

AGH UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

WYDZIAŁ FIZYKI I INFORMATYKI STOSOWANEJ
KIERUNEK STUDIÓW: FIZYKA TECHNICZNA



METODY MONTE CARLO

Laboratorium 6

Symulacja procesu Wienera, wyznaczanie współczynnika dyfuzji, symulacja procesu dyfuzji i absorpcji

zrealizował
Przemysław Ryś

Kraków, 8 Kwietnia 2024

1 Opis zagadnienia

Symulacja procesu Wienera jest wykorzystywana do wyznaczania współczynnika dyfuzji w układach otwartych. Równanie dyfuzji w 1D ma postać:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1)$$

gdzie D to współczynnik dyfuzji. Rozwiązanie dla warunku początkowego w postaci delty Diraca ma postać:

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

gdzie $\sigma_t = \sqrt{2Dt}$.

Proces dyfuzji można zasymulować, wykonując ewolucję czasową grupy cząstek, które są przemieszczane losowo zgodnie z procesem stochastycznym Wienera:

$$X_i(t + \Delta t) = X_i(t) + \Delta X_i, \quad \Delta X_i \sim N(\Delta t, 0, \sigma \Delta t) \quad (3)$$

gdzie ΔX_i ma rozkład normalny o średniej 0 i wariancji $\sigma^2 \Delta t$.

Współczynniki dyfuzji D_{xx} , D_{yy} oraz D_{xy} można określić na podstawie średnich położenia cząstek:

$$D_{xx}(t) = \frac{\langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2}{2t} \quad (4)$$

$$D_{yy}(t) = \frac{\langle y^2(t) \rangle - \langle y(t) \rangle^2}{2t} \quad (5)$$

$$D_{xy}(t) = \frac{\langle x(t)y(t) \rangle - \langle x(t) \rangle \langle y(t) \rangle}{2t} \quad (6)$$

Wartości te są fluktuacyjne w czasie, dlatego wartości niezależne od czasu oraz ich niepewności można uzyskać poprzez uśrednienie w określonym przedziale czasu.

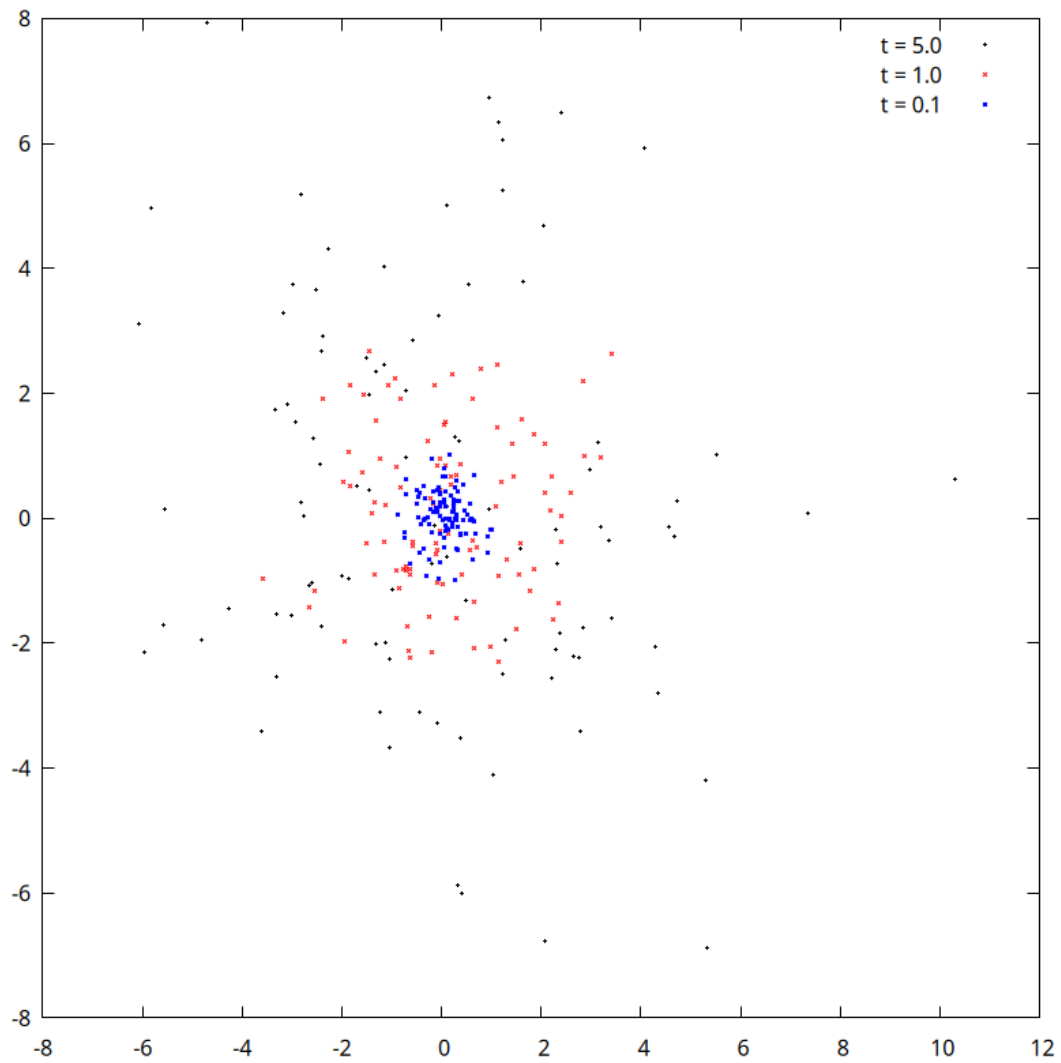
2 Wyniki

3 Zadanie 1

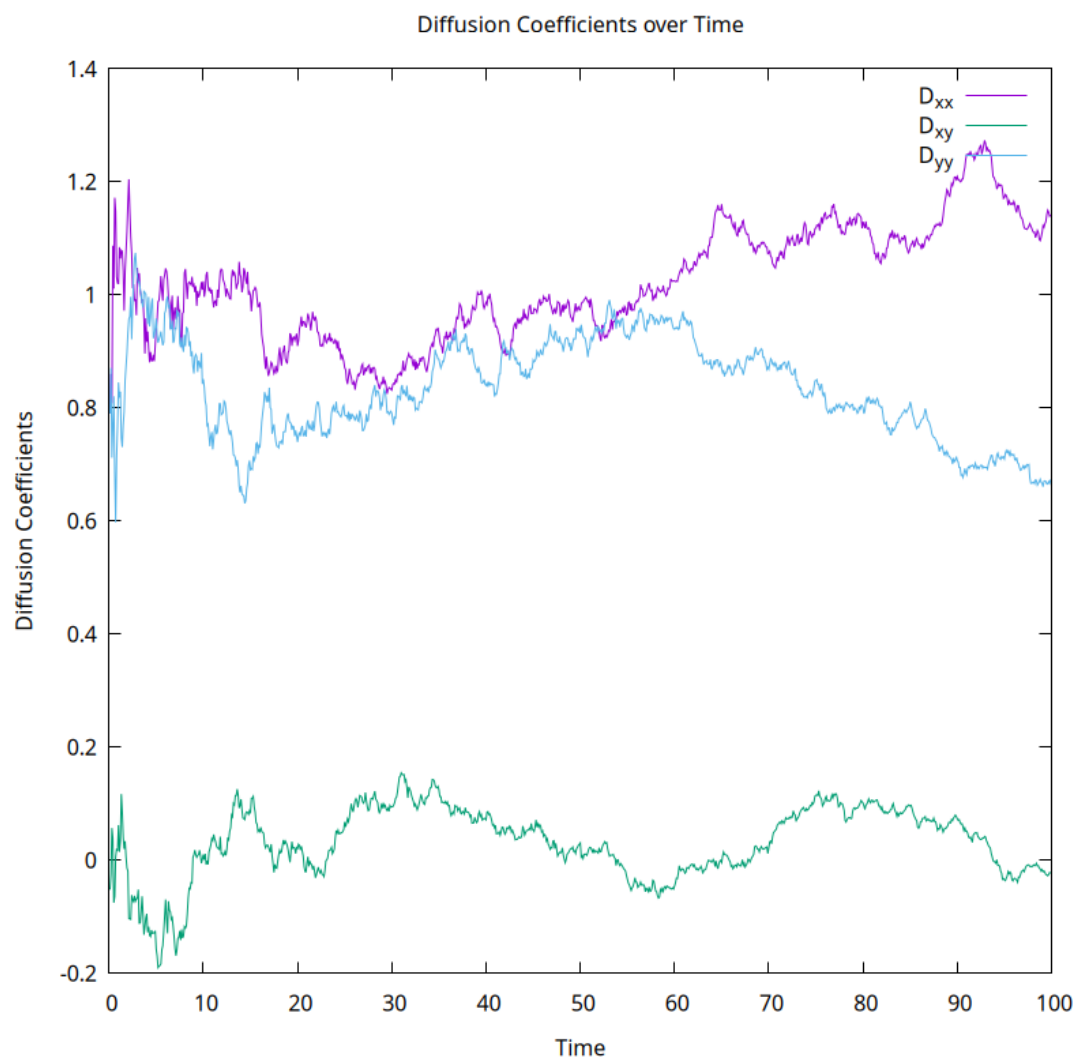
3.1 $N = 100$

Tab. 1: Współczynniki dyfuzji dla $N = 100$ cząstek w układzie

Współczynnik dyfuzji	Wartość	Błąd
D_{xx}	1.02013	0.00337048
D_{xy}	0.0314586	0.00197346
D_{yy}	0.833216	0.0028906



Rys. 1: Rozkład przestrzenny cząstek w kilku chwilach czasowych dla liczby cząstek wynoszącej $N = 100$

