

Научная статья

УДК 004.94

DOI: 10.18101/2304-5728-2023-3-99-111

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЗАХВАТА ДИФФУНДИРУЮЩИХ ЧАСТИЦ НА ЛОВУШКИ

© Архинчеев Валерий Ефимович

доктор физико-математических наук,
профессор кафедры общей и теоретической физики,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
varkhin@mail.ru

© Хабитуев Баир Викторович

старший преподаватель кафедры
информационных систем и методов искусственного интеллекта,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
bairkhabituev@bsu.ru

© Дерюгин Даниил Федорович

старший преподаватель кафедры
информационных систем и методов искусственного интеллекта,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
dandwor@gmail.com

© Мальцев Станислав Петрович

старший преподаватель кафедры
информационных систем и методов искусственного интеллекта,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
staelth94@gmail.com

© Цыбиков Анатолий Сергеевич

кандидат педагогических наук, заведующий кафедрой
информационных систем и методов искусственного интеллекта,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
cas313@rambler.ru

© Дониленко Михаил Александрович

преподаватель кафедры
информационных систем и методов искусственного интеллекта,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
donilenco@ya.ru

Аннотация. Процесс диффузии частиц в случайных средах изучается во многих работах. Несмотря на это, остаются не до конца изученными такие вопросы, как изменение характера диффузионных процессов в случайных средах, возможности фазовых переходов в электрических полях, а также асимптотическое поведение вероятности выживания диффундирующих частиц при захвате на ловушки.

В связи с этим авторами проведена серия численных экспериментов для одномерного пространства (в виде числовой прямой). Авторами описаны и реализованы алгоритмы, моделирующие диффузию частиц для нескольких случаев: фиксированное и случайное размещение поглощающих ловушек. Для эмуляции «случайности» перемещения частиц использованы алгоритмы псевдослучайной генерации. В работе описаны алгоритмы, методика проведения экспериментов и результаты экспериментов.

Полученные результаты в целом подтверждают теоретические выкладки, при этом были обнаружены новые закономерности захвата ловушек.

Ключевые слова: диффузия частиц, случайные процессы, численное моделирование.

Для цитирования

Численное моделирование процессов захвата диффундирующих частиц на ловушки / В. Е. Архинчев, Б. В. Хабитуев, Д. Ф. Дерюгин [и др.] // Вестник Бурятского государственного университета. Математика, информатика. 2023. № 3. С. 99–111.

Введение

Проблема диффузии частиц в средах с поглощающими ловушками изучалась во многих работах [1-3]. Интерес обусловлен как различными приложениями, так и аналогией с проблемой плотности состояний в неупорядоченных средах [4], а также ожидаемыми новыми особенностями в транспорте частиц [5].

На малых временах $t \ll \frac{1}{Dc^2}$, здесь характерное время соответствует времени диффузии на среднее расстояние между ловушками $\frac{1}{Dc^2}$ (где D — коэффициент диффузии, c — концентрация ловушек в одномерном случае). В этом случае вероятность выживания частиц описывается приближением среднего поля и равно:

$$W(t; c) \sim c \exp(-Dtc^2). \quad (1)$$

Однако в работе [6] подробно исследовался случай захвата на поглощающие ловушки, случайно распределенных в пространстве, диффундирующих частиц. И было показано, что на больших временах $t \gg \frac{1}{Dc^2}$ вероятность определяется флуктуациями плотности поглощающих ловушек и носит экспоненциальный характер:

$$W(t; c) \sim \left(\frac{Dtc^2}{3\pi} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{3(\pi)^2 (Dtc^2)^{1/2}}{2} \right). \quad (2)$$

Другими словами, что вероятность выживания частиц определяется существованием достаточно больших областей, свободных от ловушек.

В настоящей работе выполнено численное моделирование процессов захвата диффундирующих частиц на ловушки и сделано сравнение с ранее развитыми теоретическими представлениями [7, 8]. Статья построена следующим образом.

Во первом пункте рассмотрены алгоритмы и методы численного моделирования процессов захвата на ловушки. Во втором пункте изложены основные результаты. В Заключении дано краткое обсуждение полученных результатов и проведено сопоставление с теоретическими результатами.

