

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КАФЕДРА ПРИКЛАДНОЇ МАТЕМАТИКИ ТА МОДЕЛЮВАННЯ
СКЛАДНИХ СИСТЕМ

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на тему:

"Комп'ютерне моделювання процесів аномальної дифузії у просторово розподілених періодичних системах"

Завідувач
випускаючої кафедри

_____ Лисенко О.В.
(підпис)

Керівник роботи

_____ Князь І.О.
(підпис)

Студент групи ПМ-41

_____ Колінько І.С.
(підпис)

Погоджено на засіданні кафедри " __ " _____ 2018 р.,

Суми, 2018р.

Реферат

Дипломна робота 31 стор., 5 рис., 3 додатка.

Об'єкт дослідження – процес дифузії системи з двох частинок у кристалічній решітці.

Мета роботи – дослідження аномальної дифузії.

У роботі побудована математична модель руху двох взаємодіючих частинок частинок у періодичному потенціалі, написана програма для побудови траєкторій руху і розрахунку коефіцієнта дифузії, також побудовані графіки залежності дисперсії від часу при різних коефіцієнтах тертя.

Зміст

1. Вступ.....	4
2. Літературний огляд.....	5
2.1 Дифузія.....	5
2.2 Аномальна дифузія.....	6
2.3 Потенціал Леннард-Джонса.....	7
2.4 Білий шум.....	8
3. Постановка задачі та математична модель.....	9
4. Висновки.....	12
5. Список джерел інформації.....	13
Додаток А.....	14
Додаток Б.....	24
Додаток С.....	31

1. Вступ

Чисельне моделювання процесів дифузії сьогодні набуває великого значення через те, що всебічне розуміння дифузійних процесів в твердих тілах є одним із ключових питань в розробці матеріалів, так як в твердих тілах саме дифузія є основним механізмом масопереносу і контролює процеси перерозподілу речовини.

Роль аномальної дифузії привернула увагу в літературі для опису багатьох фізичних сценаріїв, найбільш помітних у складних системах, наприклад, дифузії білків у клітинах або дифузії через пористе середовище. Субдифузія була запропонована як міра макромолекулярного скупчення в цитоплазмі.

Нещодавно аномальна дифузія була виявлена в декількох системах, включаючи ультрахолодні атоми, теломери в ядрі клітин, і в руху одиночних частинок цитоплазми. Аномальна дифузія також виявляється в інших біологічних системах, включаючи інтервали серцебиття та в послідовності ДНК.

Щоденні коливання кліматичних змінних, таких як температура, можна розглядати як етапи випадкових скачків або дифузії і були визнані аномальними. У 1926 році, використовуючи атмосферні кулі, Льюїс Річардсон продемонстрував, що атмосфера також демонструє супердифузію.

Інтересу в науковій спільноті полягає в тому, що коли виявляється процес дифузії аномального типу, завдання полягає в розумінні основного механізму, який його викликає. Існує ряд структур, які породжують аномальну дифузію, які в даний час є модними в рамках статистичної фізики. Це довготривалі кореляції між сигналами безперервних випадкових прогулянок та дробовим броунівським рухом, дифузією колоїдних частинок у бактеріальних суспензіях та дифузією в неупорядкованих середовищах. Аномальна субдифузія в клітинному цитозолі може бути артефактом, що виникає внаслідок використання полідисперсних зондів для вимірювань.

2. Літературний огляд

2.1 Дифузія

Дифузія - рух молекул або атомів з регіону з високою концентрацією (або високим хімічним потенціалом) до області низької концентрації (або низького хімічного потенціалу) в результаті випадкового руху молекул або атомів. Дифузією керує градієнт хімічного потенціалу дифундуючих видів.[4]

Градієнт - це зміна величини кількості, наприклад, концентрація, тиск або температура із зміною іншої змінної, як правило, відстань. Зміна концентрації зі зміною відстані називається градієнтом концентрації, зміна тиску зі зміною відстані називається градієнтом тиску, а зміна температури зі зміною відстані називається температурним градієнтом.

Відмітною особливістю дифузії є те, що вона залежить від випадкового руху частинок і призводить до перемішування або масового транспорту, не вимагаючи спрямованого об'ємного руху.

Міра дифузії

Мірою дифузії є маса ΔM речовини, що продифундувала за одиницю часу через одиницю площі поверхні контактних речовин. Величина ΔM тим більша, чим більша зміна концентрації на одиницю довжини вздовж напрямку, у якому проходить дифузія.

Випадкові блукання

Для частки характерна пропорційність середнього зміщення квадратному кореню з часу.

$$\langle (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 \rangle \sim t$$

де x, y, z — координати частки в момент часу t , x_0, y_0, z_0 — її координати в початковий момент часу. Це співвідношення дозволяє ввести кількісну характеристику дифузії — коефіцієнт дифузії D :

$$D = \frac{1}{6t} \langle (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 \rangle$$

2. 2 Аномальна дифузія

Аномальна дифузія – дифузія з нелінійною залежністю від часу, протилежно до звичайної дифузії, при якій квадрат середньо квадратичного зміщення

σ_r^2 - лінійна функція від часу. Фізично це означає кількість простору яку частинка «дослідила».[2]

Аномальна дифузія описується степеневим законом

$$\sigma_r^2 \sim Dt^\alpha,$$

де D – це коефіцієнт дифузії а t – час.

Якщо $\alpha = 1$ то це звичайна дифузія,

$\alpha > 1$ – супер-дифузія,

$\alpha < 1$ – суб-дифузія.

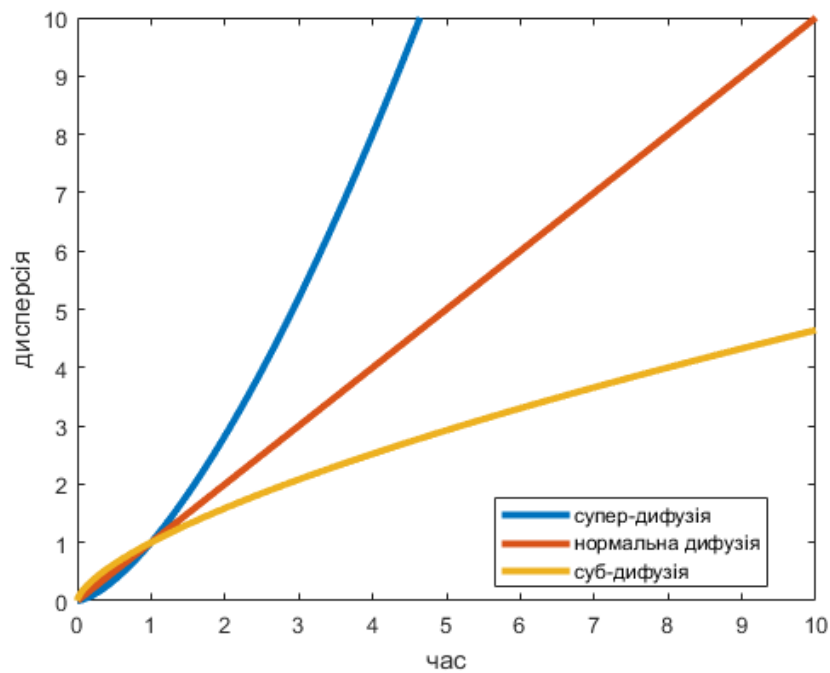


Рисунок 1. Залежність дисперсії від часу

2.3 Потенціал Леннард-Джонса

Потенціал Леннард-Джонса (також називається потенціалом L-J, потенціал 6-12 або потенціалом 12-6) є математично простим моделлю, що наближає взаємодію пари нейтральних атомів або молекул. Форма цього міжатомного потенціалу вперше була запропонована Джоном Леннардом-Джонсом у 1924 році.[5]

