תרגיל נומרי 4 – ממהלך שיכור לדיפוזיה

1. רקע

בקורס נדבר על דיפוזיה, שהיא התוצאה המאקרוסקופית של תנועה אקראית של חלקיקים בתוך מפזר, כלומר – גורם לנוע בסדרה מתמשכת של ״מהלכי שיכור״, random walks. דיפוזיה מהווה בסיס פיסיקלי יסודי המתאים לתאור תופעות רבות, החל מתנועה של גז אחד דרך גז אחר, דרך הדליפה של פוטונים באטמוספירה של כוכבים, ועד לתנועת ניוטרונים בתוך כור גרעיני. במידה רבה, התוצאה המאקרוסקופית היא פשוט ההתפלגות של מהלכי שיכור של חלקיקים נפרדים רבים, ולכן נוחה מאוד לניתוח בשיטות מונטה קרלו.

2. התפלגות אורך הצעד במהלך שיכור

המודל הפשוט ביותר של מהלך שיכור הוא בחירה אקראית של כיוון הצעד, ואז ביצוע צעד באורך קבוע. כאן נעדיף לכלול גם התפלגות של אורך הצעד, לפי השיקול הבא.

נניח שכשהחלקיק נע בכיוון x הסיכוי שלו לעבור פיזור (שינוי כיוון) על-פני צעד קצר dx פרופורציוני לאורך dx ושווה ל-dx/ℓ, כאשר ℓ הוא אורך אופייני כלשהוא. אם כך, הסיכוי לעבור לפחות מרחק x, כלומר **לא להתפזר** עד שמגיעים למרחק x, $P(x)$, יקיים משוואה דיפרנציאלית, כדלקמן.

$$P\left(x+dx\right)=P\left(x\right)\left(1-\frac{dx}{\ell}\right) \tag{1}$$

(הסיכוי לא להתפזר על-פני מרחק $x+dx$ שווה לסיכוי לא להתפזר על-פני מרחק x כפול הסיכוי לא להתפזר על-פני התוספת dx). המרחק ℓ הוא ״המהלך החופשי הממוצע״ (mean free path) של החלקיק. מתקבלת משוואה דיפרנציאלית פשוטה:

$$\frac{P\left(x+dx\right)-P\left(x\right)}{dx}=-\frac{1}{\ell}P\left(x\right)\ \Rightarrow\ P\left(x\right)=Ce^{-x/\ell}. \tag{2}$$

ניתן לזהות מיד כי $C=1$ מהדרישה כי הסיכוי לא להתפזר על-פני מרחק $x=0$ הוא, כמובן, אחד. עתה, נשים לב שהנגזרת $p(x)\equiv -dP(x)/dx$ היא צפיפות ההסתברות **להתפזר** בדיוק ב-x: ל-$p(x)$ יש יחידות של אחד לחלק למרחק. אנחנו מקבלים את הסיכוי (ליחידת אורך) שהפיזור הבא יהיה במרחק Δx בדיוק מנקודת המוצא:

$$p\left(\Delta x\right)=\frac{1}{\ell}e^{-\Delta x/\ell}. \tag{3}$$

מסקנה: יש להגריל בכל צעד שני גדלים אקראיים - את הכיוון ואת אורך הצעד. הנקודה העדינה היא שאת אורך הצעד יש להגריל לפי התפלגות אקספוננציאלית: אורך הצעד Δx יכול להיות בין אפס לאינסוף עם הסתברות $p(\Delta x)=\exp(-\Delta x/\ell)$. למרבית שפות התכנות העיליות המודרניות יש פונקציה פנימית לעשות הגרלה אקספוננציאלית, אבל ליתר בטחון, מצורפת בנספח הדרכה כיצד לעשות זאת באופן ידני.

3. הדרכה לחישובים

בכל החישובים בתרגיל נרצה למצוא את התפלגות המקום כפונקציה של הזמן עבור חלקיקים המבצעים דיפוזיה לאחר שנשתלו בראשית בזמן $t=0$. נעשה זאת בעזרת N חישובים של מסלול התנועה של חלקיק בודד, כדלקמן.

