

VENTSPILS AUGSTSKOLA

BAKALAURA DARBS „VIENDIMENSIJU DIFŪZIJAS
MODELĒŠANA ASIMETRISKA POTENCIĀLA GADĪJUMĀ”

Autors: Madara Šneidere

Matrikulas nr.: 2011020030

Darba vadītājs: asoc. prof. Juris R. Kalniņš

VENTSPILS 2014

SATURS

Lpp

Ievads	3
1. Difūzija	4-6
1.1. Difūzijas jēdziens	4-5
1.2. Brauna kustība	5-6
1.3. Difūzijas koeficients	6
2. Efektīvā lauka modelis	7
3. Lifsona – Džeksona modelis	8-12
4. Dreifa ietveršana	13
5. Modeļa izstrāde	14-23
5.1. Modeļa ideja	14-15
5.2. Bibliotēka Mersenne Twister	16
5.3. Modeļa programmēšana	16-22
5.4. Modelēšana	22-23
Secinājumi un priekšlikumi	24
Izmantotās literatūras un avotu saraksts	25

IEVADS

Darba tēma ir aktuāla pētīt nanotehnoloģijas, kur liela nozīme ir vielu fizikālo un ķīmisko procesu izprašanā.

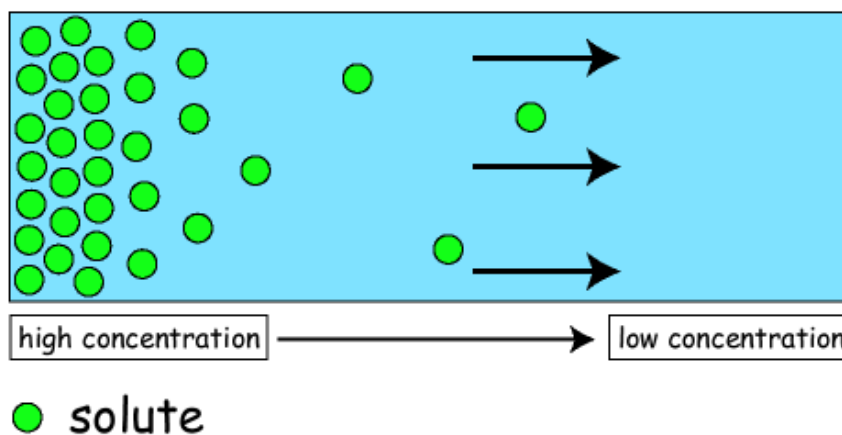
Darba mērķis ir izpētīt un modelēt šo konkrēto difūzijas veidu – viendimensiju difūziju asimetriska potenciāla gadījumā.

Lai šo mērķi varētu sasniegt, tika izvirzīti sekojoši uzdevumi: izpētīt difūzijas procesu, efektīvā lauka modeli, Lifsona – Džeksona modeli un dreifa ietveršanu. Iegūtās zināšanas izmantot veidojot simulācijas modeli C++ valodā. Modelēšanā iegūtos rezultātus salīdzināt ar teorijā teikto un veikt secinājumus.

1.DIFŪZIJA

1.1. DIFŪZIJAS JĒDZIENS

Difūzija ir vielu daļiņu pārvietošanās un izplatīšanās citās vielās, kad daļiņas pārvietojas no vietas, kurš šīs daļiņas ir vairāk uz vietu, kur tās ir mazāk, tā vienmērīgi izšķīstot.



1.1. att. Difūzijas piemērs nr.1.

Pirmajā attēlā ir parādīts kā kādas vielas daļiņas izšķīst citā vielā pārvietojoties no ar šīm daļiņām koncentrētas vietas uz mazāk koncentrētu vietu. Šo procesu ir iespējams novērot daudzviet dabā, kā piemēram cukura izšķīšana glāzē vai ūdens iekrāsošana.



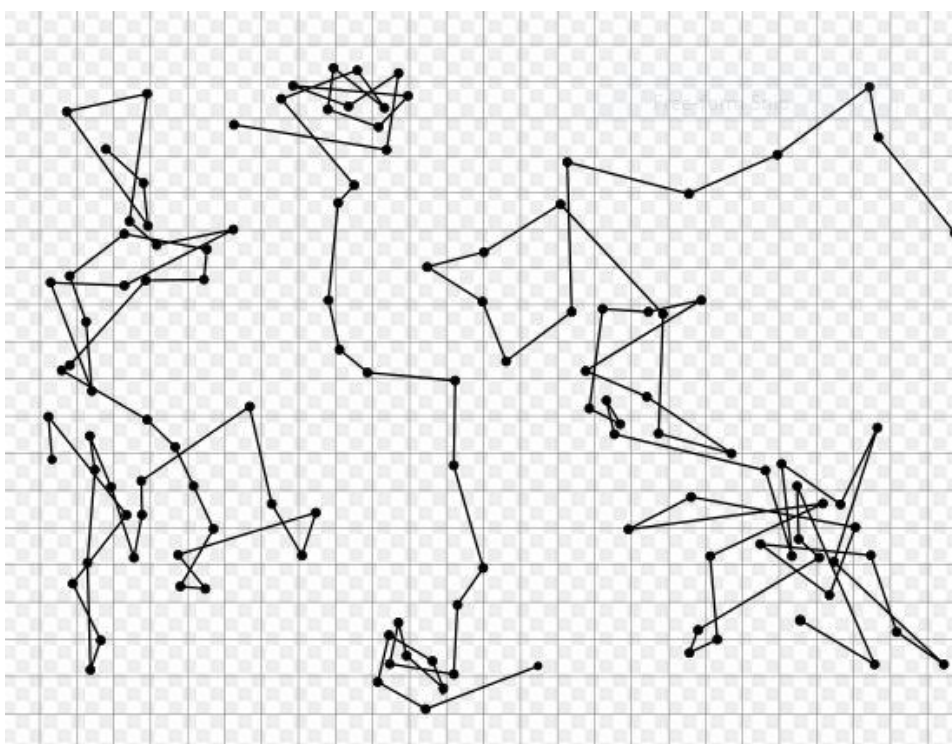
1.2. att. Difūzijas piemērs nr.2.

