

Projekt 6: Symulacja procesu Wienera, wyznaczanie współczynnika dyfuzji, symulacja procesu dyfuzji i absorpcji.

Kacper Połuszejko, 412183

1 Wstęp

1.1 Symulacja procesu Wienera i wyznaczanie współczynnika dyfuzji w układzie otwartym

Równanie dyfuzji w 1D ma postać

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

gdzie: D to współczynnik dyfuzji. Dla warunku początkowego w postaci delty Diraca (źródło punktowe)

$$u(x = 0, t = 0) = \delta(x - x_0) \quad (2)$$

rozwiązanie opisuje wyrażenie

$$u(x, t) = \frac{1}{\sigma_t \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_t^2} \right] \quad (3)$$

gdzie

$$\sigma_t = \sqrt{2Dt} \quad (4)$$

Wyrażenie (3) ma identyczną postać jak rozkład normalny $N(x_0, \sigma_t)$. Proces dyfuzji możemy zasymulować wykonując ewolucję czasową grupy cząstek, które w kolejnych chwilach czasowych są przemieszczane losowo tak jak w procesie stochastycznym Wienera (i - to numer cząstki)

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

gdzie korzystamy z rozkładu normalnego podstawiając: $t \rightarrow \Delta t$ oraz $(x - x_0) \rightarrow \Delta x$ co daje fgp tego rozkładu

$$f(\Delta x, \Delta t) = \frac{1}{\sigma_{\Delta t} \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{\Delta x^2}{2\sigma_{\Delta t}^2} \right], \quad \sigma_{\Delta t} = \sqrt{2D\Delta t} \quad (5)$$

Jeśli symulację prowadzimy dla zbioru n cząstek, z których każda jest opisywana położeniem np. w 2D:

$$\vec{r}_i(t) = [X_i(t), Y_i(t)]$$

to wówczas możemy odwrócić zagadnienie i postarać się określić współczynniki dyfuzji ($D_{xx}, D_{yy}, D_{xy} = D_{yx}$):

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

i analogicznie dla $D_{yy}(t)$ oraz współczynnik D_{xy} określający korelację kierunków x-y

$$D_{xy}(t) = \frac{\langle (x(t) - \langle x(t) \rangle)(y(t) - \langle y(t) \rangle) \rangle}{2t} = \frac{\langle x(t)y(t) \rangle - \langle x(t) \rangle \langle y(t) \rangle}{2t} \quad (7)$$

przy czym wartości oczekiwane w chwili czasowej t przybliżamy ich średnimi po liczbie cząstek

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \bar{x}(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i(t) \\ \langle y(t) \rangle &= \bar{y}(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i(t) \\ \langle x(t)y(t) \rangle &= \overline{x(t)y(t)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i(t)Y_i(t) \\ \langle x^2(t) \rangle &= \overline{x^2(t)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^2(t) \end{aligned}$$

Wartości $D_{xx}(t)$, $D_{yy}(t)$ i $D_{xy}(t)$ oczywiście fluktuują w czasie (proces stochastyczny), zatem aby uzyskać wartości niezależne od czasu oraz odpowiadające im niepewności musimy dokonać uśrednienia w wybranym odcinku czasu m-tego momentu

$$\langle D_{\alpha\beta}^m \rangle \approx \overline{D_{\alpha\beta}^m} = \frac{1}{N_t} \sum_{k=1}^{N_t} D_{\alpha\beta}^m(t_k) \quad (8)$$

gdzie: $\alpha, \beta = x, y$; N_t to liczba kroków czasowych w wybranym przedziale czasu $[t_A, t_B]$. Następnie można określić odchylenie standardowe średniej

$$\sigma_{D_{\alpha\beta}^m} = \sqrt{\frac{(\overline{D_{\alpha\beta}^m})^2 - \overline{(D_{\alpha\beta}^m)^2}}{N_t}} \quad (9)$$

Jest to typowy sposób wyznaczania współczynnika dyfuzji dla procesu, w którym rozpraszanie cząstek zachodzi pod wpływem wielu niezależnych czynników.

