

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОБРАБОТКА ДАННЫХ

Научная статья

УДК 004.94

DOI: 10.18101/2304-5728-2024-3-31-44

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ В СРЕДАХ С ЛОВУШКАМИ: СТАТИСТИКА В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

© **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

© **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

© **Москвитина Алина Александровна**

студент,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
alinamoskvitina@gmail.com

Аннотация. Процесс диффузии частиц в случайных средах изучается во многих работах. Однако несмотря на это, остаются не до конца изученными вопросы, такие 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 работе описана серия численных экспериментов для одномерного пространства (в виде числовой прямой). Описаны и реализованы алгоритмы, моделирующие диффузию частиц для случайного размещения поглощающих ловушек. В статье приводится описание методики проведения экспериментов и результаты. Основное внимание авторы уделяют анализу зависимости числа выживших частиц как от количества итераций, так и от концентрации ловушек.

Полученные результаты в целом подтверждают теоретические предсказания, при этом были обнаружены новые закономерности захвата ловушек, установлена зависимость времени захвата на ловушки от концентрации частиц.

Ключевые слова: диффузия частиц, среды с ловушками, случайные процессы, время вымирания, численное моделирование.

Благодарности

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 24-21-00356, <https://rscf.ru/project/24-21-00356/>

Для цитирования

Численное моделирование диффузии в средах с ловушками: статистика в одномерном случае / В. Е. Архинчеев, Б. В. Хабитуев, Д. Ф. Дерюгин [и др.] // Вестник Бурятского государственного университета. Математика, информатика. 2024. № 3. С. 31–44.

Введение

Проблема диффузии частиц в средах с поглощающими ловушками изучалась во многих работах [1–2]. Интерес обусловлен как различными приложениями, так и аналогией с проблемой плотности состояний в неупорядоченных средах [3], а также ожидаемыми новыми особенностями в транспорте частиц [4–8]. В работе [9] описаны результаты численного моделирования процессов захвата частиц на ловушки.

В настоящей работе продолжено исследование стохастических процессов в средах с ловушками, в частности, исследована зависимость характерных времен захвата на ловушки от концентрации ловушек. Как известно, в различных физических явлениях как правило возникают характерные параметры, описывающие эти явления. Например, в теории фазовых переходов – это корреляционные длины физических восприимчивостей и т.д., в случае динамических процессов — это характерные времена процессов. В случае диффузионных процессов появление таких параметров неочевидно, тем не менее они появляются. В задаче диффузионных процессов в средах с ловушками возникает характерная длина – расстояние между ловушками и, соответственно, в динамике время диффузии на расстояние порядка длины между ловушками. В одномерном случае оно равно:

$$t_c = \frac{1}{Dc^2} \quad (1)$$

Здесь D — коэффициент диффузии, а c — концентрация ловушек, в одномерном случае расстояние между ловушками равно обратной концентрации. Одной из задач статьи является определение указанного физического параметра.

Статья построена следующим образом. В первом пункте статьи описаны алгоритмы и методы численного моделирования, а также приводятся характеристики посевов ловушек. Во втором пункте изложены основные результаты численного эксперимента. В заключении обсуждаются результаты и производится сопоставление с известными теоретическими выкладками.

1 Алгоритмы и методы численного моделирования

В настоящем параграфе коротко опишем алгоритмы и методы моделирования, опишем постановку численного эксперимента. Для исследования описанных процессов было выполнено численное моделирование процессов захвата частиц на ловушки.

Введем основные определения. Рабочей областью будем называть отрезок на числовой прямой $[-500000, 500000]$. Ловушкой будем называть точку на числовой прямой, при попадании в которую частица «умирает», то есть перестает участвовать в итерациях и не меняет координаты.

Перед началом работы на рабочую область размещаются ловушки из заранее подготовленного посева. Далее происходит первоначальный посев частиц. Частицы размещаются на рабочей области произвольным образом, при этом координаты частицы не должны совпадать с координатами ловушек.

Итерацией алгоритма будем называть разовое смещение всех частиц. Частица может сместиться вправо или влево на 1. Направление смещения определяется случайным образом, вероятность — одинаковая.

В рамках одного запуска алгоритма происходит N итераций. После завершения алгоритма происходит запись координат выживших частиц, а также формируется информация для итогового протокола, в котором фиксируется число выживших частиц.

