MODEL BŁĄDZENIA LOSOWEGO CZĄSTECZKI W ŚRODOWISKU NIEJEDNORODNYM

Bożena Baran

Instytut Matematyki i Informatyki, Politechnika Częstochowska

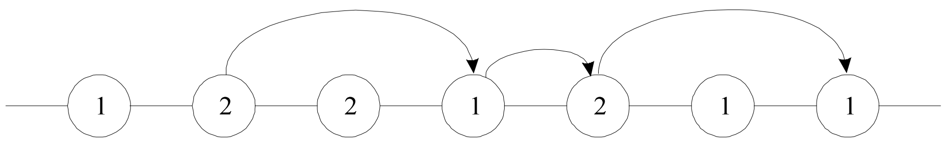
Streszczenie. Przedstawiono jednowymiarowy model błądzenia losowego cząsteczki w liniowym łańcuchu, gdzie długości skoku są przypisane losowo do miejsc łańcucha. Pierwsze dwa modele opisują dyfuzję cząsteczki z ograniczoną długością skoku (o 1, 2 lub 3 węzły), trzeci model charakteryzuje błądzenie losowe 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 wychwytu 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 wychwytu powoduje ich czasową nieaktywność. Umożliwia to cząstkom zanieczyszczenia na relatywnie głębszą penetrację do czasu uaktywnienia się centrów wychwytu.

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

W przypadku tym rozważamy błądzenie 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 ½ w lewą lub w prawą stronę.

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

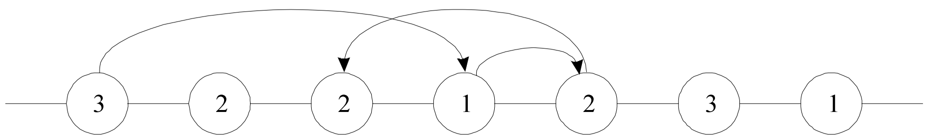
$$P_i(t+1) = \frac{1}{2}\left[(l_{i-2}-1)P_{i-2}(t) + (2-l_{i-1})P_{i-1}(t) + (2-l_{i+1})P_{i+1}(t) + (l_{i+2}-1)P_{i+2}(t)\right] \quad (1)$$

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

Wtedy dla średniego pola uzyskujemy współczynnik dyfuzji

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

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



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

W modelu tym rozważamy błądzenie 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

$$\begin{aligned} P_i(t+1) = \frac{1}{2}[\frac{1}{2}(l_{i-3}-2)(l_{i-3}-1)P_{i-3}(t) + (3-l_{i-2})(l_{i-2}-1)P_{i-2}(t) + \\ + \frac{1}{2}(l_{i-1}-3)(l_{i-1}-2)P_{i-1}(t) + \frac{1}{2}(l_{i+1}-3)(l_{i+1}-2)P_{i+1}(t) + \\ + (3-l_{i+2})(l_{i+2}-1)P_{i+2}(t) + \frac{1}{2}(l_{i+3}-2)(l_{i+3}-1)P_{i+3}(t)] \end{aligned} \tag{2}$$

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 błądzenia losowego z nieograniczoną długością skoku

W przypadku tym rozważamy błądzenie 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

$$l_i = 1, 2, ..., n, ...$$

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

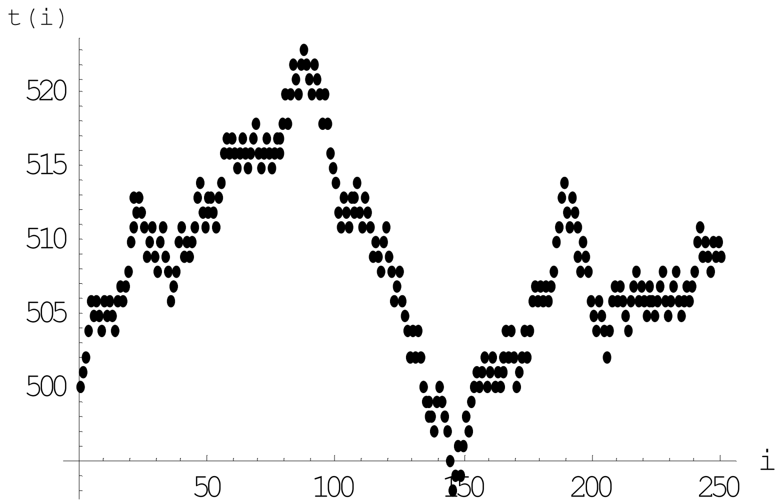
Prawdopodobieństwo $P_i(t)$, kiedy poruszająca się cząsteczka jest w miejscu i w czasie t, wyraża rekurencyjny związek

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

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, umożliwiających 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 Reviewe 1997, 55, 1, 71-78.

[2] Feller W., Wstęp do rachunku prawdopodobieństwa, PWN, Warszawa 1960.