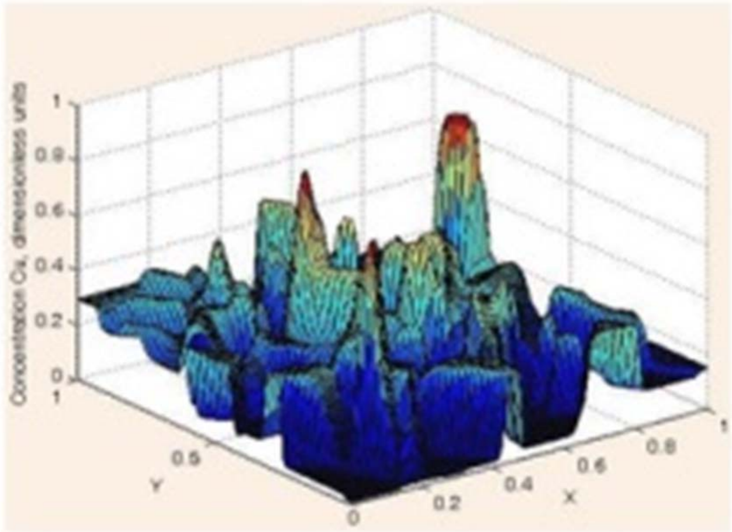


Комп'ютерне моделювання задач прикладної математики

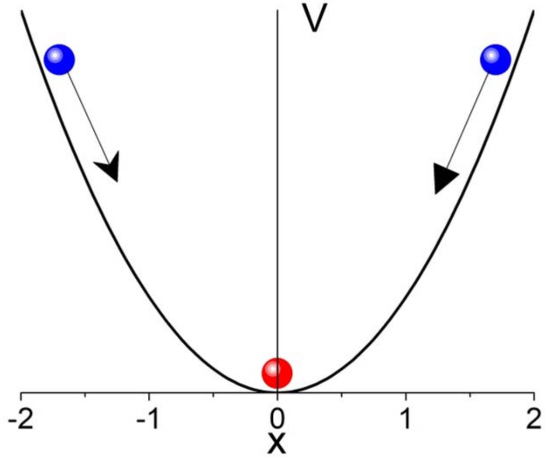
Однорідні стохастичні системи.

Лекція 3

Однорідні динамічні системи

Потенціальні системи

$$\frac{dx}{dt} = f(x), \qquad f(x) = -\frac{dV}{dx}, \qquad x(0) = x_0$$

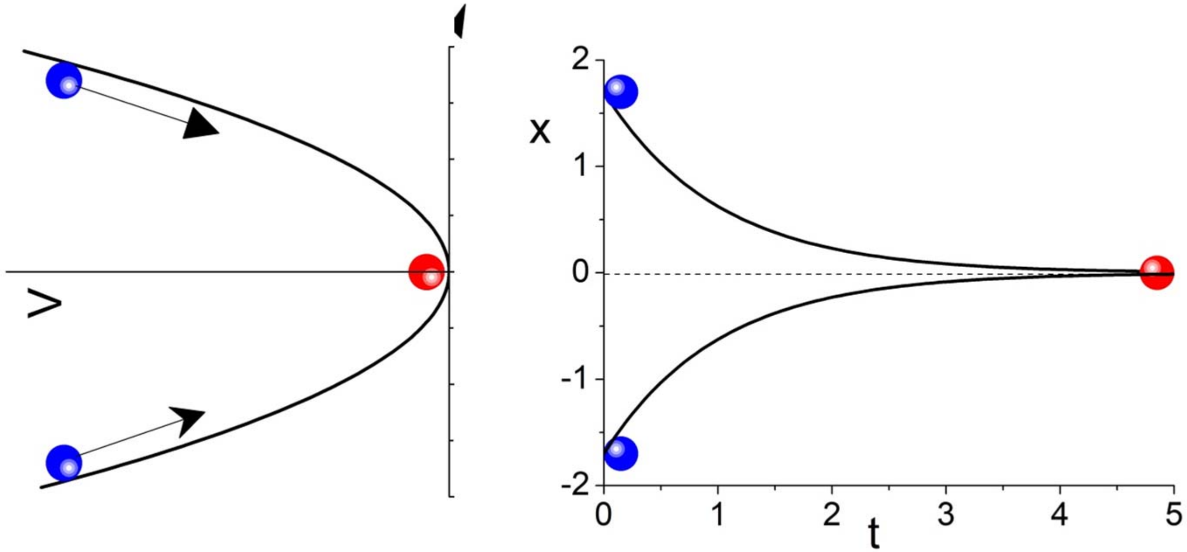


Стаціонарні стани

$$\frac{dx}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad f(x) = 0$$

Приклад:

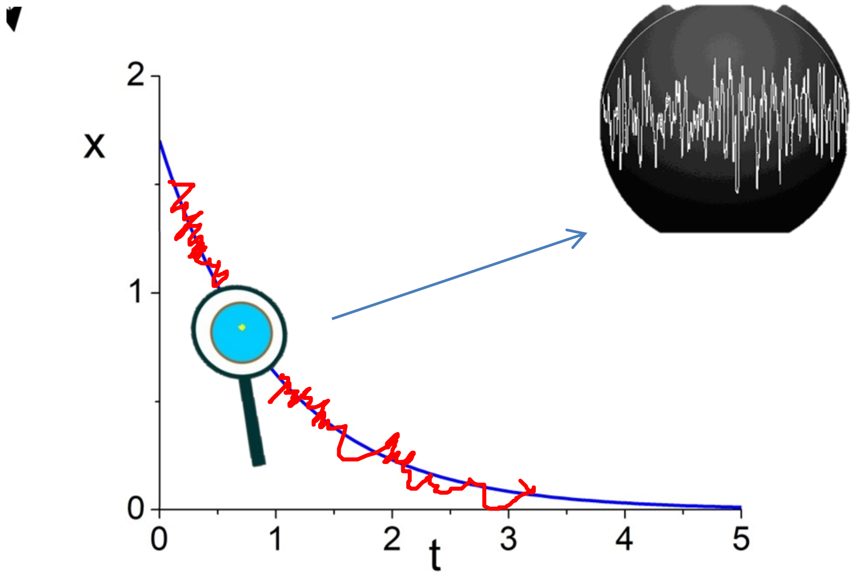
$$V(x) = x^2$$

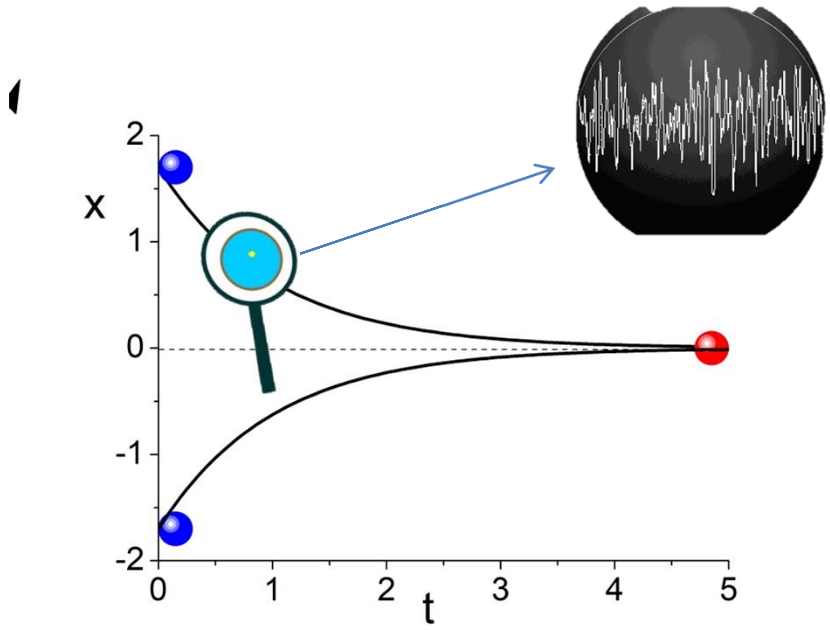


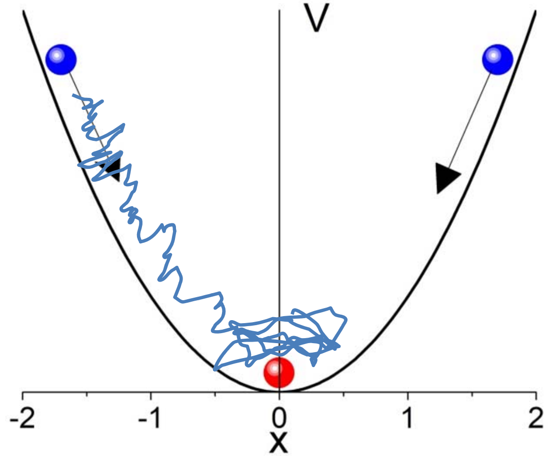
Однорідні динамічні системи

Однорідні системи

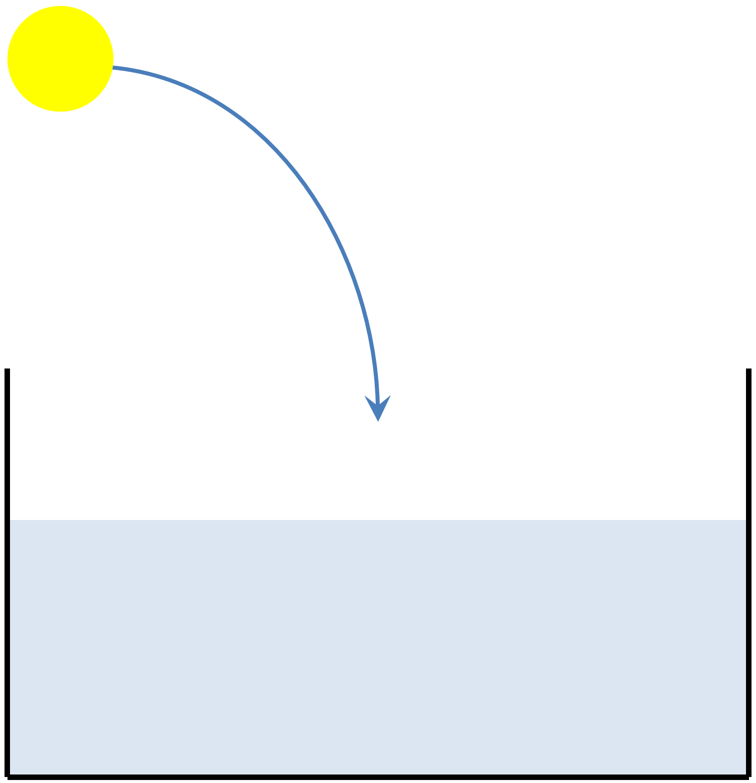
$$\frac{dx}{dt} = f(x)$$

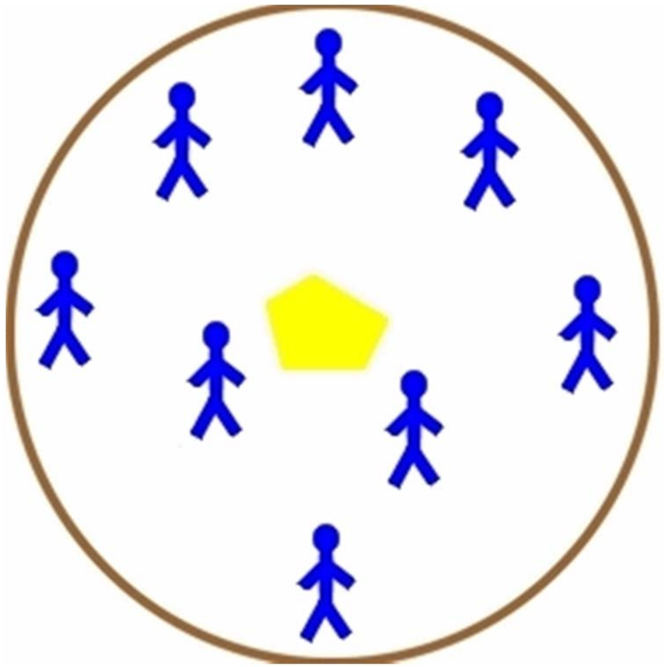




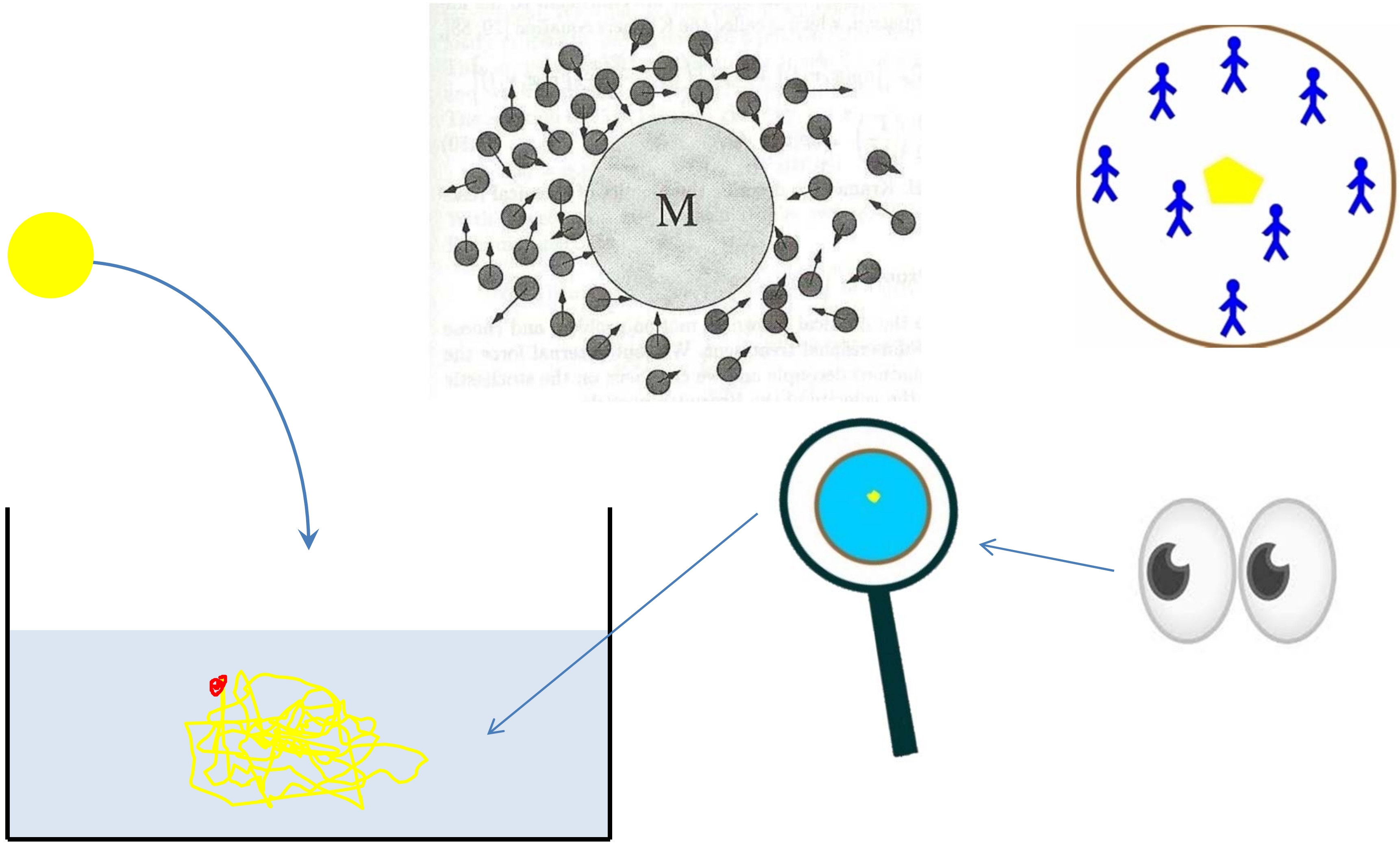


Однорідні динамічні системи