Эксперимент представляет собой серию запусков алгоритма с фиксированными параметрами для разного числа итераций, по результатам эксперимента формируется протокол эксперимента. Эксперименты проводились со следующими начальными значениями:

1. Количество частиц: $M_0=100000$
2. Количество итераций: $N= 1000 - 200000$
3. Шаг (изменение количества итераций): $dN = 1000$

Протокол эксперимента включает в себя описание начальных значений, использованного посева, а также информацию о числе итераций и количестве выживших частиц.

1.1 Посевы ловушек

Было сгенерировано 11 посевов ловушек на рабочей области $([-500000, 500000])$.

Посевы генерировались следующим образом:

1. Задавалось число ловушек K - от 5001 до 15001 (с шагом в 1000)
2. Для каждой ловушки в рабочей области генератором случайных чисел определяется координата. Если эта координата не занята (нет ловушек с такой координатой), то в нее помещается ловушка, если занята, производится повторная попытка, пока не будет получена свободная координата для ловушки.

3. В итоге получаем посев, который представляет из себя K координат ловушек.

Можно сказать, что ловушки разделяют рабочую область на отдельные интервалы. Предлагается характеризовать посевы следующим образом. Для каждого интервала вычисляется длина, после чего подсчитывается количество интервалов такой длины. Пример характеристики для посева с числом ловушек $K=10001$ на рисунке 1.

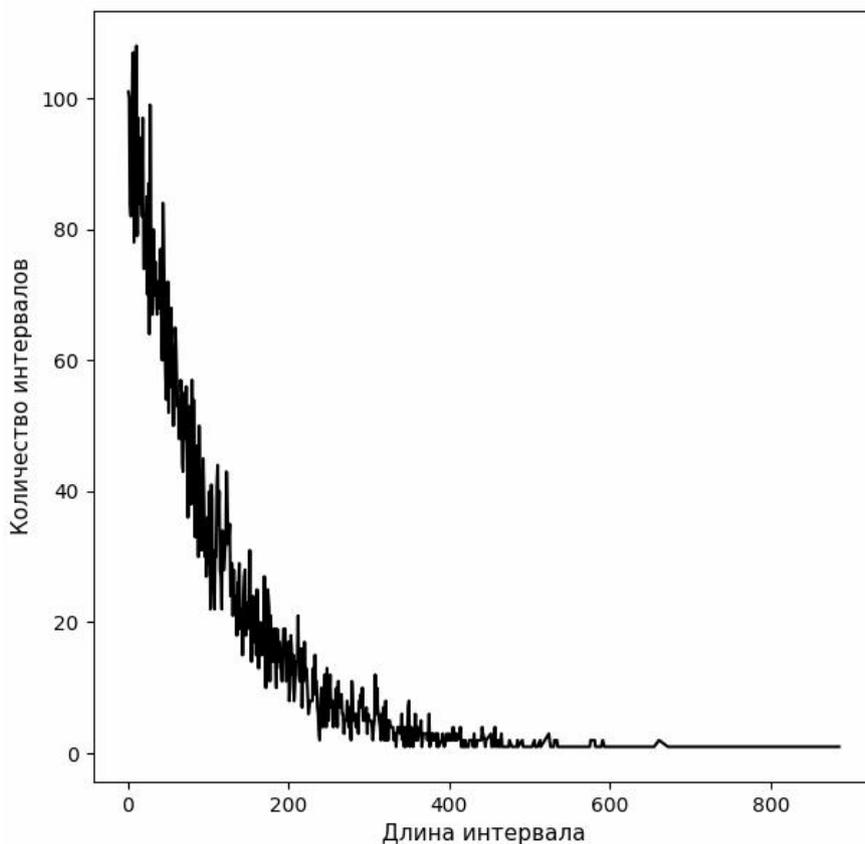


Рисунок 1. Характеристика посева ловушек ($K=10001$)

На рисунке по оси абсцисс располагаются длины интервалов, по оси ординат — количество интервалов такой длины. Для разного числа ловушек описанная характеристика имеет схожий вид. На рисунке 2 пример для нескольких посевов.