Šajā attēlā var novērot kā krāsa izšķīst ūdenī to ar laiku iekrāsojot pilnībā.

Difūzija notiek visos trīs vielu veidos – šķidrās, gāzveida un cietās vielās. Cietās vielās difūzijas process ir vislēnākais, jo vielas molekulas nepārvietojas tik ātri kā citu veidu vielās, bet gāzveida vielās šis process ir visātrākais.

1.2.BRAUNA KUSTĪBA

Tāpat kā daudzi citi procesi dabā arī difūzija ir gadījuma process, šajā gadījumā šis ir diskrets stohastisks process, ko apraksta Brauna kustība. Stohastiska procesa rezultātā sistēma no viena un tā paša sākuma stāvokļa var nonākt ar noteiktu varbūtību dažādos gala stāvokļos. Šis process var izpausties dažādi, piemēram, kāda vērtība mainās pēc determinēta likuma, bet tās izmaiņas notiek gadījuma laika momentos vai vērtības ir gadījuma lielumi, bet izmaiņas notiek determinētos laika momentos kā arī ir iespējams, ka gan vērtības, gan laika momenti ir gadījuma lielumi.



1.3.att. Brauna kustības shēma.

Attēlā 1.3. ir atspoguļota Brauna kustība, attēlā ar punktiem ir atzīmēti silīcija daļiņu kustības stāvokļi ik pēc 30 sekundēm, stāvokļi ir savienoti ar taisnām līnijām, bet ir jāņem vērā, ka patiesās kustības trajektorijas nav taisnas līnijas.

Šī parādība pirmo reizi tika novērota 1827.gadā, kad angļu botāniķis Roberts Brauns mikroskopā pētīja ūdenī iejauktas staipekņu sporas. Brauna kustība ir daļiņu haotiska kustība, kas nekad neapsīkst, bet paaugstinot temperatūru tā paliek intensīvāka. Tas notiek tāpēc, ka molekulu savstarpējo sadursmju spēks nekompensē cits citu, ja molekulas kustas haotiski, tad impulsi no molekulām, kuras saduras ar tām no dažādām pusēm, ir dažādi, tāpēc rezultējošais spēks nav vienāds ar nulli, kas rada Brauna kustību – nelielu daļiņu kustību šķidrumu molekulu sadursmju rezultātā. Molekulas kustība gāzēs arī atgādina brauna kustību, ar nosacījumu, ka molekulas pirms sadursmes ar citu molekulu kustas pa taisnvirziena trajektoriju. Brauna kustības teoriju izveidoja M. Smoluhovskis un A. Einšteins un šī teorija izskaidro daļiņas kustības gadījuma raksturu jeb gadījuma klejošanu.

1.3.DIFŪZIJAS KOEFICIENTS

Katrai vielai difūzijas koeficients ir atšķirīgs, tas izsaka nehomogēnu materiālu caurlaidības spēju. Jo augstāka difūzijas koeficients (vienai vielai attiecībā uz citu), jo ātrāk šīs vielas difundē savā starpā. Darbā izstrādātajā modelī, lai aprēķinātu difūzijas koeficientu, tiek izmantota sekojošā formula.

$$D = \frac{l^2}{2\tau}, \quad (1)$$

kur

D - difūzijas koeficients

l – soļa garums

τ – 1 soļa laiks

2.EFEKTĪVĀ LAUKA MODELIS

Tas apraksta makroskopiskās īpašības dažādiem kompozītmateriāliem. Šo materiālu sastāvdaļu vērtības ir mainīgas un nehomogēnas, tādēļ precīzi aprēķini izmantojot šīs vērtības ir tik pat kā neiespējami. Tomēr ir izstrādāti pietiekami labas aproksimācijas, kuras dod iespēju modelēt, balstoties uz vielu īpašībām un sastāvdaļām. Tas tiek pielietots kā diskrēts modelis vai kā nepārtrauktības teorija.

Eksistē vairākas efektīvā lauka aproksimācijas, tās ir salīdzinoši precīzas, katra izmantojot savus nosacījumus. Taču tās nespēj paredzēt īpašības daudzfāžu vidē tuvu filtrācijas sliekšnim tāldarbības trūkuma dēļ.

Izmantotā īpašība parasti ir elektrovadītspēja vai dielektriskā konstante pētāmajam materiālam. Šie parametri ir savstarpēji aizvietojami Laplasa vienādojuma elastības dēļ.

Efektīvā lauka modeli var aprakstīt ar Maksvela Garneta vienādojumu, kas tika izveidots 1904.gadā.

3.LIFSONA DŽEKSONA MODELIS

Lifsona Džeksona modelis nodrošina difūzijas koeficienta formulu viendimensiju difūzijas simetriskā potenciāla gadījumā

$$D_{eff} = \frac{1}{\langle \exp(-\beta U(x)) \rangle \langle \exp(\beta U(x)) / D(x) \rangle}, \quad (3.1.)$$

kur

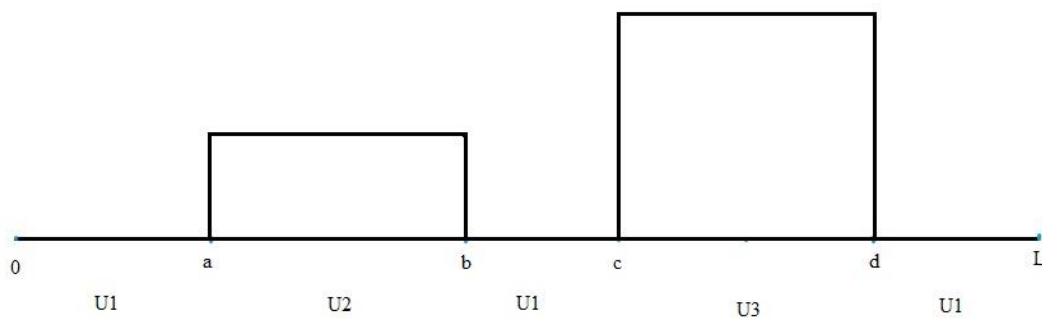
$$\langle g(x) \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L g(x) dx, \quad (3.2.)$$

L-visa perioda garums

$\beta = 1/kT$, kur k-Bolcmaņa konstante un T – absolūtā temperatūra

U-

Apskatīsim konkrētu asimetrisku modeli ar 2 ieslēgumiem atsevišķos intervālos (a,b) un (c,d).