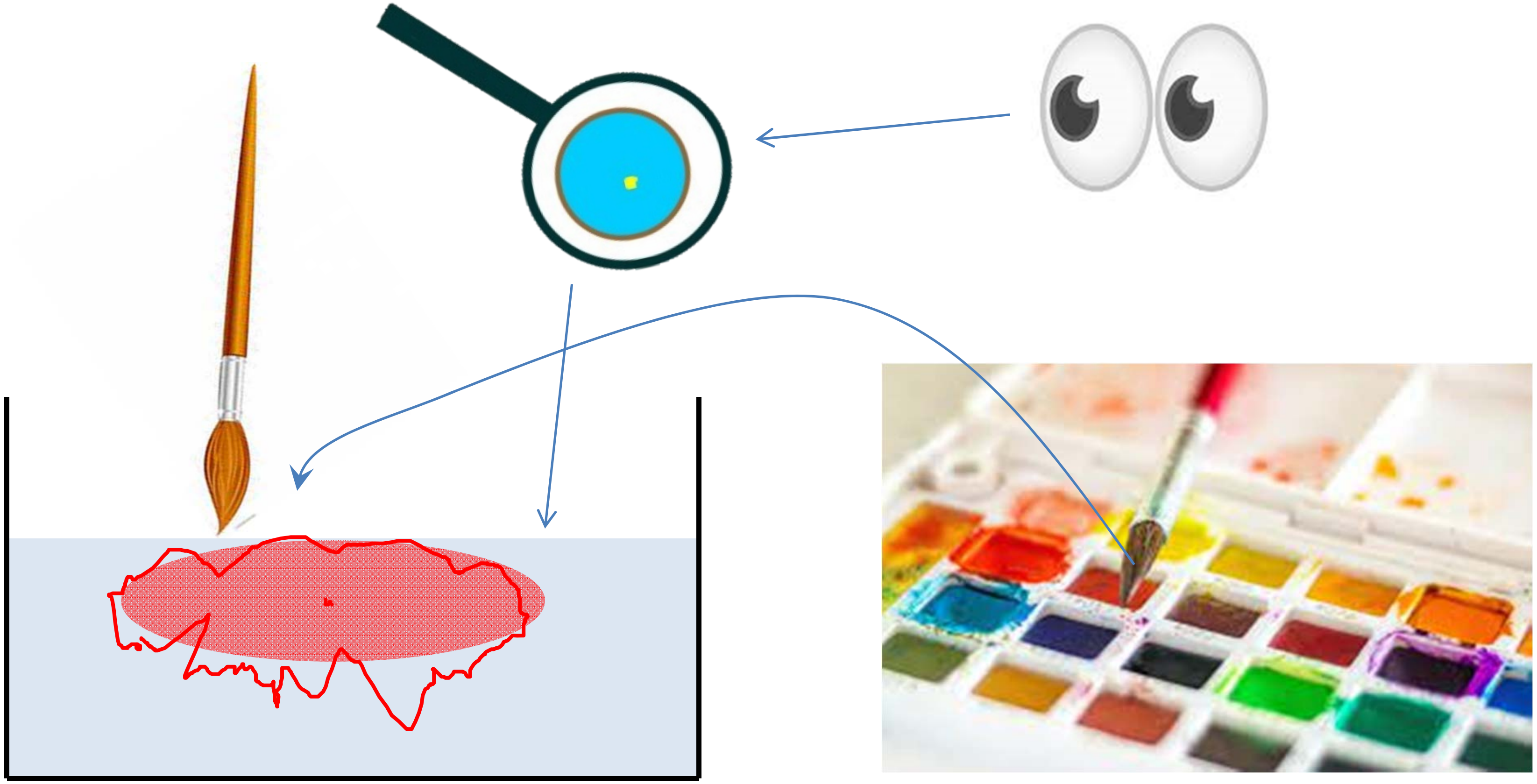




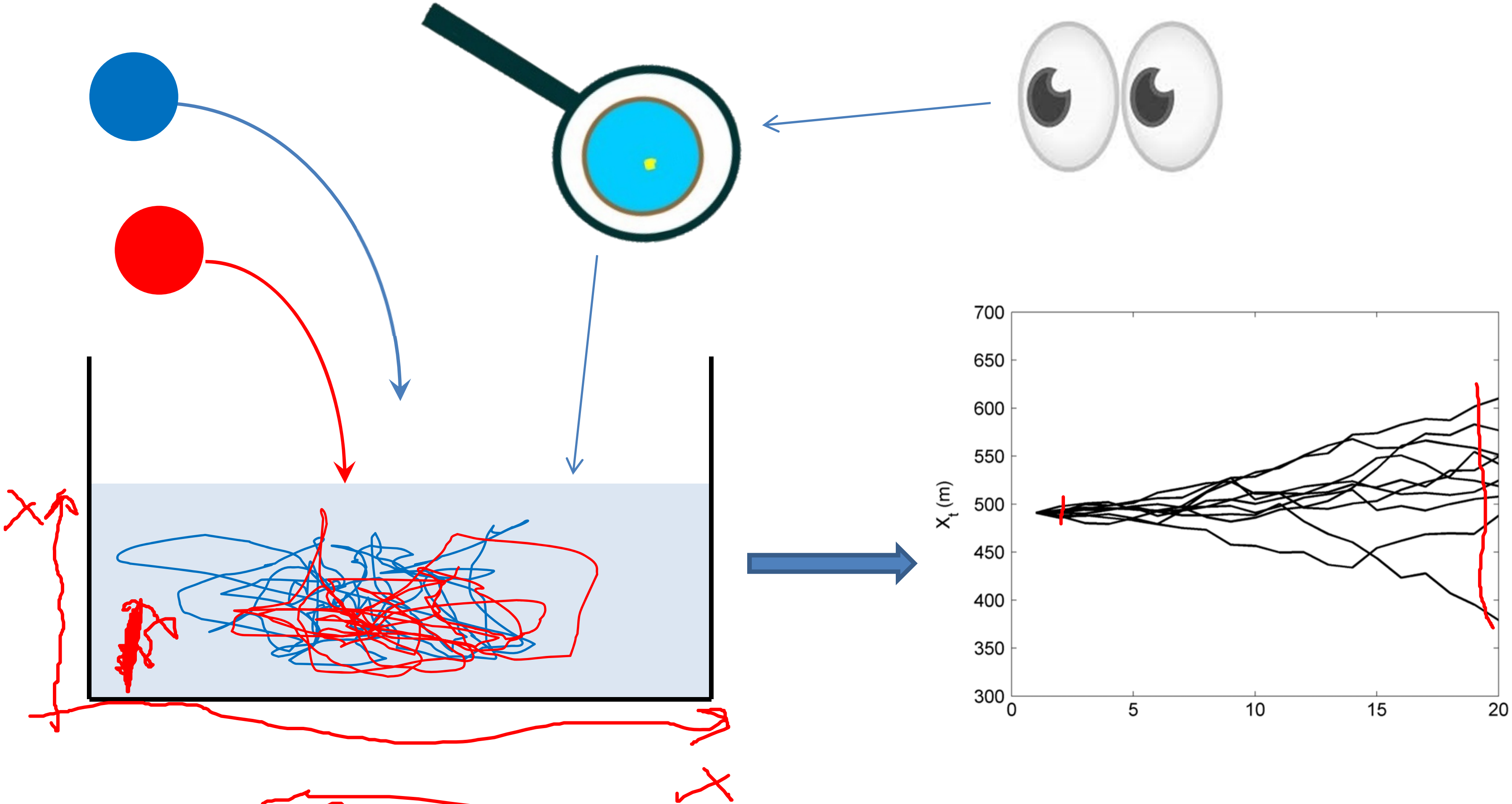
Однорідні динамічні системи



Однорідні динамічні системи



Однорідні динамічні системи

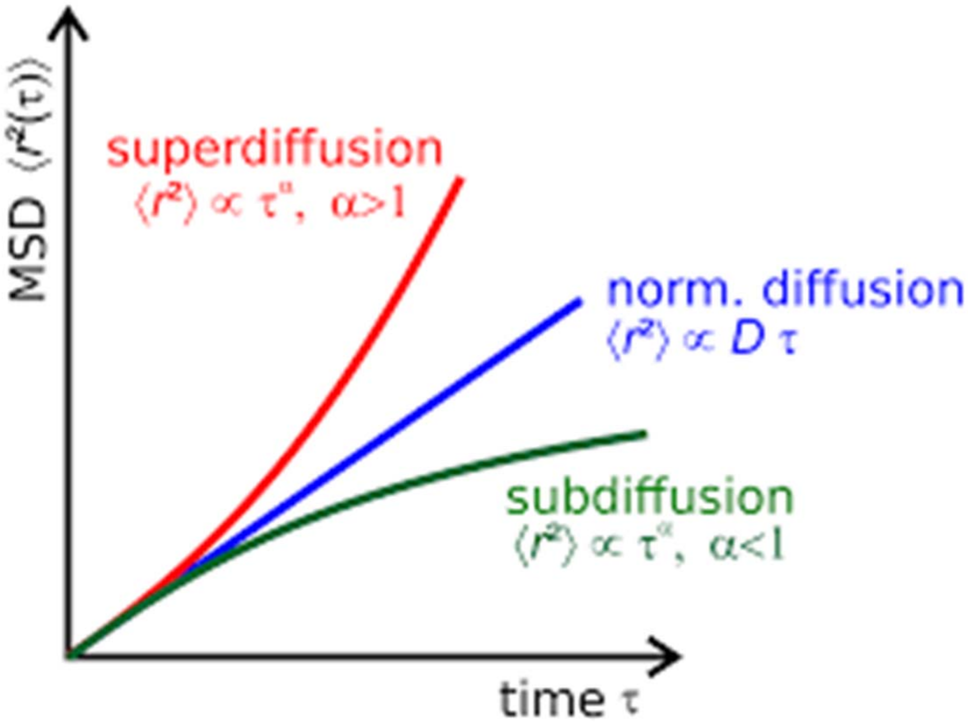


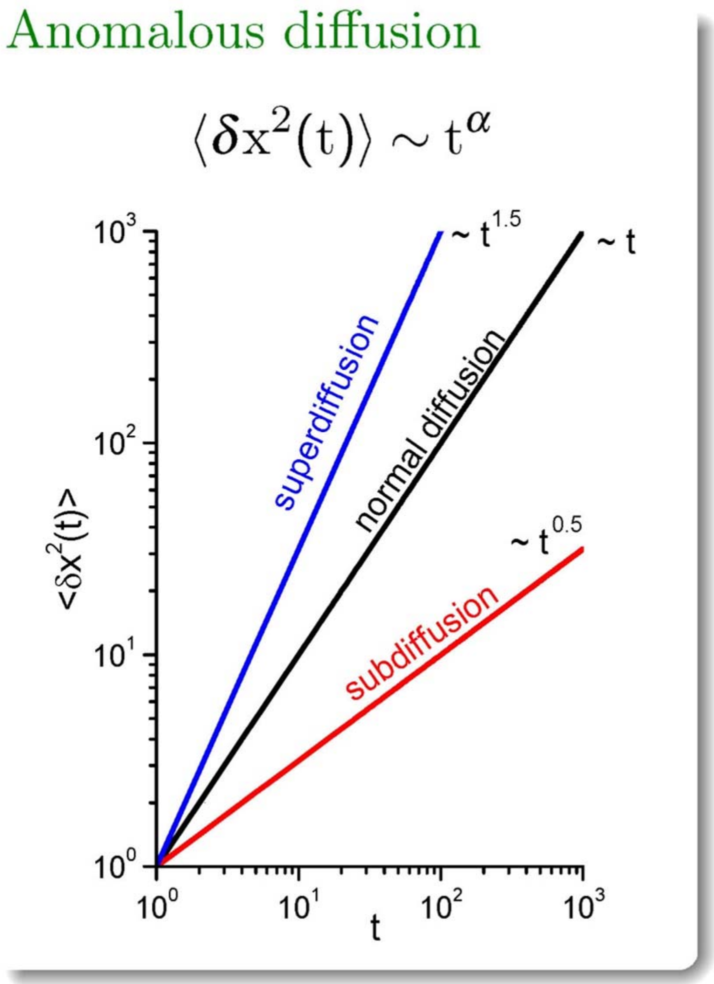
$r = \sqrt{x^2 + y^2}$

Однорідні динамічні системи

Дисперсія (MSD)

$$\langle(\delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$$





Рівняння Ланжевена

Langevin approach

Normal diffusion case

The original Langevin equation[a] describing Brownian motion

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\gamma\frac{dx}{dt} + f(x) + \xi(t).$$

Term $\xi(t)$ is a Gaussian white noise with

$$\langle \xi_i(t)\,\xi_j(t') \rangle = 2\gamma k_B T \delta(t - t')$$

according to fluctuation-dissipation relation[b].