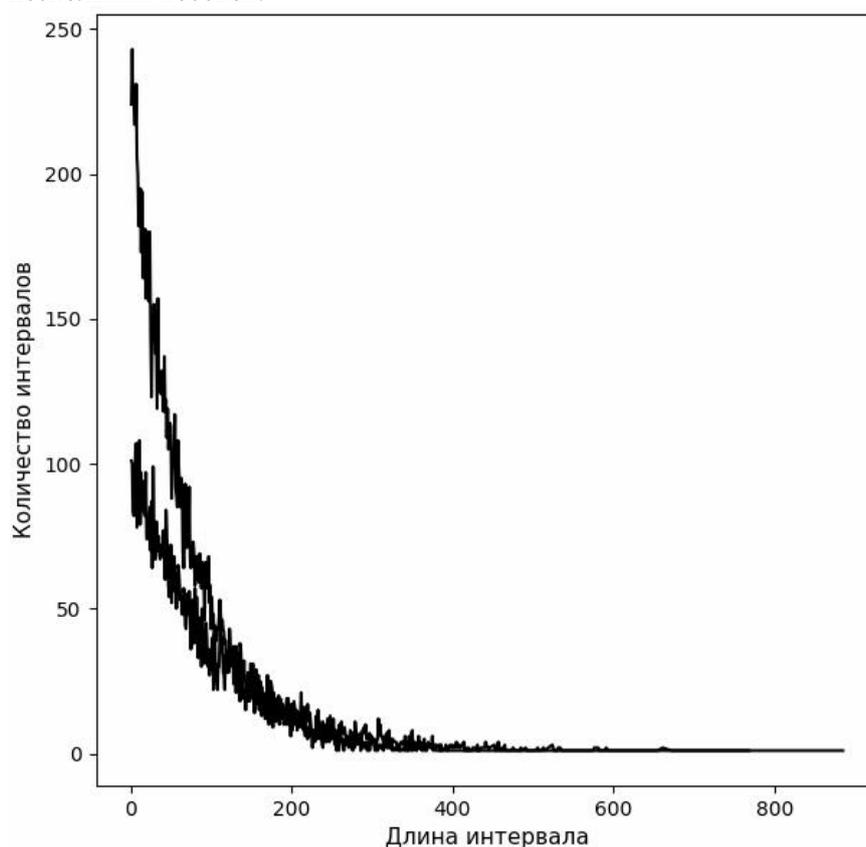


Рисунок 2. Характеристики посевов ловушек ($K=10001, 15001$)

На рисунке приведены характеристики посевов с $K=10001, 15001$. Очевидно, что при увеличении числа ловушек увеличивается количество интервалов с меньшей длиной и уменьшается максимальная длина интервала.

2 Результаты

Для каждого из описанных посевов были проведены численные эксперименты, которые включали в себя серию из 10 запусков для каждого посева ловушек. Результатом каждого запуска является отчет с данными о числе «выживших» частиц, то есть о частицах, которые не попали в ловушки. На рисунке 3 представлены графики изменения числа выживших частиц для разных посевов ловушек.

