

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский физико-технический институт (государственный университет)»
Физтех-школа Фундаментальной и Прикладной Физики
Кафедра «Проблемы теоретической физики»

Направление подготовки: Прикладные математика и физика

Направленность (профиль) подготовки: Фундаментальная и прикладная физика

Форма обучения: очная

Выпускная квалификационная работа
«Транспорт в нестационарной системе с широким спектром времен переключения»
(бакалаврская работа)

Студент:

Мозоленко Вячеслав Константинович

(подпись бакалавра)

Научный руководитель:

д.ф.-м.н., проф. Иоселевич Алексей
Соломонович

(подпись научного руководителя)

Москва 2018

Оглавление

1 Введение	2
1.1 Исследуемая модель	2
1.2 Мотивация	2
1.3 Теория стационарной диффузии	3
2 Теория динамической диффузии	5
2.1 Известные результаты	5
2.2 Классификация связей	5
2.3 Вклад типичных путей	6
2.4 Вклад аномальных путей	6
3 Компьютерная симулация	8
3.1 Свойства первого прохождения	8
3.2 Закон Фика	9
3.3 Зависимость $D(p_c)$	10
3.4 Профиль размытия	10
4 Обсуждение результатов	12
5 Список литературы	13

Глава 1

Введение

1.1 Исследуемая модель

Рассмотрим квадратную двумерную решетку, в которой каждая связь ij может случайным образом переключаться между открытым (пропускающим) и закрытым (не пропускающим) состояниями. Пусть переключение происходит по закону Пуассона со средним временем τ_{ij} , которое является собственным параметром связи и может быть распределено экспоненциально широко: $\tau_{ij} = \tau_0 \exp^{up_{ij}}$, где p_{ij} - независимая случайная величина, равномерно распределенная на $[0, 1]$.

Станем наблюдать за распространением частицы, помещенной в некий начальный узел и случайно блуждающей по системе в дискретном времени $t = n\Delta t$, где n - натуральное, а Δt - шаг дискретизации. В каждый момент времени t частица в узле i делает шаг в один случайно выбранный из соседних узлов j , для которого связь ij в данный момент открыта. Если таких узлов нет, то частица остается на месте.

Основным наблюдаемым в нашей работе станет временная эволюция $\langle r^2 \rangle = \langle \langle r^2 \rangle_{walks} \rangle_{histories}$, где усреднение понимается в двухступенчатом смысле: сначала по всем разрешенным путям внутри одной конкретной конфигурации решетки (образца), а затем - по всем "историям образца", регистрирующим то, в какие моменты времени какие связи были открыты, а какие - закрыты.

1.2 Мотивация

Исследуемая задача в значительной степени модельна, но тем не менее мы полагаем, что она поможет выявить некоторые свойства диффузионных систем, в которых структура среды изменяется с течением времени - совместно с процессом транспорта. Подобные системы описаны, например, в работах [2], [3], [4], однако в них всех рассматривается лишь одно, общее для всех элементов среды (или среды как целого) характерное время "обновления". В нашей же работе основным действующим лицом является именно экспоненциально широкое

распределение этих времен.

Примерами могут служить системы, в которых свойства прохождения меняются в соответствии с тем, в какой позиции находится некий атом (или группа атомов), расположенный на пути между двумя узлами, в которых может находиться диффундирующий объект, например, диффузия частиц растворителя в эмульсии, ионная диффузия в мягких полимерных электролитах или движение зарядов в мицеллах из центра к границе, в то время как сама мицеллярная структура претерпевает изменения как в результате закрутки молекулярных цепочек вокруг центра, так и (возможно) в результате молекулярного присоединения и разделения [2]. Соответственно, физический смысл и заключается в

$$up_{ij} = \begin{cases} W_{ij}/\omega_{ij} & T \ll \omega_{ij} \\ W_{ij}/T & T \gg \omega_{ij} \end{cases} \quad (1.1)$$

где W_{ij} - величина соответствующего потенциального барьера, ω_{ij} - характерная частота мод, ответственных за преодоление барьера, T - температура. Верхняя строка отвечает за квантовый предел с его туннельным эффектом, а нижняя - за классический, с термоактивационным механизмом преодоления барьера.