[a] P.Langevin. "On the Theory of Brownian Motion". C.R.Acad.Sci. (Paris) 146, 530 (1908)

Рівняння Ланжевена

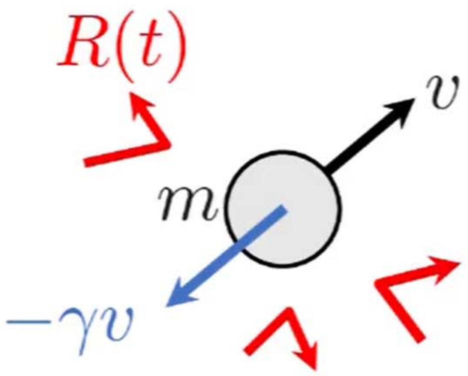
Langevin equation

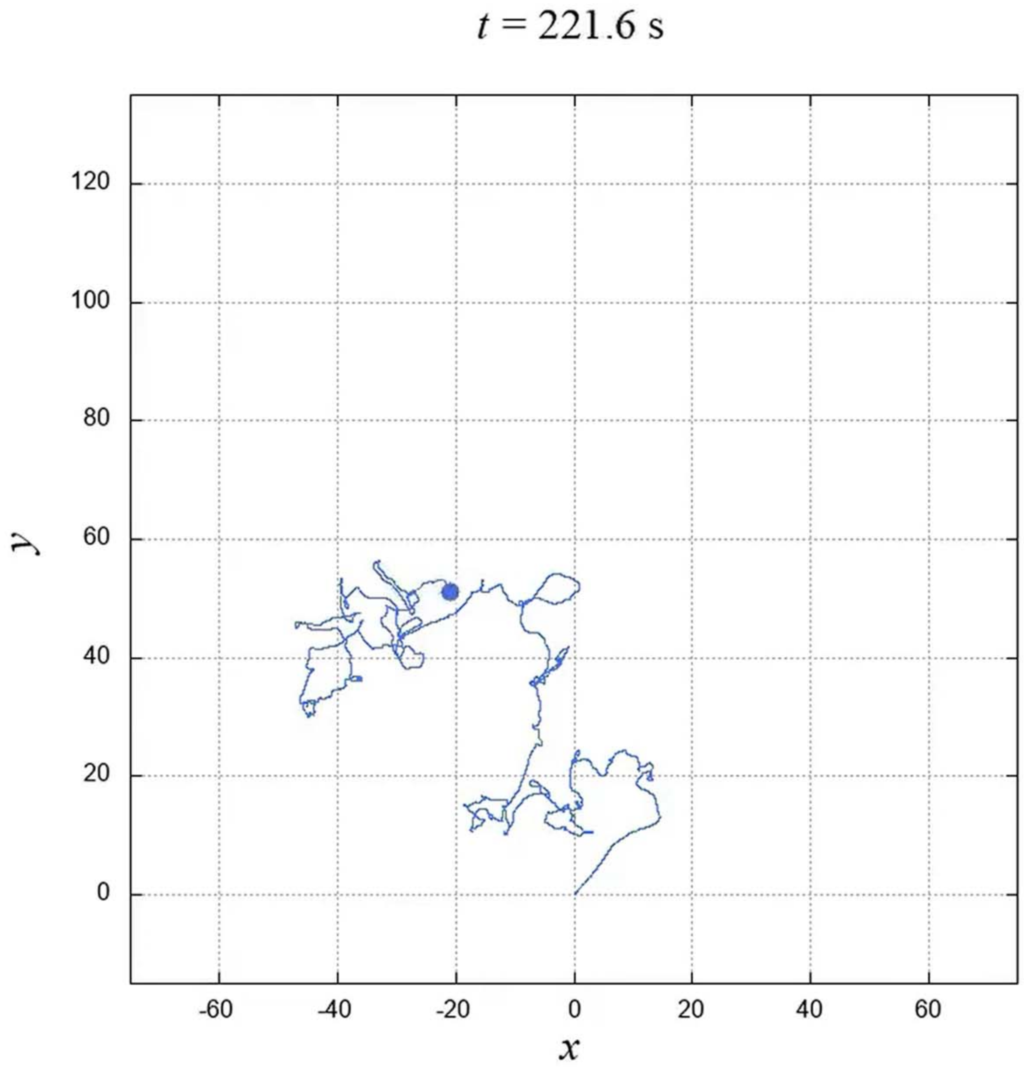
$$m\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = \boxed{-\gamma v} + \boxed{R(t)}$$