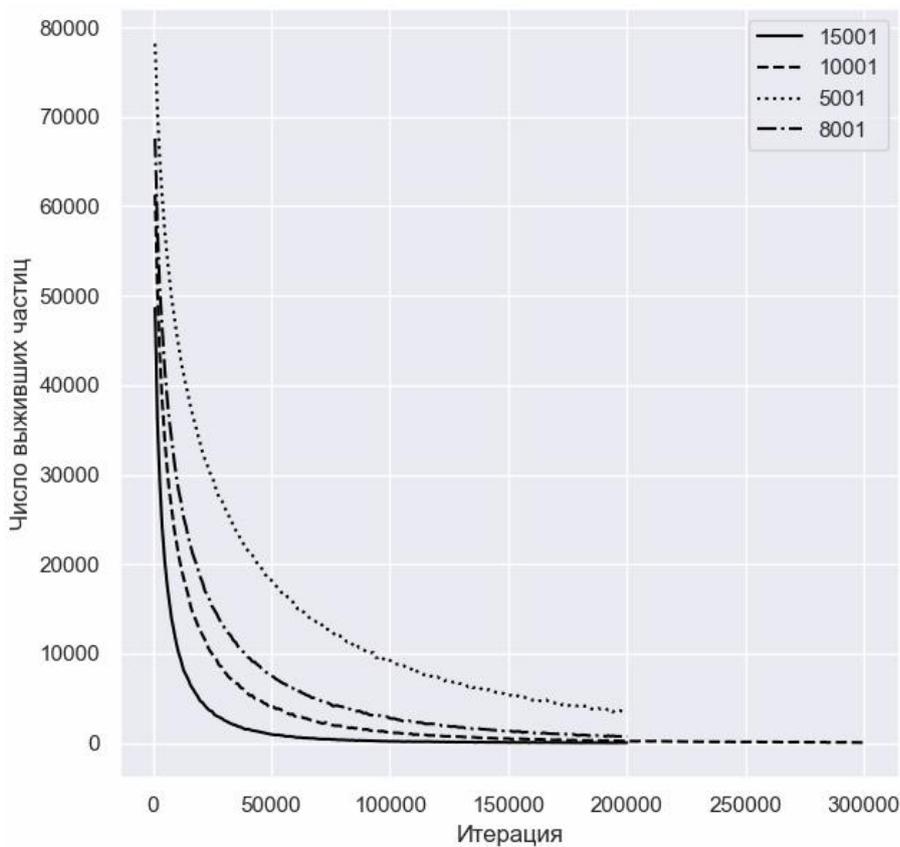


Рисунок 3. Зависимость количества выживших частиц от количества итераций

На рисунке 3 представлены графики зависимости количества выживших частиц от количества итераций для посевов с числом ловушек: 5001, 8001, 10001, 15001. Очевидно, что при увеличении числа ловушек, число выживших частиц будет уменьшаться быстрее. Для наглядности рассмотрим логарифмическую зависимость (рисунок 4).

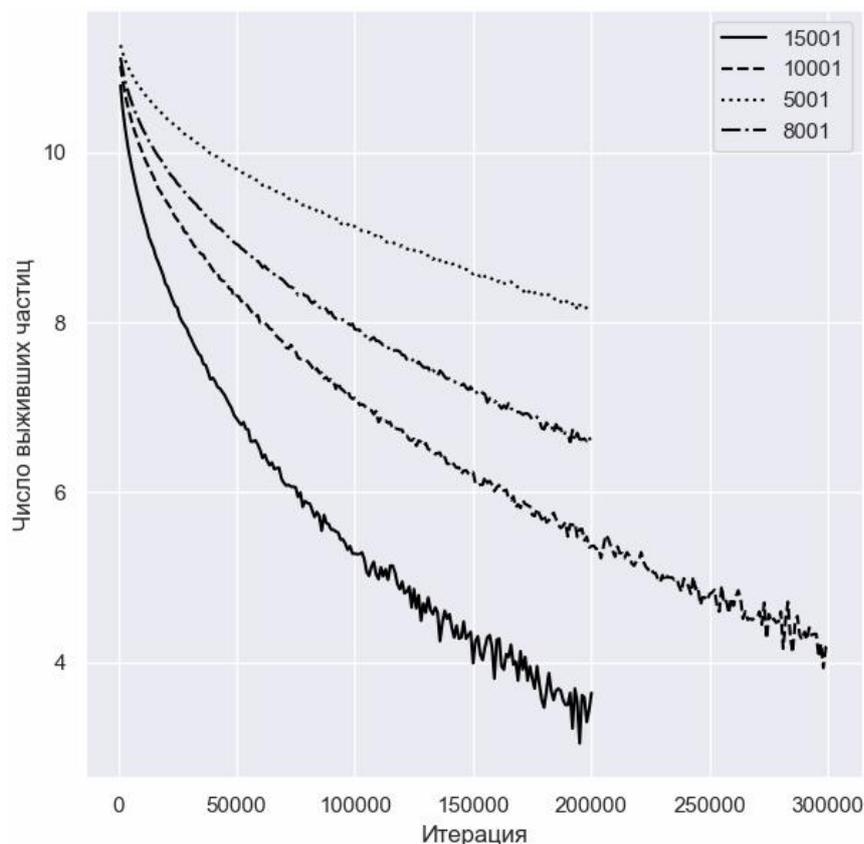


Рисунок 4. Зависимость логарифма числа выживших от количества итераций

На рисунке 4 представлена логарифмическая зависимость числа выживших от количества итераций. При увеличении числа итераций можно заметить явные флуктуации на графиках, особенно для большего числа ловушек в посевах, этот факт можно объяснить тем, что при большом числе итераций выживает мало частиц и количество активных частиц варьируется за счет «случайности» процессов. В рамках исследования для каждого посева было произведено 10 запусков. Таким образом, для выявления закономерностей логично рассматривать усредненные значения.

Результаты каждого запуска являются массивом пар чисел (x, y) , где x — число итераций, а y — количество выживших частиц. В качестве генератора случайных чисел был использован «Вихрь Мерсенна», следовательно, можно говорить о том, что распределение было нормальным. Усредненным протоколом для посева ловушек будем называть протокол, строки которого представляют собой пары чисел — число итераций и среднее от количества выживших частиц, полученные из 10 файлов протоколов для соответствующего посева ловушек. На рисунке 5 представлен график усредненных данных (логарифм).