1.3 Теория стационарной диффузии

Эта часть полностью представляет из себя выписки из [1]. Нам понадобится некоторое количество свойств вышеописанных систем в стационарном случае.

Начнем мы с того, что над порогом перколяции плотность бесконечного кластера растет как $P(p) \sim (p - p_c)^\beta$, где $\beta_{2D} = 5/36$.

Для корреляционной длины $\xi(p) \sim |p - p_c|^{-\nu}$, $\nu_{2D} = 4/3$.

Если мы рассмотрим динамическую систему в некоторый произвольный момент времени, мы увидим, что половина связей открыта и половина - закрыта. Для квадратной решетки это означает, что мы находимся ровно в точке перколяционного перехода и, если бы эта мгновенная конфигурация была заморожена (не менялась бы со временем), то диффузия через систему была бы невозможна. Более количественно, усредненное по начальным положениям квадратичное смещение частиц выглядит как:

$$\langle r^2(t) \rangle = D_0 \Delta t (t/\Delta t)^{2/d_{av}} \quad (1.2)$$

где d_{av} - фрактальная размерность блуждания, связанная с показателем проводимости μ ($\mu_{2D} = 1.30$) и ν как $d_{av} = 2 + \frac{\mu}{\nu}$. В 2D $d_{av} \approx 2.97$. Легко видеть, что в пределе $t \rightarrow \infty$ эффективный усредненный по начальным точкам коэффициент диффузии на стационарной решетке $D_{eff} = D_0 (\Delta t/t)^{1-2/d_{av}} \rightarrow 0$.

Однако, если бы нас интересовало (и в пункте 2.4 нас будет интересовать) распространение частицы только по заведомо большому кластеру без нужды проводить усреднение по

малым кластерам, вместо D_{av} нам следует использовать

$$D_{inf} = D_0(\Delta t/t)^{1-2/d_{inf}} \quad (1.3)$$

где $d_{inf} = 2 + \frac{\mu - \beta}{\nu}$, что в 2D дает $d_{inf} \approx 2.88$.

Глава 2

Теория динамической диффузии

2.1 Известные результаты

Что нам известно о динамических системах к этому моменту? Пройдемся по данным в ссылках классическим работам, на которые мы еще будем ссылаться.

[2]: введено понятие динамической перколяционной модели, в которой параметрами среды являются доля открытых связей f и общее для всей среды время перестройки $\tau_{renewal}$. Показано, что на временах наблюдения много больших $\tau_{renewal}$ распространение частиц приобретает диффузионный характер $\langle r^2(t) \rangle = Dt$, а на малых - субдиффузионный. Добавим, что речь идет об одномерной модели.

[3]: идеи предыдущей статьи расширяются, рассматривается случай произвольной размерности, частотная зависимость $D(\omega)$ и сделан шаг в сторону систем, в которых связи могут переключаться с различными характерными временами.

[4]: статья других авторов, где глубже рассмотрена задача, в которой связи переключаются отдельно друг от друга (в отличии от предыдущих, где рассматривалась задача с полным обновлением системы как целого), но результат в целом, все тот же.

Из всего вышесказанного мы можем ожидать, например, выполнения закона Фика, но лишь на временах $t \gg \tau_0 e^u$

2.2 Классификация связей

Так как частоты переключения τ_{ij}^{-1} экспоненциально зависят от случайного параметра p_{ij} , мы разделим все связи на два класса:

- Медленные или квазистатические связи с $p_{ij} > p_c$
- Быстрые или "эффективно случайные" связи с $p_{ij} < p_c$

Более конкретное определение p_c станет ясно чуть позднее.

2.3 Вклад типичных путей

Что представляет из себя типичное поведение частицы в системе? Типичным, как и для стационарной решетки, является попадание частицы на маленький кластер (~ 1) из квазистационарных связей. Но тогда, в силу малости периметра этого кластера, время убегания из него ожидается $\sim t_0 e^{Au}$, где $A \sim 1$, то есть, экспоненциально велико, что даст экспоненциально малый коэффициент диффузии.

2.4 Вклад аномальных путей

Идея этого раздела заключается в учете очень редких путей, приводящих к относительно быстрой диффузии частицы. Мы полагаем, что такие пути пролегают по большим - критическим - кластерам и вносят основной вклад в $\langle r^2 \rangle$.

