

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

Metody Monte Carlo w Fizyce

Julia Potempa (411073)



Akademia Górniczo-Hutnicza
im. Stanisława Staszica w Krakowie

16. kwietnia 2025r.

Cel ćwiczenia

Przeprowadzenie symulacji procesu dyfuzji w układzie otwartym (proces stochastyczny Wienera) oraz w układzie zamkniętym.

1 Wstęp

Proces Wienera

Symulacja opiera się na równaniu dyfuzji, które w jednym wymiarze przyjmuje postać:

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

gdzie D to współczynnik dyfuzji. Rozwiązanie dla źródła punkowego przyjmuje postać:

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

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

Wyrażenie opisujące funkcję $u(x, t)$ ma postać rozkładu normalnego $N_t(x_0, \sigma_t)$. Zatem proces dyfuzji można zasymulować dokonując ewolucji czasowej cząstek, które są przemieszczane losowo, tak, jak w procesie stochastycznym Wienera.

$$X_i(t + \Delta t) = X_i(t) + \Delta X_i, \quad \Delta X \sim N_{\Delta t}(0, \sigma_{\Delta t})$$

Do rozkładu normalnego podstawiamy $t \rightarrow \Delta t$ oraz $(x - x_0) \rightarrow \Delta x$

$$f(\Delta x, \Delta t) = \frac{1}{\sigma_{\Delta t} \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{\Delta x^2}{2\sigma_{\Delta t}^2} \right]$$

Jeżeli symulacja jest prowadzona dla n cząstek opisanych położeniem w dwóch wymiarach, to możemy odwrócić zagadnienie i określić współczynniki dyfuzji D_{xx} , D_{yy} , $D_{xy} = D_{yx}$:

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

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

Wartości w chwili t przybliżamy średnimi:

$$\langle x(t) \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i(t)$$

$$\langle x(t)y(t) \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i(t)Y_i(t), \dots$$

Wyznaczane wartości nie są stałe w czasie, tylko fluktuują (proces stochastyczny), zatem aby uniezależnić je od czasu przybliżamy ich średnie oraz wariancje (m=1,2 - moment):

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

$$\sigma_{\langle D_{\alpha,\beta} \rangle} = \sqrt{\frac{\langle D_{\alpha,\beta}^2 \rangle - (\langle D_{\alpha,\beta}^1 \rangle)^2}{N_t}}$$

Dyfuzja i absorpcja w układzie zamkniętym

Drugą częścią ćwiczenia stanowi symulacja dyfuzji w układzie zamkniętym w dwóch wymiarach. W wybranym obszarze znajduje się źródło oraz absorber pochłaniający cząstki w ustalonych pozycjach. Cząstka kiedy znajduje się na ścianie obszaru podlega odbiciu zgodnie z prawem odbicia (kąt padania = kąt odbicia). Przy ustalonej wydajności źródła absorbent ogranicza liczbę cząstek w układzie

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

2 Metodyka

Symulacja procesu Wienera polegała na wyznaczeniu zależności czasowej współczynników dyfuzji oraz ich niepewności dla $N_t = \frac{t_{max}}{\Delta t}$. Przyjęte parametry:

- $D = 1$
- $N_{max} = 10^2, 10^3, 10^4, 10^5$ - liczba cząstek
- $x_i(t = 0) = y_i(t = 0) = 0, i = 1, 2, \dots, n$
- $\Delta t = 0.1$
- $t_{max} = 100$