Він записується в наступному вигляді

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

де r — відстань між центрами частинок, ε — глибина потенційної ями, σ — відстань на якій енергія взаємодії дорівнює нулю. Параметри ε і σ це характеристики данної речовини.

На великій віддалі нейтральні атоми притягаються завдяки ван дер Ваальсовим силам, які виникають внаслідок взаємної поляризації електронних оболонок і є взаємодією між наведеними дипольними моментами. Для нейтральних атомів, які не мають власного дипольного моменту, це притягання, обернено пропорційне шостому степеню віддалі.

На близьких віддальх нейтральні атоми, які не утворюють між собою хімічних сполук, відштовхуються, завдяки принципу виключення Паулі. Закон цього відштовхування в загальному випадку невідомий і модулюється наближеними формулами. Потенціал Леннард-Джонса є однією з таких формул. Дванадцятий степінь у законі відштовхування вибраний у ньому довільно, для спрощення математичних перетворень.

Потенціал Леннард-Джонса має мінімум на віддалі r між атомами. Глибина цього мінімуму ε .

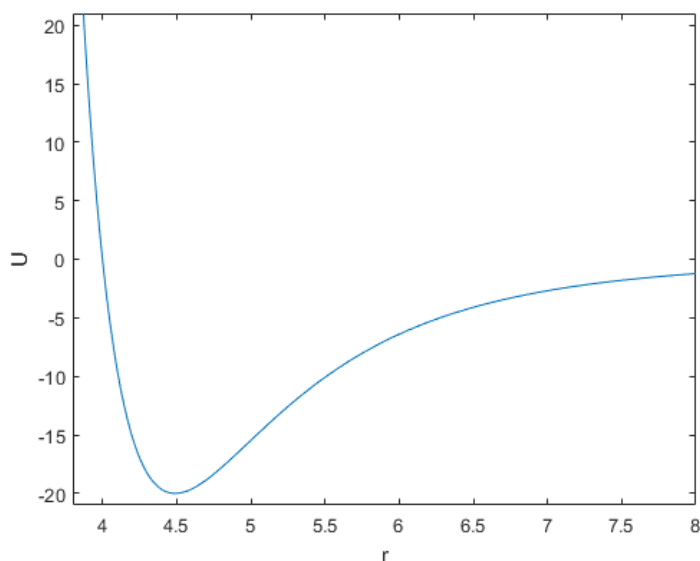


Рисунок 2. Характерний вигляд потенціалу Леннард-Джонса

2.4 Білий шум

Білий шум є випадковим сигналом, що має однакову інтенсивність на різних частотах, надаючи йому спектральну щільність постійної потужності. Білий шум відноситься до статистичної моделі для сигналів та джерел сигналів, а не до будь-якого конкретного сигналу.[3]

У дискретний час білий шум є дискретним сигналом, вибірки якого розглядаються як послідовність серійно некорельованих випадкових величин з нульовою середньою та кінцевою дисперсією. Залежно від контексту, можна також вимагати, щоб зразки були незалежними і мали однаковий розподіл імовірності (іншими словами, незалежні та ідентично розподілені випадкові величини є найпростішим уявленням білого шуму). Зокрема, якщо кожен зразок має нормальний розподіл з нульовим середнім значенням, то сигнал вважається гауссовським білим шумом.

Некорельованість у часі не обмежує значення сигналу які він може прийняти. Можливий будь-який розподіл значен. Навіть бінарний сигнал, який може приймати лише значення 1 або -1, буде білим, якщо послідовність статистично не корелюється. Шум, що має безперервний розподіл, наприклад нормальний розподіл, звичайно може бути білим.

3. Постановка задачі та математична модель

В даній роботі проводиться дослідження процесу дифузії системи з двох взаємодіючих частинок, які знаходяться у періодичному двовірному потенціалі.

На частинки впливають коефіцієнт тертя, речовини в якій вони знаходяться, а також випадкові флуктуації або шуми.

Рух частинки масою m описується рівнянням

$$m\ddot{x} = -\nabla V(x/\lambda) - \mu\dot{x} + \varepsilon(t) \quad (1)$$

де λ - це характеристична шкала довжини потенціалу. Параметр μ - це коефіцієнт тертя. ε - білий шум.

Неперервний періодичний потенціал задається рівнянням

$$V(x, y) = V_0 \cos(\pi x/\lambda + \pi y/\lambda) \cos(\pi x/\lambda - \pi y/\lambda) \quad (2)$$

Де V_0 - висота бар'єра в сідлових точках

Рівняння руху може бути переписано в безрозміреному вигляді, якщо позначити $r_x = x/\lambda$, $r_y = y/\lambda$, $s = \sqrt{V_0/m\lambda t}$, залишаться два незалежних параметра безрозмірна температура $T = k_B t/V_0$ та безрозмірне тертя

$$\gamma = \mu\lambda/\sqrt{mV_0}.$$

Рівняння приймає вигляд

$$\begin{cases} \ddot{x} = \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) - \gamma\dot{x} + \varepsilon_x \\ \ddot{y} = \sin\left(\frac{2\pi y}{\lambda}\right) - \gamma\dot{y} + \varepsilon_y \end{cases} \quad (3)$$

Для врахування взаємодії частинок між собою потрібно додати потенціал Леннарда-Джонса. Сила взаємодії знаходиться як

$$F = -(24\varepsilon\sigma^6(r^6 - 2\sigma^6)/r^{13}) \quad (4)$$

Де r - відстань між частинками, ε - глибина потенціальної ями. а σ відстань на якій сила взаємодії дорівнює нулю.

Тоді рівняння приймає вид

$$\begin{cases} \ddot{x} = \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) - \gamma\dot{x} + \varepsilon_x + F_x \\ \ddot{y} = \sin\left(\frac{2\pi y}{\lambda}\right) - \gamma\dot{y} + \varepsilon_y + F_y \end{cases} \quad (5)$$

Рівняння чисельно вирішується методом Ейлера.