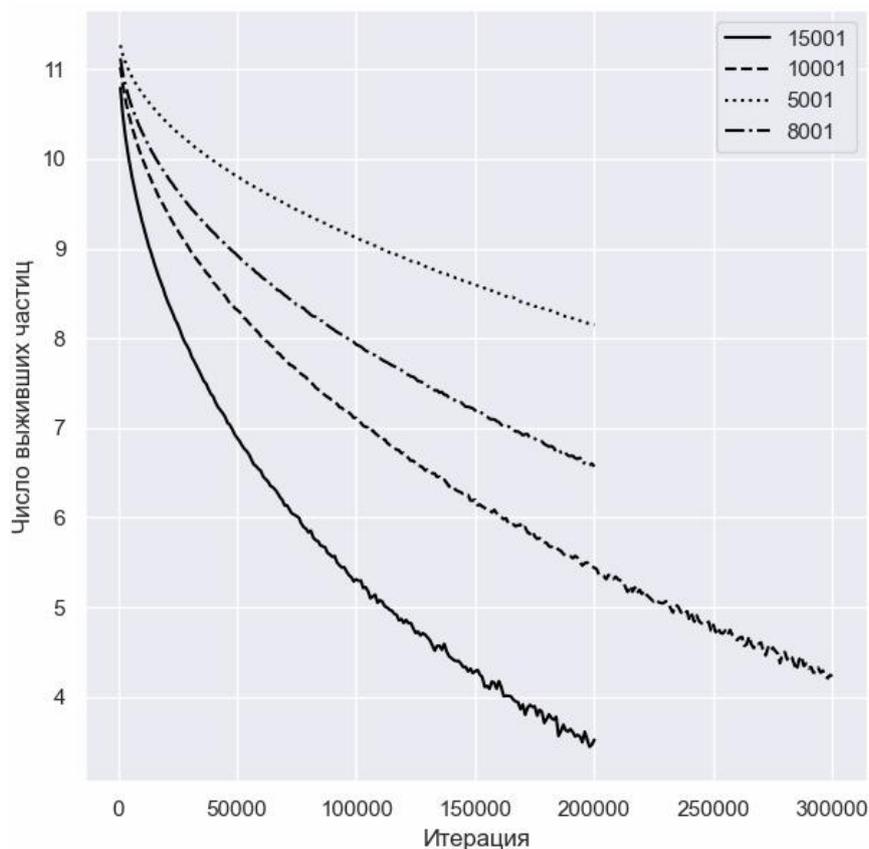


Рисунок 5. Логарифм числа выживших от количества итераций (усреднённые)

На рисунке 5 приведён график усреднённых протоколов для посевов, отображённых на рисунке 4. Визуальное сравнение графиков позволяет говорить о том, что усредненные данные сохраняют характер поведения. При этом усреднение «сглаживает» флуктуации, вызванные случайностью самих процессов.

В целом, анализ полученных графиков позволяет говорить о характерном «поведении» для разных посевов ловушек. В связи с этим возникает необходимость исследования данного явления с учётом статистики экспериментов.

Для исследования характера зависимости вымирания частиц введем понятие — время вымирания. Временем вымирания будем называть количество итераций при котором число частиц становится меньше исходного числа в e раз (обозначим его $yDie$). В нашем случае это число будет равно: $37037 (100000/e)$.

Протокол исследования содержит информацию о количестве выживших частиц в зависимости от числа итераций. Шаг по числу итераций равен 1000. Усредненные данные эксперимента позволяют определить отре-

зок, на котором происходит «вымирание», для вычисления точного времени вымирания была использована линейная интерполяция:

1. для каждого посева рассматривается усредненный протокол;
2. в протоколе находится первая строка, в которой число выживших меньше y_{Die} . Обозначим эту пару значений из строки: $(x[n], y[n])$, здесь n — номер строки в протоколе.
3. по парам $(x[n-1], y[n-1]), (x[n], y[n])$ вычисляются коэффициенты аппроксимирующей прямой $y = Ax + B$.
4. определяем время вымирания (x_{Die}) из уравнения $y_{Die} = Ax + B$.