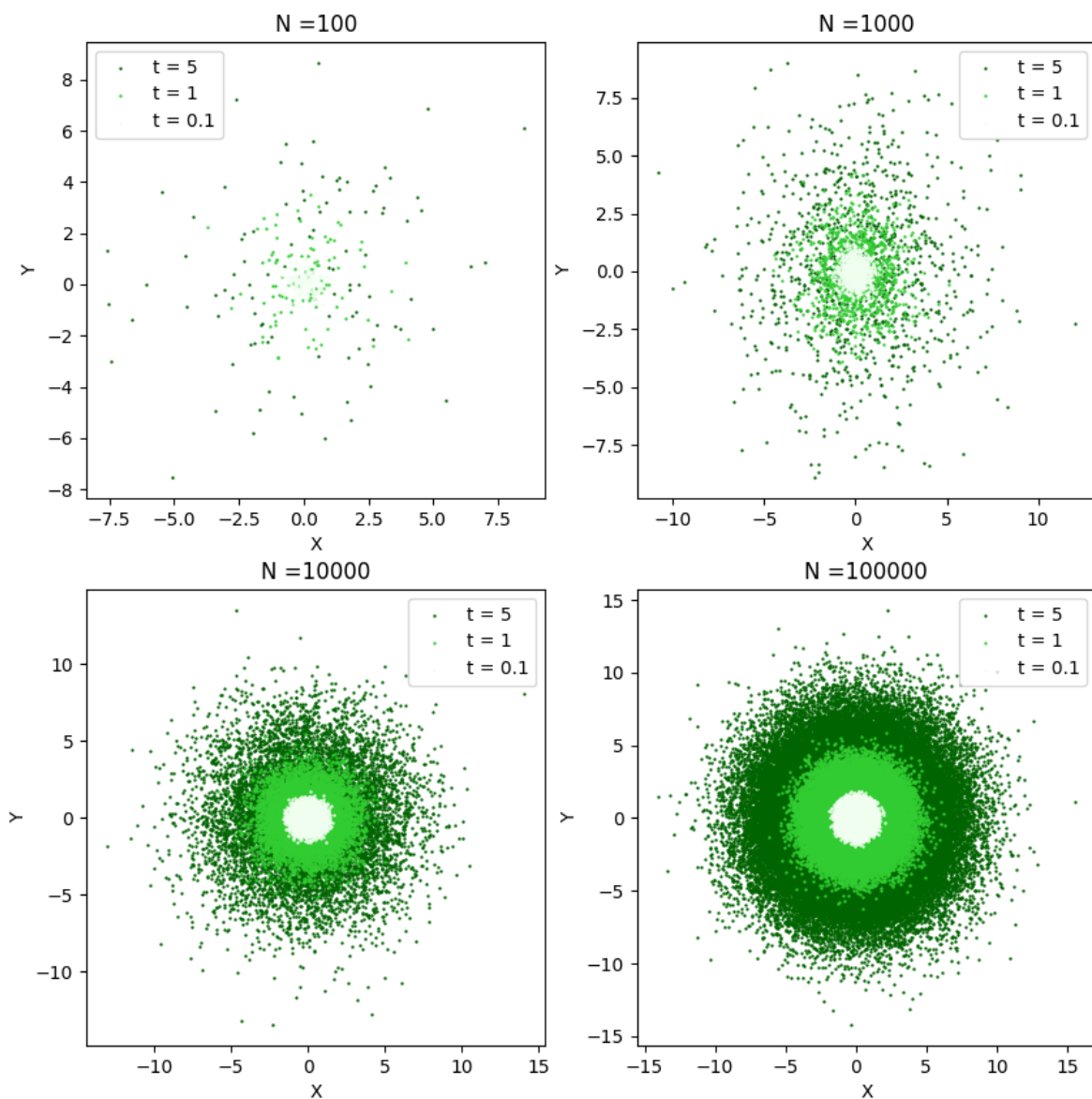
Proces dyfuzji i absorpcji w układzie zamkniętym został zasymulowany dla parametrów:

- $D = 1, N_{max} = 10^4$
- $\Delta t = 0.1, t_{max} = 10^3$
- $\omega = \frac{\Delta n}{\Delta t} = 10; 50; 100$
- $x_r = 0, y_r = 0, R_r = 5$