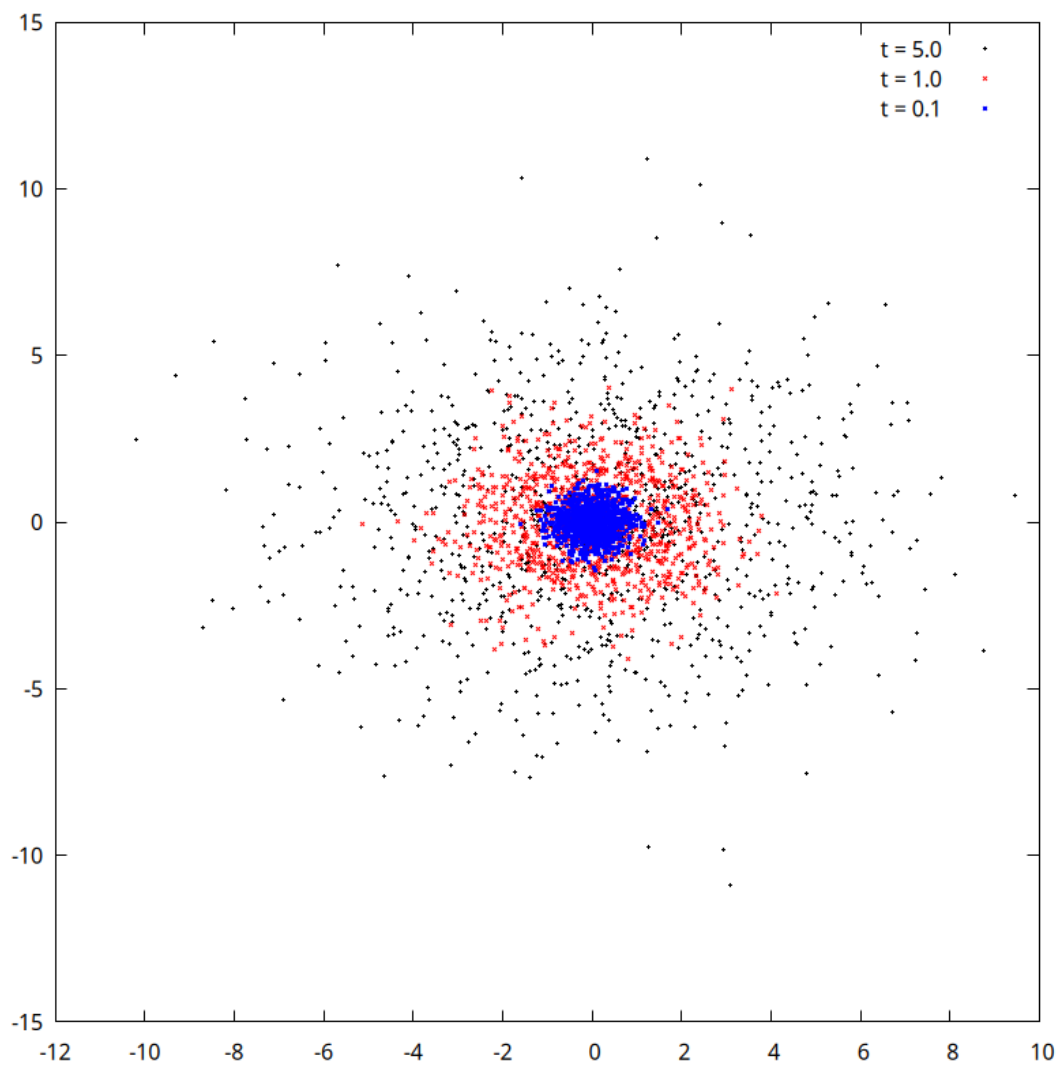


Rys. 2: Wartości współczynników dyfuzji dla liczby cząstek wynoszącej $N = 100$

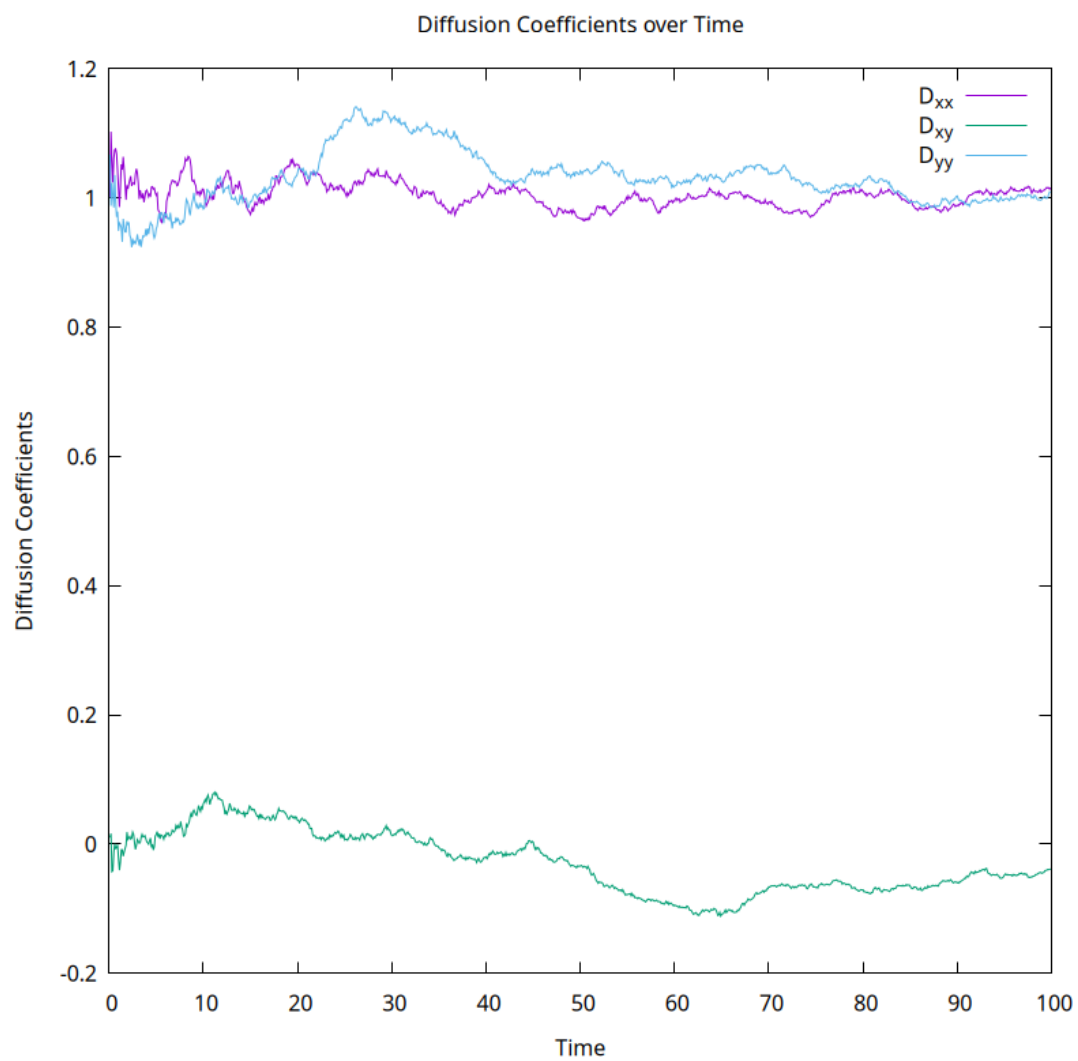
3.2 N = 1000

Tab. 2: Współczynniki dyfuzji dla $N = 1000$ cząstek w układzie

Współczynnik dyfuzji	Wartość	Błąd
D_{xx}	1.00365	0.00117956
D_{xy}	-0.0286809	0.00148465
D_{yy}	1.02952	0.00168892



Rys. 3: Rozkład przestrzenny cząstek w kilku chwilach czasowych dla liczby cząstek wynoszącej $N = 1000$