Для створення кореляції між шумами потрібно згенерувати випадкову величину, яка буде спільна для обох шумів, і додати до неї окремо згенеровані для кожного з шумів випадкові величини.

$$\begin{cases} \varepsilon_{x1} = \kappa * \varepsilon_{\text{спіл}} + (1 - \kappa) * \varepsilon_{\text{вип1}} \\ \varepsilon_{x2} = \kappa * \varepsilon_{\text{спіл}} + (1 - \kappa) * \varepsilon_{\text{вип2}} \end{cases}, \quad (6)$$

де κ – сила зв'язку.

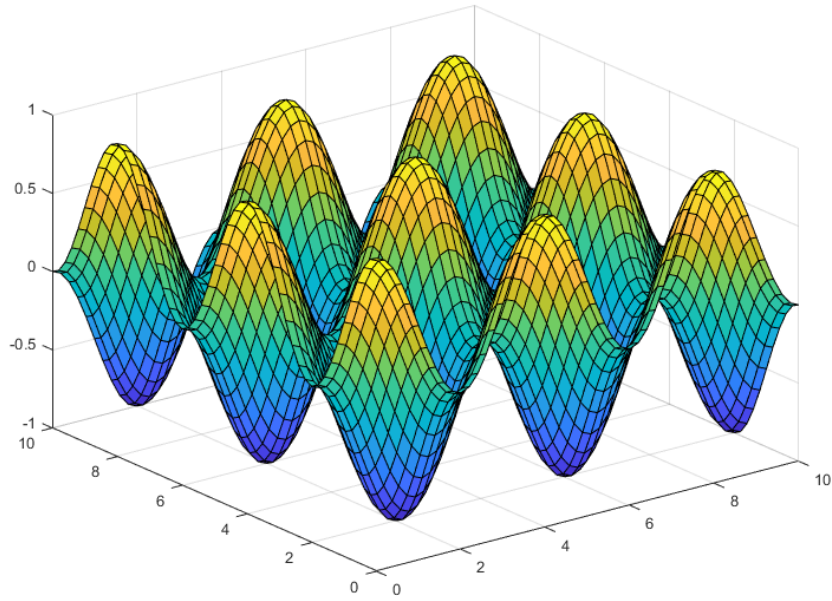
Для розрахунку коефіцієнта дифузії використовується формула

$$D = \langle l^2 \rangle / \tau \quad (7)$$

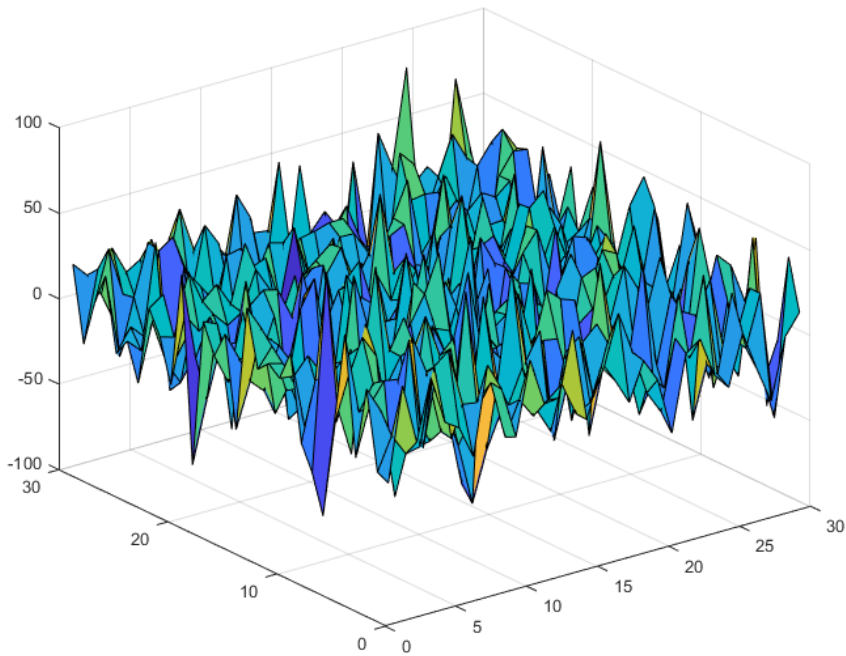
Де $\langle l^2 \rangle$ – середня величина стрибка, τ – середній час стрибка.

Потенціали

1. Вигляд періодичного потенціалу



2. Вигляд випадкового потенціалу



4. Висновки

В рамках чисельного моделювання отримані наступні результати: при малих значеннях коефіцієнту тертя у системі з двох частинок можлива реалізація режиму аномальної дифузії. При збільшенні коефіцієнту тертя система переходить до режиму нормальної дифузії.

Коефіцієнт дифузії залежить лише від тертя в системі, і залишається у рамках статистичної похибки при додаванні другої частинки, та зміні сили зв'язку між шумами.

5. Список джерел інформації

1. Diffusion on a solid surface: Anomalous is normal J.M. Sancho , A.M. Lacasta , K. Lindenberg , I. M. Sokolov and A.H. Romero
2. https://en.wikipedia.org/wiki/Anomalous_diffusion
3. https://en.wikipedia.org/wiki/White_noise
4. <https://en.wikipedia.org/wiki/Diffusion>
5. https://en.wikipedia.org/wiki/Lennard-Jones_potential

Додаток А

Програмна реалізація

1. Програма для побудови періодичного потенціалу

```
dt=0.2;
l=4;
k=10;
x=0:dt:k;
y=0:dt:k;
[x,y]=meshgrid(x,y);
V=cos(pi*x/l+pi*y/l).*cos(pi*x/l-pi*y/l);
surf(x,y,V)
```

2. Програма для побудови випадкового потенціалу

```
n=50;
z=randn(n)*25;
surf(z)
```

3. Програма для розрахунку похідних

```
syms x y l v
a=diff(v*cos(pi*x/l+pi*y/l)*cos(pi*x/l-pi*y/l),y);
simplify(a)

syms E S r
a=-diff(4*E*((S/r)^12-(S/r)^6),r);
simplify(a)
```

4. Програма для побудови траєкторій руху і розрахунку коефіцієнта дифузії для однієї частинки

```

g=1; %коэффициент трения
l=4; %период потенциала

dt=10^(-3);

%высота случайного потенциала
hight=25;

h1 = animatedline('MaximumNumPoints',Inf,'color','r');

tf=1000;%время

%объявление начальных условий
x=2;
y=2;
Vx=0;
Vy=0;

%коэффициенты для расчета диффузии
xesc=x;
yesc=y;
jumpdist=0;
jumptime=0;
lastjumptime=0;
jumpnum=0;

for t=0:dt:tf
    %генерация шума
    Ex=randn*hight;
    Ey=randn*hight;

    %сила

    x=x+Vx*dt;
    Vx=Vx-(-sin(2*pi*x/l)+g*Vx+Ex)*dt;
    y=y+Vy*dt;
    Vy=Vy-(-sin(2*pi*y/l)+g*Vy+Ey)*dt;

    addpoints(h1,x,y);
    %drawnow limitrate;

    %диффузия