1 Диффузия в средах с ловушками.

Алгоритмы и методы численного моделирования

Для сопоставления ранее развитых теоретических представлений нами было выполнено численное моделирование процессов захвата диффундирующих частиц на ловушки. В настоящем параграфе опишем кратко алгоритм моделирования и постановку численных экспериментов.

Частицы диффундируют по одномерной прямой, вероятность смещения влево и вправо равны и задается случайным образом генератором случайных чисел. В качестве начальной точки блуждания выбирается начало координат (в дальнейшем начальная точка диффузии будет выбираться случайно и также будет проводиться усреднение по начальным точкам). Итерацией назовём конфигурацию, в которой исследовалось перемещение всех частиц в течение заданного числа шагов N . В первом контрольном эксперименте был проверен очевидный факт: при достаточно большом числе итераций ($N=100000$) частицы распределяются согласно нормальному распределению.

В последующих экспериментах на числовой прямой были размещены ловушки. Ловушкой будем называть специальную точку на числовой оси, при попадании в которую частица «умирает», то есть ее координата больше не меняется.

Результатом численных экспериментов было вычисление количества выживших частиц для разного количества итераций (N), при этом для каждого N проводится усреднение по начальным расположениям диффундирующих частиц, так и по позициям ловушек.

Под численным экспериментом будем понимать проведение N итераций с заданными позициями ловушек.

Изначально были выбраны следующие параметры для серий экспериментов:

1. Начальное количество частиц: $M_0=100000$
2. Количество итераций: $N= 10000 - 1000000$
3. Шаг (изменение количества итераций): $dN = 1000$
4. Количество ловушек: $T=1001$

2 Результаты

Численные эксперименты проводились при помощи разработанных авторами программ. Программы реализованы на языке C++, для генерации псевдослучайных чисел использован алгоритм Вихрь Мерсенна.

Запуски программ проводились с использованием компилятора MS Visual Studio C++ 2022.

В эксперименте с ловушками на числовой прямой исследовались различные случаи.

2.1 Случай симметричного расположения ловушек относительно начала координат размещения ловушек, начальное расположение частиц в начале координат

При симметричном размещении ловушек, очевидно, что чем ближе будут размещены ловушки, тем выше вероятность попадания частицы в ловушку. На рисунке 1 представлены результаты численных экспериментов с симметрично размещенными ловушками, расположенными в точках с координатами $X=10, 100$. При этом очевидно, что количество выживших частиц достаточно сильно зависит от расположения ловушек

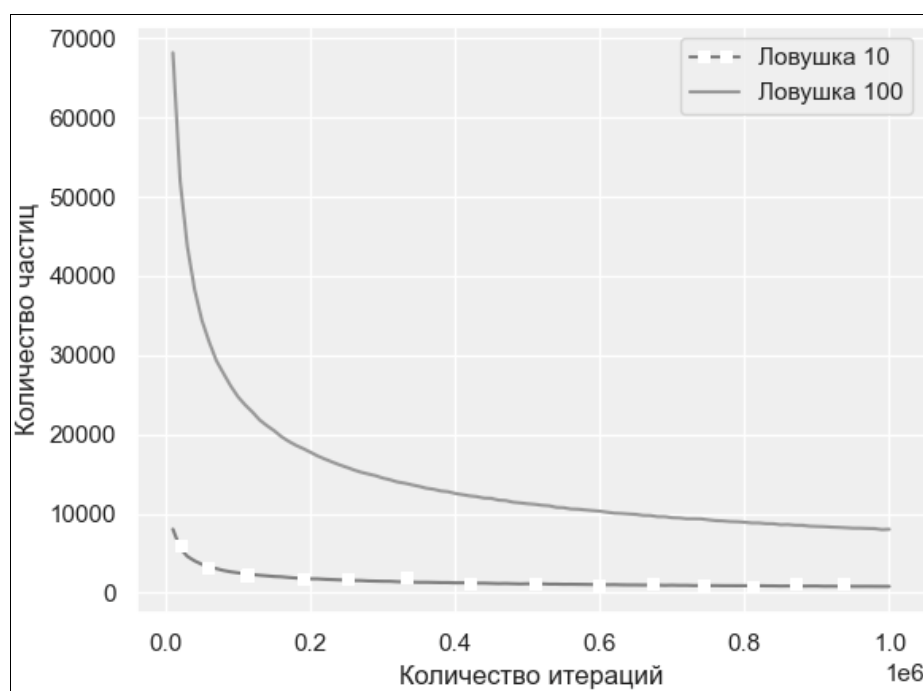


Рис. 1. Число выживших частиц

Горизонтальная ось на графике — количество итераций $N=10000-1000000$, по вертикальной оси у количество выживших частиц M .