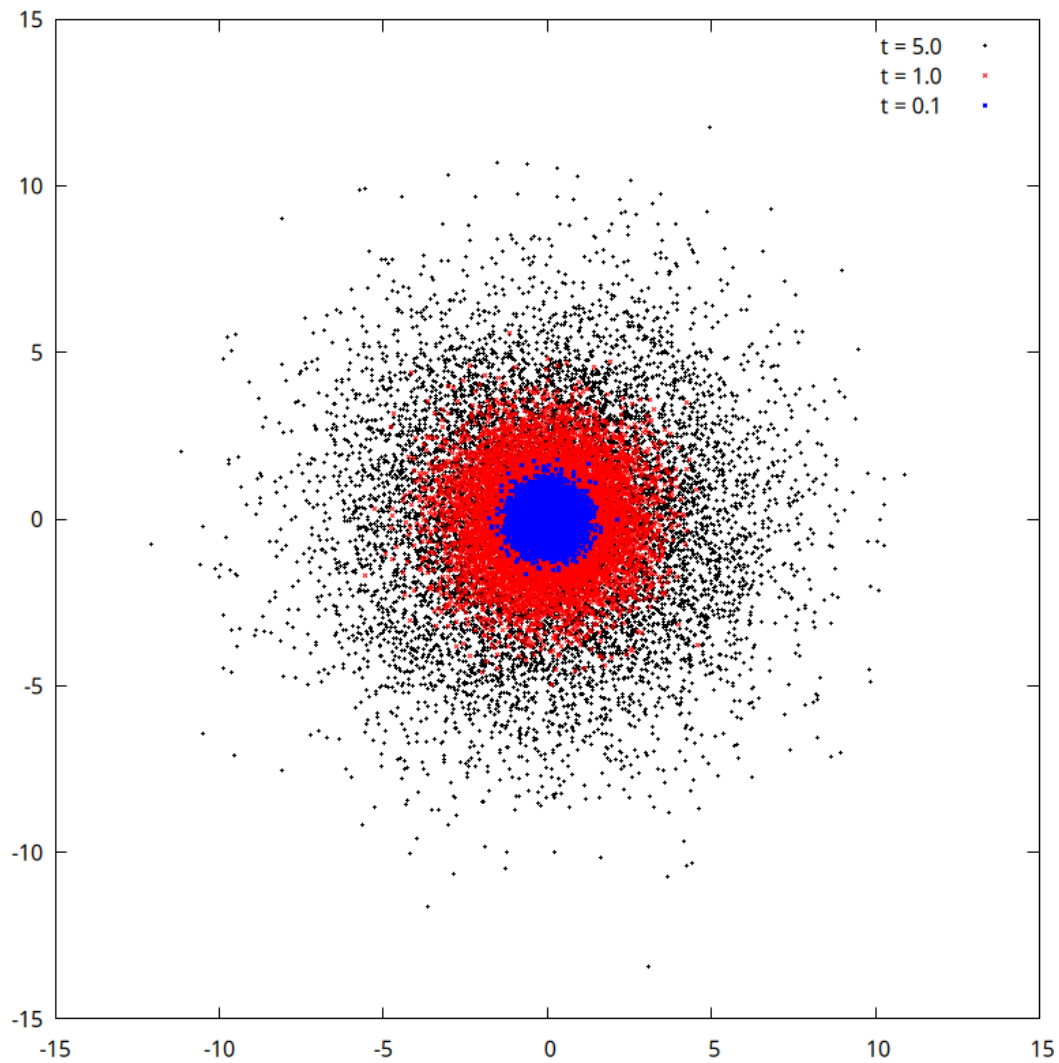


Rys. 4: Wartości współczynników dyfuzji dla liczby cząstek wynoszącej $N = 1000$

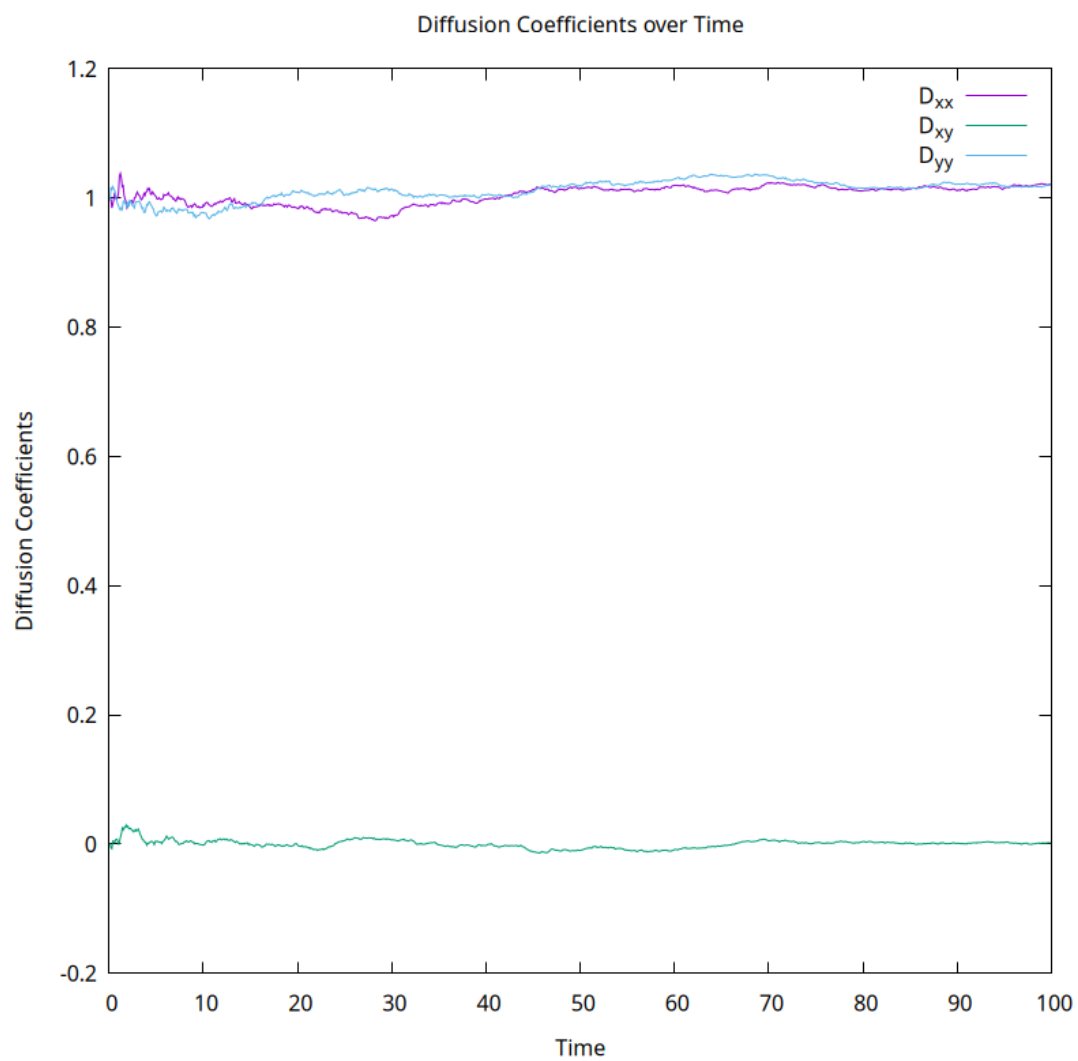
3.3 N = 10 000

Tab. 3: Współczynniki dyfuzji dla $N = 10\,000$ cząstek w układzie

Współczynnik dyfuzji	Wartość	Błąd
D_{xx}	1.00329	0.00110588
D_{xy}	3.52616×10^{-5}	0.000199496
D_{yy}	1.01095	0.00112542



Rys. 5: Rozkład przestrzenny cząstek w kilku chwilach czasowych dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

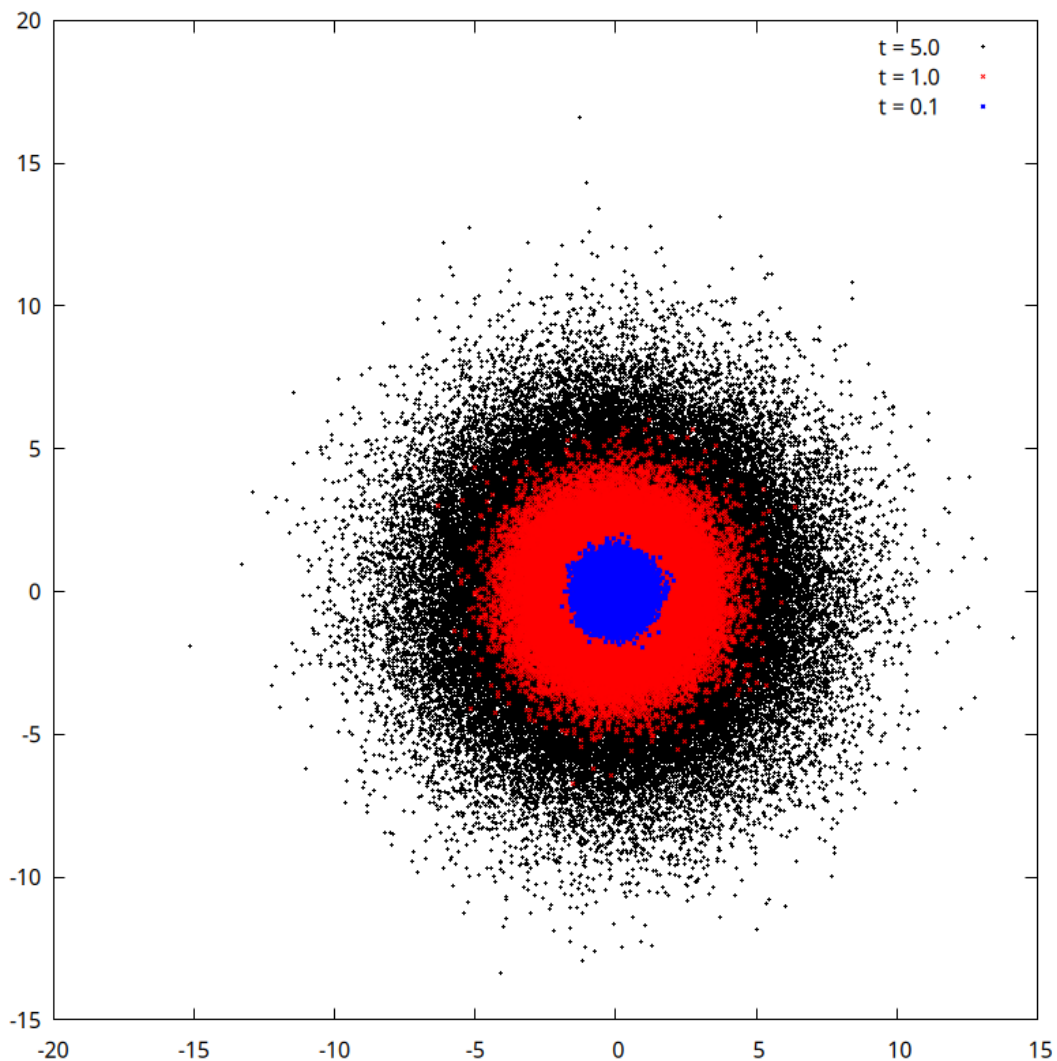


Rys. 6: Wartości współczynników dyfuzji dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

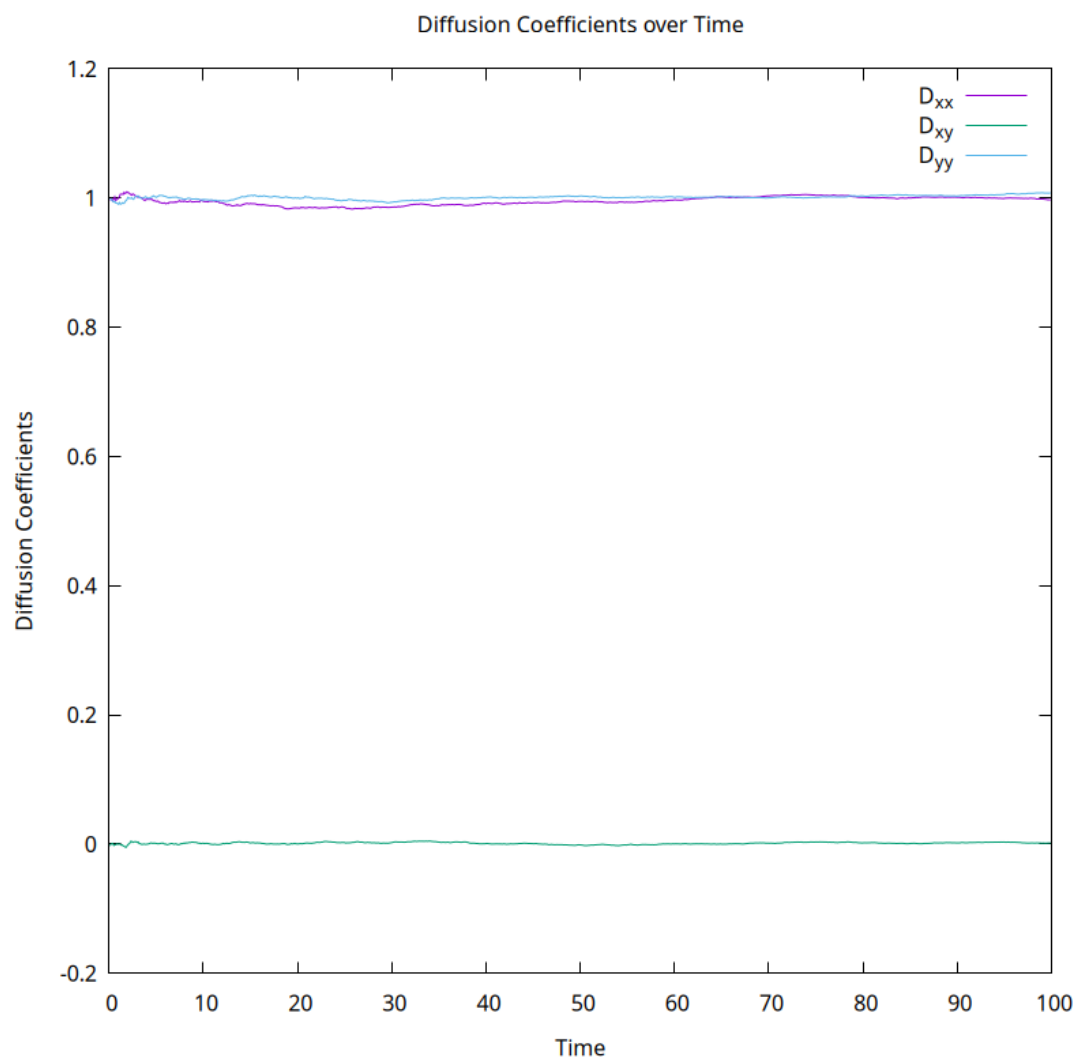
3.4 $N = 100\,000$

Tab. 4: Współczynniki dyfuzji dla $N = 100000$ cząstek w układzie

Współczynnik dyfuzji	Wartość	Błąd
D_{xx}	0.994248	0.00101385
D_{xy}	0.00127702	4.87863e-05
D_{yy}	0.999896	0.00100503