```

```
if floor(x/l)~=floor(xesc/l) || floor(y/l)~=floor(yesc/l)
    jumpdist=jumpdist + (x-xesc)^2+(y-yesc)^2;

    xesc=x; yesc=y;
    jumpnum=jumpnum+1;
    jumptime=jumptime+t-lastjumptime;
    lastjumptime=t;
end
end
jumpdist=jumpdist/jumpnum;
jumptime=jumptime/jumpnum;
D=jumpdist/jumptime;

title('g='+string(g)+' diffusion='+string(D));

xlabel('x');
ylabel('y');
```


5. Програма для побудови траєкторій руху і розрахунку коефіцієнта дифузії для двох частинок

```

clear;
g=0.001; %коэффициент трения
l=4; %период потенциала

dt=10(-3);

%коэффициенты для потенциала взаимодействия
sigma=4;
eps=20;

%высота случайного потенциала
hight=25;

h1 = animatedline('MaximumNumPoints',Inf,'color','r');
h2 = animatedline('MaximumNumPoints',Inf,'color','b');
h3 = animatedline('MaximumNumPoints',Inf,'linewidth',3);

noe=100;%кол-во экспериментов
tf=1000;%время

%объявление начальных условий
x1=2;
y1=2;
Vx1=0;
Vy1=0;

x2=2;
y2=-2;
Vx2=0;
Vy2=0;

%коэффициенты для расчета диффузии
x1esc=x1;
y1esc=y1;
jumpdist1=0;
jumptime1=0;
lastjumptime1=0;
jumpnum1=0;

x2esc=x2;
y2esc=y2;
jumpdist2=0;

```

```

jumptime2=0;
lastjumptime2=0;
jumpnum2=0;

% задание параметров шума
T=0.01; % время корреляции
ro=exp(-dt/T);
Ex0=0;
Ex1=0;
Ex2=0;
Ey0=0;
Ey1=0;
Ey2=0;
kappa=0.1; % коэфф корреляции

for t=0:dt:tf
    % генерация шума
    Ex=hight*randn;
    Ex1=hight*randn;
    Ex2=hight*randn;
    if sign(Ex)~=sign(Ex1)
        Ex1=Ex1*(-1);
    end
    if sign(Ex)~=sign(Ex2)
        Ex2=Ex2*(-1);
    end
    Ex1=kappa*Ex+(1-kappa)*Ex1;
    Ex2=kappa*Ex+(1-kappa)*Ex2;

    Ey=hight*randn;
    Ey1=hight*randn;
    Ey2=hight*randn;
    if sign(Ey)~=sign(Ey1)
        Ey1=Ey1*(-1);
    end
    if sign(Ey)~=sign(Ey2)
        Ey2=Ey2*(-1);
    end
    Ey1=kappa*Ey+(1-kappa)*Ey1;
    Ey2=kappa*Ey+(1-kappa)*Ey2;

    % рассчитываем расстояние
    rx=x2-x1; ry=y2-y1;
    r=sqrt(rx^2+ry^2);

```

```

if r<1
    r=1;
end

%сила
F=-(24*eps*sigma^6*(r^6 - 2*sigma^6))/r^13;

x1=x1+Vx1*dt;
Vx1=Vx1-(-sin(2*pi*x1/l)+g*Vx1+Ex1+F*rx/r)*dt;
y1=y1+Vy1*dt;
Vy1=Vy1-(-sin(2*pi*y1/l)+g*Vy1+Ey1+F*ry/r)*dt;

x2=x2+Vx2*dt;
Vx2=Vx2-(-sin(2*pi*x2/l)+g*Vx2+Ex2-F*rx/r)*dt;
y2=y2+Vy2*dt;
Vy2=Vy2-(-sin(2*pi*y2/l)+g*Vy2+Ey2-F*ry/r)*dt;

addpoints(h1,x1,y1);
addpoints(h2,x2,y2);
% drawnow limitrate;

%центр масс
x=(x2+x1)/2;
y=(y2+y1)/2;
addpoints(h3,x,y);

if floor(x1/l)~=floor(x1esc/l) || floor(y1/l)~=floor(y1esc/l)
    jumpdist1=jumpdist1 + (x1-x1esc)^2+(y1-y1esc)^2;

    x1esc=x1; y1esc=y1;
    jumpnum1=jumpnum1+1;
    jumptime1=jumptime1+t-lastjumptime1;
    lastjumptime1=t;
end
if floor(x2/l)~=floor(x2esc/l) || floor(y2/l)~=floor(y2esc/l)
    jumpdist2=jumpdist2 + (x2-x2esc)^2+(y2-y2esc)^2;

    x2esc=x2; y2esc=y2;
    jumpnum2=jumpnum2+1;
    jumptime2=jumptime2+t-lastjumptime2;
    lastjumptime2=t;
end

```

end

```
jumpdist1=jumpdist1/jumpnum1;  
jumptime1=jumptime1/jumpnum1;  
D1=jumpdist1/jumptime1;
```

```
jumpdist2=jumpdist2/jumpnum2;  
jumptime2=jumptime2/jumpnum2;  
D2=jumpdist2/jumptime2;  
D=(D1+D2)/2;
```

```
legend('1-частица','2-частица','центр тяжести','location','best')  
title('kappa='+string(kappa)+' g='+string(g)+' diffusion='+string(D));
```

```
xlabel('x');  
ylabel('y');
```

6. Програма для розрахунку и побудови дисперсії двох частинок

```

clear;
g=1; %коэффициент трения
l=4; %период потенциала

dt=10(-3);

%коэффициенты для потенциала взаимодействия
sigma=4;
eps=20;

%высота случайного потенциала
hight=25;

noe=100;%кол-во экспериментов
tf=1000;%время

travel=zeros(noe,tf/dt+1);
for i=1:noe
n=1;

%объявление начальных условий
x1=2;
y1=2;
Vx1=0;
Vy1=0;

x2=2;
y2=-2;
Vx2=0;
Vy2=0;

%задание параметров шума
Ex=0;
Ex1=0;
Ex2=0;
Ey=0;
Ey1=0;
Ey2=0;
kappa=0.1; %коэфф корреляции

for t=0:dt:tf