Для сравнения характера изменения числа частиц от числа итераций было проведена нормировка данных по максимальному значению в каждой выборке. Графики нормированных данных приведены на рисунке 2.

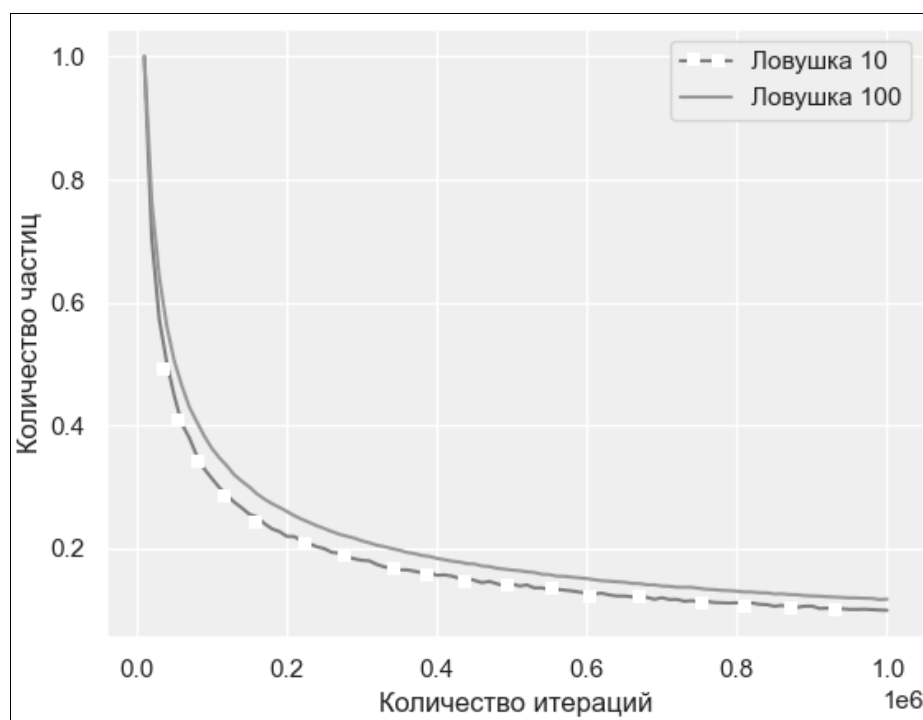


Рис. 2. Число выживших частиц (нормированный график)

Полученный график рис. 2 в приведенных координатах показывают одинаковую функциональную зависимость числа частиц M от количества итераций t .

2.2 Случай равномерного расположения ловушек относительно начала координат размещения ловушек, начальное расположение частиц случайное

На числовой прямой на отрезке $[-500000, 500000]$ размещаются T ловушек. На том же отрезке случайным образом размещаются M частиц, при этом начальная позиция частицы не совпадает с позицией ловушки. Далее движение частиц моделируется случайным образом, описанным выше. Будем вычислять число оставшихся частиц M для разного количества итераций (N), при этом для каждого N выполняется независимый расчет. Под численным экспериментом будем понимать проведение N итераций с заданными позициями ловушек.

Для экспериментов фиксировались следующие параметры:

1. Начальное количество частиц: $M = 100000$
2. Количество итераций: $N = 100000$
3. Шаг (изменение количества итераций): $dN = 1000$
4. Количество ловушек: $T=1001$

2.2.1 Равномерное распределение ловушек с шагом в 1000

Посев ловушек производится на одинаковом расстоянии (1000), называем такой посев равномерным распределением. Результаты эксперимента для равномерного распределения ловушек представлены на рисунке 3.