3.1.att. Pirmais modelis

Konkrētajam modelim šī formula tiek pielietota šādi. Formula tiek rakstīta secīgi attēlojot ieslēgumus tā kā tie ir izkārtoti modelī.

$$D_{eff} = \frac{1}{\frac{1}{L} \left(\int_0^a e^{-\beta U_1} dx + \int_a^b e^{-\beta U_2} dx + \int_b^c e^{-\beta U_1} dx + \int_c^d e^{-\beta U_3} dx + \int_d^L e^{-\beta U_1} dx \right)} \times$$

$$\times \frac{1}{\frac{1}{L} \left(\int_0^a \frac{e^{\beta U_1}}{D_1} dx + \int_a^b \frac{e^{\beta U_2}}{D_2} dx + \int_b^c \frac{e^{\beta U_1}}{D_1} dx + \int_c^d \frac{e^{\beta U_3}}{D_3} dx + \int_d^L \frac{e^{\beta U_1}}{D_1} dx \right)} =$$

Formula tiek pārrakstīta saliekot intervālus bez ieslēguma vienādojuma sākumā un intervālus ar ieslēgumu - beigās.

$$= \frac{1}{\frac{1}{L} \left(\int_0^a e^{-\beta U_1} dx + \int_b^c e^{-\beta U_1} dx + \int_d^L e^{-\beta U_1} dx + \int_a^b e^{-\beta U_2} dx + \int_c^d e^{-\beta U_3} dx \right)} \times$$

$$\times \frac{1}{\frac{1}{L} \left(\int_0^a \frac{e^{\beta U_1}}{D_1} dx + \int_b^c \frac{e^{\beta U_1}}{D_1} dx + \int_d^L \frac{e^{\beta U_1}}{D_1} dx + \int_a^b \frac{e^{\beta U_2}}{D_2} dx + \int_c^d \frac{e^{\beta U_3}}{D_3} dx \right)} =$$

Konstantes tiek iznestas pirms integrāļa zīmes.

$$= \frac{1}{\frac{1}{L} \left(e^{-\beta U_1} \int_0^a dx + e^{-\beta U_1} \int_b^c dx + e^{-\beta U_1} \int_d^L dx + e^{-\beta U_2} \int_a^b dx + e^{-\beta U_3} \int_c^d dx \right)} \times$$

$$\times \frac{1}{\frac{1}{L} \left(\frac{e^{\beta U_1}}{D_1} \int_0^a dx + \frac{e^{\beta U_1}}{D_1} \int_b^c dx + \frac{e^{\beta U_1}}{D_1} \int_d^L dx + \frac{e^{\beta U_2}}{D_2} \int_a^b dx + \frac{e^{\beta U_3}}{D_3} \int_c^d dx \right)} =$$

Veicam integrēšanu un ienesam konstantes iekavās.

$$= \frac{1}{\left(e^{-\beta U_1} \left(\frac{a}{L} + \frac{c-b}{L} + \frac{L-d}{L} \right) + (e^{-\beta U_2} \frac{b-a}{L} + e^{-\beta U_3} \frac{d-c}{L}) \right)} \times$$

$$\times \frac{1}{\left(e^{\beta U_1} \left(\frac{a}{L} + \frac{c-b}{L} + \frac{L-d}{L} \right) + (e^{\beta U_2} \frac{b-a}{L} + e^{\beta U_3} \frac{d-c}{L}) \right)} =$$

Sakārtojam vienādojumu, savelkot līdzīgos.

$$= \frac{1}{\left(\left(\frac{a}{L} + \frac{c-b}{L} + \frac{L-d}{L} \right) + e^{-\beta(U_2-U_1)} \frac{b-a}{L} + e^{-\beta(U_3-U_1)} \frac{d-c}{L} \right)} \times$$

$$\times \frac{1}{\left(\left(\frac{a}{L} + \frac{c-b}{L} + \frac{L-d}{L} \right) + e^{\beta(U_2-U_1)} \frac{b-a}{L} + e^{\beta(U_3-U_1)} \frac{d-c}{L} \right)} = \quad , \quad (3.7.)$$

Ieviešam apzīmējumus intervāliem – f, bet varbūtības ar p.

$$= \frac{1}{\left(1 - f_1 - f_2 + e^{-\beta(U_2-U_1)} f_1 + e^{-\beta(U_3-U_1)} f_2 \right)} \times$$

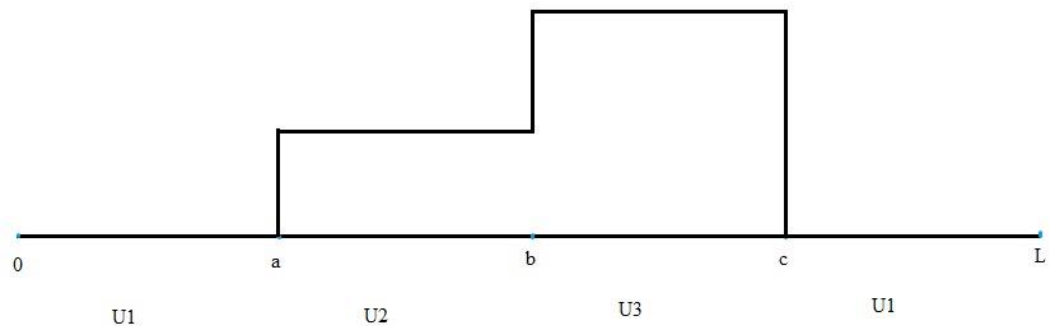
$$\times \frac{1}{\left(1 - f_1 - f_2 + e^{\beta(U_2-U_1)} f_1 + e^{\beta(U_3-U_1)} f_2 \right)} , \quad (3.8.)$$

$$\text{kur } f_1 = \frac{b-a}{L}, f_2 = \frac{d-c}{L}, \frac{p_1}{p_2} = e^{-\beta(U_2-U_1)}, \frac{p_1}{p_3} = e^{-\beta(U_3-U_1)}$$