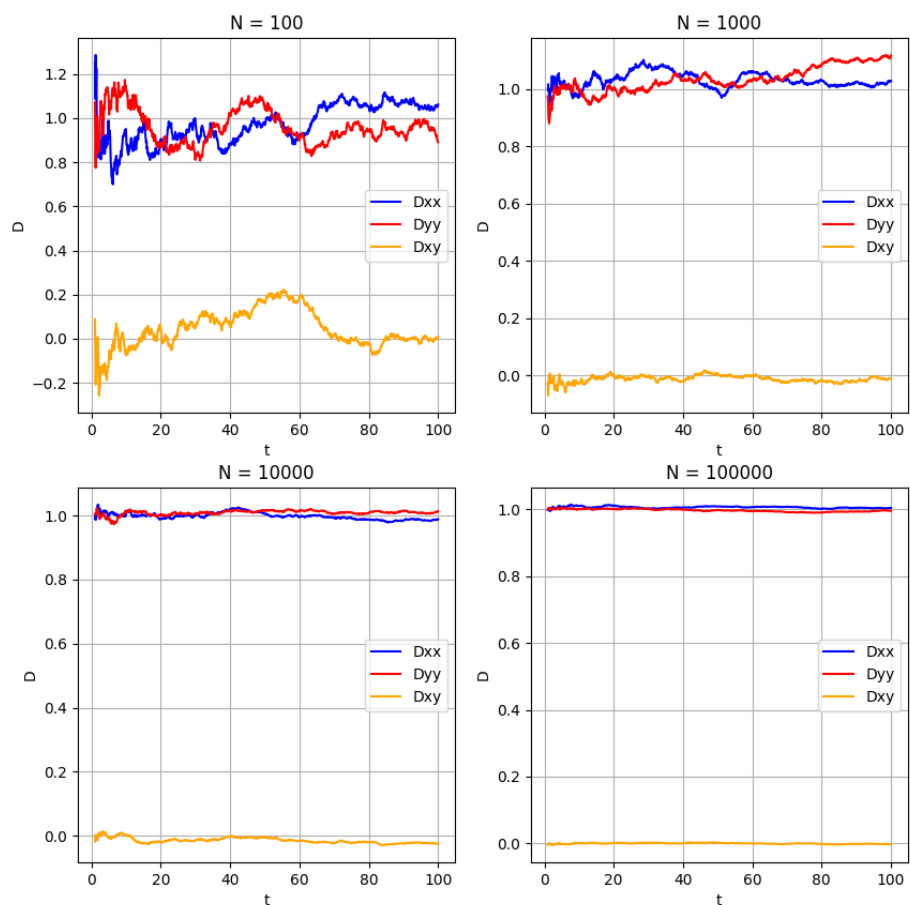
- $x_a = 3, y_a = 0, R_a = 0.1; 0.5$
- $x_s = -4.5, y_s = 0$

Symulacja została przeprowadzona w C++ z wykorzystaniem procedury `particle_translation`, a wykresy zostały przygotowane za pomocą bibliotek `matplotlib` oraz `pandas` w języku Python.

3 Wyniki



Rysunek 1: Rozkład cząstek dla różnych N w wybranych chwilach czasowych.

