

MODEL BŁĄDZENIA LOSOWEGO CZĄSTECZKI W ŚRODOWISKU NIEJEDNORODNYM

Bożena Baran

Instytut Matematyki i Informatyki, Politechnika Częstochowska

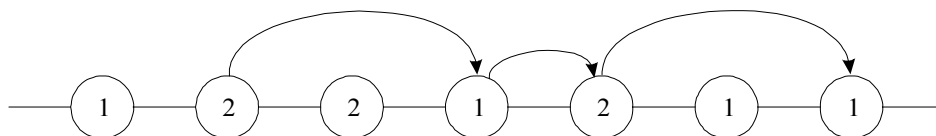
Streszczenie. Przedstawiono jednowymiarowy model błędzenia losowego cząsteczki w liniowym łańcuchu, gdzie długości skoku są przypisane losowo do miejsc łańcucha. Pierwsze dwa modele opisują dyfuzję cząsteczki z ograniczoną długością skoku (o 1, 2 lub 3 węzły), trzeci model charakteryzuje błędzenie losowe cząsteczki z nieograniczoną długością skoku. Wyznaczony został efektywny współczynnik dyfuzji dla łańcuchów z różnymi konfiguracjami długości skoku.

Wstęp

Modelowanie zachowania się układów dyskretnych, w tym granularnych, budzi duże zainteresowanie z uwagi na istotną obecność układów w technice i przyrodzie. W szczególności interesujące jest poznanie procesów dyfuzji w takich układach, jak niskowymiarowe dyskretne systemy filtrujące na bazie chemicznie aktywnych granulatów, stanowiących lokalne centra wychwyty dla zanieczyszczeń. W niniejszym opracowaniu zbadano przypadek dyfuzji w jednowymiarowym niejednorodnym układzie. Niejednorodność jest związana ze strukturalnie losowym zasięgiem przemieszczania się cząstki w układzie. Sytuacja taka ma miejsce w filtrach stochastycznych, kiedy wysycenie centrów wychwyty powoduje ich czasową nieaktywność. Umożliwia to cząstkom zanieczyszczenia na relatywnie głębszą penetrację do czasu uaktywnienia się centrów wychwyty.

1. Model błędzenia losowego z długością skoku o 1 lub 2 węzły

W przypadku tym rozważamy błędzenie losowe jednej cząsteczki w liniowym łańcuchu pokazanym na rysunku 1.



Rys. 1. Liniowy łańcuch, gdzie długości skoku 1 i 2 są losowo przypisane do miejsc. Strzałki wskazują możliwą drogę dyfundującej cząsteczki

Do każdego miejsca kratownicy i przypisana jest długość skoku l_i , która może przybierać dwie wartości: 1 lub 2 z prawdopodobieństwem odpowiednio p_1 i p_2 , gdzie $p_1 + p_2 = 1$. Przyjmujemy, że miejsce i nazywamy „1 miejscem”, gdy $l_i = 1$, oraz „2 miejscem”, gdy $l_i = 2$. Jeżeli poruszająca się cząsteczka zatrzyma się w „1 miejscu”, to może ona w następnym kroku przemieścić się do jednego z dwóch sąsiednich węzłów. Natomiast jeżeli zatrzyma się w „2 miejscu”, wtedy w następnym kroku przesuwa się o dwa węzły. Rozważamy dyskretny czas kroków ze średnim czasem postoju t . Ruch cząsteczki jest symetryczny, przemieszcza się ona z prawdopodobieństwem $\frac{1}{2}$ w lewą lub w prawą stronę.

Prawdopodobieństwo $P_i(t)$, gdy poruszająca się cząsteczka jest w miejscu i w czasie t , opisuje rekurencyjny związek

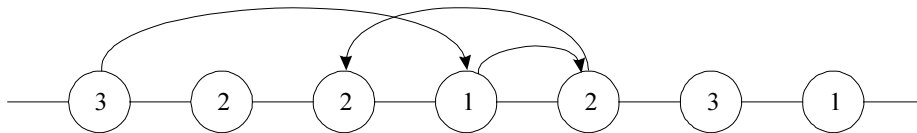
$$P_i(t+1) = \frac{1}{2} [(l_{i-2} - 1)P_{i-2}(t) + (2 - l_{i-1})P_{i-1}(t) + (2 - l_{i+1})P_{i+1}(t) + (l_{i+2} - 1)P_{i+2}(t)] \quad (1)$$

W przeciętnym polu zbliżania się zastępujemy pojedyncze l_i w równaniu (1) przez ich średnie wartości $\langle l_i \rangle = p_1 + 2p_2 = 2 - p_1$ oraz średnie kwadraty $\langle l_i^2 \rangle = t = (4 - 3p_1)t$.

Wtedy dla średniego pola uzyskujemy współczynnik dyfuzji

$$D = \frac{4 - 3p_1}{2}$$

2. Model błędzenia losowego z długością skoku o 1, 2 lub 3 węzły



Rys. 2. Schemat błędzenia losowego cząsteczki w liniowym łańcuchu, z miejscami charakteryzującymi się losową długością skoku $l_i = 1, 2, 3$

W modelu tym rozważamy błędzenie losowe cząsteczki, która przemieszcza się o 1, 2 lub 3 węzły w prawą lub w lewą stronę. Miejsca liniowego łańcucha i charakteryzują liczby $l_i = 1, 2, 3$ z odpowiednimi prawdopodobieństwami p_1, p_2, p_3 .