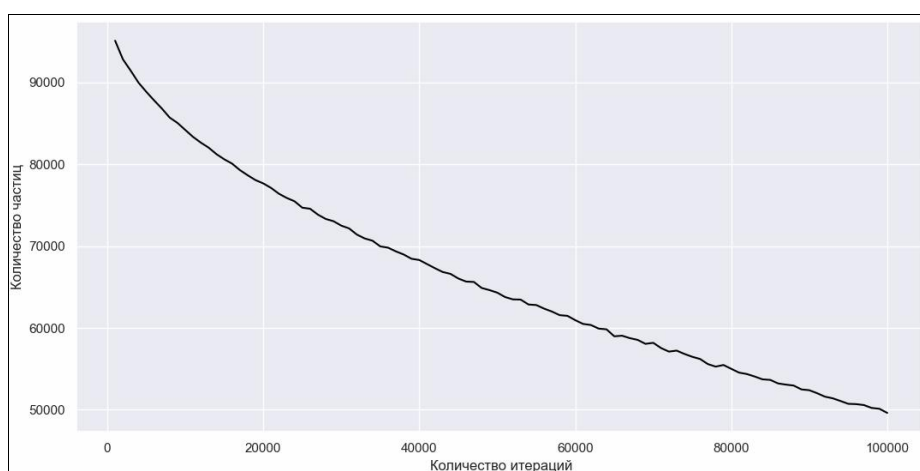


Рис. 3. Зависимость числа выживших частиц M от количества итераций N

При равномерном распределении ловушек с заданным шагом число выживших частиц уменьшается по экспоненциальному закону.

Учитывая большое число выживших частиц были произведены дополнительные эксперименты для большого числа итераций. Результаты представлены на рисунке 4.

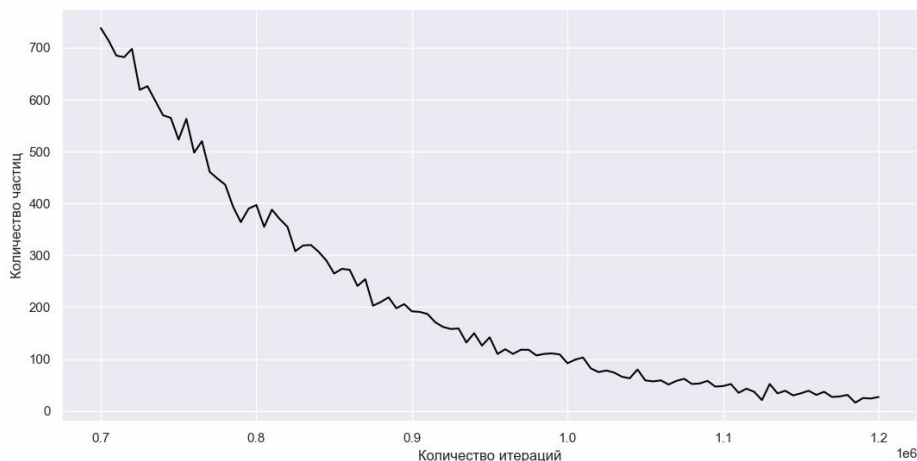


Рис. 4. Количество выживших частиц

На рисунке 4 приведены результаты экспериментов для N [700000,120000] с шагом 5000. В целом анализ результатов подтверждает теоретические выкладки — можно говорить, то зависимость числа выживших от числа итераций имеет экспоненциальный характер.

2.3 Случайное распределение ловушек

Посев ловушек производится случайным образом на отрезок $[-500000, 500000]$. В силу случайного распределения ловушек на числовой прямой образуются области с различной концентрацией ловушек. Для более полного описания случайного распределения ловушек были вычислены длины интервалов между ловушками. На рисунке 5 отображен график длин интервалов