א. שמים חלקיק בראשית ב-$t=0$, ומגרילים את התקדמותו במרחב בסדרה של הגרלות: לכל צעד k מגרילים את כיוון הצעד ואת אורך הצעד Δx_k, כאשר האחרון נעשה לפי התפלגות אקספוננציאלית. מבצעים את הצעד כך שאחרי הצעד ה-$k+1$ מקומו של החלקיק יהיה

$$x_{k+1}=x_k+\Delta x_k \tag{4a}$$

כאשר Δx_k כולל את הגודל וגם את הכיוון (הסימן) של הצעד בהתאם לכיוון שהוגרל.

ב. בהנתן מהירות החלקיק במהלך הצעד, v_k, ניתן לדעת מה הוא הזמן של סוף הצעד יחסית לזמן בתחילתו

$$t_{k+1}=t_k+\left|\Delta x_k\right|/\mathrm{v}_\mathrm{k}\ . \tag{4b}$$

כך מקדמים את החלקיק במקום ובזמן עד לזמן סופי שנקבע, מראש, tend.

ג. חוזרים על התהליך שוב ושוב, עד ל-N חלקיקים.

4. הדרכה לתיעוד המערכת

א. כדי לבנות את ההתפלגות כפונקציה של הזמן, יש לרשום את מקומו של החלקיק בזמנים מוגדרים מראש. חשוב: הזמן לרישום בדרך כלל לא יתאים בדיוק לרגע של פיזור, ולכן יש לבדוק במהלך הצעד ה-k אם הזמן לרישום tstore נמצא בין t_k ל-t_{k+1} (משוואה (4b)); אם כן, יש למצוא את משך הזמן dt=tstore-t_k, לרשום את מיקום החלקיק הצפוי ב-tstore לפי $x_{store}=x_k+\mathrm{v}_k\times dt$, ורק אז לבצע את הצעד לפי משוואות (4a-4b). אדרבא: אם התקבל צעד ארוך, שגודלו כמה פעמים $\mathrm{v}_k\times$dtstore, יהיה צורך לרשום את מצב החלקיק מספר פעמים לאורך הצעד הזה (בכל פעם שעבר עוד dtstore).

ב. כרגיל, הדרך הנוחה לניתוח התוצאות היא בהיסטוגרמות – לחלק את המרחב האפשרי למיקום החלקיק לקטעים, למצוא לאיזה קטע מתאים xstore(tstore). במצטבר על-פני N חלקיקים תיבנה היסטוגרמה כמה חלקיקים היו בקטע סביב כל ערך של x בזמן ספציפי tstore, $N(x,\text{tstore})$. אם מספר החלקיקים שהרצנו, N, מספיק גדול, נוכל לקבל את הסיכוי למצוא חלקיק במקום x בזמן tstore לפי היחס $N(x,\text{tstore})/N$. מומלץ לחלק את תחום המרחקים x שאתם רוצים לבדוק בין x_{min} ל-x_{max} לקטעים שווים (מספר הקטעים לבחירתכם – בחרו בחוכמה! ☺), ולבנות את ההיסטוגרמה בהתאם.

5. חישובים

א. חישוב הייחוס

חישוב הייחוס יהיה דיפוזיה במימד אחד, עם מהלך חופשי **ממוצע** $\ell=1$ ומהירות קבועה v=1 (כל אחד ביחידות המתאימות). שתלו $N=10^6$ חלקיקים בזה אחר זה ב-$x=0$ בזמן $t=0$. בכל צעד יש להגריל את כיוון הצעד, בכיוון x חיובי או השלילי, בהסתברות ½ לכל כיוון, ואחר-כך את אורך הצעד, לפי התפלגות אקספוננציאלית.

ב. התפלגות מהירויות

חזרו על החישוב בסעיף א׳ (דיפוזיה במימד אחד) אך כאשר החלקיק משנה את מהירותו בכל צעד לפי התפלגות גאוסיאנית (כלומר, משקפת את פקטור בולצמן, שגם הוא אקספוננט), עם ממוצע $\langle|\mathrm{v}|\rangle=1$. ראו הדרכה בנספח.

