

روش مونت‌کارلو برای حل معادلات بکر- دورین با متوسط مونومر ثابت

علیرضا سهیلی^{۱*}، حسین حسنی^{۲**}

گروه ریاضی کاربردی، دانشگاه فردوسی مشهد

گروه ریاضی، دانشگاه سیستان و بلوچستان

تاریخ پذیرش: ۸۶/۱/۲۲ تاریخ دریافت: ۸۹/۶/۱۷

چکیده: فرآیند بروخورد میان ذرات، موضوعی است که در بسیاری از زمینه‌ها مانند فیزیک، نجوم، فیزیک پلیمر، فیزیک اتمسفری مورد مطالعه قرار گرفته است. این فرآیند توسط یک سیستم از معادلات دیفرانسیلی با بعد نامتناهی (در حالت گسسته) و یا یک معادله دیفرانسیلی-انتگرالی با مشتقات نسبی غیرخطی (در حالت پیوسته) مدل‌سازی می‌شود. همچنین مدل گسسته را نیز می‌توان با یک معادله دیفرانسیل با مشتقات نسبی تقریب نمود. در این مقاله با استفاده از روش مونت‌کارلو برای حل معادلات دیفرانسیل سهموی، تقریبی برای جواب به فرم پیوسته این معادلات را به دست خواهیم آورد.

واژه‌های کلیدی: معادله سهموی، روش مونت‌کارلو، معادله دیفرانسیل تصادفی، معادله بکر- دورین

کد موضوع بندی ریاضی: ۶۵C۰۵، ۸۲C۸۰

^۱ آدرس الکترونیکی نویسنده مسئول مقاله: علیرضا سهیلی soheili@um.ac.ir

۱- مقدمه

مدل معادلات بکر-دورین مربوط به شکل‌گیری انبوھی از ذرات با حجم و نوع یکسان می‌باشد که در قالب‌هایی جمع شده‌اند، مانند ذرات اتم در قالب مولکول. در طول زمان قالب‌ها با یکدیگر برخورد نموده و طبق نرخ‌های مشخصی، یک ذره (که مونومر گفته می‌شود) می‌تواند از یک قالب جدا و یا در قالب دیگری جذب شود. اگر $c_l(t)$ متوسط تعداد قالب‌های شامل l ذره در واحد حجم در زمان t بوده و a_l و b_l به ترتیب نرخ ادغام و تلاشی ذرات در این قالب‌ها باشند، آن‌گاه تغییرات $c_l(t)$ در یک دستگاه معادلات دیفرانسیل معمولی با بعد نامتناهی، به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\frac{dc_l(t)}{dt} = J_{l-1}(t) - J_l(t); \quad l = 2, 3, \dots \quad (1)$$

$$J_l(t) = a_l c_1(t) c_l(t) - b_{l+1} c_{l+1}(t). \quad (2)$$

برای $c_1(t)$ در این مدل دو حالت بررسی شده است (بال و همکاران، ۱۹۸۶ و دانکن و سهیلی، ۲۰۰۱):

$$\frac{dc_1(t)}{dt} = 0 \quad \text{ثابت} \equiv c_1 \quad \text{یا} \quad \text{حالت اول:}$$

$$\rho(t) = \sum_{l=1}^{\infty} l c_l(t) \equiv \text{ثابت} \quad \text{حالت دوم:}$$

که در این مقاله، ما فقط حالت اول را برای این مدل بررسی می‌کنیم.

در این مدل $J_l(t)$ نرخ تبدیل یک قالب با l ذره به قالبی با $l+1$ ذره را نشان می‌دهد؛ یعنی با نرخ a_l دو قالب c_1 و c_l در هم ادغام و قالبی با $l+1$ ذره تشکیل می‌دهند و برخی قالب‌های $l+1$ ذره‌ای نیز با نرخ b_{l+1} تلاشی پیدا کرده و به قالب‌های c_1 و c_{l+1} تجزیه می‌شود که تفاضل آن‌ها $J_l(t)$ می‌باشد.

در بخش دوم این مقاله تقریب معادلات بکر-دورین را با استفاده از یک سیستم متناهی از معادلات بیان می‌کنیم، در بخش سوم تقریب پیوسته برای این معادلات، در بخش چهارم روش مونت کارلو، در بخش پنجم روش مونت کارلو برای حل معادلات دیفرانسیل سهموی و در بخش آخر نتایج شبیه‌سازی مونت کارلو برای معادلات بکر-دورین را بیان می‌کنیم.