```

```

%генерация шума
Ex=hight*randn;
Ex1=hight*randn;
Ex2=hight*randn;
if sign(Ex)~=sign(Ex1)
    Ex1=Ex1*(-1);
end
if sign(Ex)~=sign(Ex2)
    Ex2=Ex2*(-1);
end
Ex1=kappa*Ex+(1-kappa)*Ex1;
Ex2=kappa*Ex+(1-kappa)*Ex2;

Ey=hight*randn;
Ey1=hight*randn;
Ey2=hight*randn;
if sign(Ey)~=sign(Ey1)
    Ey1=Ey1*(-1);
end
if sign(Ey)~=sign(Ey2)
    Ey2=Ey2*(-1);
end
Ey1=kappa*Ey+(1-kappa)*Ey1;
Ey2=kappa*Ey+(1-kappa)*Ey2;

%расчитываем расстояние
rx=x2-x1;
ry=y2-y1;
r=sqrt(rx^2+ry^2);
if r<1
    r=1;
end

%сила
F=-(24*eps*sigma^6*(r^6 - 2*sigma^6))/r^13;

x1=x1+Vx1*dt;
Vx1=Vx1-(-sin(2*pi*x1/l)+g*Vx1+Ex1+F*rx/r)*dt;
y1=y1+Vy1*dt;
Vy1=Vy1-(-sin(2*pi*y1/l)+g*Vy1+Ey1+F*ry/r)*dt;

x2=x2+Vx2*dt;
Vx2=Vx2-(-sin(2*pi*x2/l)+g*Vx2+Ex2-F*rx/r)*dt;
y2=y2+Vy2*dt;

```

$$V_{y2} = V_{y2} - (-\sin(2\pi y_2/l) + g * V_{y2} + E_{y2} - F * r_y/r) * dt;$$

```

%ЦЕНТР МАСС
x=(x2+x1)/2;
y=(y2+y1)/2;
% addpoints(h3,x,y);
travel(i,n)=sqrt(x^2+y^2);
n=n+1;
end
end

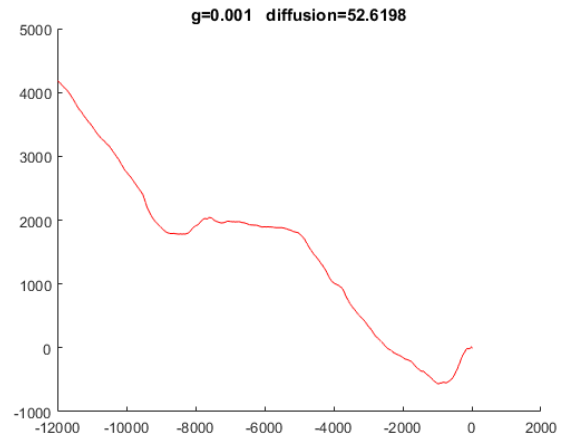
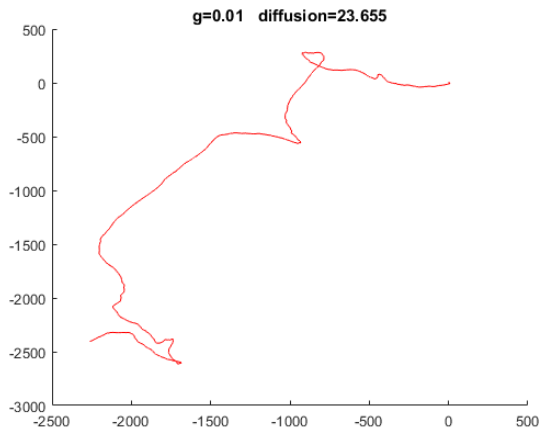
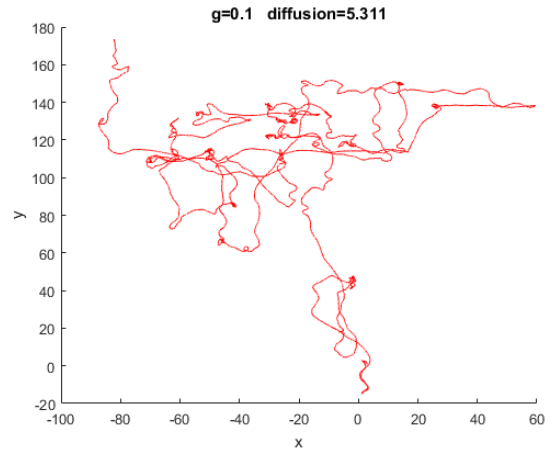
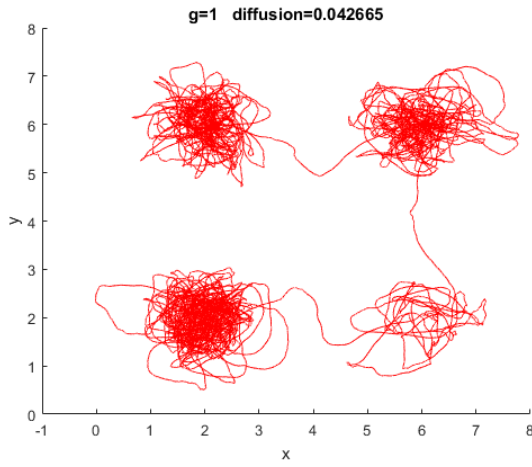
t=0:dt:tf;
plot(t,std(travel).^2);
title('kappa='+string(kappa)+' g='+string(g));

xlabel('t');
ylabel('<D>');