Wartości p_1, p_2, p_3 spełniają warunek normalizacji

$$p_1 + p_2 + p_3 = 1$$

Podobnie jak w pierwszym modelu ruch cząsteczki jest symetryczny z dyskretnym czasem kroków t .

Prawdopodobieństwo $P_i(t)$, gdy poruszająca się cząsteczka jest w miejscu i w czasie t , opisuje rekurencyjny związek

$$\begin{aligned}
 P_i(t+1) = & \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} (l_{i-3} - 2)(l_{i-3} - 1) P_{i-3}(t) + (3 - l_{i-2})(l_{i-2} - 1) P_{i-2}(t) + \right. \\
 & + \frac{1}{2} (l_{i-1} - 3)(l_{i-1} - 2) P_{i-1}(t) + \frac{1}{2} (l_{i+1} - 3)(l_{i+1} - 2) P_{i+1}(t) + \\
 & \left. + (3 - l_{i+2})(l_{i+2} - 1) P_{i+2}(t) + \frac{1}{2} (l_{i+3} - 2)(l_{i+3} - 1) P_{i+3}(t) \right] \quad (2)
 \end{aligned}$$

Po zastąpieniu pojedynczych wartości l_i przez wartość przeciętną, a następnie tworząc jej średnie kwadraty, uzyskujemy współczynnik dyfuzji

$$D = \frac{9 - 8p_1 - 5p_2}{2}$$

3. Model błędzenia losowego z nieograniczoną długością skoku

W przypadku tym rozważamy błędzenie losowe cząsteczki z możliwością skoku o dowolną liczbę węzłów w prawą lub w lewą stronę. Każde miejsce łańcucha i charakteryzuje losowa długość skoku l_i z odpowiednim prawdopodobieństwem p_i

$$l_i = 1, 2, \dots, n, \dots$$

$$p_i = \frac{1}{2} \frac{1}{2^2}, \dots, \frac{1}{2^n}, \dots \quad \text{gdzie} \quad \sum_{i=1}^{\infty} p_i = 1$$

Prawdopodobieństwo $P_i(t)$, kiedy poruszająca się cząsteczka jest w miejscu i w czasie t , wyraża rekurencyjny związek

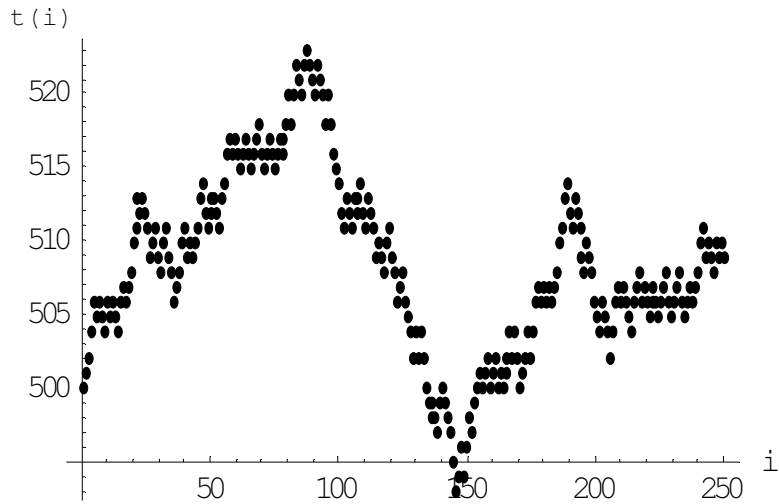
$$P_i(t+1) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\infty} [P_{i-j}(t) \varphi_j(l_{i-j}) + P_{i+j}(t) \varphi_j(l_{i+j})]$$

Ostatecznie dla średniego pola dyfuzji uzyskujemy współczynnik

$$D = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^2}{n-1} = 12$$

Wartości efektywne współczynnika dyfuzji zostały obliczone w przybliżeniu pola średniego. Są więc uwarunkowane założeniem o jednorodnym rozkładzie charakterystycznych cech węzłów. W rzeczywistych układach występują odstępstwa od jednorodnego rozkładu różnych cząstek. Badanie takich układów wymaga

eksperymentów numerycznych, umożliwiającą porównanie współczynników efektywnej dyfuzji obliczanych na drodze teoretycznej z tymi obliczonymi dla skończonych układów węzłów z niejednorodnymi rozkładami długości skoków. Obliczenia takie są przedmiotem dalszej pracy.



Rys. 3. Błądzenie losowe cząsteczki w liniowym łańcuchu z miejscami charakteryzującymi się losową długością skoku $l_i = 1, 2$

Literatura

- [1] Kutner R., Maass P., Random walk on a linear chain with a quenched distribution of jump lengths, *Physical Review* 1997, 55, 1, 71-78.
- [2] Feller W., *Wstęp do rachunku prawdopodobieństwa*, PWN, Warszawa 1960.