На рисунке 6 представлен график зависимости времени вымирания от числа ловушек:

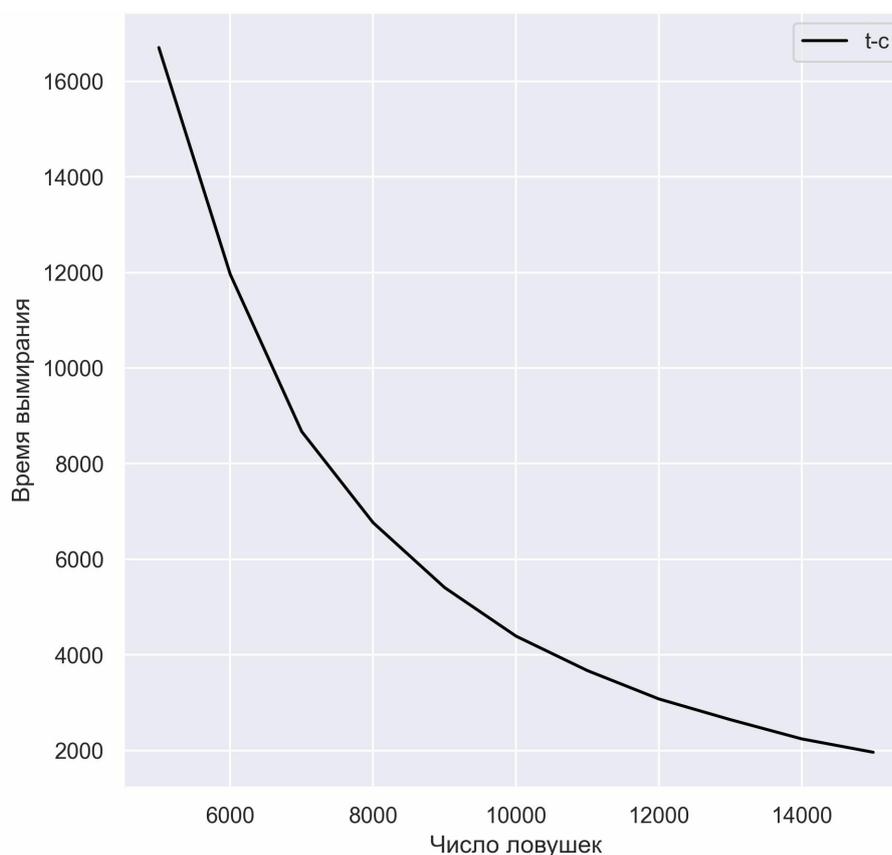


Рисунок 6. График времени вымирания

Визуальный анализ графика позволяет говорить о явной гиперболической зависимости. Согласно теоретическим выкладкам зависимость времени вымирания от числа ловушек должна аппроксимироваться гиперболической зависимостью [10, 11].

Была проведена аппроксимация функциями вида:

$$y = a + \frac{b}{x^{\alpha}} \quad (2)$$

При аппроксимации рассматривались фиксированные значения для параметра α , коэффициенты (a, b) вычислялись методом наименьших квадратов. На рисунке 7 представлены графики аппроксимирующих кривых.

