

УДК 004.45:004.942

## ДОСЛІДЖЕННЯ ДИНАМІКИ БРОУНОВСЬКИХ ЧАСТИНОК У СИСТЕМАХ ІЗ ПАСТКАМИ ЗА ДОПОМОГОЮ МАШИННОГО НАВЧАННЯ

Хацько Д. С.

Науковий керівник – д-р техн. наук, проф. Кіріченко Л. О.  
Харківський національний університет радіоелектроніки, каф. ПМ,  
м. Харків, Україна

тел. +38(098) 176-14-39, email: daryna.khatsko@nure.ua

The aim of this study is to model Brownian motion with traps using Python and to analyze the motion using clustering analysis with machine learning techniques. In this study, we have introduced the concept of traps, which are the regions in space where the Brownian particle is confined for a certain period of time. We have simulated Brownian motion with traps and analyzed the motion using clustering analysis. The results of this study are important because they demonstrate the significance of considering trapping mechanisms when modeling Brownian motion with traps. Moreover, this study is crucial for the detection and characterization of traps in Brownian motion, which can have implications for various fields such as physics, chemistry, and biophysics.

Броунівський рух – це випадковий рух частинок, зважених у рідині або газі. Вперше він був помічений Робертом Брауном у 1827 році, а пізніше пояснений Альбертом Ейнштейном у 1905 році. Це явище пов'язане з постійним бомбардуванням молекулами рідини або газу зважених частинок. Броунівський рух є фундаментальним поняттям у фізиці та хімії і має численні практичні застосування в багатьох галузях [1].

У контексті броунівського руху з пастками, пастка – це область у просторі, де броунівська частинка утримується протягом певного часу. Пастки можуть виникати природним чином, наприклад, у біологічних клітинах, або можуть бути створені штучно.

Наявність пасток може суттєво впливати на динаміку броунівських частинок, що призводить до важливих наслідків для багатьох застосувань. Тому дуже важливо проаналізувати і зрозуміти поведінку броунівських частинок у присутності пасток [2].

Дослідження пасток у броунівському русі має значну важливість, оскільки це дає змогу розуміти механізми, які лежать в основі дифузійних процесів і характеризують їхні властивості. Аналіз пасток може допомогти в прогнозуванні динаміки частинок у системах, що має практичне значення для таких галузей, як фізика, хімія, біологія та матеріалознавство.

У цьому дослідженні броунівський рух з пастками було змодельовано за допомогою Python. Код, використаний у цьому дослідженні, генерує одновимірну траєкторію броунівського руху з  $N$  кількістю кроків. За основу для моделювання одномірного руху була взята формула (1), в якій у кожен

момент часу  $t_i$ , частинка, що рухається у випадковому порядку, перебуває в позиції  $x_i$ , визначеній як сума позиції на попередньому кроці  $x_{i-1}$ , з деяким випадковим приростом  $\mu \cdot \Delta t$  і нормально розподіленим випадковим шумом з нульовим середнім і стандартним відхиленням  $\sigma\sqrt{\Delta t}$ . Для утворення пасток траєкторію біло змінено шляхом тимчасового зменшення коефіцієнта дифузії. Ці пастки імітуються шляхом зменшення середньоквадратичного відхилення нормального розподілу в 10 разів протягом інтервалів часу, в яких вони виникають.

$$x_i = x_{i-1} + \mu \cdot \Delta t + \sigma\sqrt{\Delta t} \cdot N(0,1), \quad (1)$$

де  $x_i$  – позиція частинки в момент часу  $t_i$ ;

$\mu$  – середнє значення швидкості;

$\Delta t$  – інтервал часу між  $t_{i-1}$  і  $t_i$ ;

$\sigma$  – стандартне відхилення швидкості;

$N(0,1)$  – випадкова величина, розподілена за нормальним законом із середнім значенням 0 і стандартним відхиленням 1.

Результатом такого моделювання є *numpy* масив, який містить  $x$ -координату частинки на кожному часовому кроці, а також масив двовимірних точок, які можна побудувати для візуалізації траєкторії. Крім того, програма виводить три масиви, які містять точки траєкторії в кожній пастці. Ці масиви можна використовувати для подальшого аналізу та алгоритмів машинного навчання.

Метою роботи є дослідження динаміки броунівських частинок у присутності пасток і розробка нового підходу до моделювання та аналізу цих систем з використанням методів машинного навчання.

Список використаних джерел:

1. Parisi, G. (2005). Brownian motion. *Nature*, 433, 221. <https://doi.org/10.1038/433221a>

2. Frey, E., & Kroy, K. (2006). Brownian motion: A paradigm of soft matter and biological physics. *Annalen Der Physik*, 14(1-3), 20-50. <https://doi.org/10.1002/andp.200551701-307>