Friction force

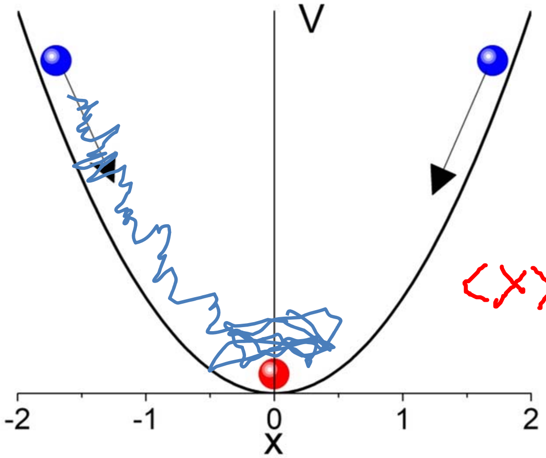
Random force

white Gaussian noise

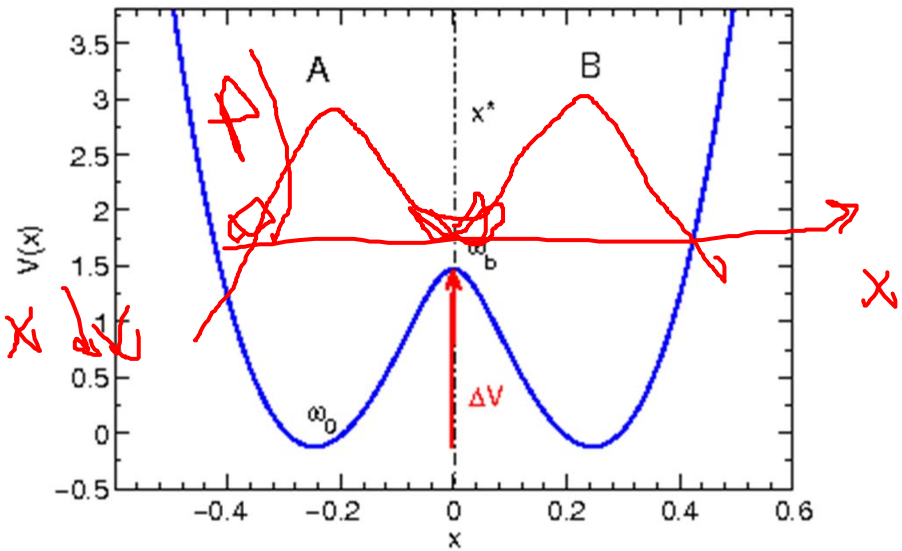


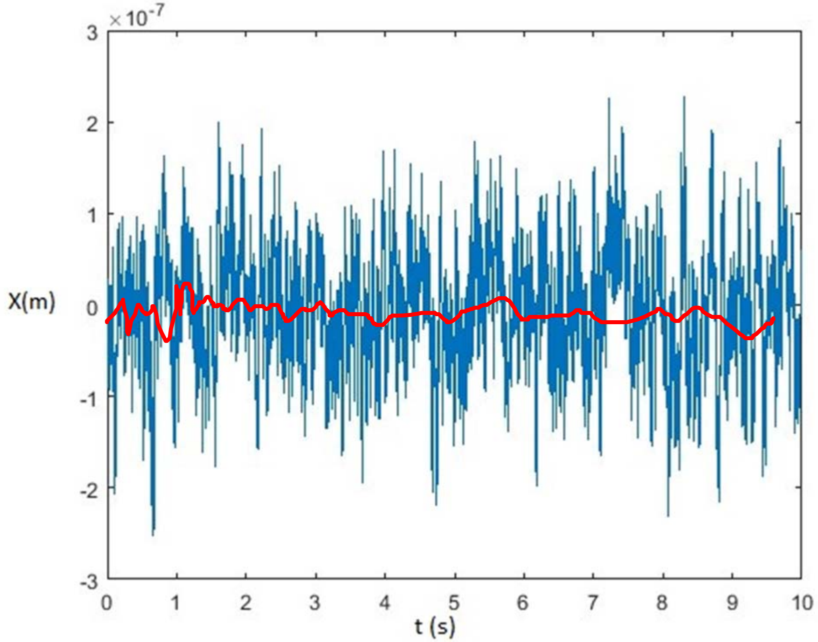


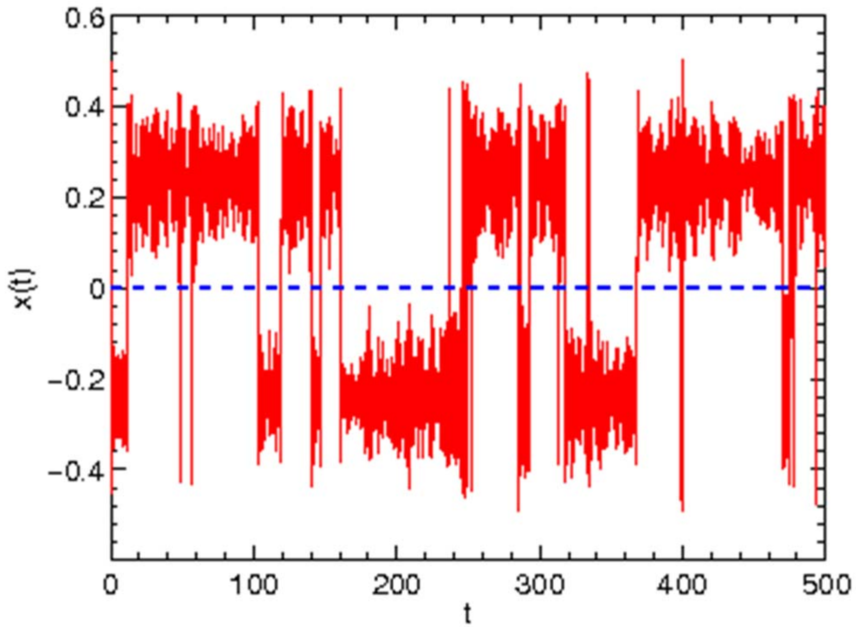
Рівняння Ланжевена



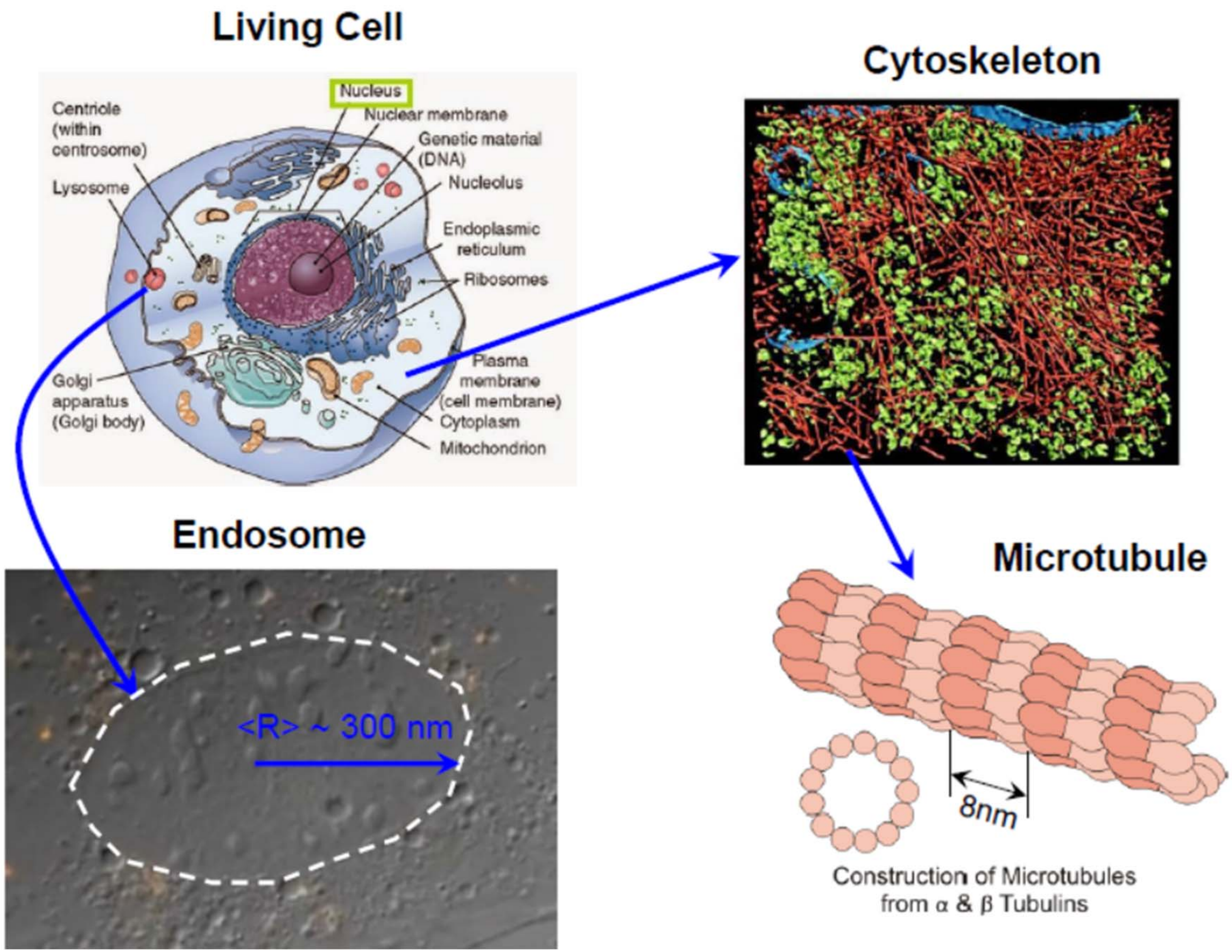
$\langle x \rangle = \int p(x)\, x\, dx$



