

Monte Carlo: symulacja procesu Wienera, wyznaczanie współczynnika dyfuzji, symulacja procesu dyfuzji i absorpcji

Filip Brodacz

17 kwietnia 2025

1 Wstęp teoretyczny

Celem niniejszych symulacji jest numeryczne modelowanie zjawiska dyfuzji w dwóch wariantach: w układzie otwartym (proces Wienera) oraz w układzie zamkniętym z absorpcją. W obu przypadkach ruch cząstek opisywany jest jako proces stochastyczny, a ich ewolucja w czasie pozwala na wyznaczenie charakterystyk takich jak współczynniki dyfuzji czy liczba aktywnych cząstek.

1.1 Dyfuzja w układzie otwartym (proces Wienera)

Podstawą teoretyczną procesu jest jednowymiarowe równanie dyfuzji:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

gdzie $u(x, t)$ to gęstość cząstek, a D to współczynnik dyfuzji. Dla warunku początkowego w postaci źródła punktowego:

$$u(x = x_0, t = 0) = \delta(x - x_0)$$

rozwiązaniem równania jest funkcja Gaussa:

$$u(x, t) = \frac{1}{\sigma_t \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_t^2}\right), \quad \sigma_t = \sqrt{2Dt}$$

Proces ten można zasymulować, aktualizując położenia cząstek zgodnie z rozkładem normalnym:

$$X_i(t + \Delta t) = X_i(t) + \Delta X, \quad \Delta X \sim \mathcal{N}(0, \sigma_{\Delta t}), \quad \sigma_{\Delta t} = \sqrt{2D\Delta t}$$

oraz analogicznie dla współrzędnej y . Dla dużej liczby cząstek można wyznaczyć współczynniki dyfuzji:

$$D_{xx}(t) = \frac{\langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2}{2t}, \quad D_{yy}(t) = \frac{\langle y^2(t) \rangle - \langle y(t) \rangle^2}{2t}$$

$$D_{xy}(t) = \frac{\langle x(t)y(t) \rangle - \langle x(t) \rangle \langle y(t) \rangle}{2t}$$

W celu ograniczenia fluktuacji wartości tych współczynników można wykonać uśrednienie w przedziale czasowym $[t_A, t_B]$:

$$\langle D_{\alpha\beta} \rangle = \frac{1}{N_t} \sum_{k=1}^{N_t} D_{\alpha\beta}(t_k)$$

1.2 Dyfuzja z absorpcją w układzie zamkniętym

W drugim zadaniu rozważamy cząstki poruszające się w ograniczonym geometrycznie obszarze kołowym (promień R_r), ze źródłem cząstek znajdującym się w jego wnętrzu. Nowe cząstki dodawane są z wydajnością:

$$\omega = \frac{\Delta n}{\Delta t}$$

Ruch cząstki opisywany jest tak jak poprzednio, natomiast jej trajektoria może zakończyć się w przypadku przecięcia przez obszar absorbenta – innego koła o promieniu R_a .

Jeśli cząstka uderzy w brzeg głównego obszaru, odbija się zgodnie z zasadą:

$$\text{kąt padania} = \text{kąt odbicia}$$

Symulacja pozwala na wyznaczenie liczby aktywnych cząstek $n(t)$ w czasie oraz analizę wpływu parametrów ω i R_a na stan stacjonarny tego układu.