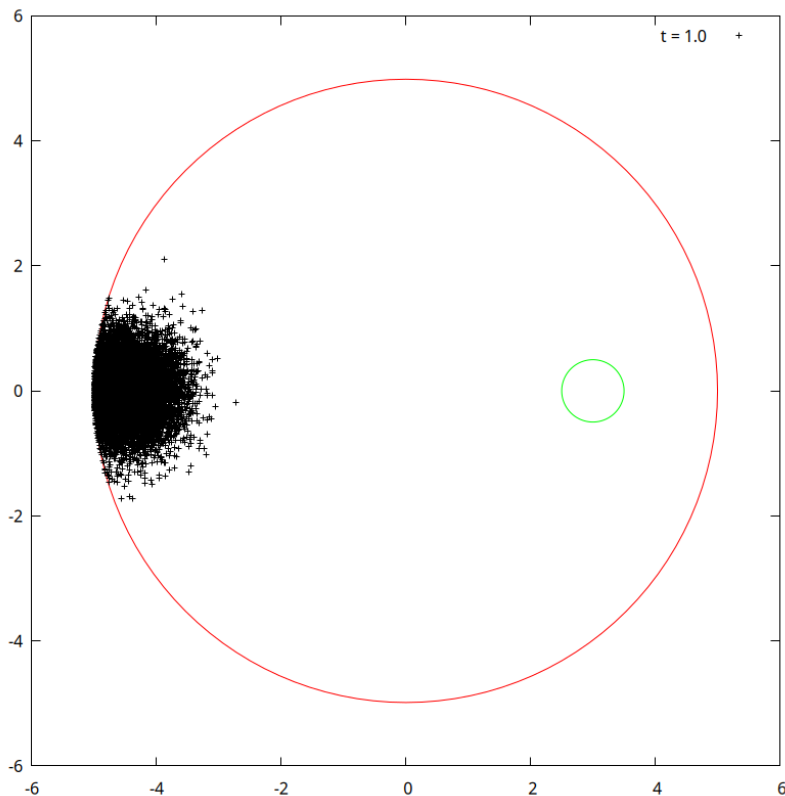
Rys. 7: Rozkład przestrzenny cząstek w kilku chwilach czasowych dla liczby cząstek wynoszącej $N = 100\,000$



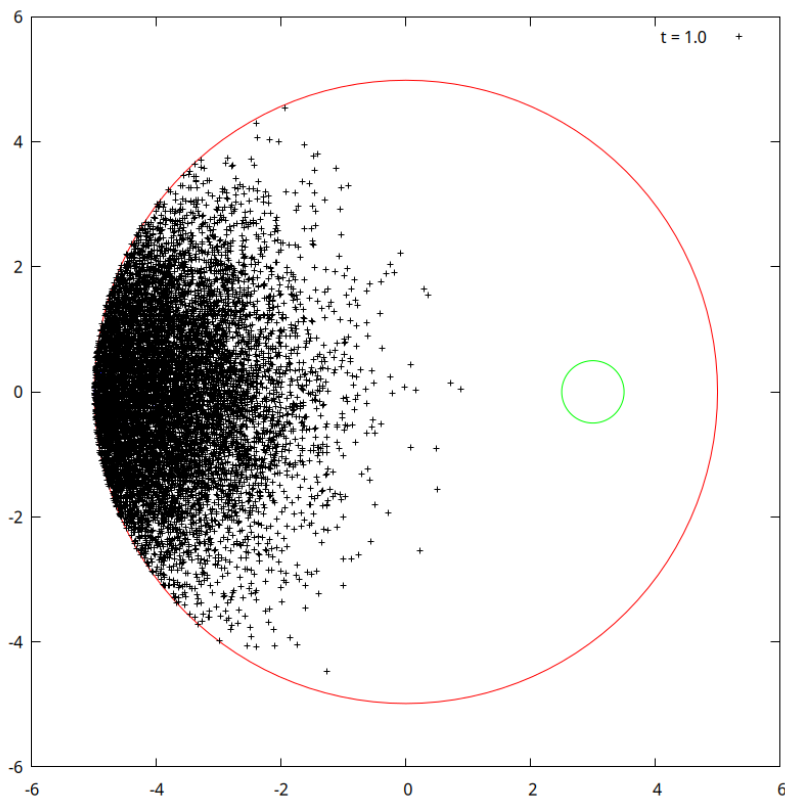
Rys. 8: Wartości współczynników dyfuzji dla liczby cząstek wynoszącej $N = 100\,000$

4 Zadanie 2

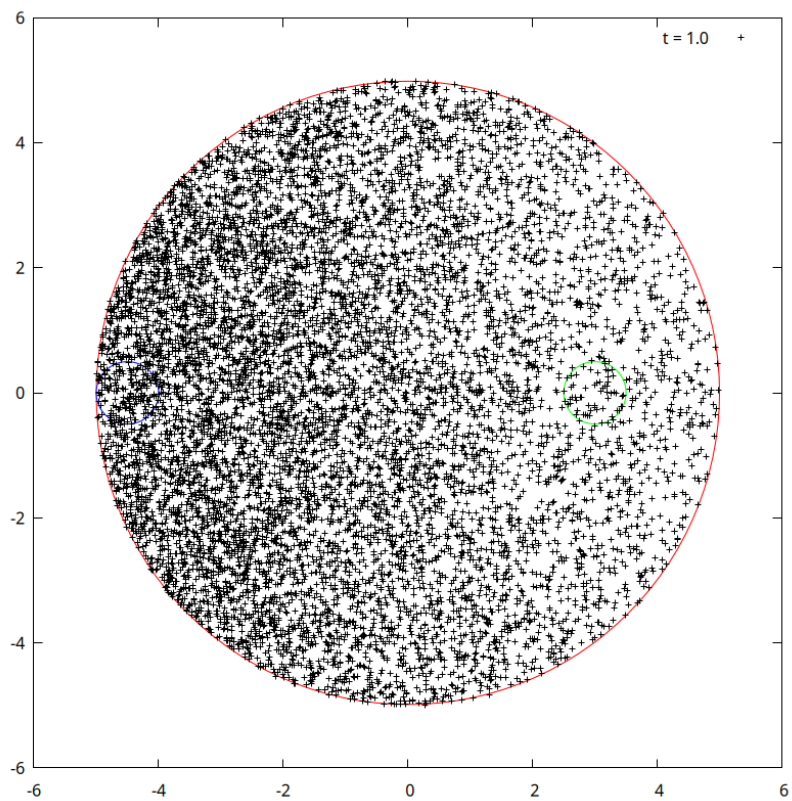
4.1 Promień absorbenta $R_a = 0.1, \omega = 10$



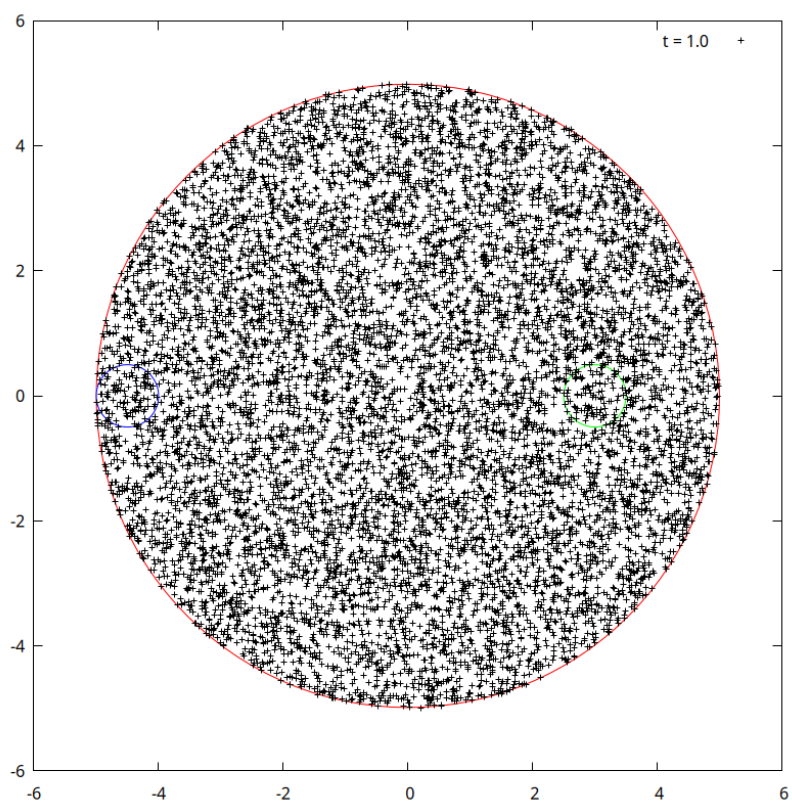
Rys. 9: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 0.1$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$



Rys. 10: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 1.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

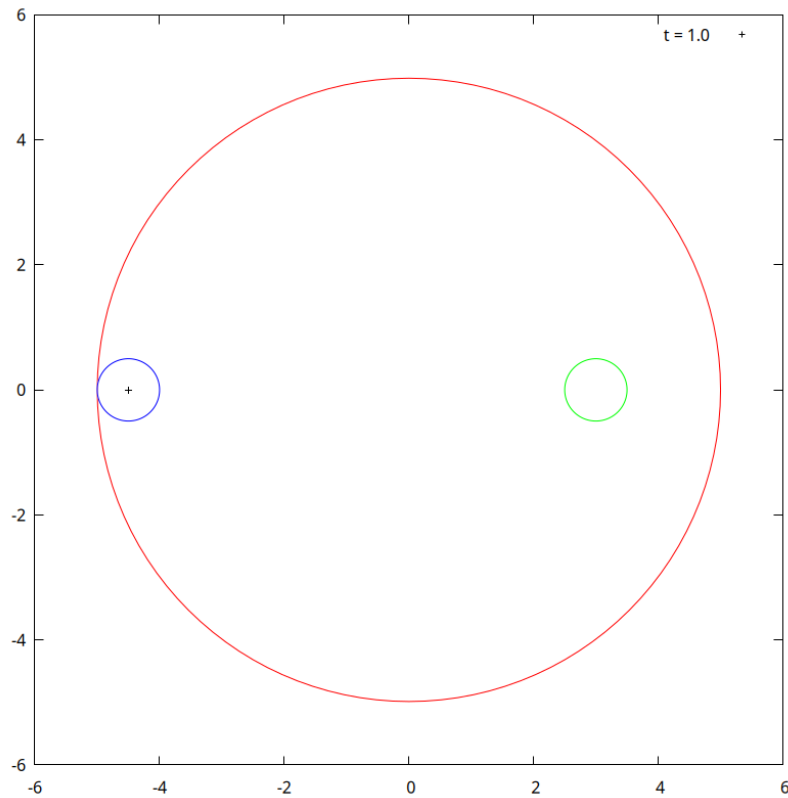


Rys. 11: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 10.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