Чтобы оформить эту мысль количественно, рассмотрим следующие множества связей:

- Множество квазистатически открытых связей $B^{(-)}$, содержащее все связи с $p_{ij} > p_c$ и открытые в данный момент времени t . Средняя концентрация таких связей есть $n^{(-)} = (1 - p_c)/2 < 1/2$, то есть, чуть ниже переколяционного порога. В таком множестве не существует бесконечных кластеров.
- Множество $B^{(+)} = B^{(-)} \cup \{\text{множество всех быстрых связей}\}$. Концентрация связей из этого множества уже $n^{(+)} = (1 + p_c)/2$, что выше порога переколяции и, как следствие, существует бесконечный кластер $C^{(+)}$ с плотностью $P_{inf}(p_c) \sim p_c^\beta$, где $\beta = 5/36$.

В предположении малости p_c , $C^{(+)}$ состоит из больших квазистационарных кластеров из множества $B^{(-)}$, соединенных между собой короткими "мостиками" из "эффективно случайных" связей. Внутри квазистационарных кластеров случайное блуждание выглядит ровно так же, как и в стационарном случае, однако когда частица достигает границы этого кластера, она может перепрыгнуть через "мостик" в соседний кластер и продолжить свое блуждание уже там, либо же, если мостик оказался закрыт, частице придет уйти обратно в кластер и, быть может, попробовать позже еще раз. Результат следующей попытки будет статистически не зависеть от первой, если время, за которое частица путешествует через кластер

$$T(p) \sim \frac{\xi(p)^2}{D_{inf}[T(p)]} \quad (2.1)$$

будет значительно больше чем $\tau(p_c)$. Здесь D_{inf} - именно коэффициент диффузии из точки, обсужденный ранее.

Таким образом, легко видеть, что из 2.1 и 1.3 следует

$$T \sim \Delta t \left(\frac{\xi(p)^2}{\Delta t D_0} \right)^{d_{inf}/2} \sim p^{-\nu d_{inf}} \quad (2.2)$$

Теперь вычислим, собственно, p_c , используя условие $T(p) \gg \tau(p)$, необходимое для потери памяти большей частью "мостиков". Тогда мы получим граничное условие вида

$$p_c^{-\nu d_{inf}} = \frac{t_0}{\Delta t} e^{up_c} \quad (2.3)$$

Введем $z = up_c/\nu d_{inf}$ и получим $ze^z = \lambda$, где $\lambda = \frac{u}{\nu d_{inf}} \left(\frac{\Delta t}{t_0} \right)^{1/\nu d_{inf}}$. Решение этого уравнения называется W - функцией Ламберта $p_c = \frac{\nu d_{inf}}{u} W(\lambda)$, причем поведение этой функции на больших и малых пределах известно:

$$W(\lambda) = \begin{cases} \lambda & , \lambda \ll 1 \\ \ln \lambda - \ln \ln \lambda & , \lambda \gg 1 \end{cases}$$

Как уже было сказано, мы станем рассматривать только случай больших u , то есть $\lambda \gg 1$ и $p_c \ll 1$. Заметим, что в противном случае наша теория просто неприменима: из $\lambda \ll 1$ следует $p_c \sim 1$, не зависящее от u , и вышеописанные предположения о строении кластера $C^{(+)}$ становятся неверными.

Перепишем эффективный коэффициент диффузии в терминах p_c

$$D_{eff} \sim P_{inf}(P_c) D_{inf}(p_c) \sim p_c^{\beta - 2\nu + \nu d_{inf}} = p_c^\mu \quad (2.4)$$

Как видим, этот результат мал по p_c лишь степенным образом, что позволяет считать аномальный вклад в диффузию основным.

Глава 3

Компьютерная симуляция

Алгоритм, использованный для вычислений, достаточно прямолинеен: в начале создается массив связей $L \times L$ со случайно сгенерированными временами τ_{ij} и состояниями и массив частиц (размера N), причем все частицы первоначально находятся в центре решетки. Далее, ежетактно, оба массива поддерживаются в соответствии с постановкой задачи.

Для генерации (псевдо)случайных чисел использовался алгоритм Mersen twister, а именно классический MT19937.