۲- تقریب به وسیله یک سیستم متناهی از معادلات

چون سیستم بکر- دورین توسط یک سیستم نامتناهی از معادلات دیفرانسیل مدل‌سازی شده است، لذا برای تقریب عددی جواب سیستم بايد مدل را با یک سیستم متناهی به اندازه کافی بزرگ برش دهیم. فرض کنید n یک عدد ثابت بزرگ باشد در این صورت سیستم متناهی برش یافته به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$\frac{dc_l^{(n)}(t)}{dt} = J_{l-1}^{(n)}(t) - J_l^{(n)}(t), \quad l = 2, 3, \dots \quad (3)$$

$$J_l^{(n)}(t) = a_l c_1^{(n)}(t) c_l^{(n)}(t) - b_{l+1} c_{l+1}^{(n)}(t). \quad l = 1, 2, \dots, n \quad (4)$$

$$J_l^{(n)}(t) = 0 \quad l = n + 1, n + 2, \dots \quad (5)$$

$$\frac{dc_1^{(n)}(t)}{dt} = 0 \quad (6)$$

رابطه‌ی (5) نشان می‌دهد که در فرآیند بروخته، اجازه‌ی تشکیل قالب‌هایی با حجمی بزرگ‌تر یا مساوی $n + 1$ ذره داده نمی‌شود (برای جزئیات بیشتری از نظریه ریاضی حالت‌های نامتناهی و متناهی مسئله به پنرز، ۱۹۸۹ مراجعه شود). بال و همکاران (۱۹۸۶) نشان داده‌اند هنگامی که $\infty \rightarrow n$ ، جواب مدل برش داده شده به جواب مدل نامتناهی همگرا است. همچنین دانکن و سهیلی (۲۰۰۱) چگونگی انتخاب نرخ ادغام و تلاشی قالب‌ها را بیان کرده‌اند. یک انتخاب مناسب برای این مقادیر ثابت که در شرایط مسئله صدق می‌کنند عبارت است از:

$$a_l \equiv 1, \quad b_{l+1} \equiv \exp(l^{\frac{2}{3}} - (l-1)^{\frac{2}{3}}). \quad l \geq 1 \quad (7)$$

خاصیت اساسی مورد علاقه در مطالعه‌های اخیر معادلات بکر- دورین وجود یا عدم وجود جواب‌های تعادلی و رفتار جواب پس از مدت زمان طولانی است که این می‌تواند در بال و همکاران (۱۹۸۶) و پنرز (۱۹۸۹) دیده شود. اگر یک جواب تعادلی وجود داشته باشد آن‌گاه برای هر دو مسئله با حالت‌های نامتناهی و برش داده شده، متوسط قالب‌های l ذره‌ای در حالت تعادل، مستقل از زمان بوده و به صورت $Q_l = \tilde{c}_1 \tilde{c}_l$ می‌باشد. در اینجا Q به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$Q_1 = 1$$

$$Q_l = \frac{a_1 a_2 \cdots a_{l-1}}{b_1 b_2 \cdots b_l}, \quad (l = 2, 3, \dots). \quad (8)$$

حال با توجه به (۸) نتیجه می‌شود که $Q_{l-1} = b_l Q_l$; سپس با جایگذاری (۷) در (۸) داریم، $Q_l = \exp(-(l-1)^{\frac{2}{3}})$. ثابت می‌شود که سیستم متناهی بکر- دورین برای هر $t \geq 0$ دارای جواب منحصر بفرد با $r = 1, 2, \dots, n$, $c_r(t) \geq 0$ می‌باشد (لم ۲.۱ بال و همکاران، ۱۹۸۶) و لذا خاصیت ساده و فیزیکی سیستم برشی که در اینجا در نظر گرفته‌ایم نامنفی بودن $c_l(t)$ می‌باشد (بال و همکاران، ۱۹۸۶).