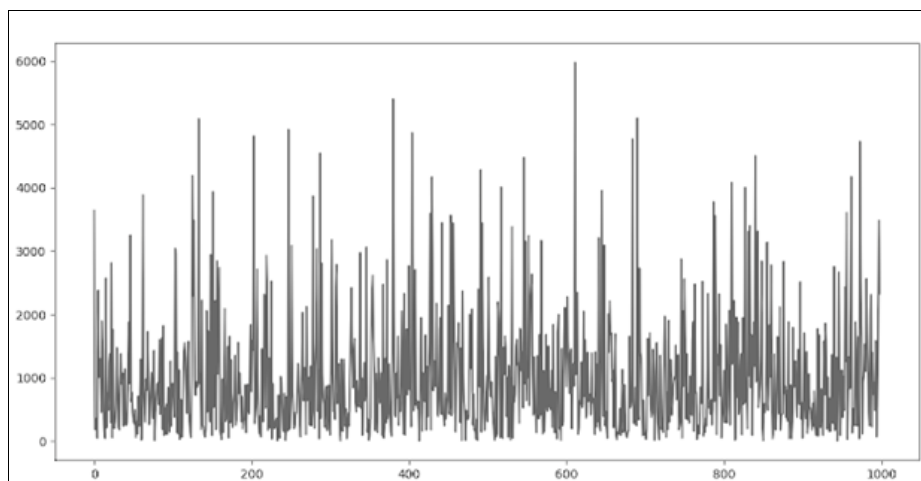


Рис. 5. Распределение длин интервалов между ловушками

Горизонтальная ось — номер ловушки (от 0 до 999), вертикальная ось - расстояние между ловушкой с номером i и $i+1$. Согласно полученным расчетам в исследуемом распределении выделяется несколько достаточно больших областей.

Ниже на рис. 6 приведён график длин интервалов, упорядоченных по возрастанию

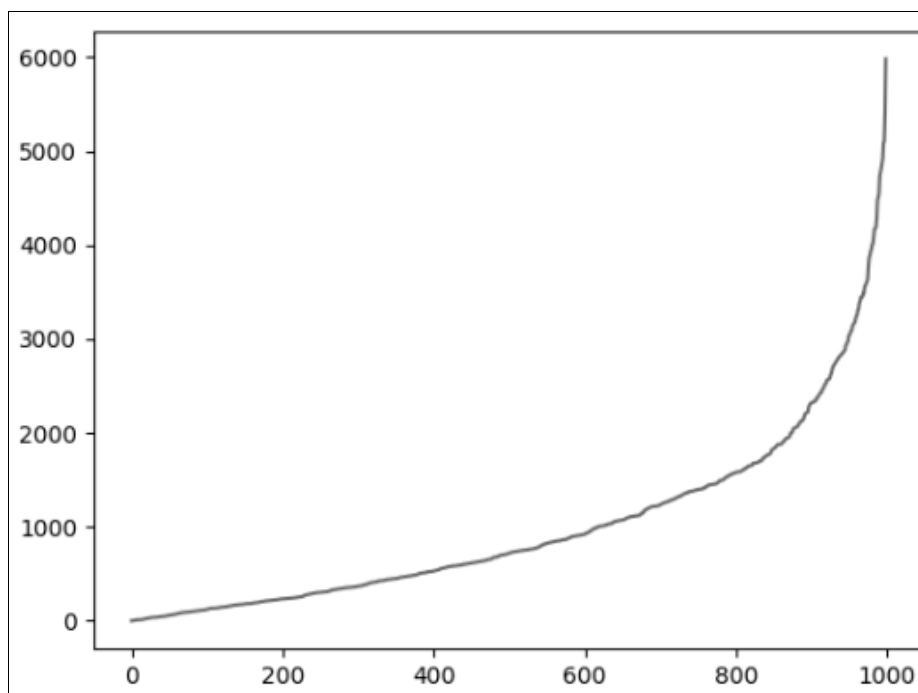


Рис. 6. Длины интервалов между ловушками по мере возрастания

Эта зависимость носит экспоненциальный характер.

Характер изменения количества выживших частиц при случайном расположении ловушек по сравнению с равномерным расположением обладает следующими особенностями:

1. Количество выживших частиц в первых $N=100000$ итерациях больше.
2. Характер убывания числа выживших частиц можно аппроксимировать экспоненциальной функцией — см. рис. 7.