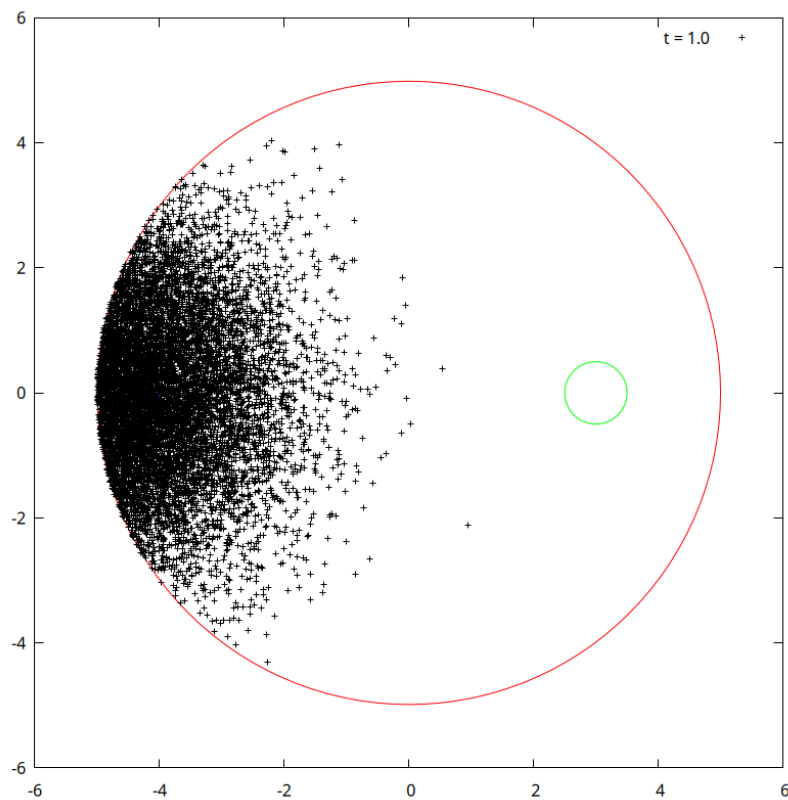


Rys. 12: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 100.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

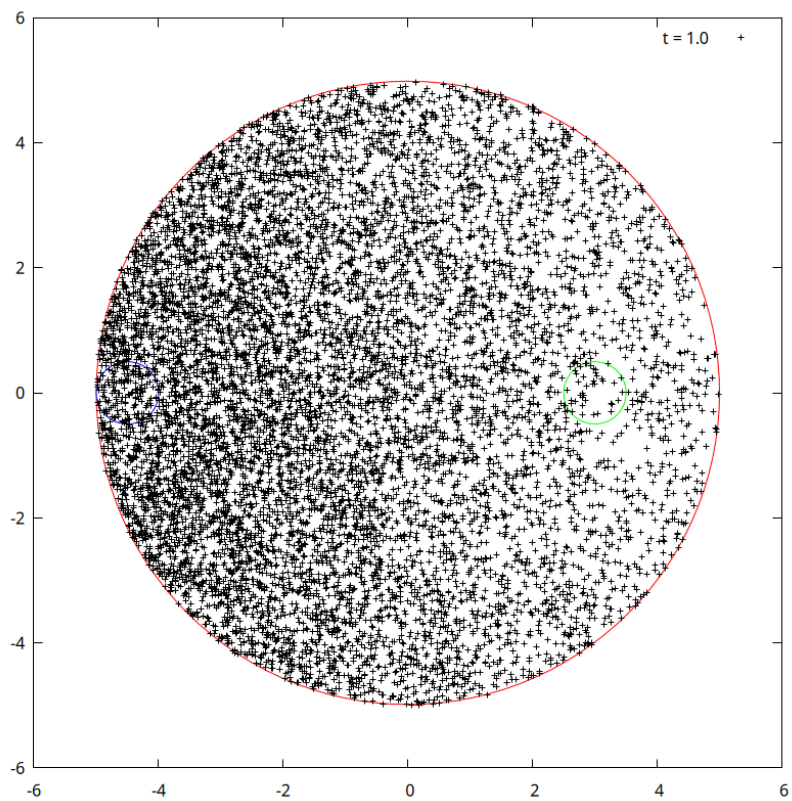
4.2 Promień absorbenta $R_a = 0.1, \omega = 50$



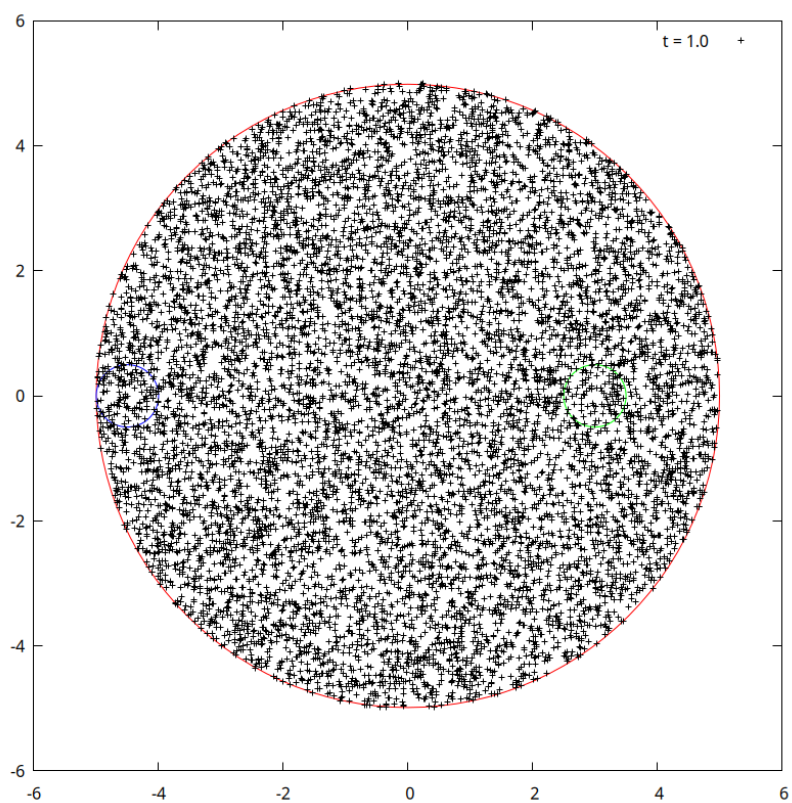
Rys. 13: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 0.1$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$



Rys. 14: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 1.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

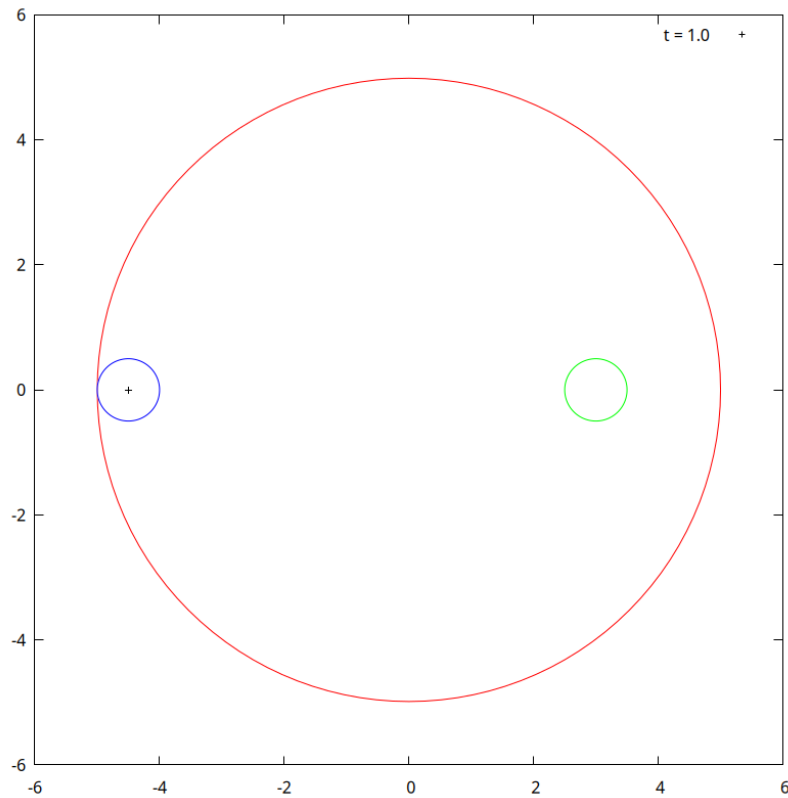


Rys. 15: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 10.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

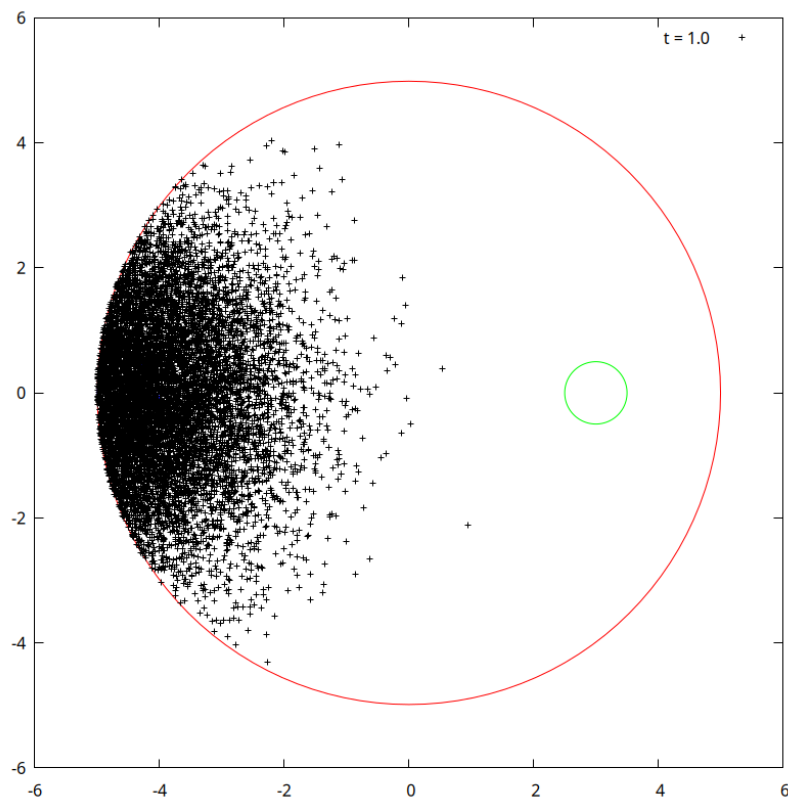


Rys. 16: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 100.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