۳- تقریب پیوسته برای معادلات بکر- دورین

در این بخش نشان داده می‌شود معادلات بکر- دورین که یک سیستم از معادلات دیفرانسیل معمولی بودند را می‌توان به صورت یک معادله دیفرانسیل با مشتقات جزئی (PDE) بیان کرد (سهیلی، ۲۰۰۴). حال به محاسبه J_l به طور پیوسته می‌پردازیم و لذا فرض می‌کنیم که l و t دو متغیر مستقل پیوسته باشند:

$$\begin{aligned} J_l &= a_l c_l c_1 - b_l + c_{l+1}, & b_l &= \frac{a_{l-1} Q_{l-1}}{Q_l} \\ J_l &= a_l c_l c_1 - \frac{a_l Q_l}{Q_{l+1}} c_{l+1}, & \frac{J_l}{a_l Q_l c_1^{l+1}} &= \frac{c_l}{Q_l c_1^l} - \frac{c_{l+1}}{Q_{l+1} c_1^{l+1}} \\ J_l &\approx -a_l Q_l c_1^{l+1} \frac{\partial}{\partial l} \left(\frac{c_l}{Q_l c_1^l} \right) \end{aligned} \quad (9)$$

در این حالت همهٔ پارامترهای سیستم تابع‌هایی از متغیر غیرمنفی پیوستهٔ l هستند، به عبارت دیگر:

$$J(l, t) = -a(l) Q(l) c(1, t)^{l+1} \frac{\partial}{\partial l} \left(\frac{c(l, t)}{Q(l) c(1, t)^l} \right)$$

و با استفاده از (۱) نیز داریم:

$$\frac{\partial c(l, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(l, t)}{\partial l} \quad (10)$$

به سادگی نتایج مشابه را برای سیستم متناهی برش یافته نیز می‌توان به دست آورد و لذا معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی زیر را به عنوان تقریبی برای معادلات بکر- دورین برش یافته به کار می‌بریم:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(l,t)}{\partial t} &= -\frac{\partial J(l,t)}{\partial l} && 1 < l < n \\ J(l,t) &= -a(l)Q(l)c(l,t)^{l+1} \frac{\partial}{\partial l} \left(\frac{c(l,t)}{Q(l)c(l,t)^l} \right) \end{aligned} \quad (11)$$

۴- روش مونت کارلو

ایده‌ی اصلی روش مونت کارلو محاسبه‌ی تخمینی برای یک مقدار مشخص با استفاده از محاسبه‌ی مقادیر امید ریاضی آن برای تعداد زیادی از مسیرهای مستقل شبیه‌سازی شده می‌باشد. پایه‌ی این روش روی قانون اعداد بزرگ است که بیان می‌کند میانگین روى تعداد به اندازه‌ی کافی بزرگ از نمونه‌ها، تقریباً برابر میانگین آن‌هاست. مقدار

$$\frac{1}{M} \sum_{r=1}^M Y(w_r) \quad (12)$$

را در نظر بگیرید. که (w_r) مسیر نمونه‌ی متغیر تصادفی Y است. قضیه‌ی حد مرکزی می‌گوید که (12) تقریباً دارای توزیع نرمال با میانگین μ و واریانس $\frac{\sigma^2}{M}$ است که $M \rightarrow \infty$ داریم:

$$\frac{1}{M} \sum_{r=1}^M Y(w_r) \rightarrow \mu = E(Y)$$

بدین ترتیب (12) می‌تواند برای تقریب $E(Y)$ به کار بردشود. این روش برای تقریب مقادیر امید ریاضی، روش مونت کارلو نامیده می‌شود. به عبارت ساده‌تر رابطه‌ی (12)، Y را روی M مسیر نمونه محاسبه می‌کند و میانگین نمونه را به عنوان تقریبی برای مقادیر امید ریاضی Y بیان می‌کند. در شبیه‌سازی کامپیوترا امکان ندارد که شبیه‌سازی را به تعداد نامتناهی انجام دهیم بنابراین M را که عدد خیلی بزرگی است انتخاب کرده و شبیه‌سازی را با این عدد انتخابی انجام می‌دهیم.

۵- روش مونت کارلو برای حل معادلات دیفرانسیل سهمی

از آن جایی که معادلات بکر-دورین به صورت معادلات دیفرانسیل سهمی قابل بیان می‌باشد؛ در این بخش روش مونت کارلو برای تقریب معادلات دیفرانسیل سهمی مورد مطالعه قرار می‌گیرد. در این روش یک سیستم از معادلات دیفرانسیل تصادفی را بر طبق اپراتور سهمی

- نوشته و جواب معادله‌ی سهموی با استفاده از این سیستم بیان می‌شود. مسئله‌ی مقدار اولیه - مرزی زیر را در نظر گیرید (گوسو، ۲۰۰۴):

$$\begin{cases} Lu + f(t, x, p) = 0 & t \in (0, T), x \in G \\ u(T, x, p) = \varphi(x, p) & x \in G \\ u(t, x, p) = 0 & x \in \partial G \end{cases} \quad (13)$$

که در آن $L \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^d a_i(t, x, p) \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d b_{i,j}(t, x, p) \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}$ یک عملگر سهموی است. همچنین $B(t, x, p) = [b_{ij}(t, x, p)]$ یک ماتریس مثبت معین متقارن است و $G \subset \mathbb{R}^d$ دامنه‌ی کراندار شده با مرز منظم ∂G است.