1.2 Symulacja dyfuzji i absorpcji w układzie zamkniętym

Rozważamy teraz proces dyfuzji cząstek w układzie zamkniętym, którego brzeg stanowi okrąg. W układzie jest źródło dostarczające do układu cząstki z wydajnością

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

Cząstka w układzie podlega dyfuzji w kierunkach x oraz y ze współczynnikiem $D = D_{xx} = D_{yy} = \text{const}$; jeśli w chwili t znajduje się w położeniu $\vec{P}(t)$ to proponowane nowe położenie $\vec{P}(t + \Delta t) = \vec{P}(t) + [\Delta x, \Delta y]$, gdzie przesunięcia w czasie są z fgp danego wzorem (5). Jeśli nowa pozycja leży poza brzegiem obszaru odbija się ona od ścianki zewnętrznej zgodnie z prawem odbicia (kąt padania = kąt odbicia). Jeśli trajektoria cząstki przecina obszar absorpcyjny (okrąg wewnątrz obszaru dyfuzji) to cząstka zostaje usunięta z układu, a zarejestrowane zostaje zdarzenie absorpcji (reakcji).

2 Metodyka

2.1 Proces Wienera

Wykonano symulację dyfuzji N_{max} cząstek w układzie otwartym (proces Wienera) w celu wyznaczenia zależności czasowej współczynników dyfuzji: $D_{xx}(t)$, $D_{yy}(t)$ oraz $D_{xy}(t)$. Symulacje przeprowadzono dla następujących parametrów:

$$D = 1$$

$$N_{max} = 10^2, 10^3, 10^4, 10^5 \quad (\text{liczba cząstek})$$

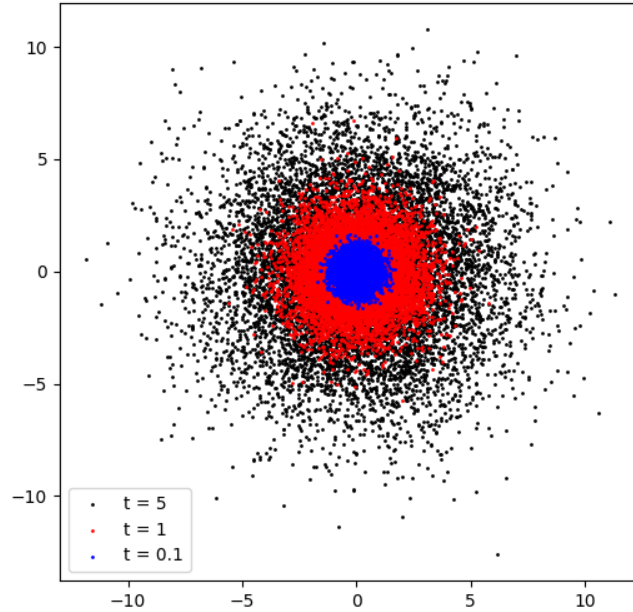
$$x_i(t=0) = y_i(t=0) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$\Delta t = 0.1, \quad t_{max} = 100$$