Iegūstam gala formulu difūzijas koeficienta aprēķināšanai.

$$D_{eff} = \frac{1}{\left(1 - f_1 - f_2 + \frac{p_1}{p_2} f_1 + \frac{p_1}{p_3} f_2 \right) \cdot \left(1 - f_1 - f_2 + \frac{p_2}{p_1} f_1 + \frac{p_3}{p_1} f_2 \right)} , \quad (3.9.)$$

Tagad apskatīsim asimetriksu modeli ar 2 ieslēgumiem intervālos (a,b) un (b,c), kuri atrodas balakus viens otram.



3.2.att Otrais modelis

Šim modelim formula tiek izvesta līdzīgi kā iepriekš.

$$D_{eff} = \frac{1}{\frac{1}{L} \left(\int_0^a e^{-\beta U_1} dx + \int_a^b e^{-\beta U_2} dx + \int_b^c e^{-\beta U_3} dx + \int_c^L e^{-\beta U_1} dx \right)} \times$$

$$\times \frac{1}{\frac{1}{L} \left(\int_0^a \frac{e^{\beta U_1}}{D_1} dx + \int_a^b \frac{e^{\beta U_2}}{D_2} dx + \int_b^c \frac{e^{\beta U_3}}{D_3} dx + \int_c^L \frac{e^{\beta U_1}}{D_1} dx \right)} =$$
(3.10.)

Iekavās tiek sakārtoti mainīgie, saliekot integrāļus, kuri satur ieslēgumu vērtības iekavu beigās.

$$= \frac{1}{\frac{1}{L} \left(\int_0^a e^{-\beta U_1} dx + \int_c^L e^{-\beta U_1} dx + \int_a^b e^{-\beta U_2} dx + \int_b^c e^{-\beta U_3} dx + \right)} \times$$

$$\times \frac{1}{\frac{1}{L} \left(\int_0^a \frac{e^{\beta U_1}}{D_1} dx + \int_c^L \frac{e^{\beta U_1}}{D_1} dx + \int_a^b \frac{e^{\beta U_2}}{D_2} dx + \int_b^c \frac{e^{\beta U_3}}{D_3} dx \right)} =$$
(3.11.)

Tad konstantes tiek iznestas pirms integrāļa zīmes.

$$= \frac{1}{\frac{1}{L} \left(\int_0^a dx + e^{-\beta U_1} \int_c^L dx + e^{-\beta U_2} \int_a^b dx + e^{-\beta U_3} \int_b^c dx + e^{-\beta U_3} \right)} \times$$

$$\times \frac{1}{\frac{1}{L} \left(\frac{e^{\beta U_1}}{D_1} \int_0^a dx + \frac{e^{\beta U_1}}{D_1} \int_c^L dx + \frac{e^{\beta U_2}}{D_2} \int_a^b dx + \frac{e^{\beta U_3}}{D_3} \int_b^c dx \right)} =$$
(3.12.)

Tiek veikta integrēšana un intervāla garums tiek ienests iekavās.

$$= \frac{1}{\left(e^{-\beta U_1} \left(\frac{a}{L} + \frac{L-c}{L} \right) + (e^{-\beta U_2} \frac{b-a}{L} + e^{-\beta U_3} \frac{c-b}{L}) \right)} \times$$

$$\times \frac{1}{\left(e^{\beta U_1} \left(\frac{a}{L} + \frac{L-c}{L} \right) + (e^{\beta U_2} \frac{b-a}{L} + e^{\beta U_3} \frac{c-b}{L}) \right)} =$$
(3.13.)

Sakārtojam vienādojumu, savelkot līdzīgos.

$$= \frac{1}{\left(\left(\frac{a}{L} + \frac{L-c}{L} \right) + e^{-\beta(U_2-U_1)} \frac{b-a}{L} + e^{-\beta(U_3-U_1)} \frac{c-b}{L} \right)} \times$$

$$\times \frac{1}{\left(\left(\frac{a}{L} + \frac{L-c}{L} \right) + e^{\beta(U_2-U_1)} \frac{b-a}{L} + e^{\beta(U_3-U_1)} \frac{c-b}{L} \right)} = \quad (3.14.)$$

Ieviešam apzīmējumus f_1 un f_2 , kuri katrs apzīmē savu intervālu.

$$= \frac{1}{\left(1 - f_1 - f_2 + e^{-\beta(U_2-U_1)} f_1 + e^{-\beta(U_3-U_1)} f_2 \right)} \times$$

$$\times \frac{1}{\left(1 - f_1 - f_2 + e^{\beta(U_2-U_1)} f_1 + e^{\beta(U_3-U_1)} f_2 \right)}, \text{ kur } f_1 = \frac{b-a}{L}, f_2 = \frac{c-b}{L}, \quad (3.15.)$$

Ieviešam apzīmējumu p , kurš apzīmē varbūtību ar kādu daļiņa pārvar potenciāla robežu.

$$D_{eff} = \frac{1}{\left(1 - f_1 - f_2 + \frac{p_1}{p_2} f_1 + \frac{p_1}{p_3} f_2 \right) \cdot \left(1 - f_1 - f_2 + \frac{p_2}{p_1} f_1 + \frac{p_3}{p_1} f_2 \right)}, \quad (3.16.)$$