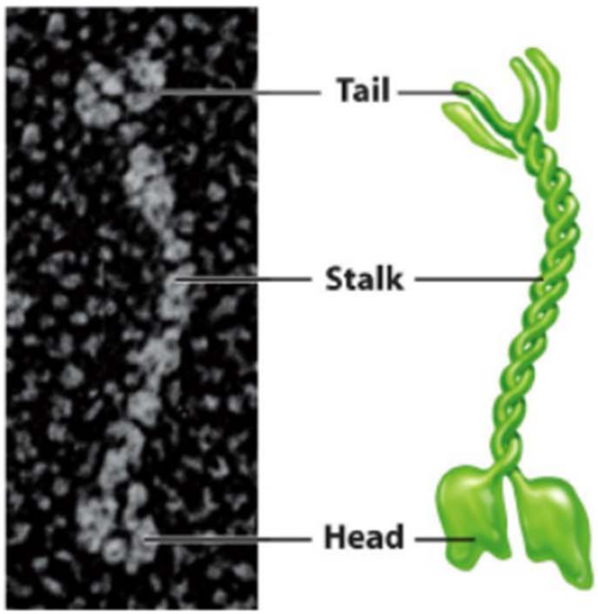


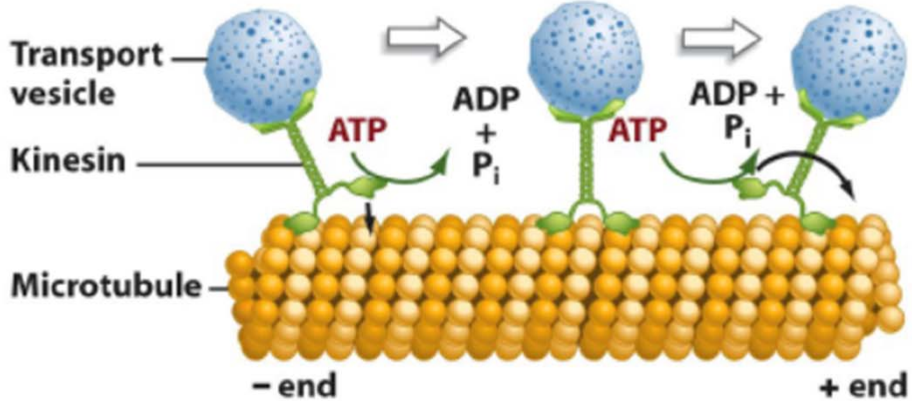


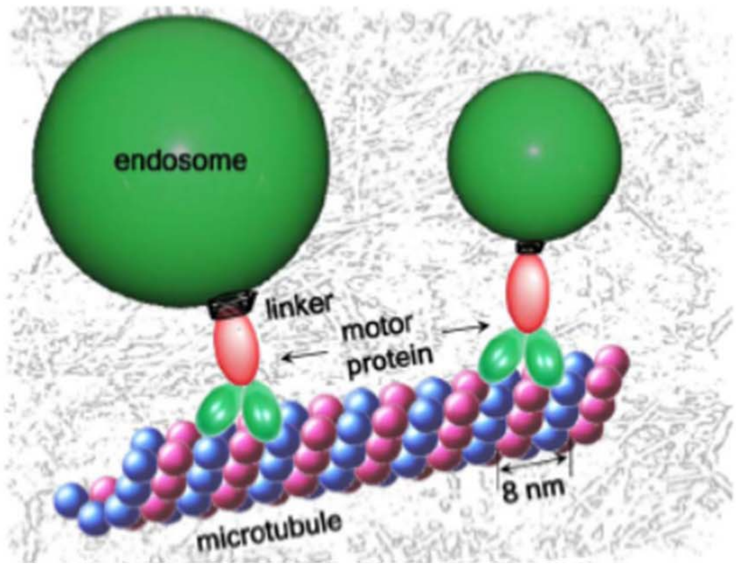
Жива клітина



Жива клітина





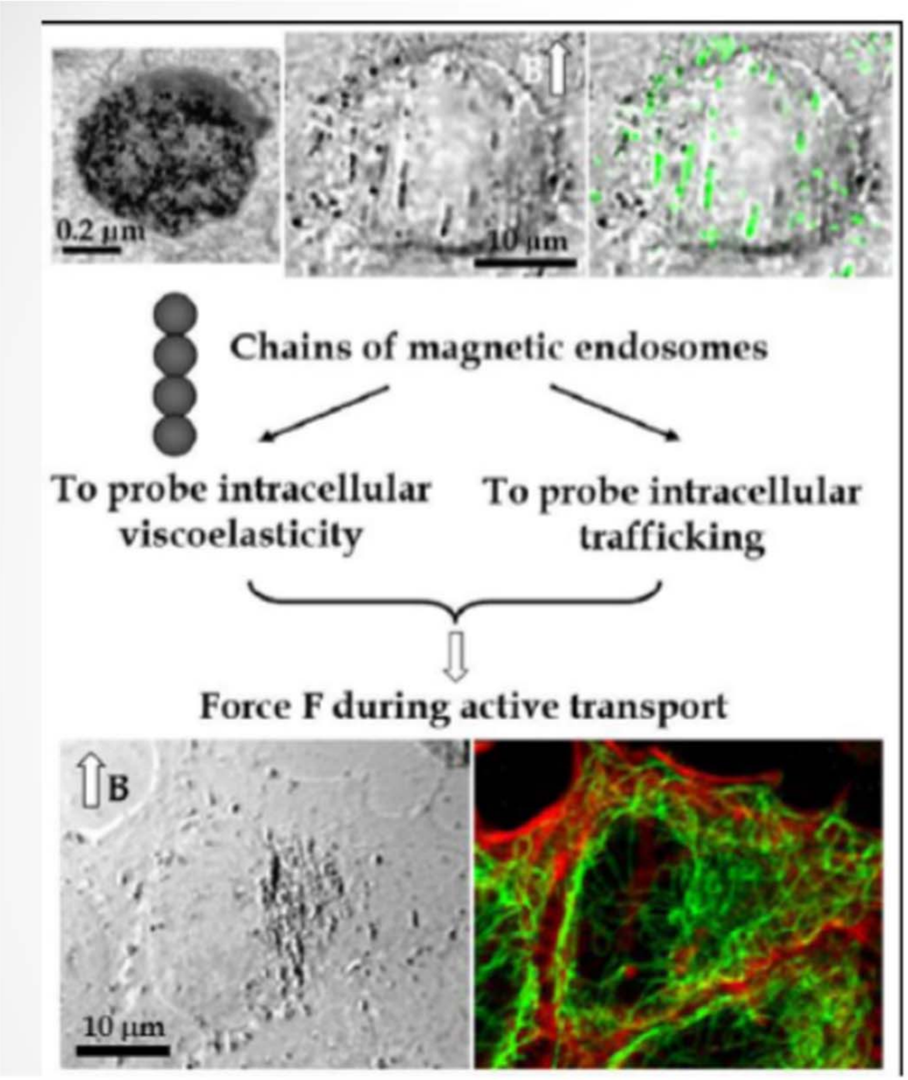


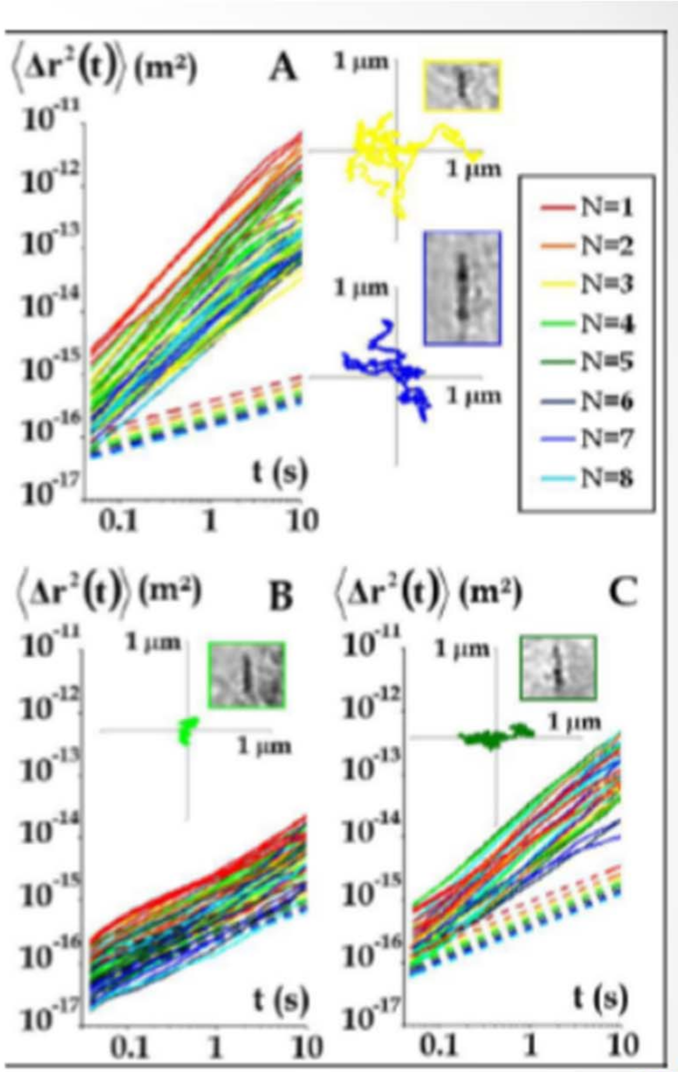