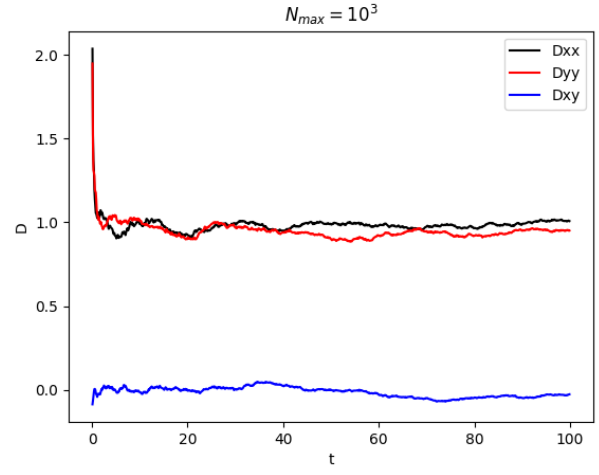
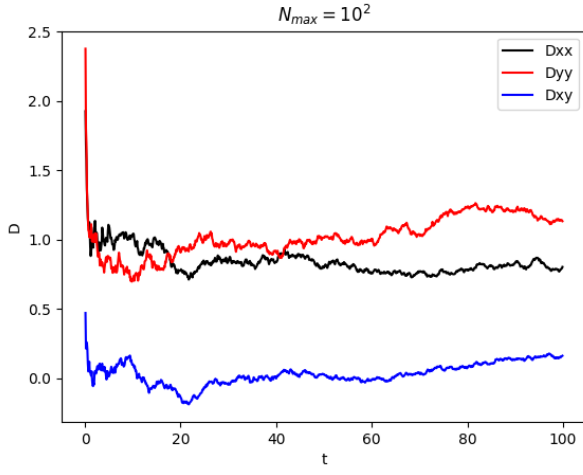
Dla każdej wartości N_{max} sporządzono wykresy czasowych przebiegów współczynników dyfuzji: $D_{xx}(t)$, $D_{yy}(t)$ oraz $D_{xy}(t)$, prezentując je wspólnie na jednym wykresie.

Na podstawie uzyskanych danych obliczono wartości średnie współczynników dyfuzji oraz ich niepewności, przyjmując liczbę kroków czasowych równą $N_t = t_{max}/\Delta t$.

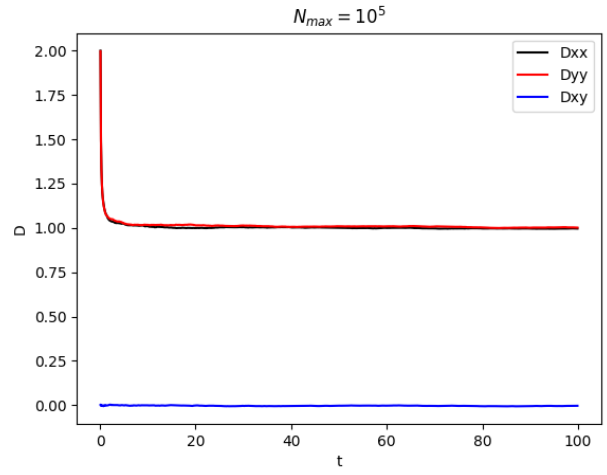
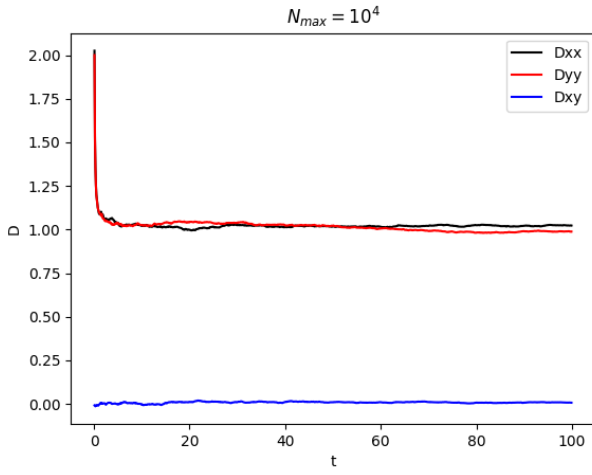
Wyniki