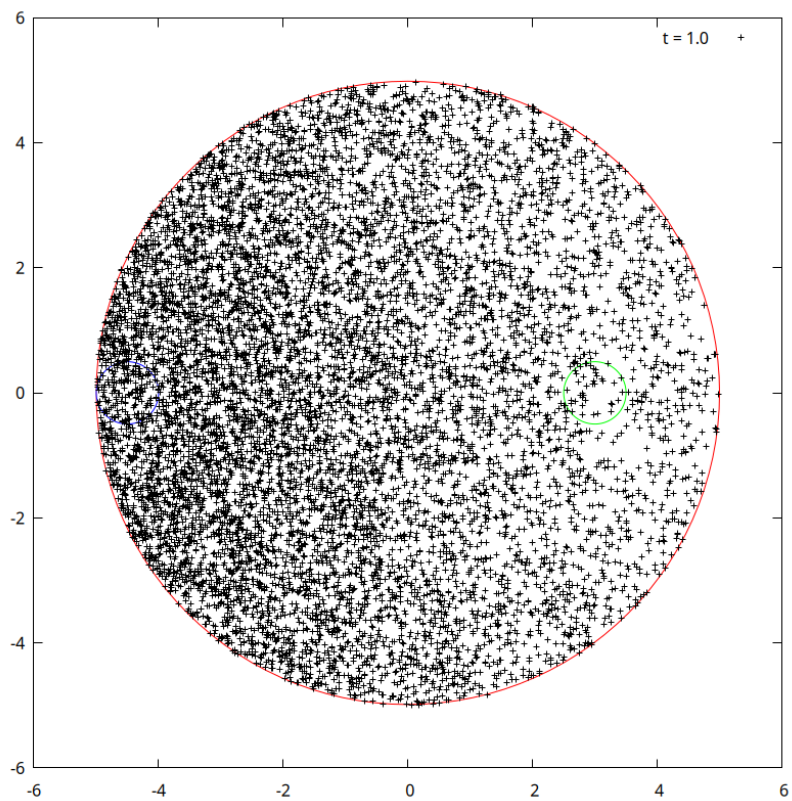
4.3 Promień absorbenta $R_a = 0.1, \omega = 100$



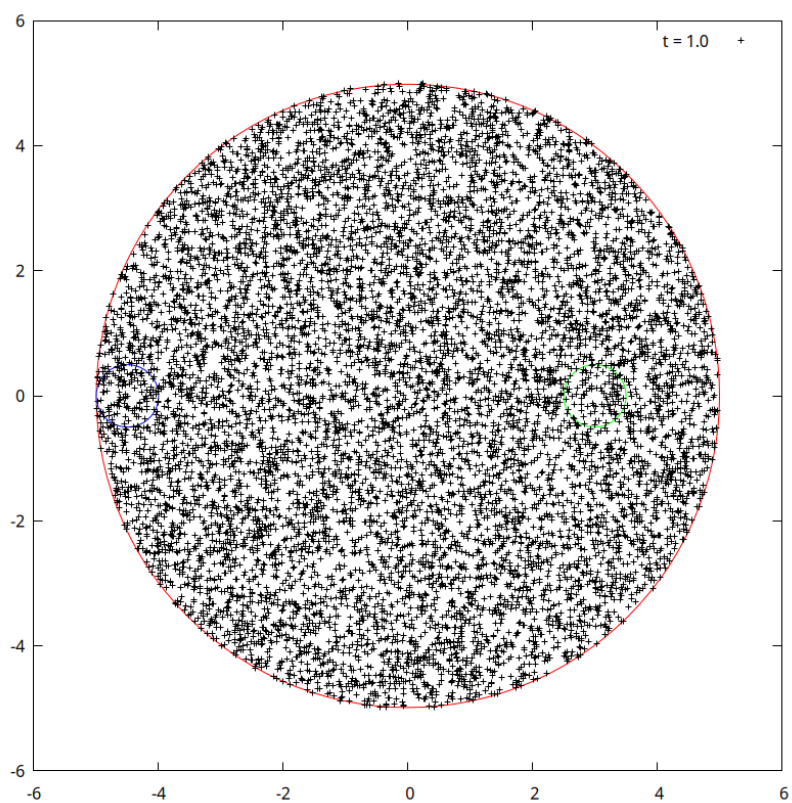
Rys. 17: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 0.1$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$



Rys. 18: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 1.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

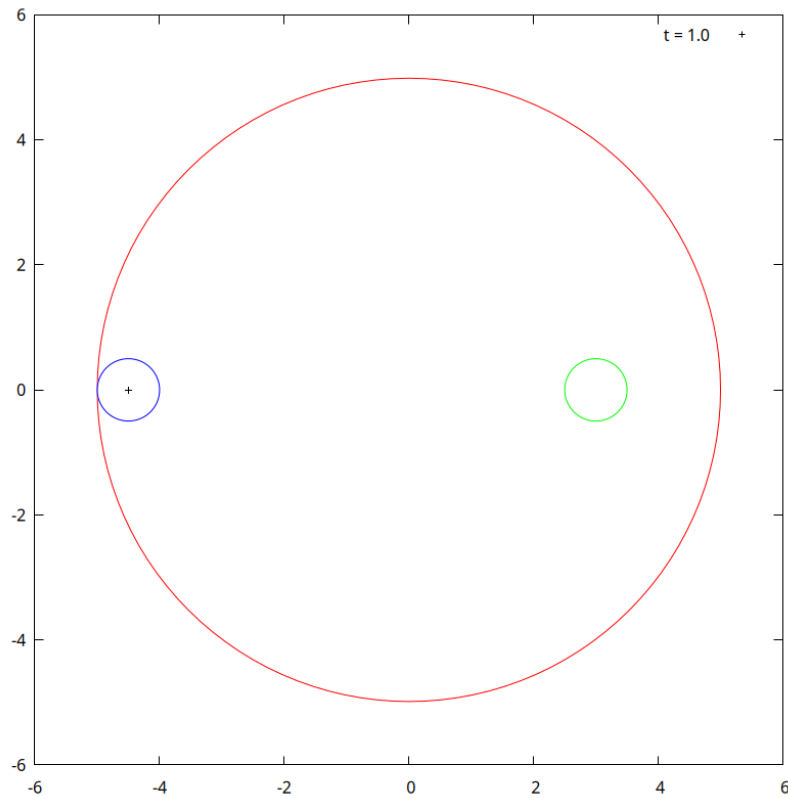


Rys. 19: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 10.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

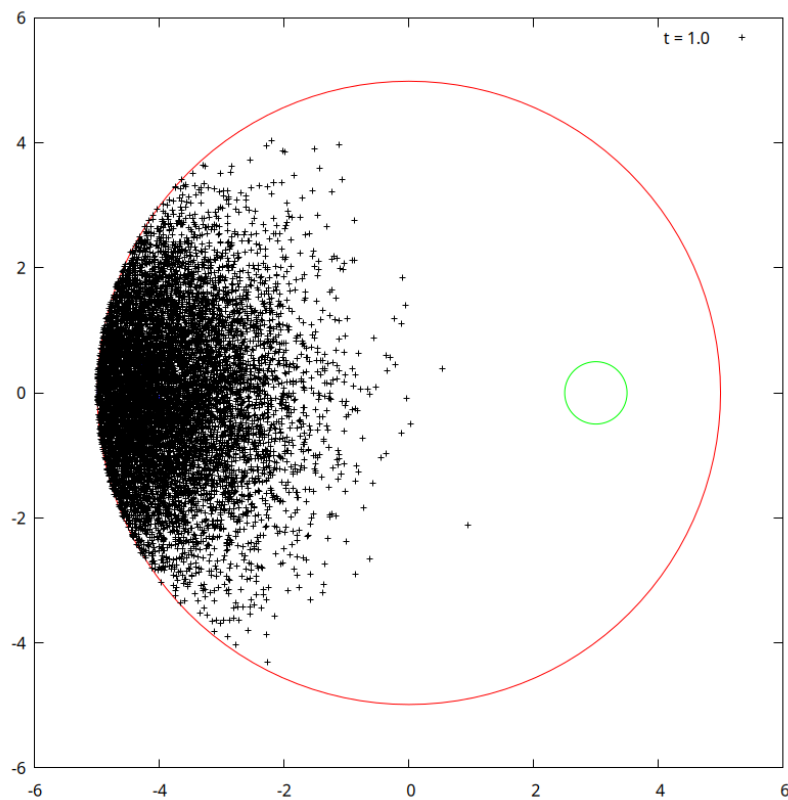


Rys. 20: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 100.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

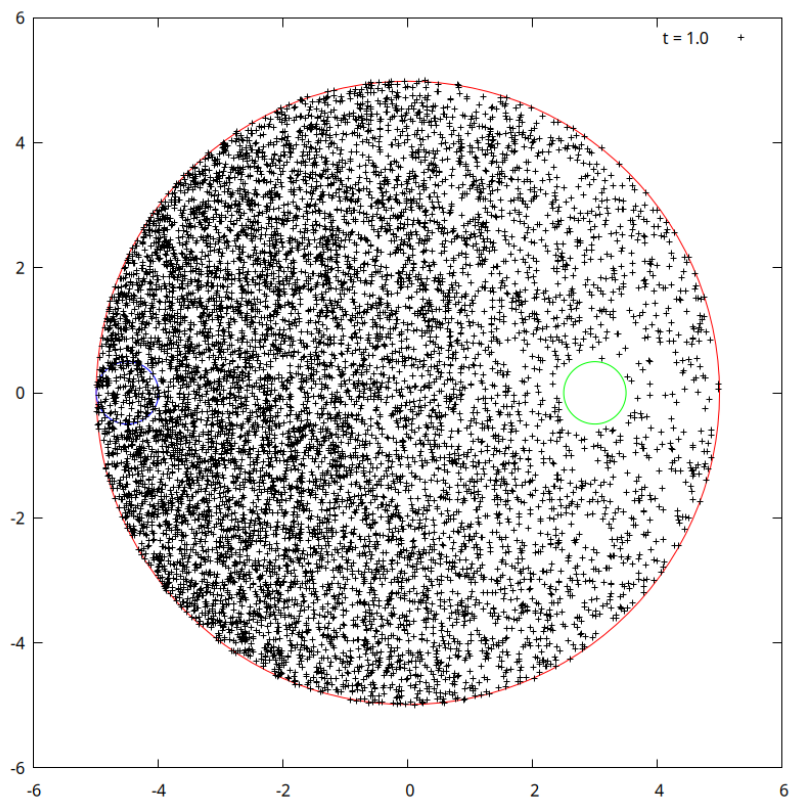
4.4 Promień absorbenta $R_a = 0.5, \omega = 10$