ג. דיפוזיה בשני מימדים

חזרו על החישוב בסעיף א׳ (מהירות קבועה) אך הפעם כשהחלקיק יכול לנוע בשני כיוונים, x ו-y. הדרך לעשות זאת היא להגריל את כיוון התנועה θ באופן אחיד בתחום $[0,2\pi)$, ואז את אורך הצעד L (התפלגות אקספוננציאלית לפי משוואה (3)), קובעים את המהירות בשני הצירים, $\mathrm{v}_x=\mathrm{v}\cos\theta$, $\mathrm{v}_y=\mathrm{v}\sin\theta$, כאשר v=1 (בבעיה ללא היחידות שלנו). במילים אחרות – משוואה (4a) היא הפעם וקטוריות בשני מימדים. חשוב: הפעם מתחילים את החלקיקים בראשית $(x=0,y=0)$, והגודל לתיעוד בעזרת היסטוגרמה הוא המרחק מהראשית $r=(x^2+y^2)^{1/2}$.

ד. דיפוזיה בתווך לא אחיד

חזרו על החישוב בסעיף א׳ (דיפוזיה במימד אחד, מהירות קבועה) אך כאשר המהלך החופשי תלוי במקום x לפי הכלל $\ell(x)=|x|^{\omega}$. כלומר, הסיכוי לנוע מהמקום x_0 למקום x_1 תלוי בשני הערכים הללו ולא רק בהפרש ביניהם; ראו בהסבר בנספח. בצעו את החישובים עבור $\omega=-1$ ו-$\omega=+0.5$.

6. הצגת התוצאות

א. עבור חישוב הייחוס

הציגו לחישוב שלוש עקומות של $P(x,\text{tstore})=N(x,\text{tstore})/N$ בזמנים tstore=1,5,20. מה הוא x בעל ההסתברות הגבוהה ביותר ומה היא סטיית התקן?

הערה: שימו לב שהמרחק המקסימאלי מהראשית שחלקיק יכול להגיע אליו תלוי ב-tstore: $x_{max}=\text{v}\times\text{tstore}=\text{tstore}$; $x_{min}=-\text{v}\times\text{tstore}=\text{tstore}$ (בפרמטריזציה ללא יחידות כש-v=1) ולכן כדאי להגדיר מערך מרחקים שונה להיסטוגרמה בכל אחד מהזמנים, כדי לקבל רזולוציה מרחבית טובה.

התוצאה התאורטית לפי הפתרון של משוואת הדיפוזיה היא גאוסיאן מהצורה (ללא יחידות)

$$p(x,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi t}}\exp\left(-\frac{x^2}{4t}\right). \qquad (7)$$

האם קיבלתם גאוסיאן? אם ניכרים הבדלים מגאוסיאן – ממה הם נובעים?

ב. עבור החישוב עם התפלגות המהירויות

בנו גרף של $P(x,t)$ לחישוב בזמנים tstore=1,20. והשוו לחישוב הייחוס. הסבירו את המקורות לדימיון האיכותי או האי-דימיון האיכותי, בהתאם לתוצאות[1].

ג. עבור החישוב הדו-מימדי

בנו גרף של $P(r,t)$ לחישוב בזמנים tstore=1,5,20. שימו לב: r חיובי, $0\leq r\leq \text{v}\times\text{tstore}=\text{tstore}$ (שוב, בלי יחידות) ולכן יש לבנות את ההיסטוגרמה בהתאם. השוו בין $P(x,t)$ בחישוב הייחוס ל-$P(r,t)$ בחישוב הנוכחי. באיזה חישוב הסיכוי להגיע למרחקים גדולים מהראשית גבוה יותר? מדוע?

ד. עבור החישוב עם התווך הלא-אחיד

בנו גרף של $P(x,t)$ לחישוב בזמנים tstore=1,20. והשוו לחישוב הייחוס. הסבירו את המקורות לדימיון האיכותי או האי-דימיון האיכותי, בהתאם לתוצאות.

שאלה פיסיקלית: מדוע לא נבחרו ערכים של $\omega>1$? נסו לנסח תשובה פיסיקלית (להבדיל מתשובה מתמטית לגבי התכונות של הנוסחה (A.4) בנספח).