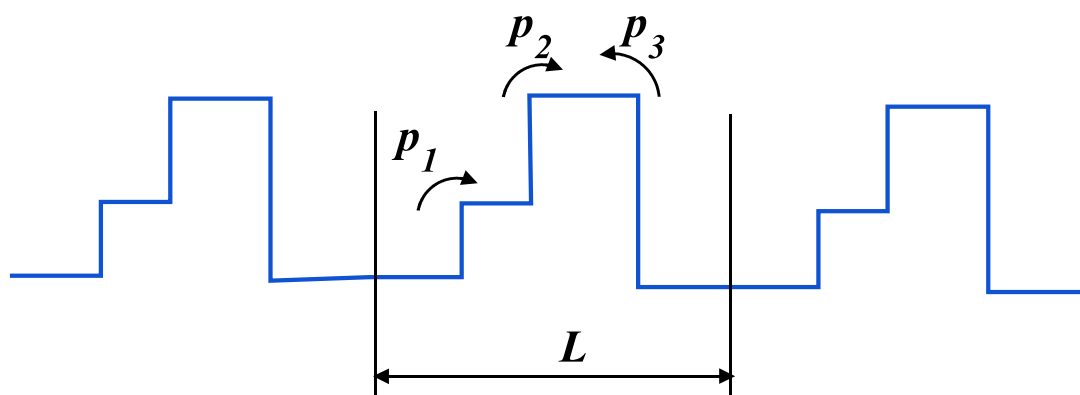
Rezultātā tiek iegūta tādi pati forma kā simetriskā modeļa gadījumā, tas nozīmē, ka šī formula var tikt pielietota abiem gadījumiem vienādi un šo formulu varēs izmantot rezultātu salīdzināšanai ar modelēšanā iegūtajiem rezultātiem.

4.DREIFA IETVERŠANA

5.MODEĻA IZSTRĀDE

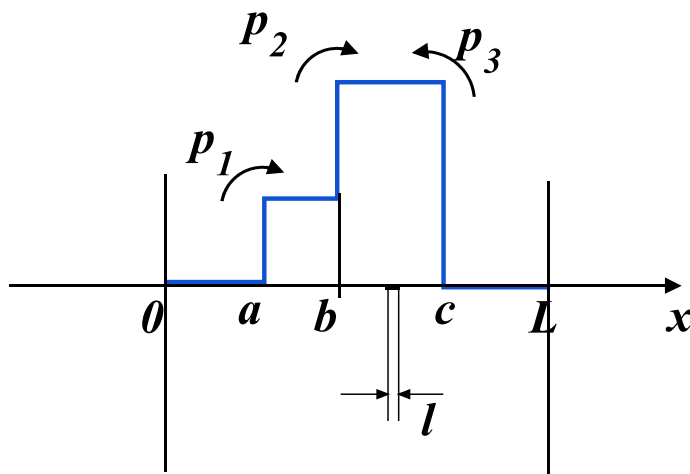
5.1.MODEĻA IDEJA

Šajā darbā tika modelēta difūzija viendimensiju asimetriskā vidē, kas nosaka to, ka kāda daļiņa no sākuma stāvokļa var kustēties divos virzienos – pa labi vai pa kreisi, ar atšķirīgām varbūtībām. Tā kā šinī modelī netika apskatīti kādi ārēji spēki, tad daļiņas kustēšanos ietekmēs tikai varbūtība ar kādu tā var pārvarēt potenciāla barjeras pa kreisi vai pa labi.



5.1. att. Nepārtrauktais modelis

Šajā attēlā ir redzams nepārtrauktais modelis kāds tika veidots darbā, kur daļiņa pārvietojas pa taisni ar barjerām.



5.2. att. Nepārtrauktā modeļa viens periods

Šajā attēlā ir redzams viens periods L pa kuru pārvietojas daļiņa. Ar p_i ir atzīmētas varbūtības ar kādām daļiņa pārvirz poteciāla robežas a , b un c . Un l ir viena gadījumlēciena garums, kur $l < 0.1$.

Apgabalā L notiek gadījuma klejošana – lēcieni pa kreisi un pa labi ar varbūtību $\frac{1}{2}$, izņemot punktus a, b un c , kas ir poteciālu robežas un kuras ir jāpārvirz ar konkrētu varbūtību p_i . Piemēram, ja daļiņa atrodas intervālā $(0, a)$ un notiek lēciena pa labi, tā ka l ir lielāks vai vienāds ar a jeb daļiņa lec uz intervālu (a, b) , tad gadījuma skaitlim ir jābūt mazākam vai vienādam ar varbūtību p_1 un tikai tad lēciena ir realizējies, savādāk daļiņa atstarojas jeb lec pa kreisi, kur nav poteciāla robežas.

Sākumā daļiņa tiek novietota brīvi izvēlētajā punktā x_0 , kas atrodas intervālā $(0, L)$. Nākamā koordināte katrā solī tiek aprēķināta šādi: ja daļiņa pārvietojas pa labi $x = x + l$, ja pretēji, tad $x = x - l$, lai iegūtu nepārtrauktu modeli, katru reizi, kad daļiņa iet ārā no intervāla $(0, L)$, tas tiek fiksēts un tiek atzīmēts uz kuru pusi tā ir izgājusi np pieskaita 1, ja daļiņa pārgājusi pār labo galu, nn pieskaita 1, ja daļiņa pārgājusi kreiso galu, tai pat laikā daļiņa tiek pārcelta uz intervāla otru pusi. Piemēram, ja daļiņa lec pāri labajam galam (L), tad $np = np + 1$ un daļiņa atrodas intervāla sākumā $(0) x = 0$. Šādi tiek ieviests periodisks robežcikls.

Pēc N lēcienu skaita tiek aprēķināts $x + np * l - nn * l - x_0$, tad process sākas no sākuma, kad procesam ir iziets cauri N_v reizes, tiek aprēķināts

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N_v} (x_i + np_i * l - nn_i * l - x_0)^2}{N_v} \quad (5.1.)$$

Tad tiek aprēķināts difūzijas koeficients viendimensiju difūzijas gadījumā.

$$D_{eff} = \frac{\langle x^2 \rangle}{2 * N * \tau}, \quad (5.2.)$$

kur

τ – viena lēciena ilgums

5.2.BIBLIOTĒKA MERSENNE TWISTER

Modeļa izstrādē tika izmantota bibliotēka Mersenne twister, ar tās palīdzību tika ģenerētas gadījuma vērtības, kuras tika izmantotas modelēšanā.