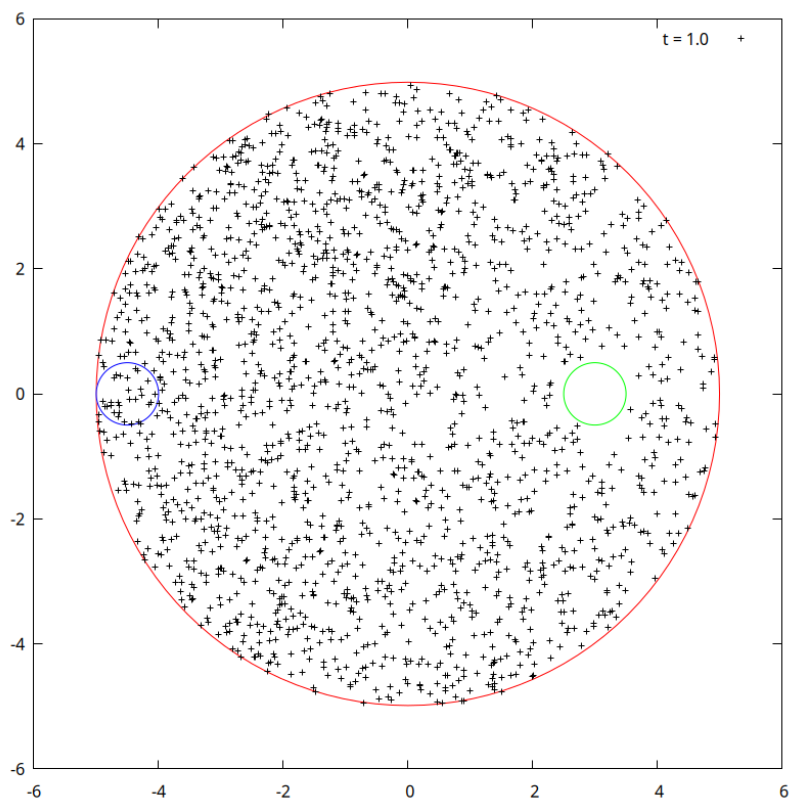
Rys. 21: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 0.1$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$



Rys. 22: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 1.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

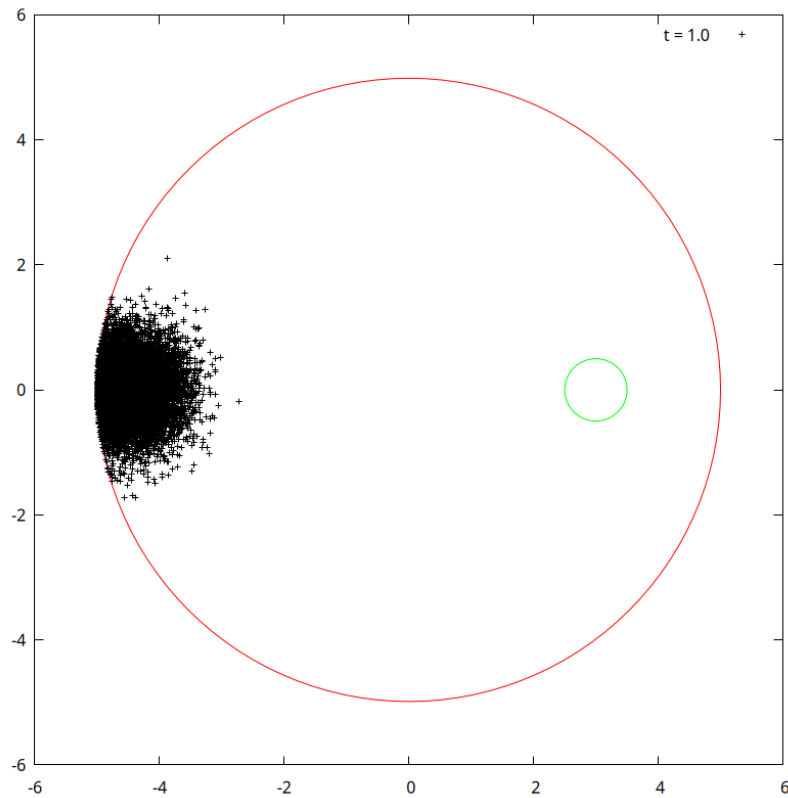


Rys. 23: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 10.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

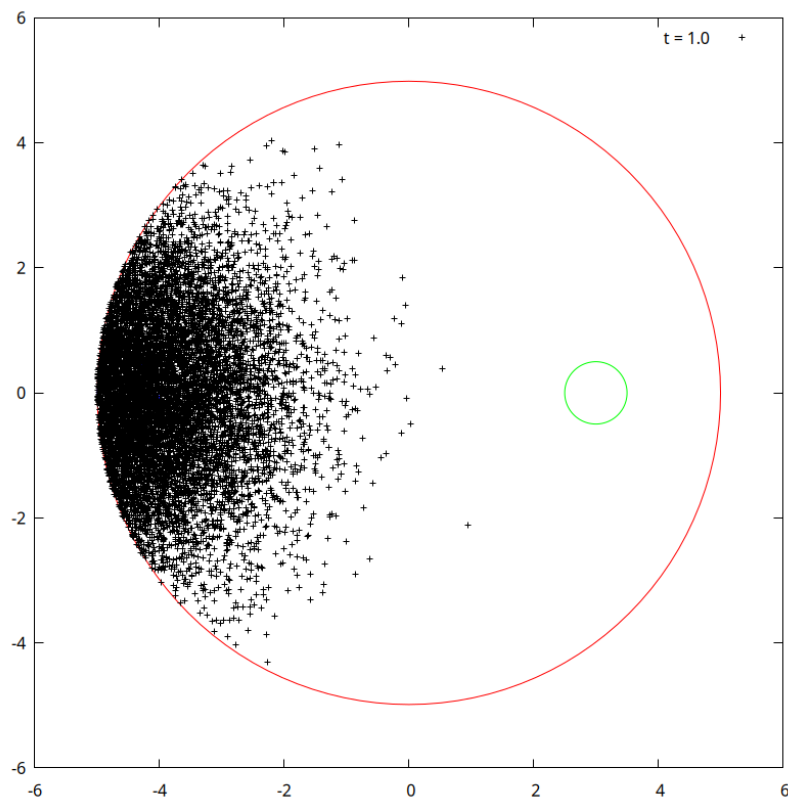


Rys. 24: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 100.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

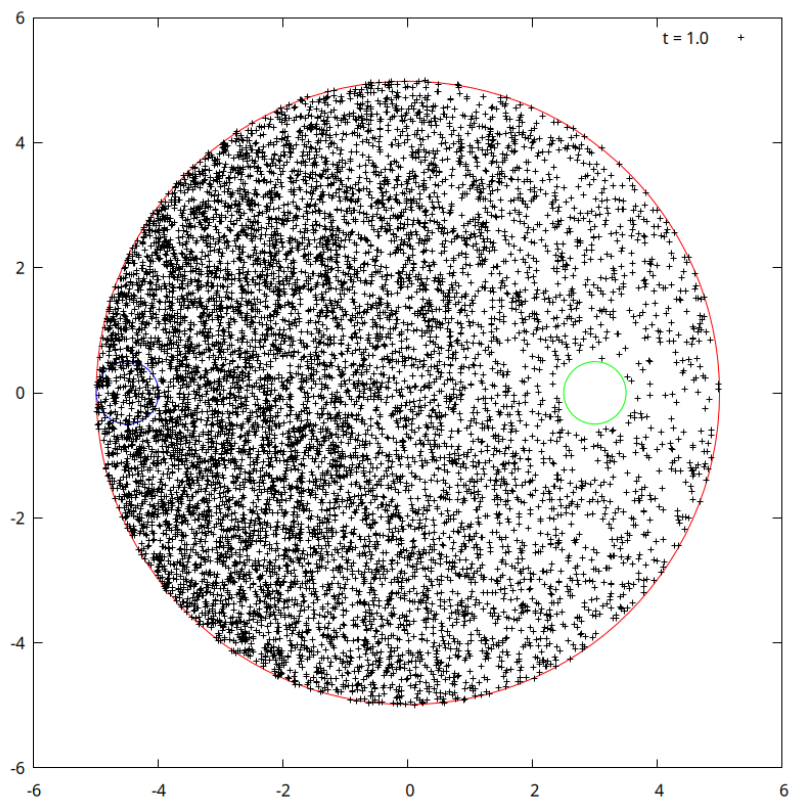
4.5 Promień absorbenta $R_a = 0.5, \omega = 50$



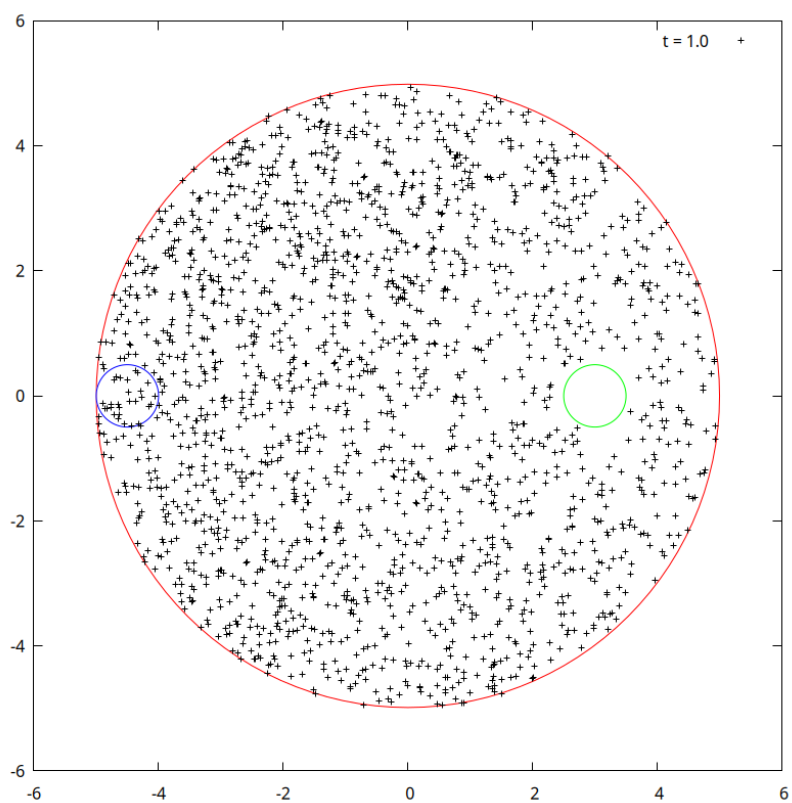
Rys. 25: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 0.1$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$



Rys. 26: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 1.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