تعریف ۱. فرآیند تصادفی $\{W(t), t \geq 0\}$ یک حرکت براونی استاندارد (فرآیند وینر) است اگر

$$P(W(\cdot) = 0) = 1 \quad (\text{الف})$$

ب) برای $t_0 < t_1 < \dots < t_n$ نموهای $W(t_n) - W(t_{n-1}), \dots, W(t_1) - W(t_0)$ مستقل باشند (به عبارتی $W(t)$ دارای نموهای مستقل است).

ج) $(W(s) - W(t))$ دارای توزیع نرمال با میانگین صفر و واریانس $s - t$ باشد (بوراگ و بوراگ، ۲۰۰۲).

تعریف ۲. هرگاه $\{W(t), t \geq 0\}$ یک فرآیند وینر باشد، آن‌گاه فرآیند تصادفی $\{z(t), t \geq 0\}$ را نوفه سفید نامند اگر

$$\int_a^b g(t)z(t)dt = g(b)W(b) - g(a)W(a) - \int_a^b w(t)g'(t)dz(t)$$

که در آن $g(t)$ تابع دلخواه و مشتق‌پذیر در $[a, b]$ است (بوراگ و بوراگ، ۲۰۰۱). یعنی مشتق یک فرآیند وینر، یک فرآیند نوفه سفید می‌باشد که به صورت زیر قابل بیان است:

$$\int_0^t z(u)du = W(t) \quad \text{یا} \quad z(t) = \frac{dW(t)}{dt}$$

تجزیه و تحلیل سیستم‌های دینامیکی تصادفی اغلب منجر به معادلاتی به فرم ذیل می‌شود:

$$\frac{dX_t}{dt} = a(X_t, t) + b(X_t, t)z_t, \quad X_{t_0} = X_0. \quad (14)$$

که در آن z_t را نوفه سفید گویند. در اینجا a و X_t توابع برداری و $b(X, t) = b_{ij}$ یک ماتریس با بعد $d \times m$ می‌باشد. طبعاً z_t هم m بعدی می‌باشد. به a ضریب راندگی (یا رانش) و به b ضریب انتشار گویند. معادله (۱۴) را به صورت زیر می‌توان نوشت:

$$dX_t = a(X_t, t)dt + b(X_t, t)dW_t \quad (15)$$

که یک معادله دیفرانسیل تصادفی است.

تعريف ۳. فرض کنید $U \subset \mathbb{R}^n$ یک مجموعه باز باشد، آن‌گاه اولین زمان خروج از U را با τ_U نشان داده که به صورت $\tau_U = \inf\{t > 0 : X_t \notin U\}$ تعریف می‌شود:

حال فرض کنید مسئله (۱۳) همه شرایط لازم برای وجود و یکتاپی جواب را داشته باشد، فرم انتگرالی معادله دیفرانسیل تصادفی که بر طبق اپراتور سهمی می‌تواند نوشه شود به صورت زیر است (گوسو، ۲۰۰۴):

$$y(s) = x + \int_t^s a(v, y(v))dv + \int_t^s \sigma(v, y(v))dW(v), \quad t \in [0, T], y(t) = x \quad (16)$$

که در اینجا $\sigma(t, y)$ ماتریسی است که در معادله $B(t, y) = \sigma(t, y)\sigma(t, y)^T$ صدق می‌کند. با فرض شرایط لازم برای وجود و یکتاپی جواب (۱۶) و با شبیه‌سازی مسیرهای آن، یک تخمین مونت‌کارلو برای جواب مسئله (۱۳) به صورت زیراست (گوسو، ۲۰۰۴):

$$u(t, x) = E_{t,x}(\varphi(y(T)))\chi(\tau > T) + \int_t^{\tau \wedge T} f(v, y(v))dv \quad (17)$$

که τ اولین زمان خروج y از A تابع مشخصه A و نماد $E_{t,x}$ امید شرطی روی شرط $y(t) = x$ است را بیان می‌کند (گوسو، ۲۰۰۴).