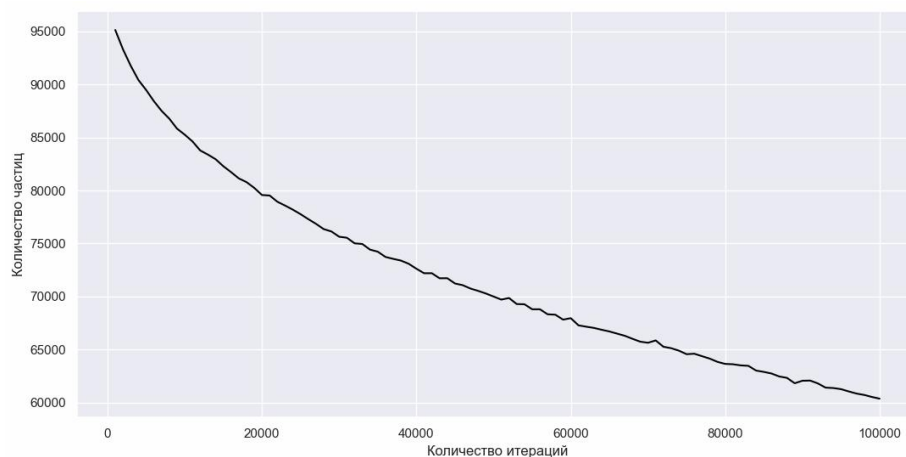


Рис. 7. Зависимость числа выживших частиц M от числа итераций N

В связи с достаточно высокой вычислительной нагрузкой было принято решение изменить параметры эксперимента за счёт увеличения количества ловушек в 10 раз. Увеличение количества ловушек уменьшает размеры «свободных» интервалов в связи с чем резко уменьшается число выживших (рисунок 8).

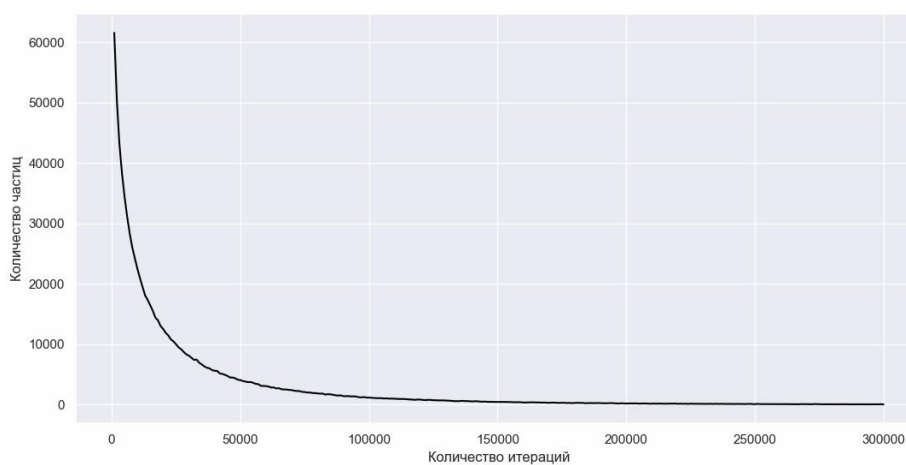


Рис. 8. Зависимость числа выживших частиц от числа итераций для $T=10001$

График демонстрирует резкое изменение количества выживших при $N > 50000$. В связи с чем удобнее производить оценку значения логарифма от числа выживших (рисунок 9).