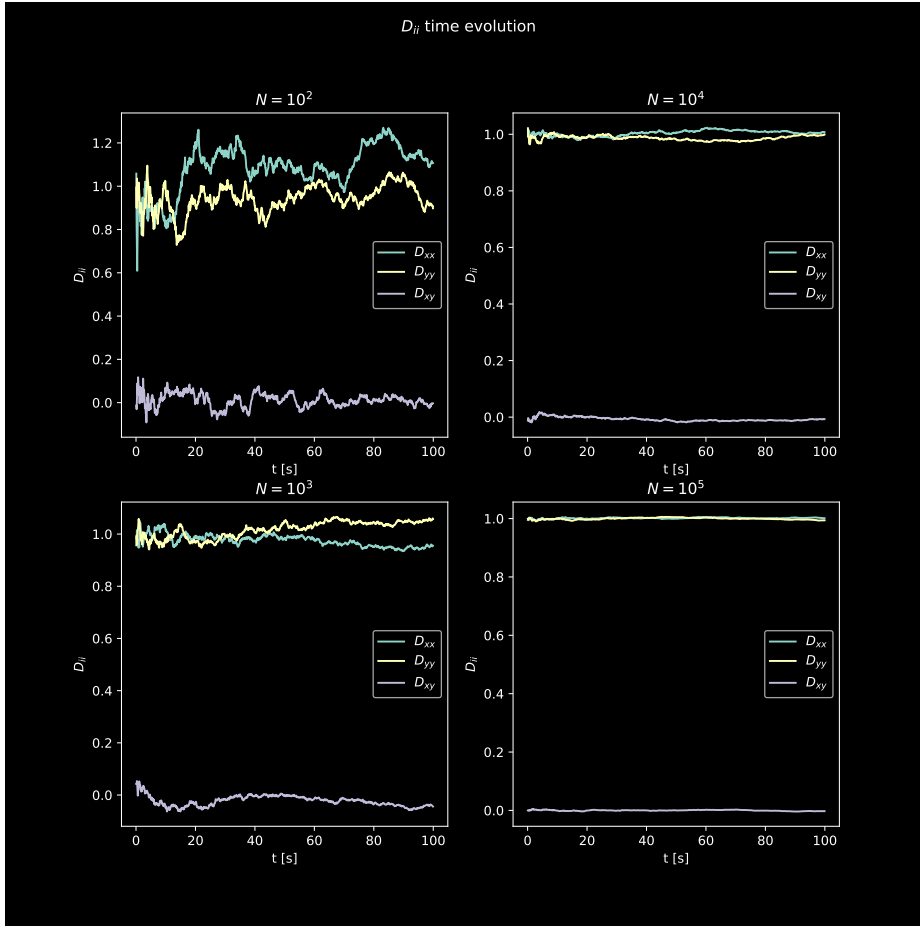
Dzięki analizie $n(t)$ oraz wizualizacji rozkładu cząstek w różnych chwilach czasowych możliwe jest zrozumienie dynamiki układów dyfuzyjnych z ograniczonymi warunkami brzegowymi i procesami absorpcji.

2 Wyniki

2.1 Zależność D_{ii} od czasu symulacji

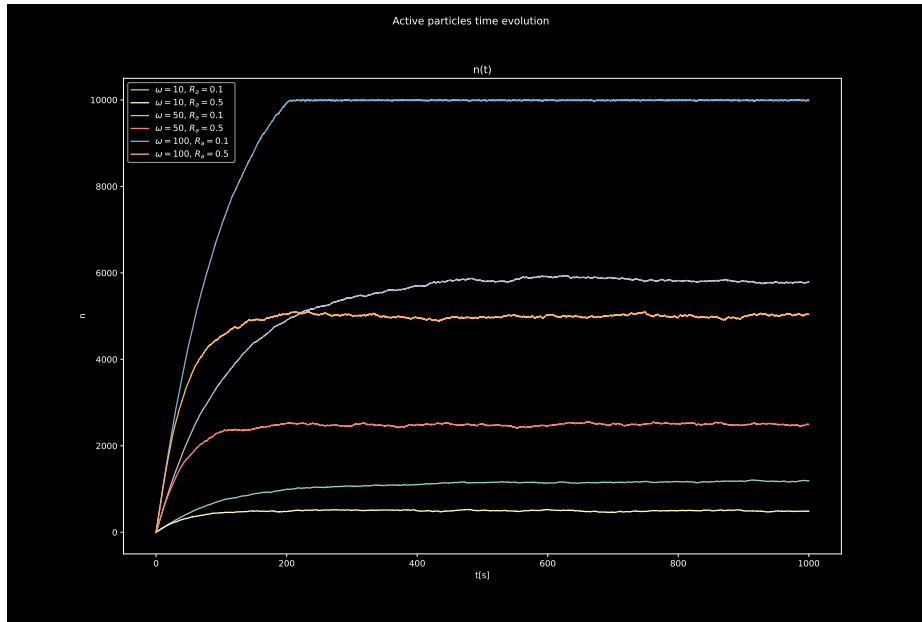
Na rysunku przedstawiono zależność współczynnika dyfuzji D_{ii} od czasu symulacji dla układu otwartego (proces Wienera). Ruch cząstek modelowany był jako suma niezależnych przyrostów Δx i Δy , losowanych z rozkładu normalnego o zerowej średniej i wariancji proporcjonalnej do Δt . W rezultacie obserwujemy, że dla rosnącej liczby cząstek wartości D_{xx} i D_{yy} stabilizują się wokół wartości 1.0, natomiast D_{xy} fluktuuje wokół zera, co potwierdza brak korelacji między składowymi ruchu w kierunku x i y .

