

ОЦЕНКА РАССТОЯНИЯ ДО БЛИЖАЙШЕГО СОСЕДА НА ПОВЕРХНОСТИ ПЫЛЕВОЙ ЧАСТИЦЫ

А. Б. Островский, А. И. Васюнин

Уральский федеральный университет, лаборатория астрохимии

В работе представлен аналитический метод расчета расстояния до ближайшего соседа на поверхности сферической пылевой частицы в модели непрерывного равномерного распределения частиц на поверхности. Приведено сравнение с результатами Монте-Карло-моделирования.

ESTIMATION OF THE DISTANCE TO A NEAREST NEIGHBOUR ON THE SURFACE OF A DUST GRAIN

A. B. Ostrovskii, A. I. Vasyunin

Ural Federal University, Laboratory of Astrochemistry

We suggest an analytical model for estimation of the distance to a nearest neighbour on a surface of a spherical dust grain. Comparison with Monte-Carlo simulation are presented.

Введение

В современных астрохимических моделях предполагается существенная роль в поверхностной химии бездиффузионного механизма химических реакций (см., например, [1–3]). Эффективность бездиффузионного механизма сильно зависит от расстояния между реагирующими частицами. Вероятности реакций в астрохимии обычно оцениваются как отношение числа частиц на поверхности к числу мест прилипания, что по смыслу соответствует вероятности обнаружить частицу в произвольном месте. В данной работе предлагается уточненный механизм оценки расстояния до ближайшего соседа на поверхности сферической пылинки.

Вероятность обнаружения частицы в малой площадке

Задача решается в приближении непрерывного распределения положения частиц на поверхности сферической пылинки радиусом R_g . Пространственное распределение частиц на поверхности предполагается равномерным. Таким образом, вероятность dP_1 попадания *одиночной* частицы в малую площадку dS с учетом нормировки есть

$$dP_1 \equiv C_1 dS, \quad \int_S C_1 dS = C_1 4\pi R_g^2 \equiv 1 \Rightarrow C_1 = \frac{1}{4\pi R_g^2}. \quad (1)$$

В случае когда на поверхности находится множество из N штук идентичных частиц с равномерным распределением, обнаружение конкретного экземпляра частицы в площадке dS трактуется как независимое совместное событие для всех экземпляров набора. Вероятность такого события определяется по (1). Далее, необходимо получить вероятность dP_N , обнаружить хотя бы один экземпляр частицы из набора в площадке dS . Вероятность dP_N

есть дизъюнкция (сложение — логическое ИЛИ) всех событий для всех частиц набора попасть в площадку dS . По правилу сложения вероятностей для такого случая получим

$$dP_N \equiv dP(A_1 + A_2 + \dots + A_N) = 1 - dP(\bar{A}_1) dP(\bar{A}_2) \dots dP(\bar{A}_N), \quad (2)$$

где A_i — событие обнаружения i -го экземпляра частицы в площадке dS ; $\bar{A}_i$ отрицание события A_i . Тогда

$$dP(A_i) = dP_1 = \frac{1}{4\pi R_g^2} dS, \quad dP(\bar{A}_i) = 1 - dP(A_i) = 1 - \frac{1}{4\pi R_g^2} dS, \quad (3)$$

$$dP(A_1 + A_2 + \dots + A_N) = 1 - (1 - dP(A_i))^N = 1 - \left(1 - \frac{1}{4\pi R_g^2} dS\right)^N. \quad (4)$$

Выражение (4) может быть линеаризовано в реалистичном предположении $dP_1 \rightarrow 0$, если $dS \rightarrow 0$. Тогда $(1 - dP(A_i))^N$ разлагается в степенной ряд по малому параметру $dP(A_i)$ с отбрасыванием слагаемых высоких порядков малости:

$$dP_N \equiv dP(A_1 + A_2 + \dots + A_N) \simeq \frac{N}{4\pi R_g^2} dS, \quad dP_N \equiv k dS, \quad k \simeq \frac{N}{4\pi R_g^2}, \quad (5)$$

где k — плотность вероятности события обнаружить хотя бы один экземпляр частицы из набора в N штук в площадке dS на поверхности сферической пылинки радиусом R_g для равномерного непрерывного распределения частиц по поверхности.