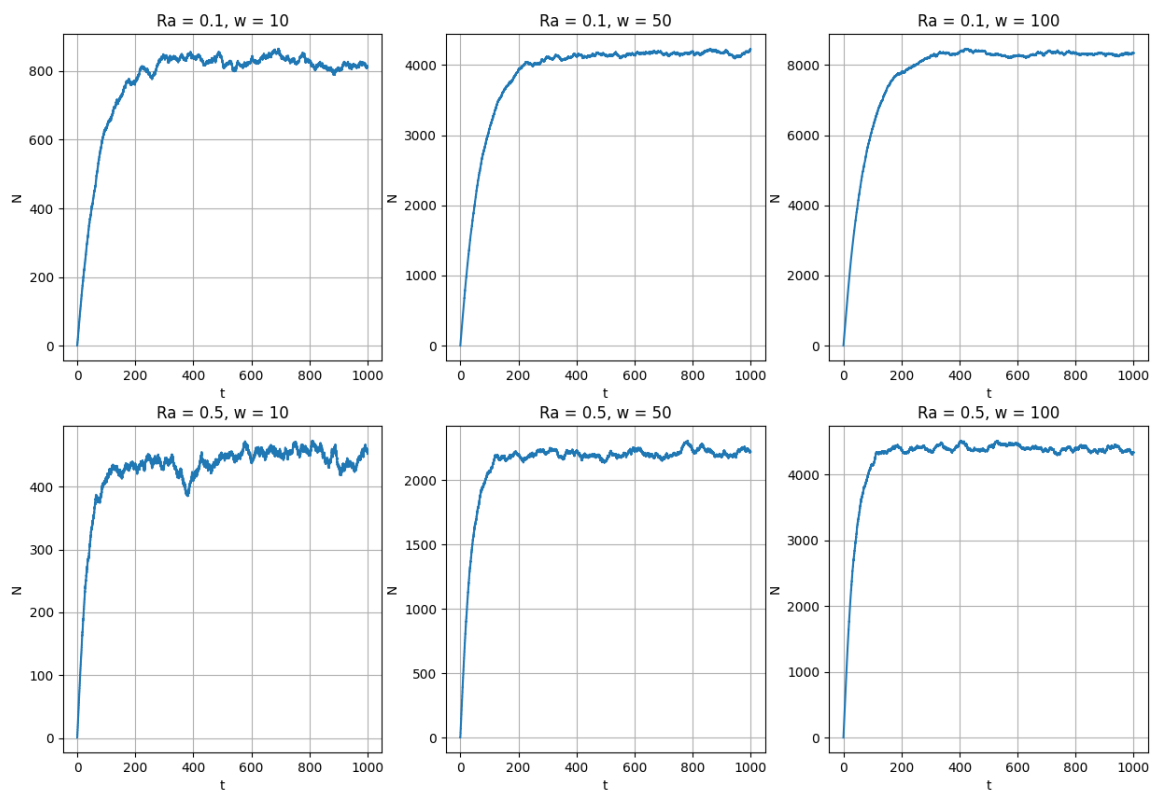


Rysunek 2: Składowe współczynnika dyfuzji dla różnych N w czasie.

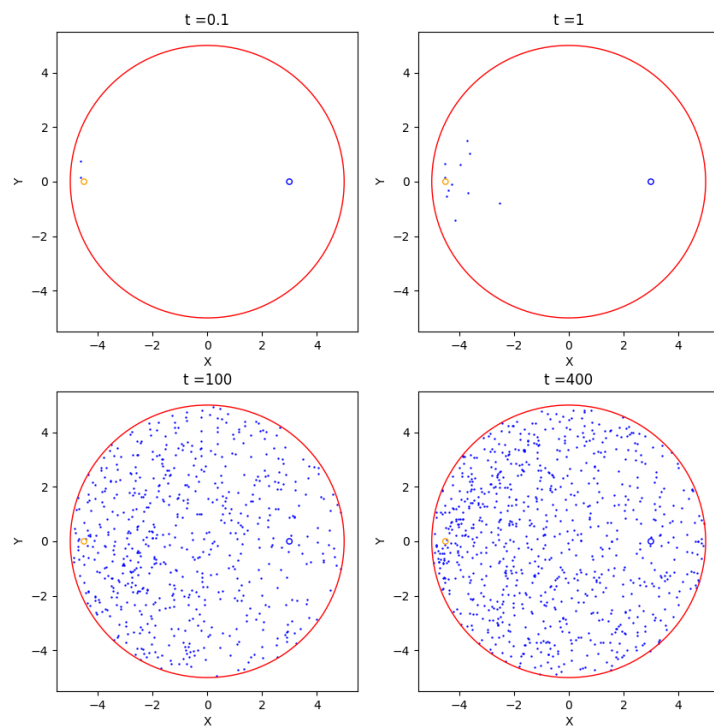
Symulacja procesu Wienera przebiegła pomyślnie. Widać rozpraszanie się cząstek na wykresie (1) oraz stabilizację wyznaczonych współczynników dyfuzji przy większej ilości iteracji na wykresie (2).

```
N: 100 Dxx: 0.970898 +/- 0.00272072
N: 100 Dyy: 0.960425 +/- 0.00242136
N: 100 Dxy: 0.0438542 +/- 0.00265162
N: 1000 Dxx: 1.03204 +/- 0.000833292
N: 1000 Dyy: 1.03507 +/- 0.00139092
N: 1000 Dxy: -0.0128016 +/- 0.00036041
N: 10000 Dxx: 0.998272 +/- 0.000328332
N: 10000 Dyy: 1.00897 +/- 0.00022096
N: 10000 Dxy: -0.0144577 +/- 0.000269395
N: 100000 Dxx: 1.00654 +/- 8.43069e-05
N: 100000 Dyy: 0.997427 +/- 0.000125931
N: 100000 Dxy: -0.000186971 +/- 5.07572e-05
```