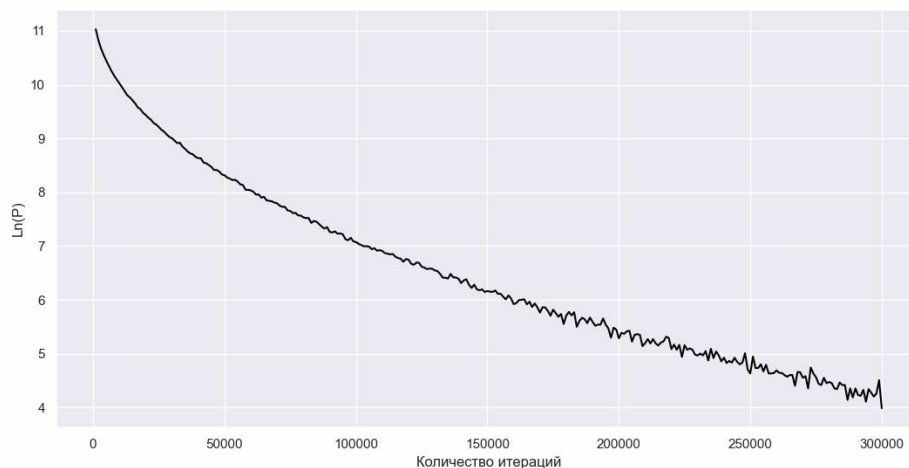


Рис. 9. Зависимость логарифма числа выживших от числа итераций

На графике виден переход ($N > 150000$) и смена поведения от степенного к линейному. Также при увеличении числа итераций ($N > 200000$) видны флуктуации которые обусловлены применением генератора случайных чисел и можно рассматривать как статистическую погрешность.

На рисунке 10 показаны результаты 8 экспериментов для описанного посева. Запуски производились независимо с одинаковым набором параметров.

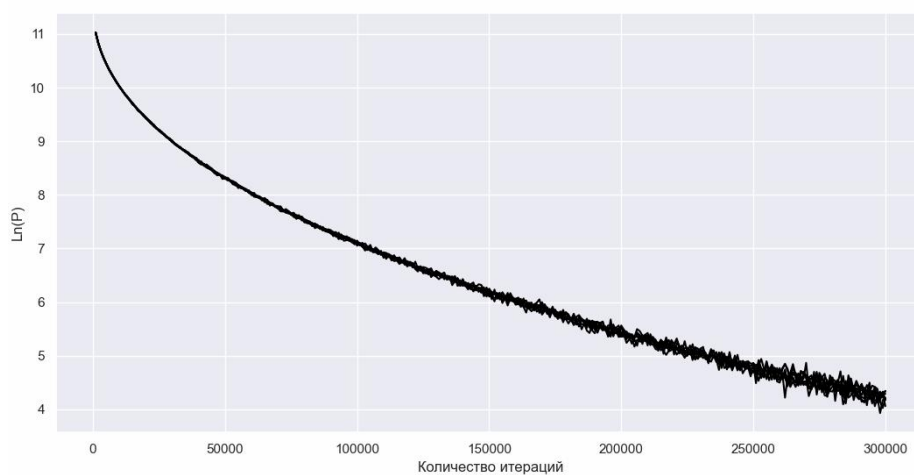


Рис. 10. Результаты серии экспериментов

Анализ результатов серии из 8 экспериментов, демонстрирует, что поведение, полученное на рисунке 8 является характерным.

Заключение

Обсудим полученные результаты. В настоящей работе выполнено численное моделирование процессов захвата на ловушки частиц, диффундирующих в средах с ловушками. Исследованы два случая расположения ловушек: равномерного и случайного расположения ловушек при различных начальных распределениях частиц — в начале координат и при случайном распределении вдоль прямой.

Для случая равномерного распределения ловушек, что соответствует приближению средней концентрации ловушек в пространстве получена экспоненциальная зависимость как ожидалось — рис. 1. При этом в приведенных координатах эта зависимость носит универсальный характер — не зависит от расположения ловушек.

В случае случайного расположения и со случайным начальным распределением частиц функциональная зависимость числа выживших частиц носит более сложный характер, а именно, в численных экспериментах было выделено две характерные области временных зависимостей — на малых временах обычная экспоненциальная зависимость, которая сменяется, по-видимому, дробно-экспоненциальной зависимостью. Чтобы понять такое поведение было проанализировано распределение длин интервалов между ловушками и было установлено существование флуктуационных областей, свободных от ловушек, в которых и выживают диффундирующие частицы на больших временах. Это распределение носит экспоненциальный характер, что указывает на экспоненциально редкое появление флуктуационных областей большего размера.

Таким образом, численные эксперименты подтвердили ранее развитые теоретические представления, позволили более детально разобраться в природе появления флуктуационных областей, определить распределение этих областей по длинам, также были обнаружены и новые закономерности процессов захвата на ловушки, что потребует дальнейших исследований.