Функция распределения расстояния до ближайшего соседа

Требуется оценить вероятность обнаружения ближайшего к произвольной точке P (рис. 1) соседа на некотором расстоянии от P из набора N частиц, равномерно распределенных по поверхности пылинки. Задача решается в сферической системе координат, ось z совмещена с направлением на выбранную точку на поверхности пылинки.

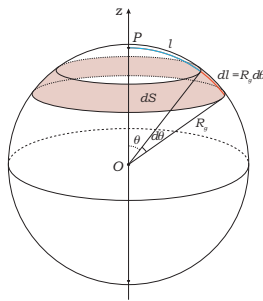


Рис. 1. Оценка расстояния до ближайшего к произвольной точке P соседа на поверхности сферы (пылинки): O — центр сферы; R_g — радиус сферы; Oz — полярная ось; θ — полярный угол; l — дистанция по поверхности сферы до некоторой точки (синяя кривая), соответствующая углу θ ; dl — элемент длины на поверхности (красная кривая), соответствующий углу $d\theta$; dS — дифференциально малый элемент площади сферы (розовое кольцо) для взятых θ , $d\theta$, R_g

Искомая вероятность P_l для события обнаружить ближайшего соседа на расстоянии l определяется вероятностью попасть в определенную кольцевую площадку dS и вероятностью dP_N (5) обнаружить хотя бы одну частицу из набора в dS , причем эти события

являются статистически независимыми совместными событиями. Пусть $F(\theta)$ есть функция распределения для события обнаружить ближайшего к точке P соседа на полярном угле θ , а $f(\theta)$ — соответствующая плотность вероятности.

Вероятность обнаружить ближайшего соседа в $[\theta, \theta + d\theta]$ и вероятность обнаружить соседа в $(0, \theta_0)$ суть соответственно

$$f(\theta) d\theta, \quad F(\theta_0) = \int_0^{\theta_0} f(\theta) d\theta. \quad (6)$$

С другой стороны, вероятность $f(\theta) d\theta$ есть совместная вероятность двух несовместных событий: не встретить частицу в $(0, \theta)$ и встретить ее в $[\theta, \theta + d\theta]$. Вероятность не встретить частицу в $(0, \theta)$ есть $1 - F(\theta)$. Вероятность встретить частицу в $[\theta, \theta + d\theta]$ есть вероятность события найти частицу в сферическом кольце с площадью dS , то есть $k dS$. Величина dS определяется как

$$dS = L dl = [L - \text{периметр } dS] = 2\pi R_g \sin \theta \cdot R_g d\theta. \quad (7)$$

Запишем, таким образом, что $f(\theta) d\theta = (1 - F(\theta)) k dS$ и получим дифференциальное уравнение вида

$$\frac{f'(\theta)}{f(\theta)} = \cot \theta - 2\pi k R_g^2 \sin \theta. \quad (8)$$

Решение данного уравнения для всей поверхности сферы дает следующие выражения для плотности вероятности, функции распределения, среднего расстояния до ближайшего соседа как функций линейного расстояния до соседа l по поверхности пылинки ($\theta = l/R_g$):

$$f(l) = \frac{\pi k R_g^2}{\sinh(2\pi k R_g^2)} \sin(l/R_g) \exp(2\pi k R_g^2 \cos(l/R_g)), \quad (9)$$

$$F(l) = \frac{\exp(2\pi k R_g^2) (\exp(2\pi k R_g^2) - \exp(2\pi k R_g^2 \cos(l/R_g)))}{\exp(4\pi k R_g^2) - 1}, \quad (10)$$

$$\bar{l} = \frac{\pi R_g}{2} (I_0(2\pi k R_g^2) - \exp(-2\pi k R_g^2)) \operatorname{csch}(2\pi k R_g^2), \quad k \simeq N/(4\pi R_g^2), \quad (11)$$

где $I_0(\cdot)$ — модифицированная функция Бесселя первого рода.