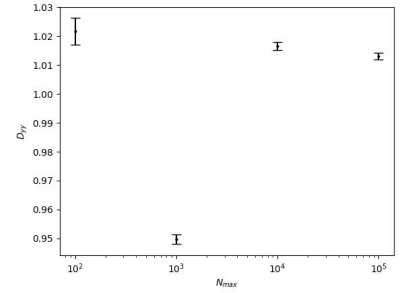
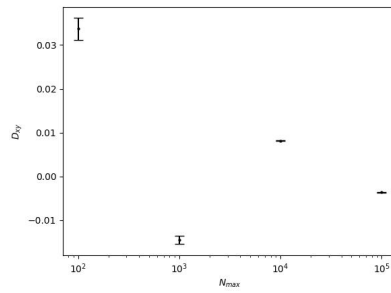
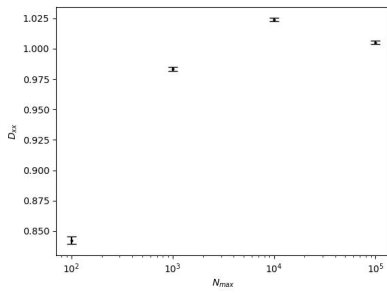
Rys. 1: Rozkład przestrzenny cząstek w różnych chwilach czasowych dla procesu Wienera.



Rys. 2: Wartości współczynników dyfuzji dla różnych wartości N_{max} .



Rys. 3: Wartości współczynników dyfuzji dla różnych wartości N_{max} .



Rys. 4: Wartości średnie współczynników oraz ich niepewności dla różnych N_{max} .

2.2 Dyfuzja i absorpcja w układzie zamkniętym

Wykonano symulację procesu dyfuzji i absorpcji w układzie zamkniętym o geometrii kołowej. Symulacje przeprowadzono dla następujących parametrów:

$$D = 1, \quad N_{max} = 10^4, \quad \Delta t = 0,1, \quad t_{max} = 10^3$$

$$\omega = \Delta n / \Delta t = 10; 50; 100$$

$$x_r = 0, \quad y_r = 0, \quad R_r = 5$$

$$x_a = 3, \quad y_a = 0, \quad R_a = 0,1; 0,5$$

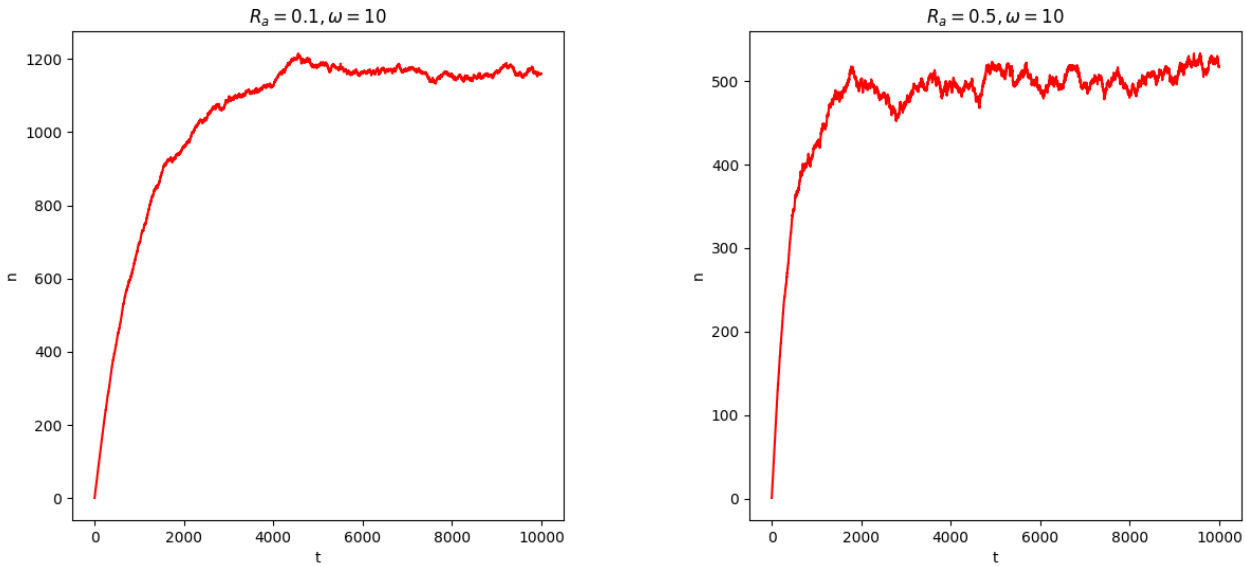
$$x_2 = -4,5, \quad y_s = 0$$

Na podstawie wyników symulacji narysowano zależność liczby cząstek aktywnych od czasu $n(t)$. Przeanalizowano wpływ parametrów ω oraz R_a na maksymalną liczbę cząstek aktywnych n .