[1] - עניין אחד המחייב זהירות: בסיכוי קטן יכולה לצאת מהירות גבוהה, המביאה את החלקיק אל מחוץ לתחום שלפיו הגדרתם את טווח הדגימה (x_{max} ו-x_{min}). עליכם להערך לכך בתוכנית שתכתבו.

נספח – השלמות

הגרלה מהתפלגות אקספוננציאלית

בהגרלת אורך הצעד (כל הסעיפים) אנחנו מעוניינים להגריל את הגודל $\tau=|\Delta x|/\ell$ (המכונה ״העומק האופטי״) באופן אקספוננציאלי, כך ש-τ מקבל ערכים בין אפס ל-∞, בהסתברות $e^{-\tau}$. לשם כך נגריל משתנה עזר, s באופן אחיד בקטע $(0,1)$, ואז נגדיר:

$$\tau = -\ln s \, . \tag{A.1}$$

כאשר יש התפלגות מהירויות (סעיף ב׳) נרצה להגריל בנוסף לכיוון גם את הערך האבסולוטי של המהירות, ולשם כך יש להגריל את $\pi v^2/4$ באופן אקספוננציאלי. הפקטור $\pi/4$ נדרש כנירמול כדי שהמהירות האבסולוטית הממוצעת תהיה 1. כלומר, יש להגדיל אם המהירות חיובית או שלילית, וגם להגריל את s באופן אחיד בקטע $(0,1)$. הצירוף קובע את v:

$$v = \pm\sqrt{-\frac{4}{\pi}\ln s} \, . \tag{A.2}$$

תרגום לאורך הצעד בתווך בצפיפות משתנה (סעיף ד׳)

עבור מהלך חופשי התלוי במקום $\ell(x)$, העומק האופטי שחלקיק צריך לעבור הוא האינטגרל על-פני $d\tau=dx/\ell(x)$ על כל הטווח בין x_0 ל-x_1. כלומר

$$\tau\left(x_0, x_1\right) = \int_{x_0}^{x_1} \frac{dx}{\ell\left(x\right)} = \int_{x_0}^{x_1} dx\, x^{-\omega} \tag{A.3}$$

מכאן, שאם אנחנו יודעים את x_0 של תחילת הצעד, והגרלנו את τ כאמור לעיל, נוכל למצוא גם את x_1.

שימו לב ביישום הנומרי לנקודה עדינה: יש לנו בבעיה x חיוביים ושליליים.

- כל עוד נקודות ההתחלה והסיום נמצאת באותו חצי של המרחב, התרגום ל-x_1 פשוט, ונוח לעבוד עם הערכים המוחלטים. אנחנו יודעים לפי הכיוון אם $|x_1|>|x_0|$ או להפך, ואז בוחרים

$$\begin{aligned} |x_1| &= \left[|x_0|^{(1-\omega)} + (1-\omega)\tau\right]^{1/(1-\omega)} \quad \text{for } |x_1|>|x_0| \\ |x_1| &= \left[|x_0|^{(1-\omega)} - (1-\omega)\tau\right]^{1/(1-\omega)} \quad \text{for } |x_1|<|x_0| \end{aligned} \tag{A.4}$$

- אבל מה קורה אם יוצא לנו עומק אופטי המחייב לעבור דרך $x=0$? אין ברירה: צריך לפרק את הצעד לשניים, $\tau=\tau_1+\tau_0$, כאשר τ_0 הוא העומק אופטי של הצעד עד ל-$x=0$, שערכו

$$\tau_0 = \frac{1}{1-\omega}|x_0|^{1-\omega} \, . \tag{A.5}$$

כלומר, שיטת העבודה היא כזו: אם יוצא שהצעד הוא בכיוון $x=0$, יש לבחון אם τ שהוגרל מקיים $\tau>\tau_0$. אם לא, עובדים לפי המתכון מהנקודה הקודמת. אם כן, החלקיק מבצע שני מהלכים ברצף: אחד עד לראשית (במשך זמן $|x_0|/v$), ואחר-כך ממשיך (לצד השני יחסית ל-$x=0$) עם עומק אופטי τ_1, שבעזרתו מוצאים את $|x_1|$, ומוסיפים למשך הזמן את $|x_1|/v$. משך הצעד הכללי הוא, אם כן, $(|x_0|+|x_1|)/v$.