3.1 Свойства первого прохождения

Взглянем на так называемые first-passage properties, а именно на то, как часто проходятся связи с разными τ_{ij} в первый раз: то есть, если мы для каждой связи добавим флаг, опущенный в изначальном состоянии и поднимаемый как только через эту связь прошли, то мы хотим изучить статистику τ_{ij} с поднятыми флагами в конце симуляции. Результат соответствующего счета можно видеть на Рис. 3.1

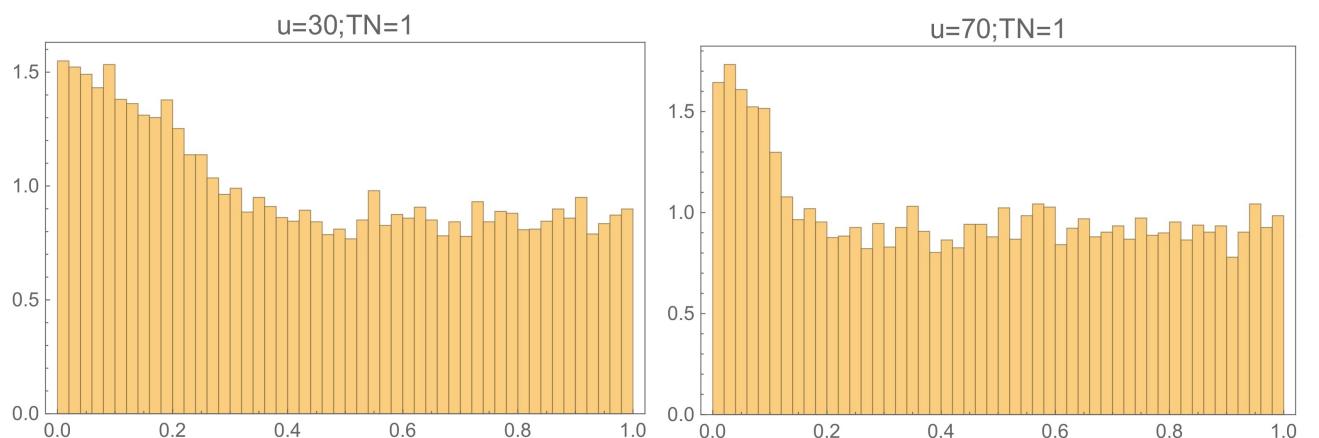


Рис. 3.1: Частота прохождения связей в зависимости от их τ . По оси абсцисс - $p_{ij} = \frac{1}{u} \ln \frac{\tau_{ij}}{\tau_0}$, по оси ординат - доля прохождений. TN - "вместимость" флага.

Здесь мы выделим две основных черты: выделенность малых τ и уменьшение "зоны выделенности" с увеличением u , что косвенно может подтверждать физичность вышеизложенного разделения связей на медленные и быстрые. Для представленного случая с $u = 30$ $p_c \approx 0.2$, а для $u = 70$ $p_c \approx 0.1$, что качественно совпадает с шириной выделенной зоны и косвенно подтверждает догадки, высказанные в пунктах 2.4 и 2.2.

3.2 Закон Фика

Рассмотрим более внимательно поведение $r^2(t)$ для различных u и t_0 . Симуляции показывают, что на больших временах выполняется закон Фика, который нельзя было бы ожидать в стационарном случае и который полностью является следствие динамики решетки. На Рис. 3.2 изображены 10 линий различных образцов после усреднения по 1000 частиц в каждом образце. Несмотря на то, что начальное поведение может различаться от симуляции к симуляции, на больших временах все они выходят на единый (внутри набора параметров) линейный режим.

Отметим так же, что для динамической системы выполнение закона Фика, согласно [2] не является чем-то необычным, однако в нашем случае он проявляется задолго до $t \gg \tau_0 e^u$ (мы полагаем, что этот эффект проявляется на временах $t \gg \tau_0 e^{up_c}$, но отдельно исследовать этот вопрос мы не успели), что является, в некотором смысле, новым утверждением.