Литература

1. Montrol E. W., Weiss G. H. Random Walks on Lattices // *Journal of Mathematical Physics*. 1965. V. 6. P. 167–175.
2. Архинчеев В. Е. Временная зависимость вероятности выживания диффундирующих частиц в многомерных средах с поглощающими ловушками в электрических полях // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2020. Т. 157, № 1. С. 97–100.
3. Рязанов Г. В. Случайные блуждания на плоской решетке с ловушками // *Теоретическая и математическая физика*. 1972. Т. 10. С. 271–277. DOI: 10.1007/BF01090731.
4. Лифшиц И. М. О структуре энергетического спектра и квантовых состояниях неупорядоченных конденсированных систем // *Успехи физических наук*. 1964. Т. 83. С. 617–663.
5. Балагуров Б. Я., Вакс В. Г. Теория диффузных фазовых переходов // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 1973. Т. 65. С. 1600–1604.

6. Балагуров Б. Я., Вакс В. Г. Случайные блуждания частицы по решеткам с ловушками // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1973. Т. 65. С. 1939–1943.

7. Архинчев В. Е. Скэйлинг в проблеме захвата диффундирующих частиц на поглощающие ловушки в электрическом поле // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2019. Т. 155, № 1. С. 184–188.

8. Архинчев В. Е. О влиянии магнитного поля на захват диффундирующих частиц на поглощающие ловушки // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2019. Т. 155, № 3. С. 562–566.

Статья поступила в редакцию 19.06.2023; одобрена после рецензирования 18.08.2023; принята к публикации 27.09.2023.

NUMERICAL SIMULATION OF THE CAPTURE PROCESSES INTO TRAPS FOR DIFFUSING PARTICLES

Valery E. Arkhincheev

Dr. Sci. (Phys. and Math.), Professor,
department of general and theoretical physics
Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina St., Ulan-Ude 670000, Russia
varkhin@mail.ru

Bair V. Khabituev

Senior lecturer,
department of Information systems and artificial intelligence
Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina St., Ulan-Ude 670000, Russia
bairkhabituev@bsu.ru

Daniil F. Derugin

Senior lecturer,
department of Information systems and artificial intelligence
Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina St., Ulan-Ude 670000, Russia
dandwor@gmail.com

Stanislav P. Maltsev

Senior lecturer,
department of Information systems and artificial intelligence
Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina St., Ulan-Ude 670000, Russia
staeth94@gmail.com

Anatoliy S. Tsybikov

Cand. Sci. (Pedagogy), Head of department of IT, Senior lecturer,
department of Information systems and artificial intelligence
Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina St., Ulan-Ude 670000, Russia
cas313@rambler.ru

Mikhail A. Donilenko

Lecturer,
department of Information systems and artificial intelligence
Dorzhi Banzarov Buryat State University
24a Smolina St., Ulan-Ude 670000, Russia
donilenco@ya.ru

Abstract. The process of particle diffusion in random medium has been studied in many works. However, despite this, issues such as the change in the nature of diffusion processes in random medium, the possibility of phase transitions in electric fields, and the asymptotic behavior of the survival probability of diffusing particles when captured by traps remain not fully understood. In this regard, the authors carried out a series of numerical experiments for a one-dimensional space (in the form of a real axis). The authors describe and implement algorithms that simulate particle diffusion for several cases: fixed and random placement of absorbing traps. Pseudo-random generation algorithms were used to emulate the “randomness” of particle movement. The paper describes the algorithms, the methodology for conducting experiments and the results of the experiments. On the whole, the obtained results confirm the theoretical computations, and new regularities of catching were found.

Keywords: particle diffusion, random processes, numerical experiments.

For citation

Arkhincheev V. E., Khabituev B. V., Derugin D. F., Maltsev S. P., Tsybikov A. S., Donilenko M. A. Numerical Simulation of the Capture Processes Into Traps for Diffusing Particles // Bulletin of Buryat State University. Mathematics, Informatics. 2023. N. 3. P. 99–111.

The article was submitted 19.06.2023; approved after reviewing 18.08.2023; accepted for publication 27.09.2023.