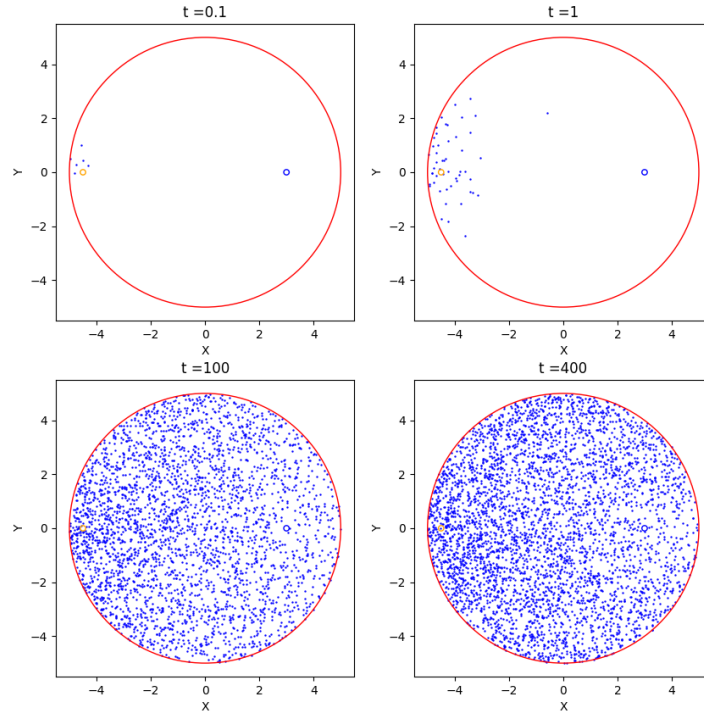
Rysunek 3: Wartości składowych współczynnika dyfuzji wraz z ich odchyleniem standardowym dla kolejnych wartości N .



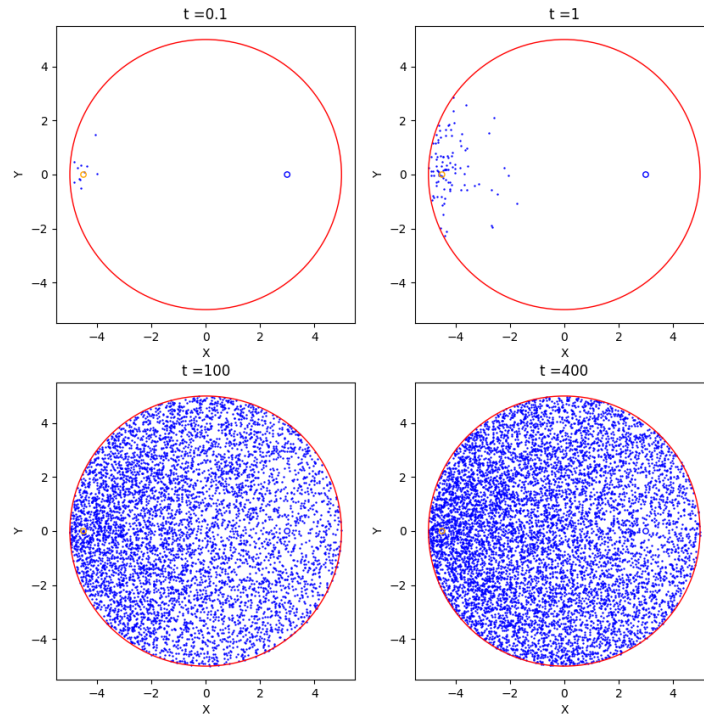
Rysunek 4: Liczba cząstek w układzie w zależności od czasu trwania symulacji.