Численная проверка и обсуждение результатов

Для контроля и проверки полученных результатов было проведено Монте-Карло-моделирование для построения численной функции распределения для ряда значений размеров пылинки и числа частиц на ее поверхности. Случайное значение дистанции рассчитывалось как $l = R_g \cos^{-1}(2\gamma - 1)$, где γ — равномерно распределенное в $(0, 1)$ случайное число. Использовался следующий генератор случайных чисел: **Mersenne Twister 64-bit pseudorandom number generator** [4, 5]. Число частиц на поверхности N рассчитывалось для значений $R_g = 0.1$ и 1 мкм, числовой плотности газа в среде $\rho_{gas} = 10^6 \text{ см}^{-3}$, относительного обилия частиц по водороду n_{sp} , плотности вещества пылинки $\rho_g = 3 \text{ г/см}^3$. Для сравнения с классическим подходом приводим полное число мест прилипания на поверхности $N_{sites} = 1.9 \cdot 10^8$ для $R_g = 1$ мкм и $1.9 \cdot 10^6$ для $R_g = 0.1$ мкм. Выполнялся миллион раундов набрасывания N частиц на поверхность. Для каждого раунда определялась минимальная дистанция. Результаты моделирования и сравнение с аналитическими значениями приведены на рис. 2. Заметные различия между аналитической модельной оценкой

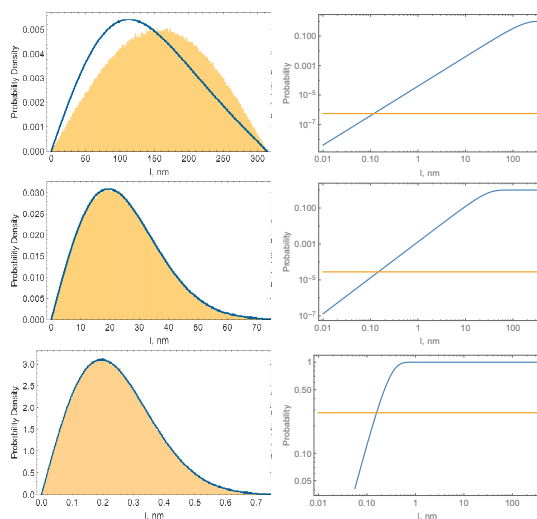


Рис. 2. Аналитические и Монте-Карло расчеты вероятности встретить ближайшего соседа для пылинки $R_g = 0.1$ мкм. Верхний ряд — $N = 1$ ($n_{sp} = 2 \cdot 10^{-12}$); средний ряд — $N = 52$ ($n_{sp} = 10^{-10}$); нижний ряд — $N = 525\,453$ ($n_{sp} = 10^{-6}$). Аналитическая кривая — синий цвет. Желтым цветом на левых панелях показан Монте-Карло-расчет, а на правых панелях величина N/N_{sites} . По горизонтальной оси — расстояние до ближайшего соседа (нм). Левая панель: плотность вероятности по формуле (9) и Монте-Карло. Правая панель: функция распределения расстояния до ближайшего соседа по формуле (10) и величина N/N_{sites}

и Монте-Карло-моделированием проявляются только в случае одиночных частиц на поверхности пылинки (сильное нарушение условия непрерывности распределения), но и они становятся несущественными уже при $N = 5-10$.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, номер проекта 23-12-00315.

Библиографические ссылки

- [1] Garrod R. T., Pauly T. On the Formation of CO₂ and Other Interstellar Ices // *Astrophys. J.* — 2011. — Vol. 735, № 1. — P. 15. 1106.0540.
- [2] Jin M., Garrod R. T. Formation of Complex Organic Molecules in Cold Interstellar Environments through Nondiffusive Grain-surface and Ice-mantle Chemistry // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* — 2020. — Vol. 249, № 2. — P. 26. 2006.11127.
- [3] Garrod R. T., Jin M., Matis K. A. et al. Formation of Complex Organic Molecules in Hot Molecular Cores through Nondiffusive Grain-surface and Ice-mantle Chemistry // *The Astrophysical Journal Supplement Series.* — 2022. — Vol. 259, № 1. — P. 1.
- [4] Matsumoto M., Nishimura T. Mersenne Twister: A 623-Dimensionally Equidistributed Uniform Pseudo-Random Number Generator // *ACM Trans. Model. Comput. Simul.* — 1998. — Vol. 8, № 1. — P. 3–30.
- [5] Nishimura T. Tables of 64-Bit Mersenne Twisters // *ACM Trans. Model. Comput. Simul.* — 2000. — Vol. 10, № 4. — P. 348–357.