Wartości D_{xx} oraz D_{yy} wykazują zbliżony przebieg, co sugeruje izotropowość procesu dyfuzji, przy założeniu, że układ nie wprowadza preferencyjnych kierunków ruchu dla cząstek.



2.2 Zależność $n(t)$ dla różnych parametrów

Na wykresach przedstawiono zależność liczby aktywnych cząstek $n(t)$ w czasie dla różnych ustawień parametrów absorpcji R_a oraz wydajności dodawania nowych cząstek ω . Dla większych wartości R_a , cząstki szybciej opuszczają obszar główny, co skutkuje mniejszą liczbą aktywnych cząstek w czasie. Z kolei wyższa wydajność dodawania nowych cząstek prowadzi do wzrostu liczby aktywnych cząstek w dłuższym okresie.



2.3 Wizualizacja rozkładu cząstek

Wizualizacja rozkładu cząstek w różnych chwilach czasowych pozwala na zaobserwowanie, jak zmienia się struktura układu w czasie. W przypadku układu otwartego cząstki rozprzestrzeniają się równomiernie w przestrzeni, co jest typowe dla procesu Wienera. W układzie zamkniętym z absorpcją rozkład cząstek jest bardziej skoncentrowany w części bliższej źródłu w początkowej części symulacji by pod koniec wyrównać ich rozkład w przestrzeni.

Animacja ruchu cząstek dla $k = 2$ w układzie otwartym

Animacja ruchu cząstek dla $k = 3$ w układzie otwartym

Animacja ruchu cząstek dla $k = 4$ w układzie otwartym

Animacja ruchu cząstek dla $k = 5$ w układzie otwartym

Animacja ruchu cząstek dla $\omega = 10, R_a = 0.1$ w układzie zamkniętym

Animacja ruchu cząstek dla $\omega = 50, R_a = 0.1$ w układzie zamkniętym

Animacja ruchu cząstek dla $\omega = 100, R_a = 0.1$ w układzie zamkniętym

Animacja ruchu cząstek dla $\omega = 10, R_a = 0.5$ w układzie zamkniętym

Animacja ruchu cząstek dla $\omega = 50, R_a = 0.5$ w układzie zamkniętym

Animacja ruchu cząstek dla $\omega = 100, R_a = 0.5$ w układzie zamkniętym

3 Podsumowanie

W pracy przeprowadzono symulacje procesów dyfuzji przy użyciu metody Monte Carlo, rozważając dwa przypadki: proces Wienera w układzie otwartym oraz dyfuzję z absorpcją w układzie zamkniętym. W przypadku pierwszym, uzyskano stabilne wartości współczynników dyfuzji D_{xx} i D_{yy} , potwierdzając izotropowość procesu. W drugim przypadku, zależność liczby aktywnych cząstek $n(t)$ od czasu została zbadana dla różnych parametrów, takich jak promień absorbenta R_a oraz wydajność dodawania nowych cząstek ω . Wyniki pokazały, że zwiększenie wartości R_a prowadzi do szybszego usuwania cząstek z układu, podczas gdy wyższa wartość ω powoduje wzrost liczby aktywnych cząstek w czasie. Dodatkowo, wizualizacje rozkładu cząstek w różnych chwilach czasowych umożliwiły lepsze zrozumienie dynamiki procesów dyfuzyjnych w obydwu układach.