5.3.MODEĻA PROGRAMMĒŠANA

Sākumā tika programmēts modelis viendimensiju difūzijas asimetriskā gadījumā, kurā ietilpst 2 barjeras, kuras atrodas noteiktā attālumā viena no otras(3.1.att.).

Modeļa izstrādē tika izmantoti šādi mainīgie:

1. L – nogriežņa garums
2. a – otrās fāzes sākums
3. b – otrās fāzes beigas
4. c – trešās fāzes sākums
5. d – trešās fāzes beigas
6. l – daļiņas lēciena garums(l1- ieslēgumā, l2- pamatvidē)
7. t1 – lēciena laiks
8. Time – lēcienu skaits 1 ciklā
9. ND – ciklu skaits
10. p – varbūtība ar kādu daļiņai jāpārvar potenciāla robežas(p2-otrā fāze, p3-trešā fāze)
11. f – fāzes garums(2-otrās fāzes, 3-trešās fāzes)
12. D1-difūzijas koeficients pamatvidē
13. DefT – teorētiskais difūzijas koeficients
14. tt – programmas darbināšanas laiks(tt0-sākuma laiks, tt1-beigu laiks)
15. np – skaita pārneses pa veselu nogriezni pa labi vai pa kreisi
16. xkvad –
17. x2vid -
18. x, x1 – koordināte, kurā atrodas daļiņa
19. x2 – koordināte, kurā daļiņa būs pēc soļa
20. st, st1 – gadījuma skaitlis
21. outnr, N – skaitītāji
22. mtrand – gadījumskaitļu ģenerators

23. outputnr – pēc cik lēcieniem izvada uz ekrāna rezultātu

Programmas sākumā tiek piešķirtas sākuma vērtības elementiem, uzrakstītas formulas pēc kā tiek aprēķināti elementi un izvadīti galvenie mainīgie pēc kā notiks modelēšana.

```
f1=(b-a)/L;  
f2=(d-c)/L;  
f=c/L;  
D1=l1*l1/(2*t1);  
DefT=1/(1-f1-f2+f1/p2+f2/p3)/(1-f1-f2+p2*f1+p3*f2);  
time(&tt0);  
cout<<"SAKUMS: "<<ctime(&tt0)<<endl;//fikse pulsteni,kad sakam  
cout<<"Def-1D DATI: Time="<<Time<<" ND="<<ND<<endl;  
cout<<" a="<<a<<" b="<<b<<" l1="<<l1<<" p2="<<p2<<" p3="<<p3<<endl;  
  
x2vid=0;  
  
outnr=0;
```

Galvenais programmas algoritms ir iekļauts for ciklā, kas iet cauri iepriekš definētam ciklu skaitam. Katra cikla sākumā elementiem tiek piešķirtas sākuma vērtības un daļiņa tiek novietota nejauši izvēlētajā vietā nogrieznī.

```
for (int N=1;N<=ND;N++) {  
  
    np, t, xkvad = 0.;  
  
    x =L* mtrand1.rand( 1 );  
  
    x1=x;
```

Tad programma ieiet while ciklā, kur norisinās vielas daļiņas lēcieni, kuru skaits ir iepriekš definēts. Sākumā tiek noteikts, kurš soļa lielums ir jāņem vērā pēc atrašanās vietas nogrieznī.

```

while(t<Time)  {
    if(x1>a && x1<b || x1>c && x1<d)
        l=l2;
    else
        l=l1;
}

```

Tad tiek ģenerēts gadījuma skaitlis ar kādu daļiņa veiks nākamo soli, tad tiek noteikts vai šis solis būs pa labi vai kreisi, ja gadījuma skaitlis būs mazāks vai vienāds, tad daļiņa leks uz labo pusi, pretējā gadījumā - kreiso.

```

st=mtrand1.rand( 1 );
if(st<=0.5)
    x2=x1+l;
else
    x2 = x1-l;

```

Tad tiek noteikts vai daļiņa neiet ārpus nogriežņa robežām.

```

if (x2>L) {
    x2-=L;
    np+=1;
    goto label;}

if(x2<0) {
    x2+=L;
    np-=1;
    goto label;}

```

Tad tiek pārbaudīts vai daļiņa lec uz kādu no barjeram, piemēram šajā koda daļā tiek pārbaudīts vai daļiņa lec uz intervālu (a,b) no labās vai kreisās puses. Un, ja gadījumskaits ir

mazāks par varbūtību kāda nepieciešama lai pārvarētu šo barjeru, tad notiek lēciens, pretējā gadījumā – atstarošanās.

```
st1=mtrand1.rand( 1 );  
  
if(x1<a&& x2>a) { //barjera no kreisās uz a  
    if(st1<p2) {  
        goto label;}  
        x2=2*a-x2; //atstarojas  
        goto label;}  
  
if(x1>b&& x2<b) { // no (bc) uz (ab)  
    if(st1<p2)  
        {goto label;}  
        x2=2*b-x2; //atstarojas  
        goto label;}
```

Līdzīgi notiek pārbaudes vai daļiņa lec uz intervālu (c,d) no labās vai kreisās puses.

```
if(x2>c&& x1<c) //no (b,c) uz (c,d)  
    {if(st1<p3)  
        {goto label;}  
        x2=2*c-x2; //atstarojas  
        goto label;}  
  
if(x1>d&& x2<d) //no(d,L) uz (c,d)  
    {if(st1<p3)  
        {goto label;}  
        x2=2*d-x2; //atstarojas  
        goto label;}
```

Ja kādā no algoritma daļām ir izsaukts goto label, tad programma nonāk šeit., kur daļiņas atrašanās koordinātei tiek piešķirta vērtība uz kuru daļiņa leca. Un tiek aizvērts while cikls.

```
label: x1=x2;  
      t+=1;  
      }
```

Tad tiek aprēķināts un palielināts cikla skaitītājs par vienu.

```
xkvad=(np*L+x2-x)*(np*L+x2-x);  
x2vid+=xkvad;  
outnr+=1;
```