۶- نتایج شبیه‌سازی مونت‌کارلو برای معادلات بکر- دورین

در مسئله مقدار اولیه- مرزی (۱۳) فرض شده است که $u(t, x, p)$ معلوم باشد، در مدل بکر- دورین فرض می‌کنیم که $c(l, t) = c(l, T)e^{-(l-t)} = e^{-(l-T)}c(0, T)^l$ برابر وضعیت تعادلی باشد. یعنی داریم:

$$J(l,t) = a(l)Q(l)c(1,t)^{l+1} \frac{\partial}{\partial l} \left(\frac{c(l)}{Q(l)c(1,t)^l} \right)$$

حال اگر از J نسبت به l مشتق گرفته و در (۱۰) قرار دهیم، معادله‌ای که به دست می‌آید به صورت زیر خواهد بود:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \left[\frac{(9 \log(c(1,t))(l-1)^{\frac{1}{3}} - 1)}{9(l-1)^{\frac{1}{3}}} \right] c(1,t) \frac{\partial c}{\partial l} + c(1,t) \frac{\partial^2 c}{\partial l^2} - \frac{2}{9} \frac{c(1,t)}{(l-1)^{\frac{1}{3}}} c(l,t) = 0 \quad (18)$$

پس برای تقریب با روش مونت کارلو معادله‌ی (۱۸) را با شرایط زیر در نظر می‌گیریم (دانکن و سهیلی، ۲۰۰۱):

$$\begin{cases} c(l,T) = e^{-(l-1)^{\frac{1}{3}}} c(1,T)^l \\ c(l,0) = 0, & l = 2, 3, \dots \\ c(1,0) = \text{Constant} \end{cases} \quad (19)$$

سیستم معادله دیفرانسیل تصادفی که برای (۱۸) با استفاده از (۱۶) می‌توانیم به دست بیاوریم به صورت زیر خواهد بود:

$$y(s) = l + \int_t^s (-\log(c(1,v))) + \frac{1}{3}(l-1)^{-\frac{2}{3}} c(1,v) dv + \int_t^s \sqrt{2c(1,v)} dW(v)$$

بنابراین تخمین جواب با استفاده از (۱۷) برای معادله‌ی فوق برابر خواهد بود با:

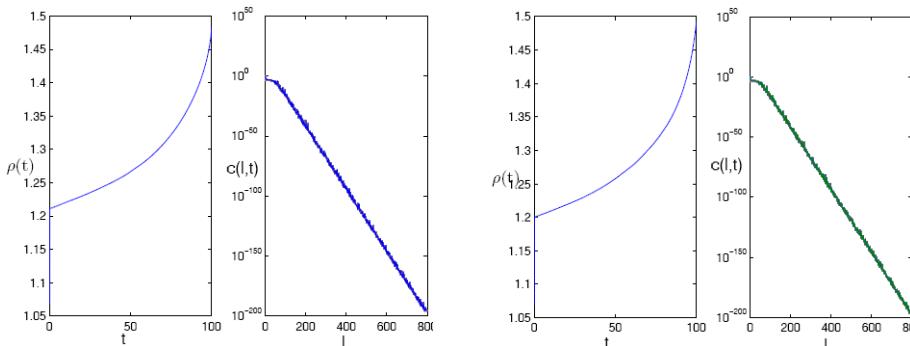
$$c(l,T) = E[e^{-(l-1)^{\frac{1}{3}}} c(1,T)^l \chi(\tau > T) + \int_t^{\tau \wedge T} \frac{-2}{9} \frac{c(1,v)}{(l-1)^{\frac{1}{3}}} c(l,v) dv]$$

در این بخش جواب $c(l,t)$ را برای $l = 2, 3, \dots$ و مقادیر مختلف t روی بازه‌ی $(0, T)$ به دست می‌آوریم.

۷- نتایج عددی

معادله (۱۸) با شرایط اولیه‌ی (۱۹) را در نظر بگیرید. در اینجا با به کار بردن فرمول مونت کارلو برای $c(l,t)$ ($l = 2, 3, \dots$) نتایج را برای دو حالت خواهیم داشت. در این دو حالت فرض می‌کنیم که $c(l,t) = 1/069$ باشد:

حالت اول) فرض کنید $t_0 = 0$ ، $T = 100$ و $M = 500$ ، $N = 2500$ باشد. $n = 2000$ که در اینجا N تعداد افزایشات بازه‌ی $[t_0, T]$ و M تعداد تکرارهای مونت‌کارلو است. نتایج مربوط به این حالت در شکل (۱) آمده است.