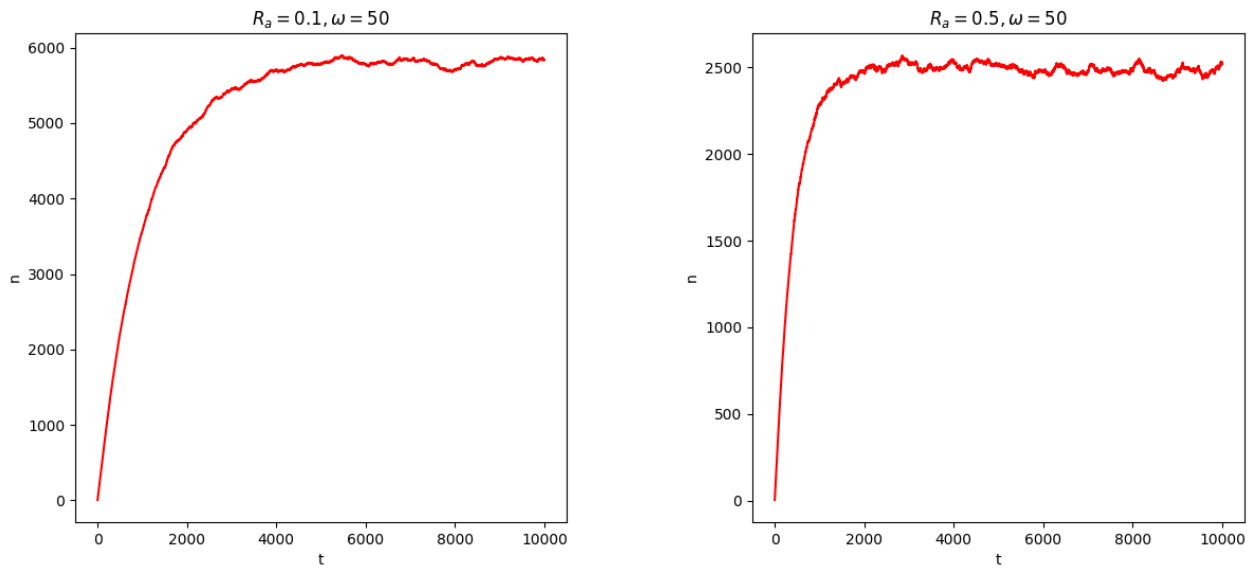
Dodatkowo sporządzono kilka rysunków przedstawiających:

- rozkład cząstek w początkowych chwilach symulacji (okres narastania $n(t)$),
- rozkład końcowy cząstek (dla ustalonego stanu $n(t)$, w którym wartość ta fluktuuje).