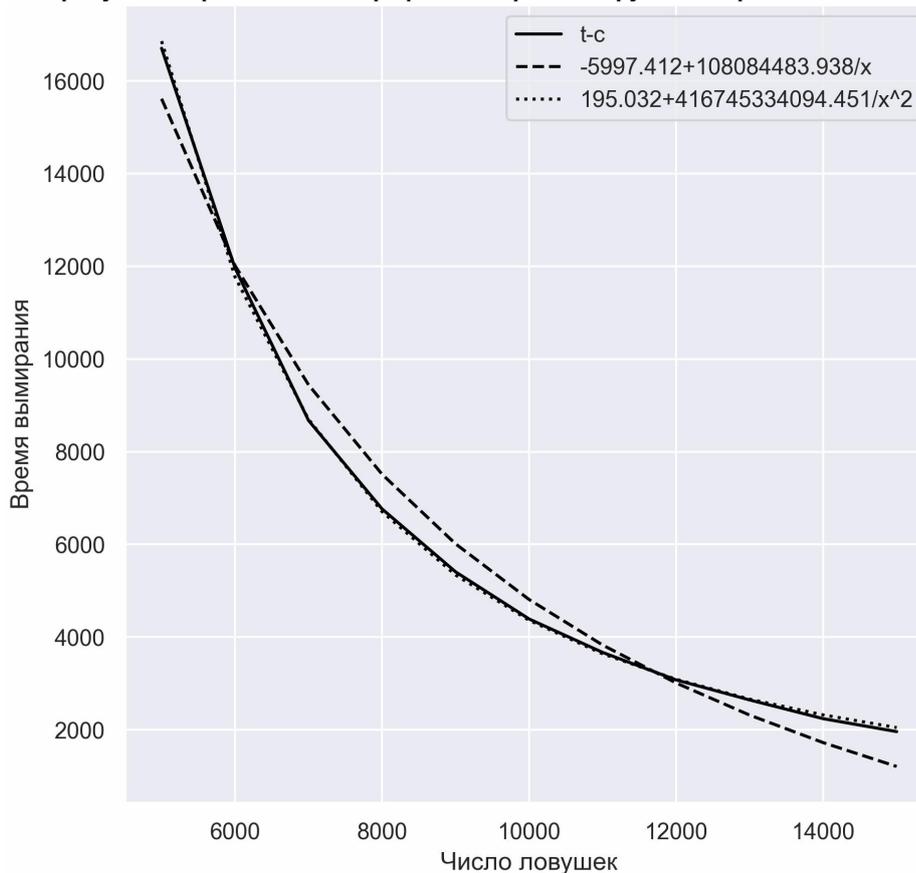


Рисунок 7. Аппроксимация времени вымирания

На рисунке 7 сплошной линией обозначен исходный график, пунктиром — аппроксимация гиперболой, точками — аппроксимация квадратичной гиперболой. В легенде представлены коэффициенты. Визуальная оценка подтверждает теоретические выкладки — график квадратичной гиперболы практически совпадает с исходным графиком.

При использовании формулы средней абсолютной ошибки аппроксимации были получены результаты: 11,633 % — линейная гипербола, 1,417% — квадратичная гипербола. В общем стоит отметить, что при повышении степени гиперболы от 1 к 2 средняя ошибка аппроксимации уменьшается, что подтверждает теоретические выкладки.

Заключение

Обсудим полученные результаты. В настоящей работе выполнено численное моделирование процессов захвата на ловушки частиц, диффундирующих в средах с ловушками. Было сгенерировано одиннадцать случайных посевов ловушек с числом ловушек от 5001 до 15001 (шаг 1000). Для каждого посева была проведена серия из десяти экспериментов и сформирован усреднённый отчёт.

Общий анализ изменения количества выживших частиц в зависимости от числа итераций соответствует и подтверждает полученные ранее результаты. Для более глубокого анализа изменения количества выживших частиц в зависимости от количества итераций было использовано понятие «время вымирания». На основе усреднённых отчётов была построена зависимость времени выживания от числа ловушек.

На рисунке 6 приведён график изменения времени вымирания. Визуальный анализ позволяет говорить о гиперболической зависимости. Данные были аппроксимированы гиперболическими функциями вида $y = a + \frac{b}{x^{\alpha}}$. Наилучшие результаты были получены для квадратичных функций, что подтверждает теоретические выкладки.

Исследование характерных времен в задаче важно для дальнейших исследований. Во-первых, как правило, на малых временах работает приближение «среднего поля», однако на временах больших характерных времен задачи появляются новые функциональные зависимости, так называемые флуктуационные, которые обусловлены нарушением приближения «среднего поля» [12, 13]. Во-вторых, в случае появления в задаче еще одного параметра, как в задаче с внешними полями, можно ожидать также новых закономерностей в областях, когда новый параметр превышает исходное время диффузии [14, 15]. Поэтому проведение выше описанных численных экспериментов позволит определить область поиска новых закономерностей и функциональных зависимостей.

Литература

1. Montrol E. W., Weiss G. H. Random Walks on Lattices. *Journal of Mathematical Physics*. 1965; 6: 167–175.
2. Рязанов Г. В. Случайные блуждания на плоской решетке с ловушками // Теоретическая и математическая физика. 1972. Т. 10. С. 271–277. DOI: 10.1007/BF01090731
3. Балагуров Б. Я., Вакс В. Г. Теория диффузных фазовых переходов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1973. Т. 65. С. 1600–1604.
4. Балагуров Б. Я., Вакс В. Г. Случайные блуждания частицы по решеткам с ловушками // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1973. Т. 65. С. 1939–1943.
5. Donsker M. D., Varadhan R. S. Asymptotics for the wiener sausage. *Communications on Pure and Applied Mathematics*. 1975; 28: 525–565.
6. Donsker M. D., Varadhan R. S. On the number of distinct sites visited by a random walk. *Communications on Pure and Applied Mathematics*. 1979; 32: 721–747.