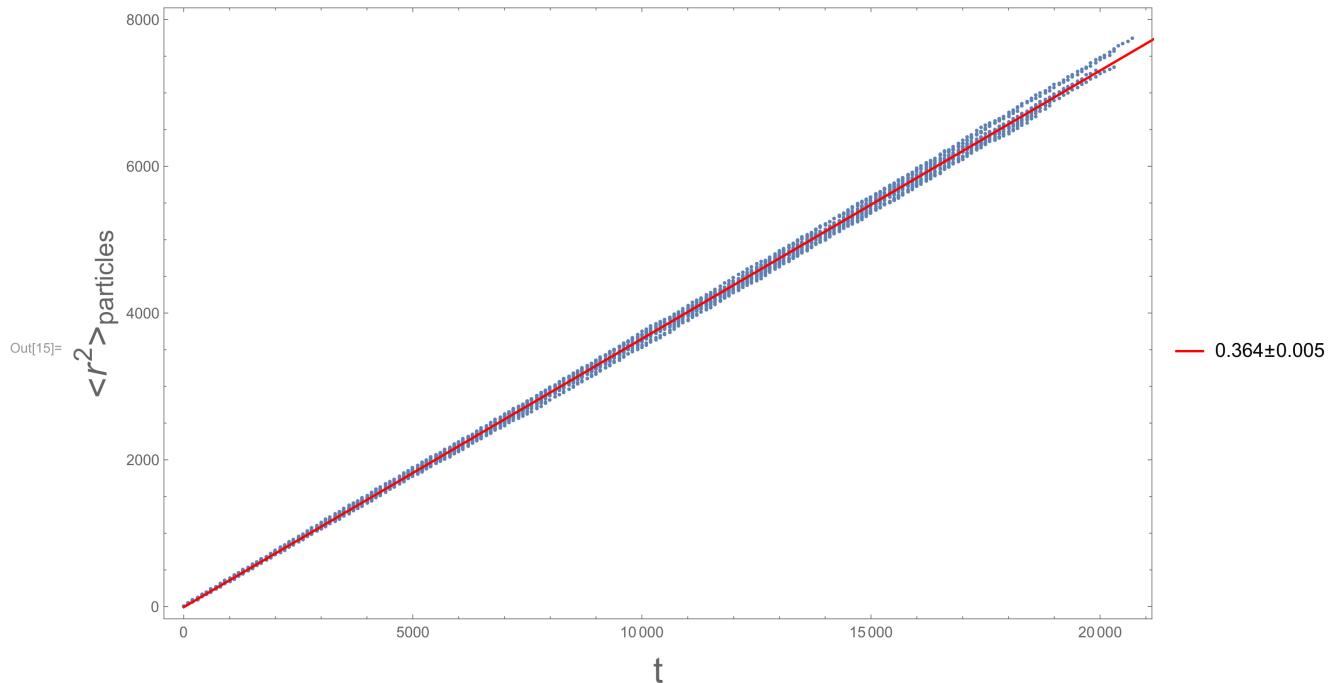


Рис. 3.2: Пример зависимости $r^2(t)$ для $u = 10; \tau_0 = 1$. Здесь представлено 10 симуляций, в каждой проводилось усреднение по 1000 частиц

3.3 Зависимость $D(p_c)$

Теперь же построим зависимость коэффициентов диффузии D от параметра системы p_c для широкого промежутка по u и двух значений $\tau_0 = \{1, 100\}$ в лог-лог масштабе. На Рис.3.3 мы видим, что на больших u , то есть на маленьких p_c результаты численного счета хорошо ложатся на некую степенную зависимость, вот только коэффициент наклона сильно отличается от предсказанного.