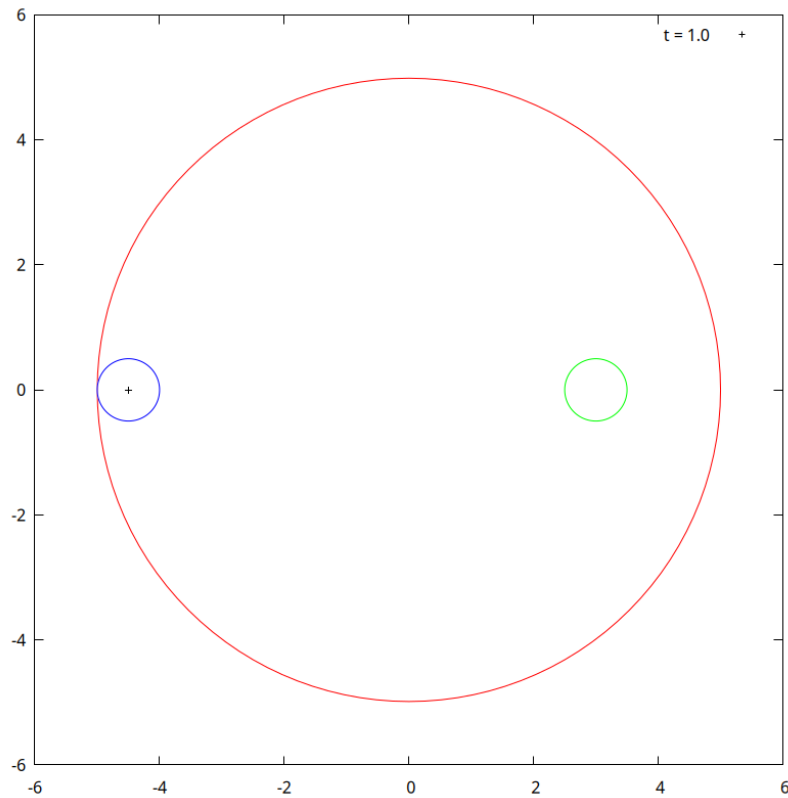


Rys. 27: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 10.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

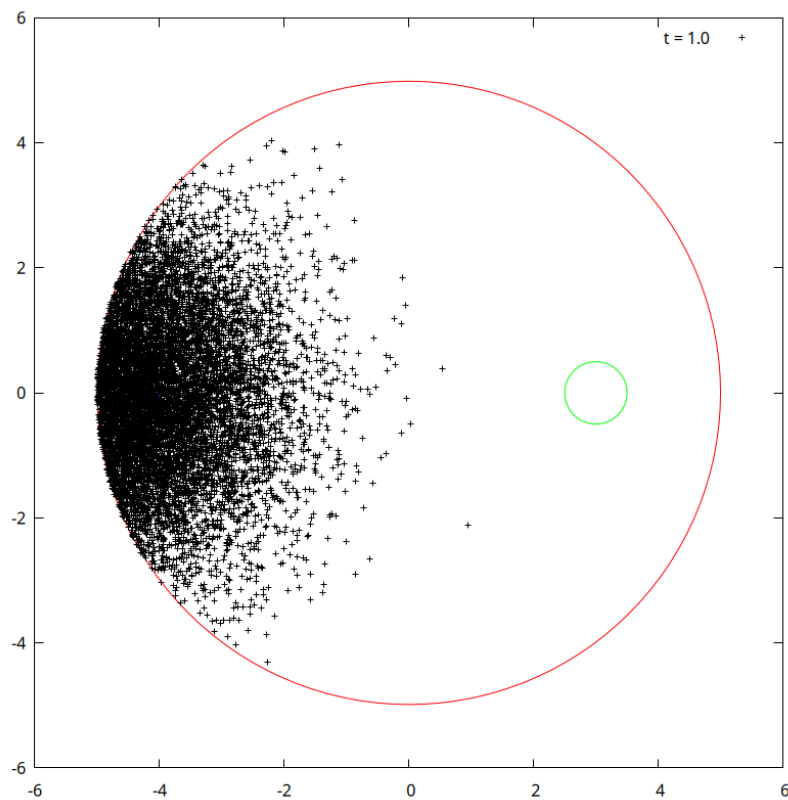


Rys. 28: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 100.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

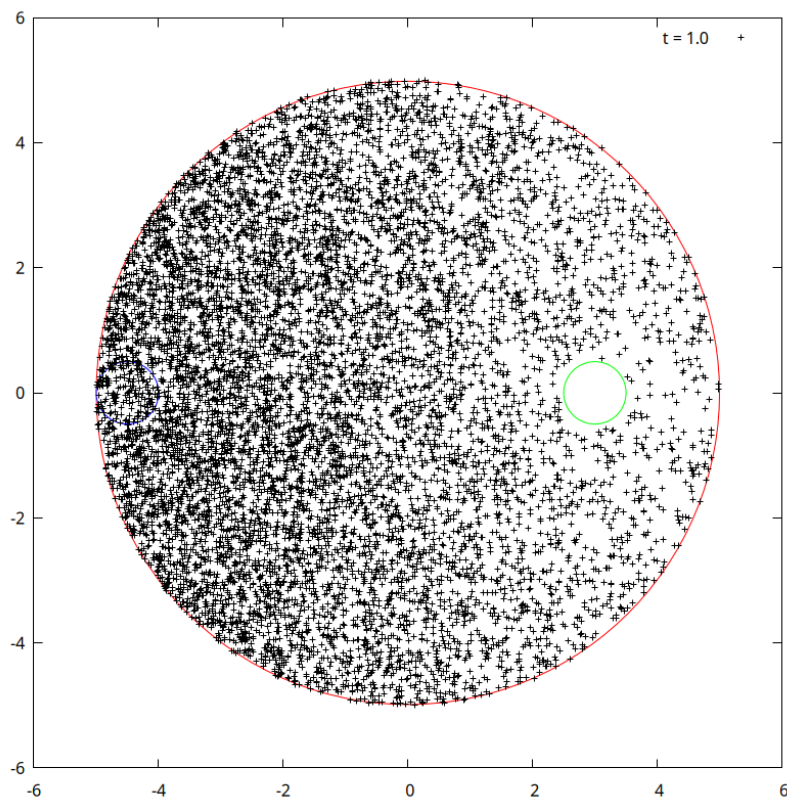
4.6 Promień absorbenta $R_a = 0.5, \omega = 100$



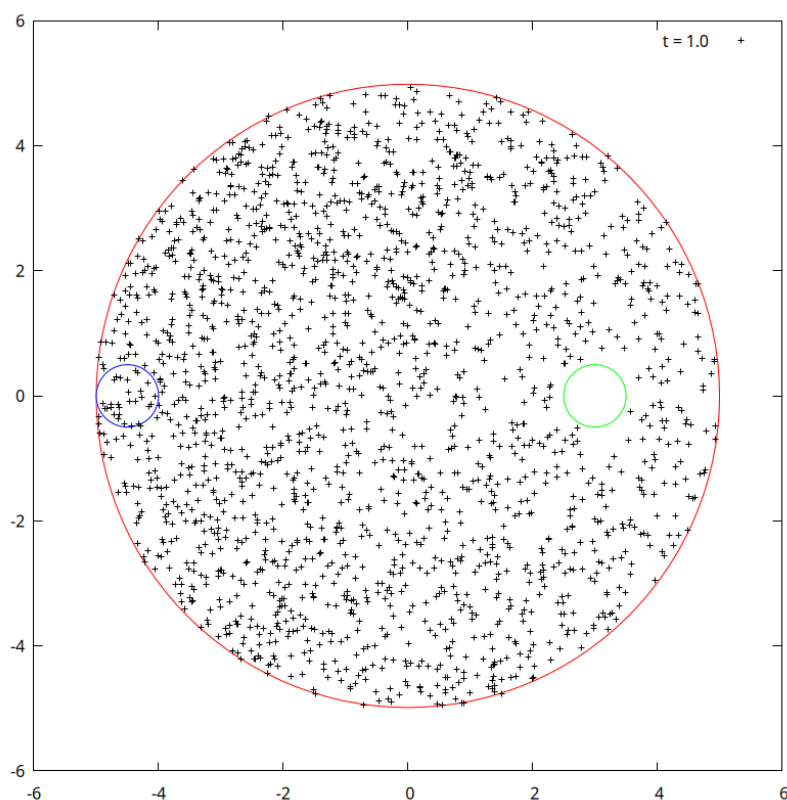
Rys. 29: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 0.1$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$



Rys. 30: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 1.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

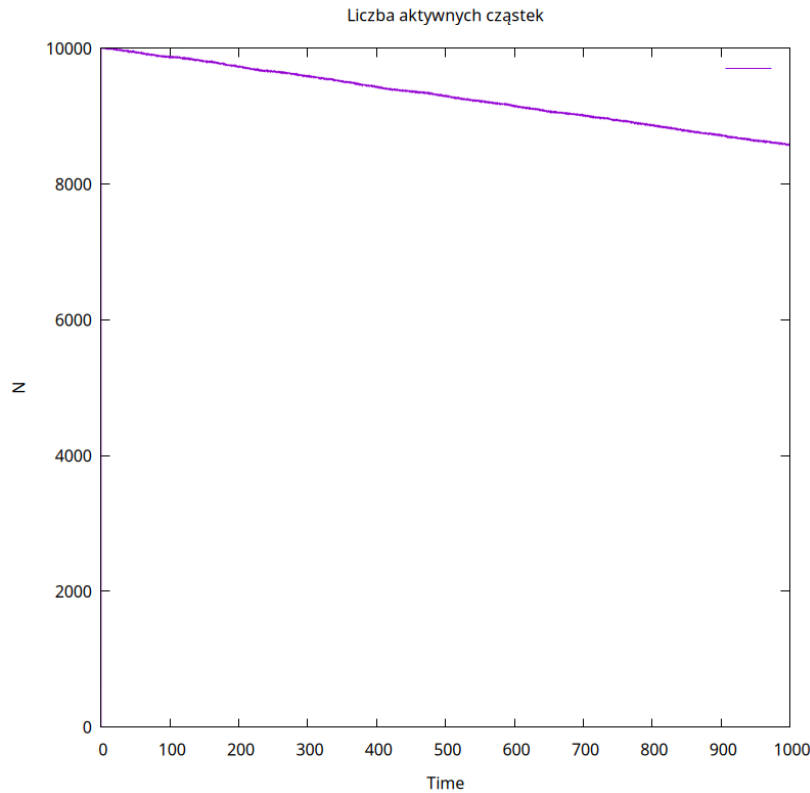


Rys. 31: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 10.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$



Rys. 32: Rozkład przestrzenny cząstek dla chwili czasowej $t = 100.0$ dla liczby cząstek wynoszącej $N = 10\,000$

Na rysunkach widać jak cząstki rozprzestrzeniają się po układzie. Absorber umieszczony w układzie nie działa w pełni poprawnie.



Rys. 33: Liczba aktywnych cząstek, niestety nie jest realizowana w sposób prawidłowy

5 Wnioski

Symulacja procesu Wienera jest skuteczną metodą do wyznaczania współczynnika dyfuzji w układach otwartych, gdzie rozpraszanie cząstek zachodzi pod wpływem wielu niezależnych czynników. Równanie dyfuzji w jednym wymiarze opisuje rozkład stężenia substancji w czasie i przestrzeni, gdzie współczynnik dyfuzji D odpowiada za szybkość rozprzestrzeniania się substancji. Proces dyfuzji można efektywnie symulować, wykorzystując proces stochastyczny Wienera, co pozwala na analizę przemieszczania się cząstek w czasie. Wartości współczynników dyfuzji D_{xx} , D_{yy} oraz D_{xy} są fluktuacyjne w czasie, dlatego konieczne jest uśrednienie ich wartości w określonym przedziale czasu w celu uzyskania wyników niezależnych od czasu.