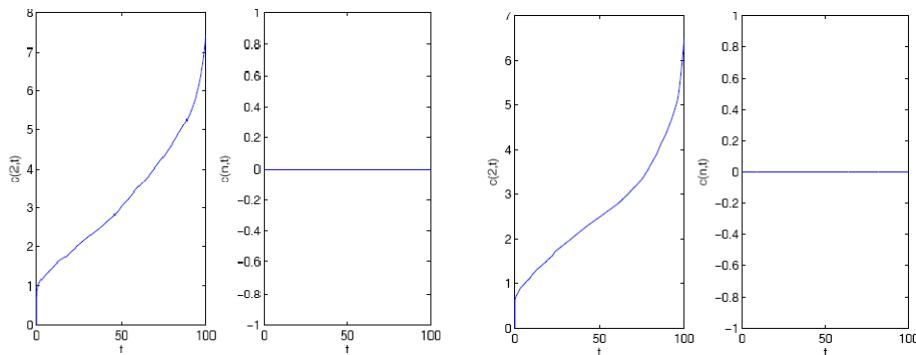


شکل ۲: شکل سمت راست $c(l,t)$ (متوسط تعداد قالب‌ها) و شکل سمت چپ $\rho(t)$ (چگالی) را برای معادله بکر-دورین تعریف شده در (۱۸) با $N=2000$ نشان می‌دهد.

حالت دوم) فرض می‌کنیم $t_0 = 0$ ، $T = 100$ و $M = 700$ ، $N = 2000$ و $n = 2000$ باشد و نتایج مربوط به این حالت را نیز در شکل (۲) می‌بینیم.

در نمودارهای سمت راست شکل‌های (۱) و (۲) تغییرات c در طول زمان بررسی می‌شود که این تغییرات نزولی می‌باشد. این موضوع را می‌توان نتیجه‌ی انتخاب نرخ ادغام و تلاشی دانست که نرخ ادغام $a_l = 1$ می‌باشد در حالی که $b_{l+1} \equiv \exp(l^{2/3} - (l-1)^{2/3})$ یک تابع نزولی بر حسب l می‌باشد که $\lim_{l \rightarrow \infty} b_l = 1$. با توجه به شرایط اولیه‌ی سیستم که در آن فقط مونومر وجود دارد، ابتدا قالب‌هایی با ذرات بزرگ‌تر تشکیل می‌گردد و لذا به سرعت از تعداد مونومرهای تا حد صفر کاهش می‌یابد و قالب‌هایی با حجم بزرگ‌تر تشکیل می‌گردد. موضوع دیگری که باید در نظر گرفت تعریف J در بخش قبل می‌باشد که قرینه‌ی تعریف اصلی است. ولی در سیستم واقعی مدل (۱) و (۰) پس از مدت زمان طولانی که b_l به یک نزدیک‌تر می‌شود آن‌گاه تقریباً نرخ ادغام و تلاشی قالب‌ها یکسان می‌شود و سیستم به وضعیتی متعادل و مستقل از زمان میل می‌کند.

نتایج شبیه‌سازی به روش مونت کارلو برای دو مقدار متفاوت N آورده شده است. چگالی سیستم در هر دو حالت رفتار یکسانی دارد که به طور مسلم منحنی ρ به شرایط اولیه سیستم وابسته است. عموماً سیستم در لحظه‌ی $t = 0$ با مقدار ثابتی مونومر شروع می‌شود (که در این تجربه عددی متوسط مقدار مونومرها در واحد حجم مشابه بال و همکاران، ۱۹۸۶ و دان肯 و سهیلی، ۲۰۰۱ برابر $1/0.69$ در نظر گرفته شده است). در مدل مورد بحث این مقاله، متوسط مونومرها در طول زمان ثابت فرض شده است و لذا در طول زمان افزایش چگالی سیستم (ρ) را در نمودارهای سمت چپ شکل‌های (۱) و (۲) مشاهده می‌کنیم. مقدار $(l > 1)c(l, t)$ مشابه ρ در طول زمان یکتابع افزایشی می‌باشد که این موضوع به طور مثال در شکل‌های (۳) و (۴) برای تغییرات $c(2, t)$ رسم گردیده است. از طرفی رفتار تغییرات $(l >> 1)c(l, t)$ بستگی به نوع انتخاب نرخ ادغام و تلاشی یعنی a_l و b_l دارد.