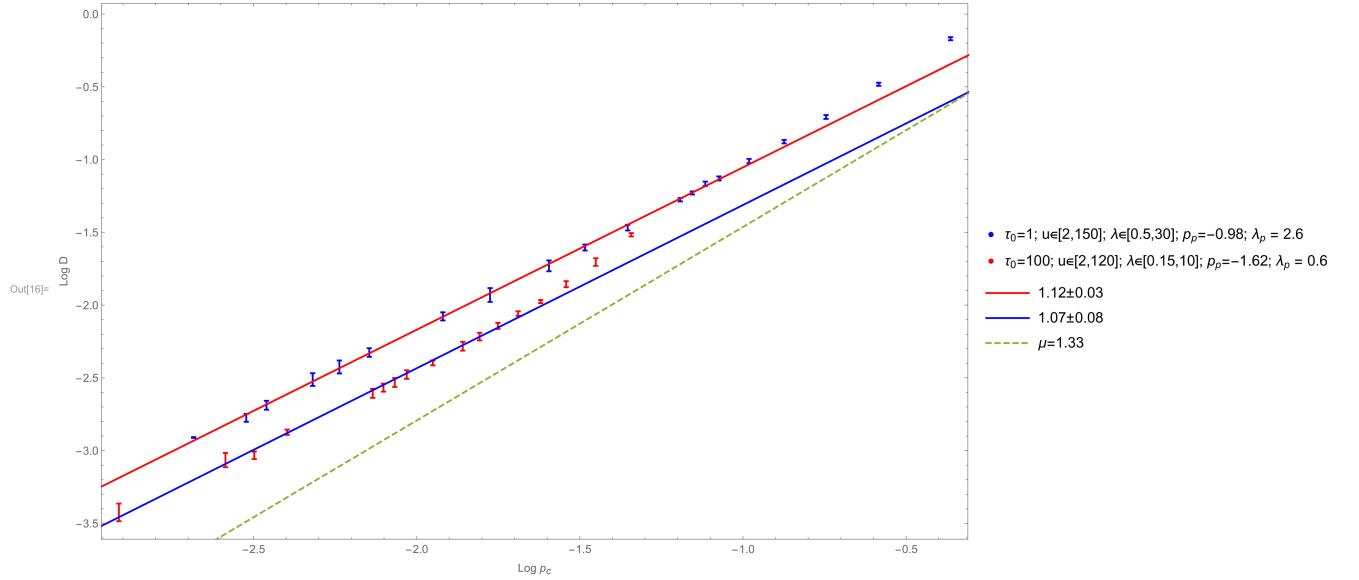


Рис. 3.3: Зависимость $\ln D$ от $\ln p_c$ для $\tau_0 = \{1, 100\}$. Прерывистой зеленой линией обозначен наклон ожидаемой теоретической зависимости

3.4 Профиль размытия

Взглянем на еще один вопрос, который мог бы помочь нам лучше понять происходящее, а именно на то, как выглядит профиль распространяющихся частиц, то есть, на зависимость $P(r|t)$ или $rP(r|t)$. На Рис. 3.4 представлена именно зависимость $rP(r|t)$ и мы видим, что на границах основного пятна плотность частиц убывает никак не медленнее, чем 10 степень (хотя, скорее всего, и вовсе как экспонента), что будет обсуждено ниже.

Так же отметим, что мы ожидали, что основной "колокол" распределения, состоящий (в наших предположениях) из частиц на типичных траекториях, будет значительно меньше, чем $\langle r^2(t) \rangle$, однако было получено, что квадрат радиуса "колокола" $r_m^2(t) \sim$ в 4 раза больше, чем $\langle r^2(t) \rangle$, что так же мы обсудим в следующем пункте.