Amount of energy released from hydrolysis of ATP

$$ATP + H_2O \rightarrow ADP + Pi$$

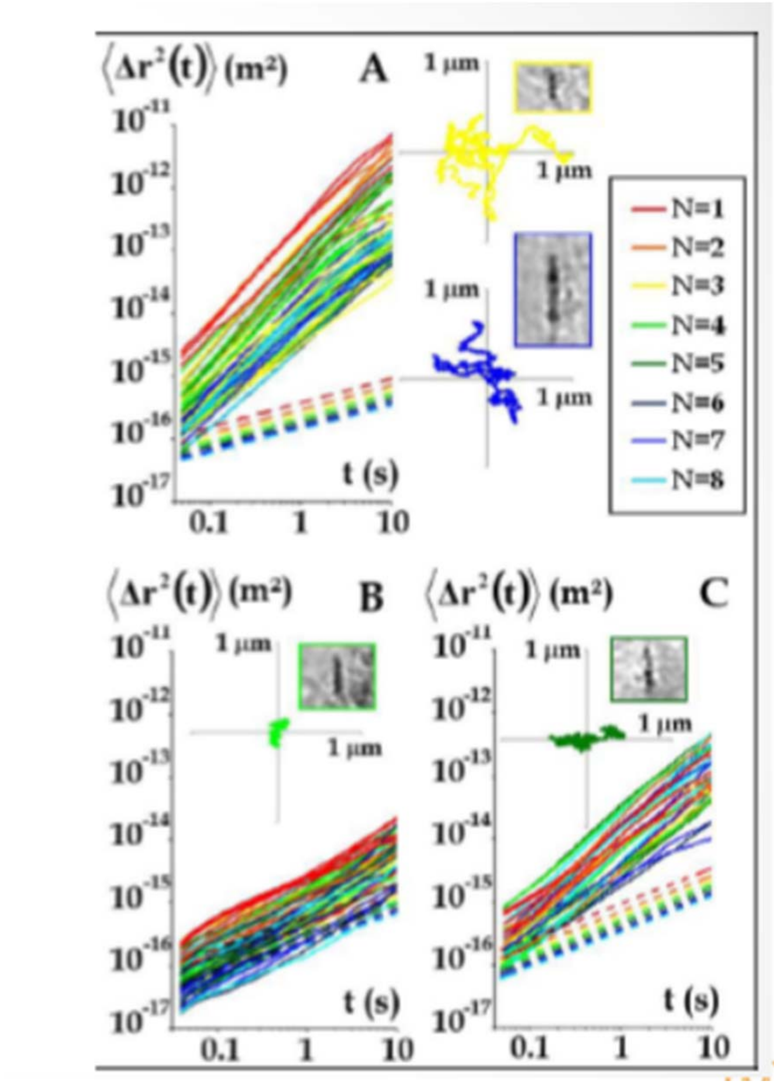
$$\Delta G = -30.5\ kJ/mol$$

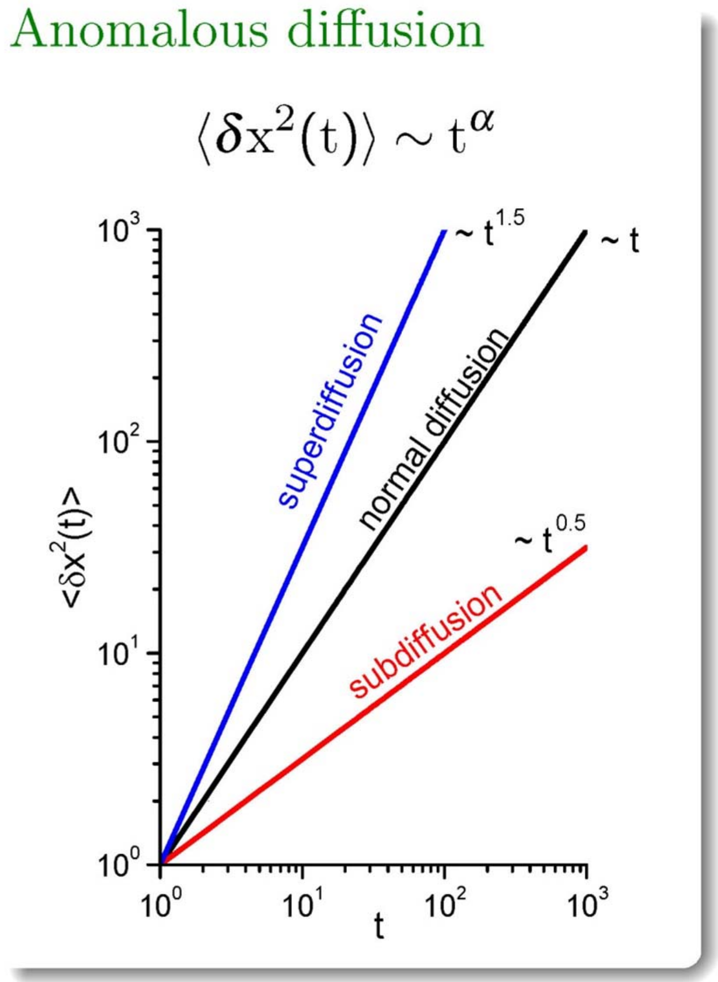
Жива клітина





Жива клітина





Дякую за увагу