Ja cikla skaitītājs sakrīt ar iepriekš definētu skaitli pēc, kura jāizvada rezultāts, tad tiek izvadīts rezultāts. Un tiek aizvērts for cikls.

```
if (outnr==outputnr) {  
    cout << "x2vid=" << x2vid << " sqrt(x2vid)" << sqrt(x2vid) << endl;  
    cout << " x2=" << x2vid/N << " Dexp=" << x2vid/(2*Time*N);  
    cout << " Dexp/D1=" << x2vid/(2*Time*N)/D1 << " N=" << N << endl;  
    cout << " Dexp/DefT=" << x2vid/(2*Time*N)/D1/DefT << endl;  
  
    outnr=0;  
    time(&tt1);  
    tt0=tt1;  
}  
}
```

Pašās programmas beigās tiek noteikts un izvadīts laiks cikos programma beidza savu darbu.

```
cout<<"BEIGAS: "<<ctime(&tt0)<<endl;
```

Tad tika izveidots otrais asimetriskais modelis(3.2.att), kurā galvenās atšķirības no iepriekšējā modeļa bija tajā, ka barjeras bija blakus viena otrai, līdz ar to šajā modelī netika izmantots mainīgais d, un potenciāla barjeras a,b,c tika pārvietotas kā arī varbūtības ar kādām daļiņa pārvar potenciāla robežas ir atkarīgas viena otras.

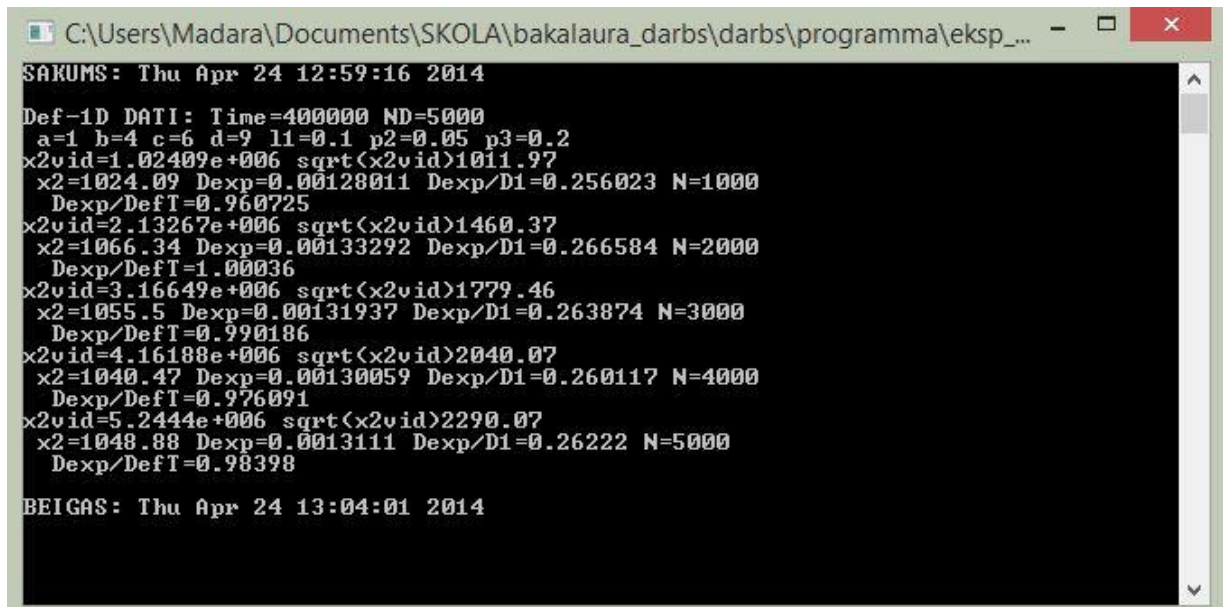
Programmas sākumā ir veiktas izmaiņas aprēķinot barjeras platumu.

```
f1=(b-a)/L;  
f2=(c-b)/L;
```

Vēl bija nepieciešams pārveidot programmas daļu, kurā daļiņa lec pāri potenciāla robežām, ņemot vērā, ka abas barjeras atrodas blakus.

```
if(x1<a&& x2>a) { //barjera no kreisās uz a  
    if(st1<p2)  
        goto label;  
    x2=2*a-x2; //atstarojas  
    goto label;}  
if(x2>b&& x1<b) { //no (a,b) uz (b,c)  
    if(st1<p3)  
        goto label;  
    x2=2*c-x2; //atstarojas  
    goto label;}  
if(x1>c&& x2<c) { //no(c,L) uz (b,c)  
    if(st1<p3)  
        goto label;  
    x2=2*d-x2; //atstarojas  
    goto label;}
```

Programmas izvads izskatās sekojoši.



The screenshot shows a Windows command prompt window with the title bar 'C:\Users\Madara\Documents\SKOLA\bakalaura_darbs\darbs\programma\eksp_...'. The output text is as follows:

```
SAKUMS: Thu Apr 24 12:59:16 2014
Def-ID DATI: Time=4000000 ND=5000
a=1 b=4 c=6 d=9 l1=0.1 p2=0.05 p3=0.2
x2vid=1.02409e+006 sqrt(x2vid)1011.97
x2=1024.09 Dexp=0.00128011 Dexp/D1=0.256023 N=1000
Dexp/DefT=0.960725
x2vid=2.13267e+006 sqrt(x2vid)1460.37
x2=1066.34 Dexp=0.00133292 Dexp/D1=0.266584 N=2000
Dexp/DefT=1.00036
x2vid=3.16649e+006 sqrt(x2vid)1779.46
x2=1055.5 Dexp=0.00131937 Dexp/D1=0.263874 N=3000
Dexp/DefT=0.990186
x2vid=4.16188e+006 sqrt(x2vid)2040.07
x2=1040.47 Dexp=0.00130059 Dexp/D1=0.260117 N=4000
Dexp/DefT=0.976091
x2vid=5.2444e+006 sqrt(x2vid)2290.07
x2=1048.88 Dexp=0.0013111 Dexp/D1=0.26222 N=5000
Dexp/DefT=0.98398
BEIGAS: Thu Apr 24 13:04:01 2014
```