```

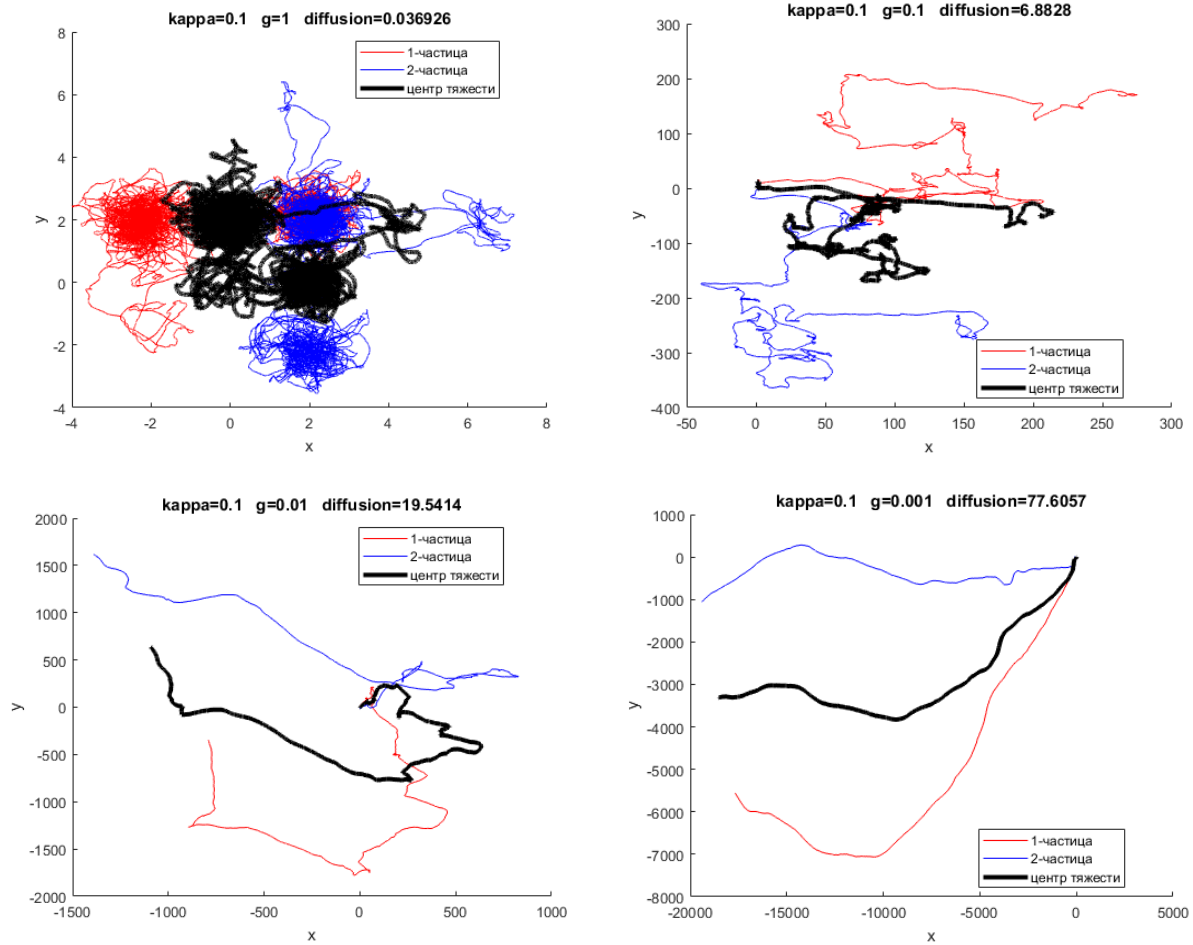
Додаток Б

1. Рух однієї частинки

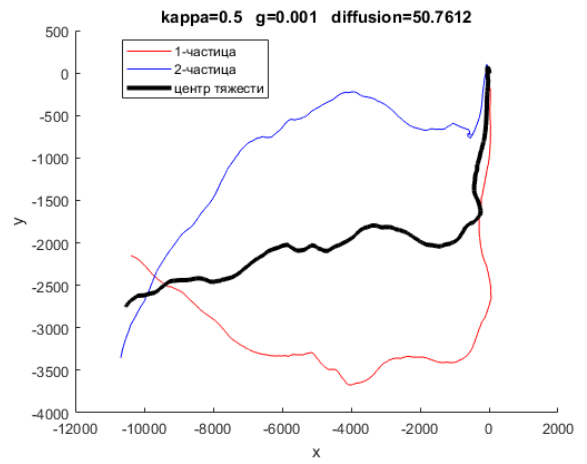
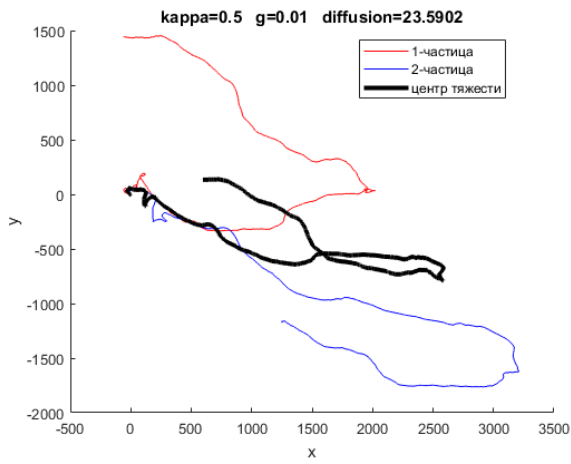
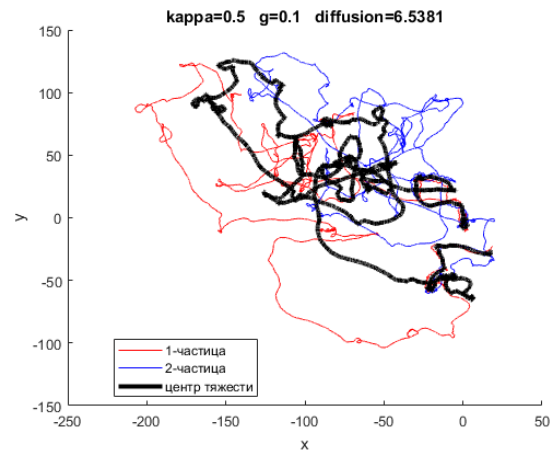
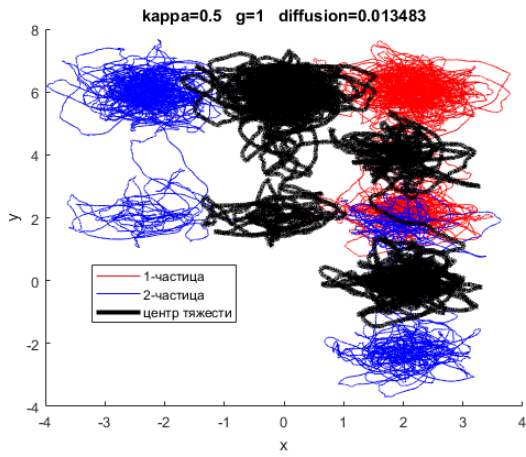


Рух однієї частинки з різними коефіцієнтами тертя γ .