7. Federico B., Charlie D., Hugues C., Bertrand D., Ivan D., Miguel A. Muñoz, Langevin Equations for Reaction-Diffusion Processes. *Physical Review Letters*. 2016; 117: 100601. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.100601>

8. Sang B. L., Kim I. C., Miller C. A., Torquato S. Random-walk simulation of diffusion-controlled processes among static traps. *Physical Review B*. 1989; 39: 11833. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.11833>

9. Численное моделирование процессов захвата диффундирующих частиц на ловушки / В. Е. Архинчеев, Б. В. Хабитуев, Д. Ф. Дерюгин [и др.] // Вестник Бурятского государственного университета. Математика, информатика. 2023. № 3. С. 99–111. DOI: [10.18101/2304-5728-2023-3-99-111](https://doi.org/10.18101/2304-5728-2023-3-99-111)

10. Архинчеев В. Е. Влияние дрейфа на временную асимптотику вероятности выживания частиц в средах с поглощающими ловушками // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2017. Т. 151, вып. 2. С. 322–325. DOI: <https://doi.org/10.7868/S0044451017020109>

11. Fouxon I., Holzner M. Solvable continuous-time random walk model of the motion of tracer particles through porous media. *Physical Review E*. 2016; 94: 022132.

12. Felekidis N., Melianas A., Kemerink M. Nonequilibrium drift-diffusion model for organic semiconductor devices. *Physical Review B*. 2016; 94: 035205.

13. Grassberger P., Procaccia I. Diffusion and drift in a medium with randomly distributed traps. *Physical Review A*. 1982; 26: 3686.

14. Movaghar B., Pohlmann B., Würtz D. Electric field dependence of trapping in one dimension. *Physical Review A*. 1984; 29: 1568.

15. Архинчеев В. Е. О неподвижных точках, инвариантах преобразований Дыхне и устойчивости решений задачи эффективной проводимости случайно неоднородных двухфазных сред // Письма в «Журнал экспериментальной и теоретической физики». 1998. Т. 67, вып. 11. С. 951–958.

Статья поступила в редакцию 23.09.2024; одобрена после рецензирования 11.11.2024; принята к публикации 12.11.2024.

NUMERICAL SIMULATION OF DIFFUSION WITH TRAPS:
STATISTICS IN THE ONE-DIMENSIONAL SPACE

© **Arkhinchev Valery Efimovich**

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

© **Khabituev Bair Victorovich**

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

© **Derugin Daniil Fedorovich**

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

© **Maltsev Stanislav Petrovich**

Senior lecturer department of Information systems and artificial intelligence
Buryat State University
Russia, 670000, Ulan-Ude, Smolina st. 24a
staelth94@gmail.com

© **Donilenko Mikhail Aleksandrovich**

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

© **Moskvitina Alina Aleksandrovna**

Student at the Institute of Mathematics, Physics and Computer Science,
department of general and theoretical physics
Buryat State University
Russia, 670000, Ulan-Ude, Smolina st. 24a
alinamoskvitina@gmail.com

Abstract. The process of particle diffusion in random media is studied in many works. However, despite this, issues such as changes 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 are not well-researched.

Paper describes a series of numerical experiments for one-dimensional space. Authors describes algorithms of particle diffusion simulation for random placement of absorbing traps. Paper describes the experimental methodology and results. The authors pay main attention to the number of surviving particles analysis, both from the number of iterations and from the concentration of traps.

The results obtained generally confirm theoretical predictions; new patterns of capture by traps were discovered, and the dependence of the capture time on traps on particle concentration was established.

Keywords: particle diffusion, media with traps, random processes, extinction time, numerical simulation.

Funding

The research was funded by the Russian Science Foundation № 24-21-00356, <https://rscf.ru/project/24-21-00356/>

For citation

Arkhincheev V. E., Khabituev B. V., Derugin D. F., Maltsev S. P., Donilenko M. A., Moskvitina A. A. Numerical Simulation of Diffusion With Traps: Statistics in the One-Dimensional Space // Bulletin of Buryat State University. Mathematics, Informatics. 2024. N. 3. P. 31–44.

The article was submitted 23.09.2024; approved after reviewing 11.11.2024; accepted for publication 12.11.2024.