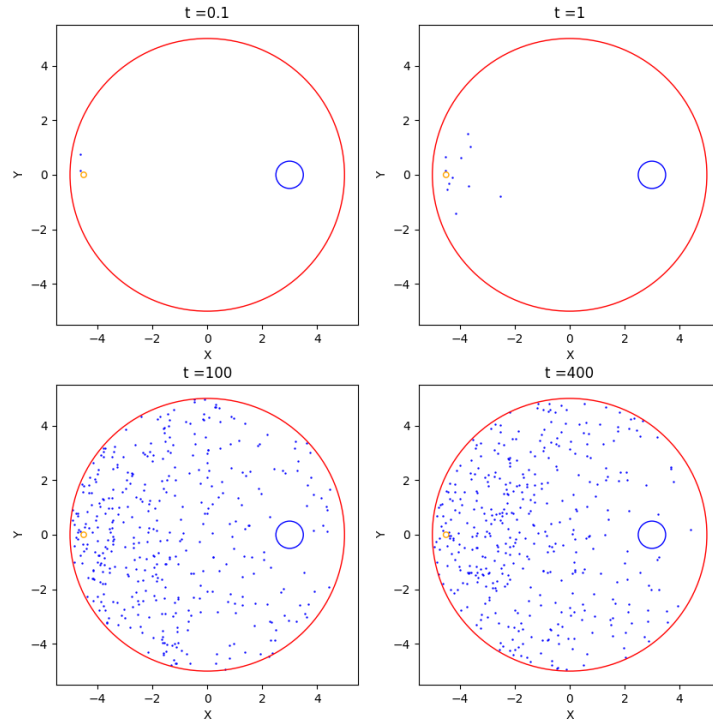
Rysunek 5: Dyfuzja cząstek w układzie zamkniętym z absorberem o promieniu 0,1 i wydajnością źródła $\omega = 10$.



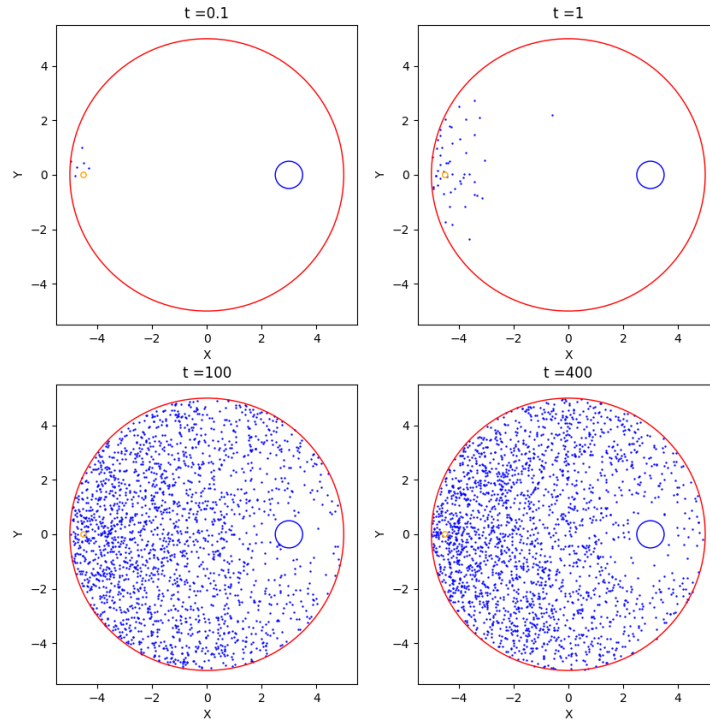
Rysunek 6: Dyfuzja cząstek w układzie zamkniętym z absorberem o promieniu 0,1 i wydajnością źródła $\omega = 50$.