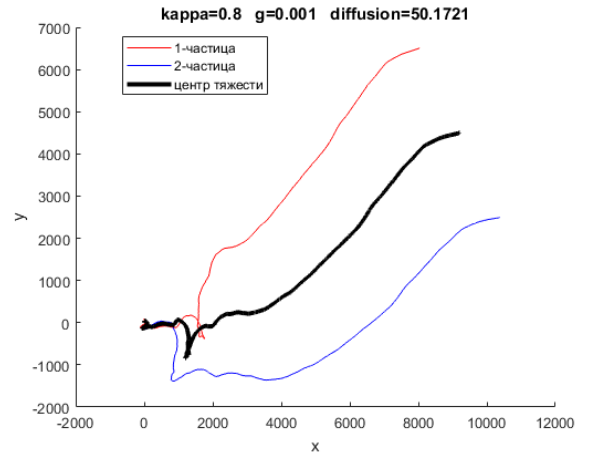
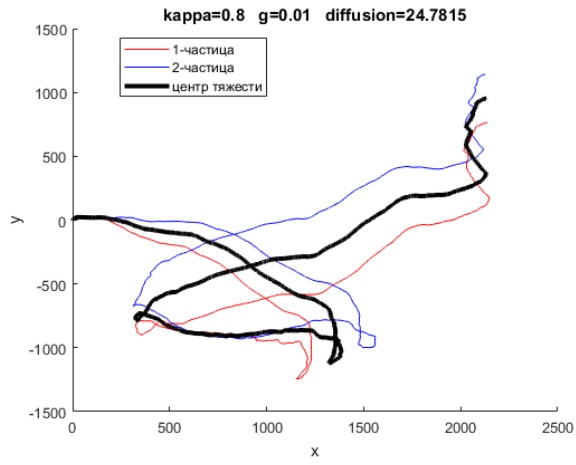
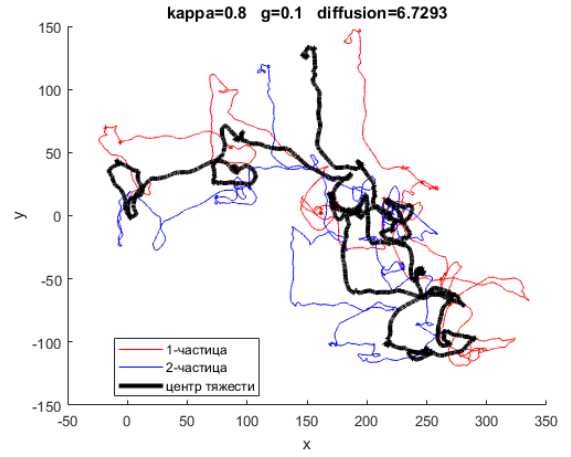
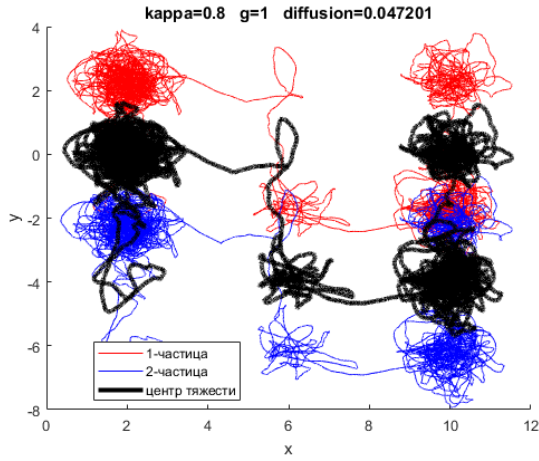
2. Рух двох частинок



Рух двох зв'язаних частинок з різними коефіцієнтами тертя γ , при $\kappa = 0.1$.

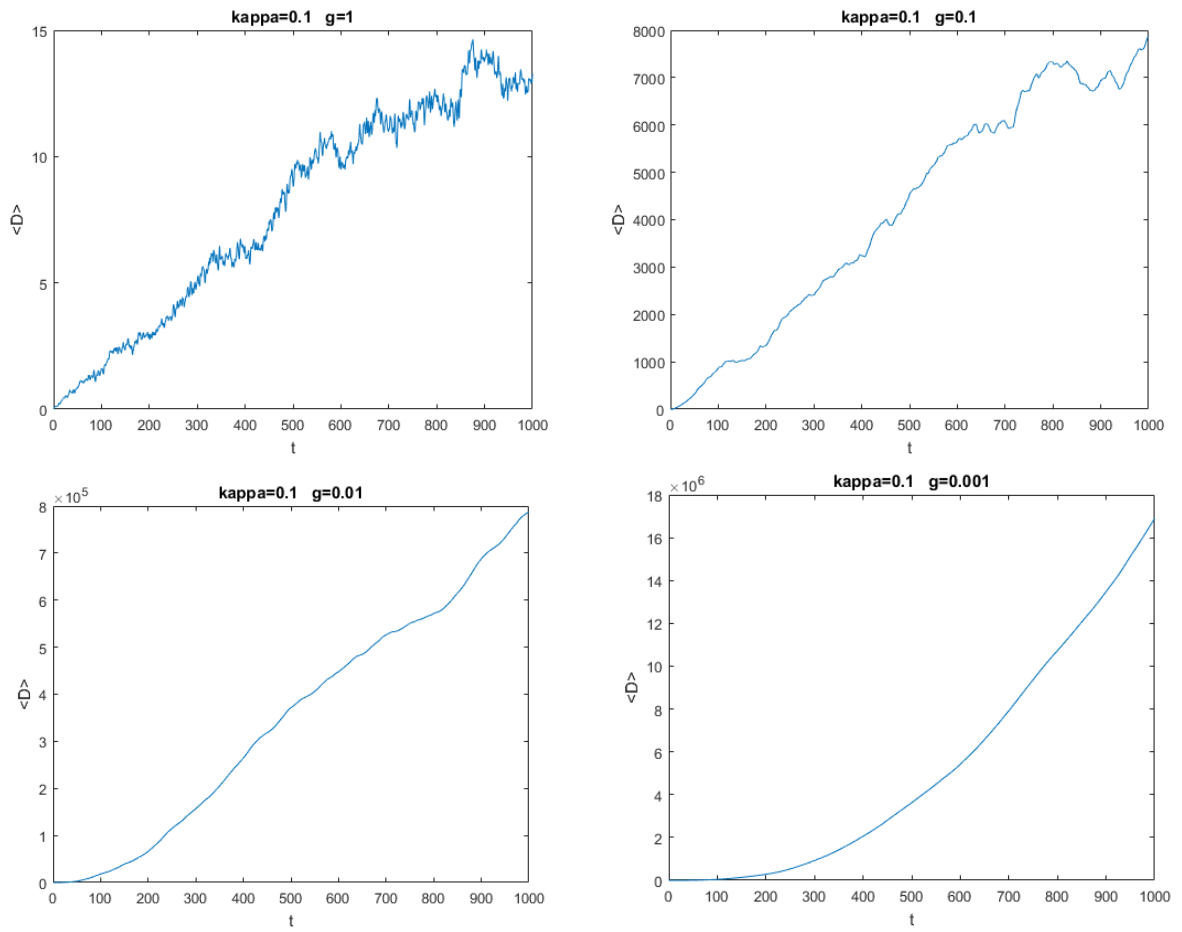


Рух двох зв'язаних частинок з різними коефіцієнтами тертя γ , при $\kappa = 0.5$.