5.3.att. Programmas izvads

5.4.MODELĒŠANA

Pirmais eksperiments tika veikts ar modeli, kura barjeras ir ar platumu 3 un tās atrodas ar 2 vienību attālumu viena no otras. Barjeras ir dažāda augstuma. Tika izvēlēti šādi parametri:

$a=1$, $b=4$, $c=6$, $d=9$, $L=10$

$l_1, l_2 = 0.1$

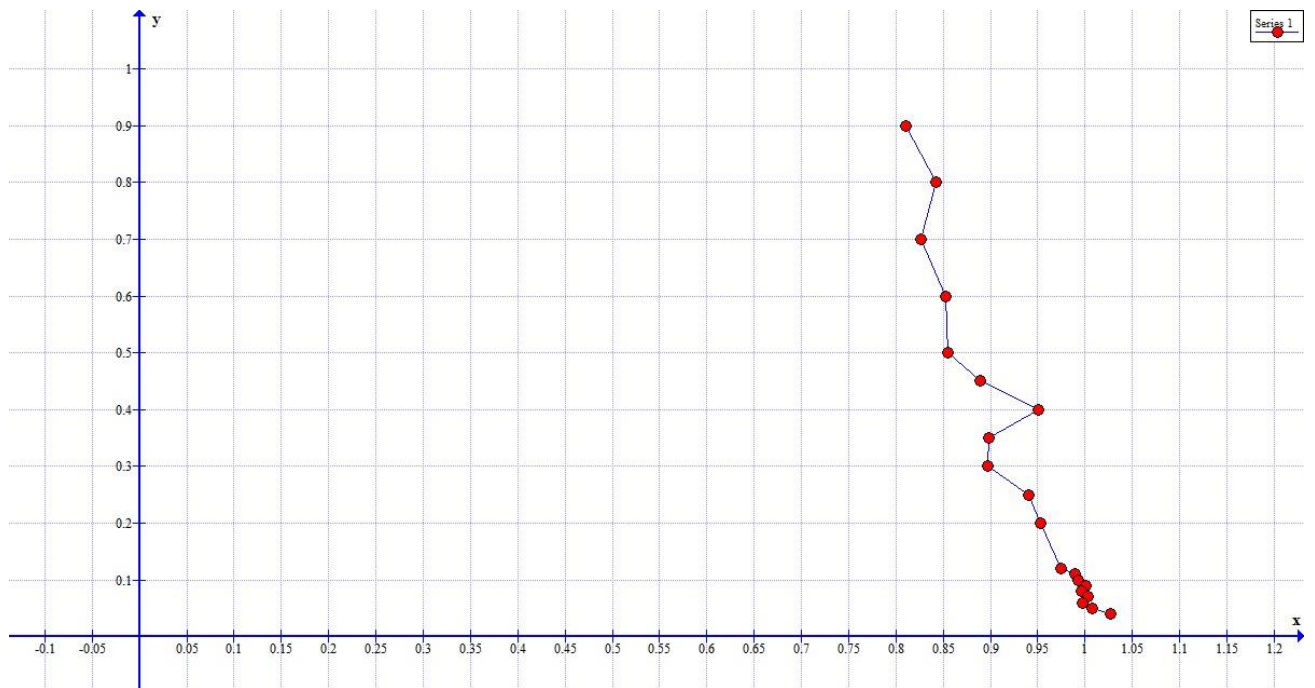
$t_1=1$

Time=4000000

ND=5000

$p_2=0.05$, $p_3=0.2$

Eksperiments tika veikts mainot soļa garumus l_1 un l_2 .



5.4.att. Pirmais eksperiments

Otrais eksperiments tika veikts ar līdzīgu modeli, kuram arī barjeras bija dažāda augstuma, un šīs barjeras atradās kopā. Sākuma parametri tika izvēlēti sekojoši:

$a=2$, $b=5$, $c=8$, $L=10$

$l_1, l_2 = 0.1$

$t_1=1$

$\text{Time}=4000000$

$\text{ND}=5000$

$p_2=$, $p_3=$

Līdzīgi kā iepriekš tika mainīts soļa garums l_1 un l_2 .

SECINĀJUMI UN PRIEKŠLIKUMI

IZMANTOTAIS LITERATŪRAS UN AVOTU SARAKSTS

1. Juris R. Kalnin, Eugene Kotomin, *AIP The journal of chemical physics*. Effective diffusion coefficient in heterogeneous media. American Institute of Physics. 137, 166101 (2012)
2. I. Riider, E. Hahn, I. Brune, J. Buohler, K.Kern - Nature, *Building one-and two-dimensional nanostructures by diffusion-controlled aggregation at surfaces* (1993) (http://lms.epfl.ch/files/content/sites/lms2/files/publications/papers/1993_Roder_N.pdf)
3. John Wiley. *One-Dimensional Nanostructures*. ISBN- 978-1-118-07191-5 (2013)
4. Juris R. Kalnin, Eugene Kotomin, J.Maier, *AIP The journal of chemical physics and chemistry of solids*. Calculations of the effective diffusion coefficient for inhomogeneous media. American Institute of Physics. 63, 449-456 (2002)
5. J.R.Kalninsh, *RAU Scientific Report. Computer Modeling & New Technologies*. Effective diffusion coefficient in one-dimensional inhomogenous model with periodically distributed inclusions (1999)
6. Juris R. Kalnin, Eugene Kotomin, J.Maier, J.Jamnik, *AIP The journal of chemical physics and chemistry of solids*. Generalised Maxwell – Garnett equation application to electrical and chemical transport (2006)
7. M.Wang, N.Pan, *Materials science & engineering*. Predictions of effective physical properties of complex multiphase materials (2008)
8. E.Heinsalu, M.Patriarca, I.Goychuk, P.Hänggi, *Journal of physics: condensed matter*. Fractional diffusion in periodic potentials. <http://iopscience.iop.org/0953-8984/19/6/065114/> (2007)
9. D.L.Weaver, Interpretation of lateral diffusion coefficients, 311-313.lpp