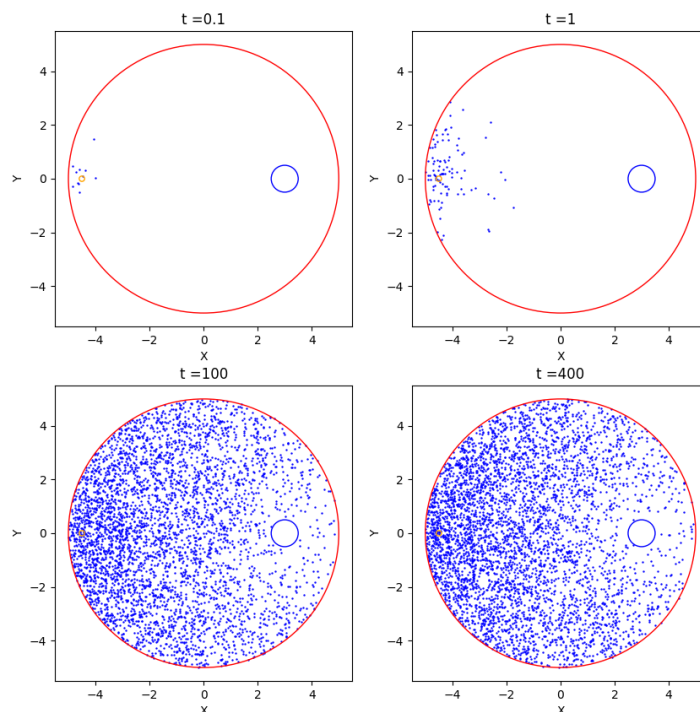
Rysunek 7: Dyfuzja cząstek w układzie zamkniętym z absorberem o promieniu 0,1 i wydajnością źródła $\omega = 100$.



Rysunek 8: Dyfuzja cząstek w układzie zamkniętym z absorberem o promieniu 0,5 i wydajnością źródła $\omega = 10$.



Rysunek 9: Dyfuzja cząstek w układzie zamkniętym z absorberem o promieniu 0,5 i wydajnością źródła $\omega = 50$.



Rysunek 10: Dyfuzja cząstek w układzie zamkniętym z absorberem o promieniu 0,1 i wydajnością źródła $\omega = 100$.

Powyższe obrazy przedstawiają postęp symulacji dla różnych parametrów. Ilość cząstek w układzie była ściśle związana z promieniem absorbera oraz wydajnością źródła.

4 Wnioski

W ćwiczeniu został z powodzeniem zasymulowany proces Wienera dyfuzji w układzie otwartym, gdzie zasymulowane wartości składowych współczynnika dyfuzji zostały wyznaczone z odwróconego zagadnienia i stabilizowały się w czasie. Dyfuzja w układzie zamkniętym z obecnym absorberem również się udała. Widać, że na ilość cząstek w układzie wpływa zarówno wielkość obszaru absorbera jak i wydajność źródła. Dla promienia 0.1 i wydajności na poziomie 10 ilość cząstek w układzie stabilizuje się na poziomie około 800. Przy zmianie wydajności ta wartość jest proporcjonalnie większa, natomiast przy zmianie samego promienia absorbera na 0.5 spada ona około dwukrotnie.