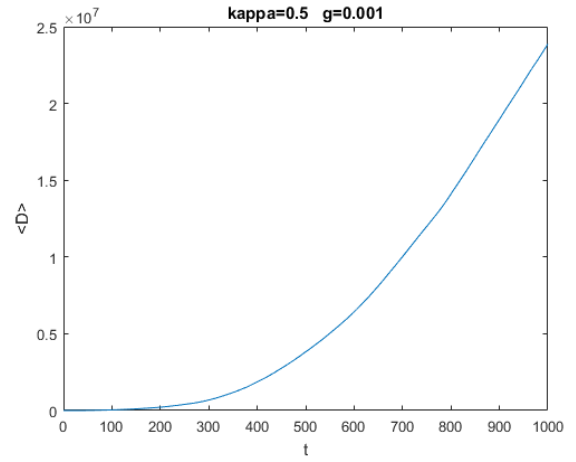
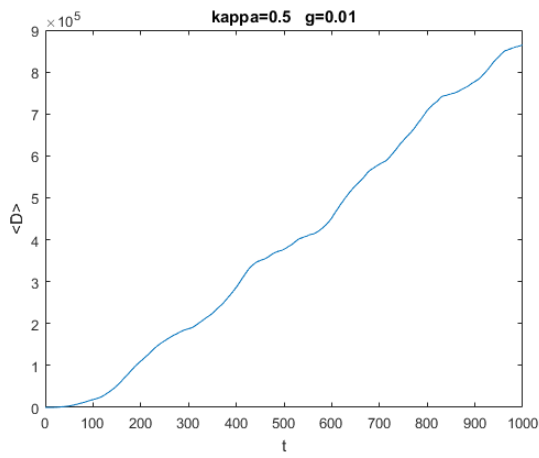
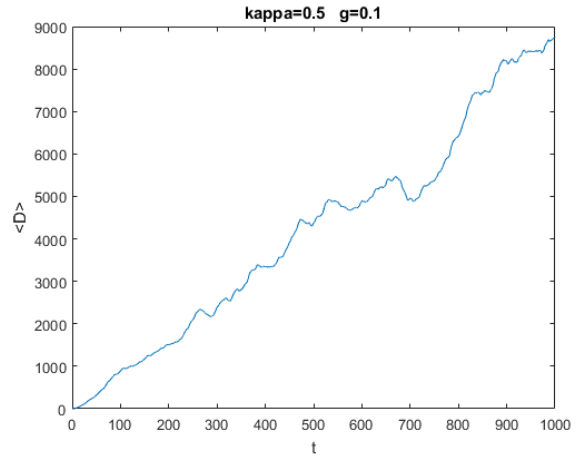
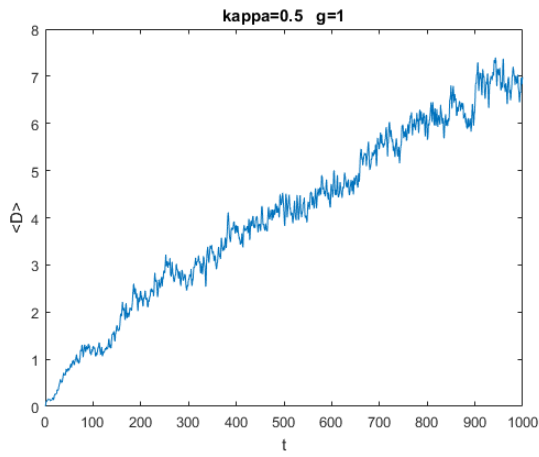


Рух двох зв'язаних частинок з різними коефіцієнтами тертя γ , при $\kappa = 0.8$.

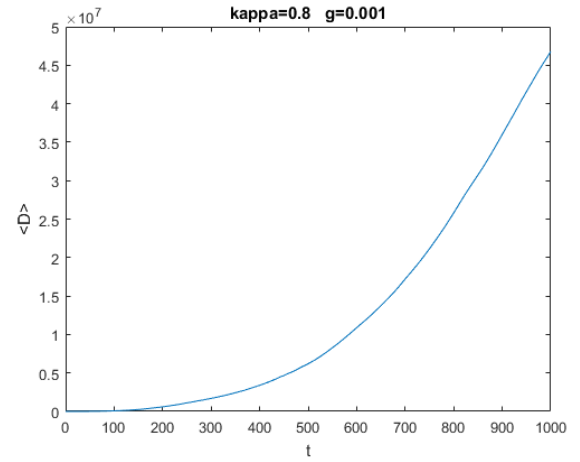
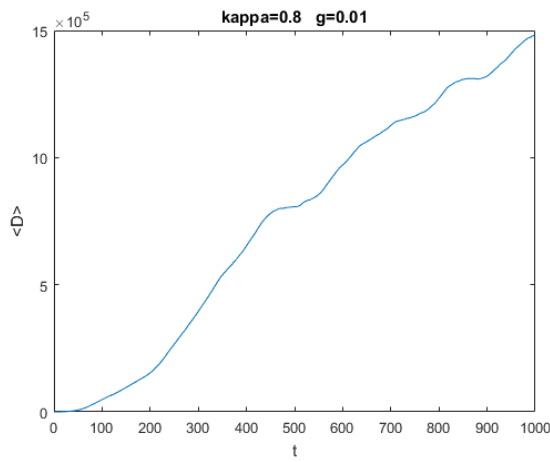
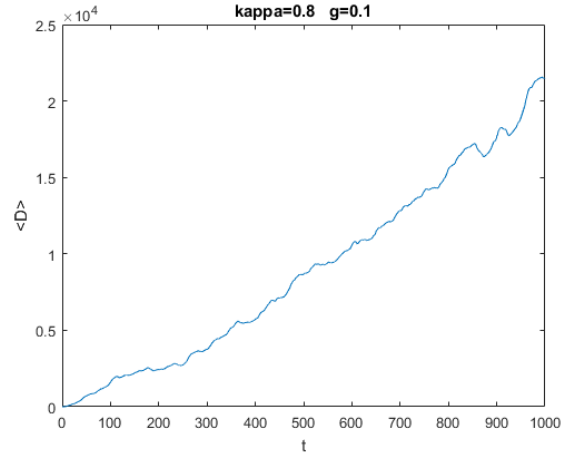
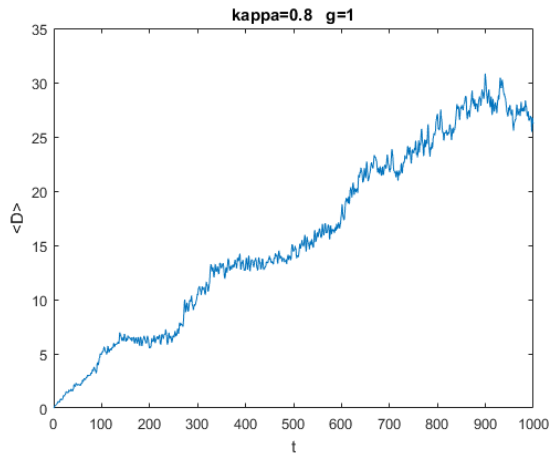
3. Дисперсія двох частинок із різними коефіцієнтами зв'язку між шумами



Залежність дисперсії від часу при різних коефіцієнтах тертя γ , при $\kappa = 0.1$.



Залежність дисперсії від часу при різних коефіцієнтах тертя γ , при $\kappa = 0.5$.



Залежність дисперсії від часу при різних коефіцієнтах тертя γ , при $\kappa = 0.8$.

Додаток С

Залежність коефіцієнтів дифузії від тертя і сили зв'язку між шумами

	1 частинка	2 частинки		
		$\kappa=0,1$	$\kappa=0,5$	$\kappa=0,8$
$\gamma=1$	0,042	0,037	0,013	0,047
$\gamma=0,1$	5,31	6,88	6,53	6,73
$\gamma=0,01$	23,66	19,54	23,59	24,78
$\gamma=0,001$	52,62	77,6	50,76	50,17