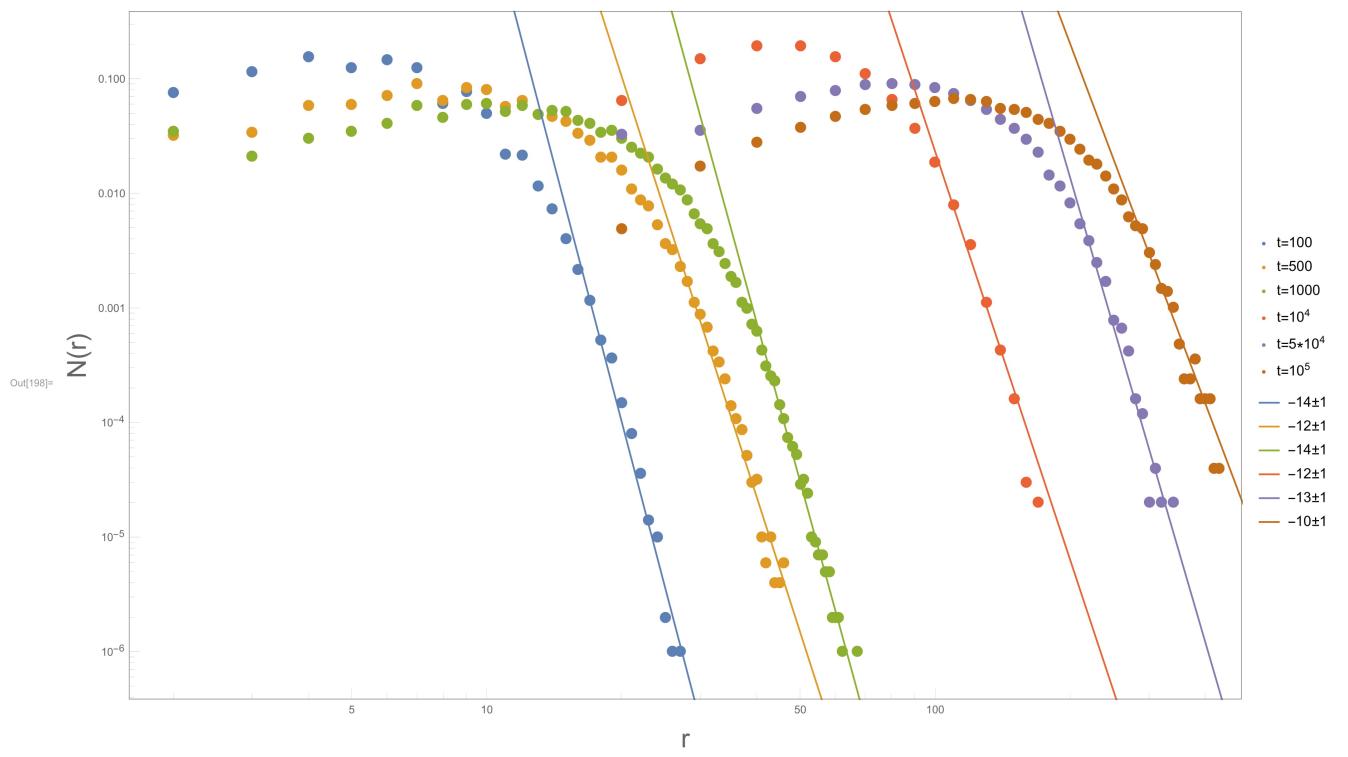


Рис. 3.4: Эволюция зависимости $N(r) = rP(r)$ со временем внутри одной симуляции для $u = 30; \tau_0 = 1$. Усреднение проводилось по 1000 частиц.

Глава 4

Обсуждение результатов

Мы видим, что результаты отличаются от предсказанных, хотя $D(p_c)$ спадает с p_c всего лишь степенным образом, что, казалось бы, подтверждает нашу догадку об основном вкладе аномальных путей в $\langle r^2 \rangle$. В вкупе с пунктом 3.1 это убеждает нас в том, что мы все же не далеки от правды. Чем же может быть вызвано такое отличие критических коэффициентов?

Самое очевидное, что приходит на ум - мы просто не дошли до больших λ и остались в области ~ 1 .

Другой вопрос заключается в том, можно ли пренебречь скоррелированным движением частиц в начале симуляции, когда все они находятся в одной центральной точке. И, действительно, когда мы исследовали зависимости $\langle r^2(t) \rangle$ для различных параметров u, τ_0 , особенно для больших их значений, мы получали, что начальные части зависимостей сильно меняются от симуляции к симуляции, однако, на больших временах все они выходили на линейную зависимость. К несчастью, исследование этого перехода провести мы не успели.

Третий вопрос навеян пунктом 3.4. Если основной вклад в диффузию частиц приходит из аномальных путей, то мы ожидаем, что соответствующее распределение обязано иметь узкий колокол типичных путей и медленно затухающие степенные хвосты путей аномальных ($\sim 3-4$ степени). Однако, как мы видим, это не так, что является некоторым противоречием, которое пока не очень понятно, как разрешить. Хотя и имеется возможное объяснение, заключающееся в том, что была взята недостаточно большая выборка и мы просто не поймали аномальные траектории, это требует дальнейшей проверки.

Глава 5

Список литературы

- [1] А. С. Иоселевич, “Введение в теорию протекания”, Москва, 2014
- [2] S. D. Druger, A. Nitzan, and M. A. Ratner, J. Chem. Phys. **79**, 3133 (1983).
- [3] S. D. Druger, M. A. Ratner, and A. Nitzan, Phys. Rev. **B 31**, 3939 (1985).
- [4] A. K. Harrison and R. Zwanzig, Phys. Rev. **A 32**, 1072 (1985).