شکل ۴: شکل سمت راست $c(n, t)$ و شکل سمت چپ $c(2, t)$ را برای معادله بکر-دورین تعریف شده در (۱۸) با $N=2500$ نشان می‌دهد.

شکل ۳: شکل سمت راست $c(n, t)$ و شکل سمت چپ $c(2, t)$ را برای معادله بکر-دورین تعریف شده در (۱۸) با $N=700$ نشان می‌دهد.

در این مقاله برای مقادیر متناهی l داریم، $a_l > b_l$ ، یعنی در سیستم نرخ تلاشی بیشتر از نرخ ادغام بوده و لذا هرچند چگالی سیستم در طول زمان افزایشی است (این موضوع را می‌توان به تزریق مونومر بیشتر در طول زمان به سیستم تعبیر نمود)، ولی قالب‌هایی با تعداد $l >> 1$ ذره در سیستم شکل نمی‌گیرد. به طور نمونه نمودارهای سمت راست در شکل‌های (۳) و (۴) نشان می‌دهند که تا زمان نهایی $T = 100$ نیز قالبی با $n = l$ - ذره تشکیل نگردیده است و مقدار شرایط اولیه صفر ثابت مانده است. به نظر می‌رسد اگر سیستم برای مدت زمان خیلی طولانی شبیه‌سازی شود آن‌گاه در طول زمان برای این که مقدار $c(1, t)$ مستقل از زمان باشد باید به سیستم، مونومر بیشتری تزریق گردد.

در حالتی که سیستم به حالت اشباع برسد به مرور قالب‌هایی با تعداد مونومرهای زیاد تشکیل می‌شود که معمولاً در این حالت نرخ تلاشی به نرخ ادغام نزدیک شده ($\lim_{l \rightarrow \infty} b_l = a_l = 1$).

بنابراین سیستم به وضعیت تعادل می‌نماید که در حالت ایدهآل تعادل، دیگر نیازی به تزریق مونومر به سیستم نمی‌باشد. در نتیجه چگالی سیستم $\rho(t)$ نیز در این حالت مقداری

$$\text{ثابت و مستقل از زمان دارد، که همان } \sum_{l=1}^{\infty} l \tilde{c}_l = \tilde{\rho} \text{ خواهد بود.}$$

مراجع

- Ball, J.M., Carr, J. and Penrose, O. (1986), The Becker-Doring equations, Basic properties and asymptotic behaviour of solutions, *Comm. Math. Phys.*, 104, 657-692.
- Burrage, K. and Burrage, P.M. (2002), Numerical method for stochastic differential equation with application, Queensland.
- Duncan, D.B. and Soheili, A.R. (2001), Approximating the Becker-Doring cluster equations, *Appl. Numer. Math.*, 37, 1-29.
- Gusev, S.A. (2004), Monte Carlo estimates of the solution of a parabolic equation and its derivatives made by solving stochastic differential equation, *Communic. in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 9, 177-185.
- Penrose, O. (1989), Metastable states for the Becker-Doring cluster equations, *Comm. Math. Phys.*, 124, 515-541.
- Soheili, A.R. (2004), Continuum model of two-component Becker-Doring equations, *IJMMS*, 49, 2641-2648.

Monte Carlo Method for Solving Becker-Doring Equations with Constant Monomers

Ali Reza Soheili¹ and Hussain Hassani²

¹ Department of Applied Mathematics, Ferdowsi University of Mashhad,
Mashhad, Iran

² Department of Mathematics, University of Sistan and Baluchestan,
Zahedan, Iran

Abstract

Stochastic differential equations (SDE) play a relevant role in many application areas such as collision, population and polymer dynamics, genetic regulation, investment finance and biology. The procedure of collision among particles was modeled by an infinite dimensional differential system (in the discrete case) and a nonlinear partial integro-differential equation (in the continuous case). The discrete case may be approximated with a parabolic partial differential equation. In this paper, using the Monte-Carlo method, we obtain an approximation for solving the parabolic differential equation in the continuous form.

Keywords: Parabolic Equation, Monte Carlo Method, Stochastic Differential Equation, Becker-Doring Equation.

Mathematics Subject Classification (2000): 82C800, 65C05