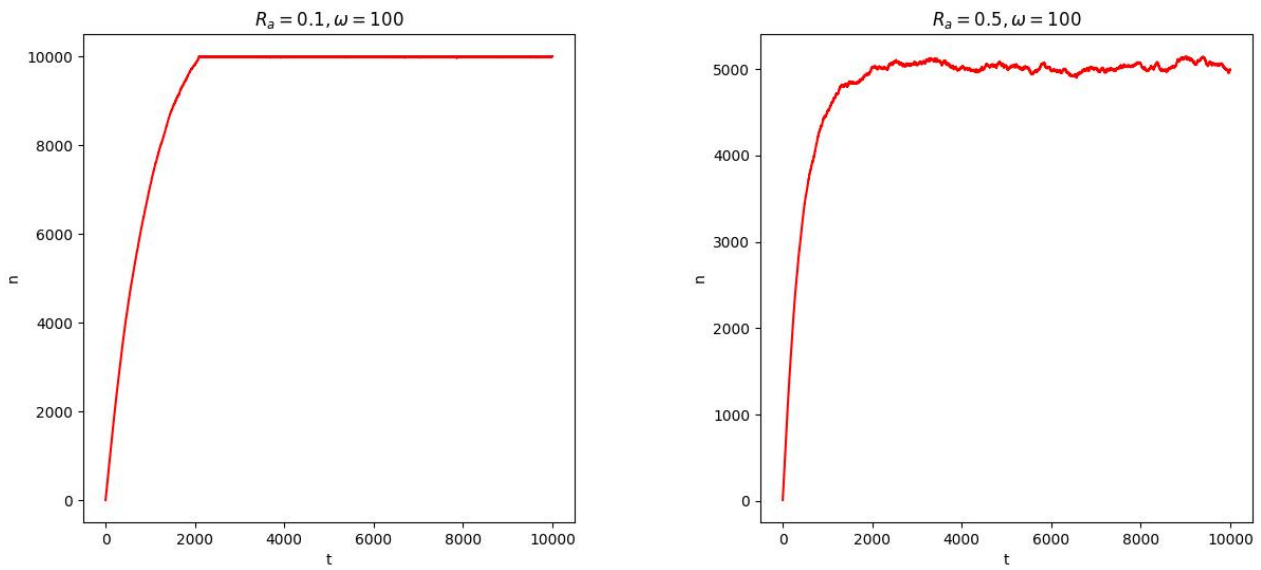
Wyniki



Rys. 5: Zależność liczby cząstek aktywnych n od czasu dla różnych wartości parametrów R_a oraz ω .

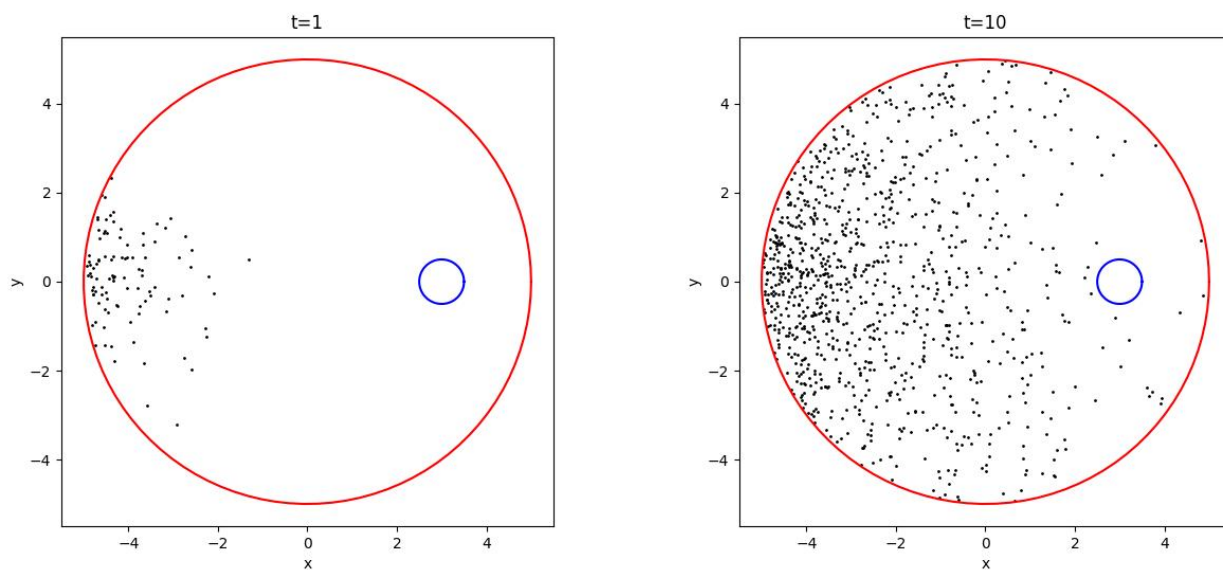


Rys. 6: Zależność liczby cząstek aktywnych n od czasu dla różnych wartości parametrów R_a oraz ω .

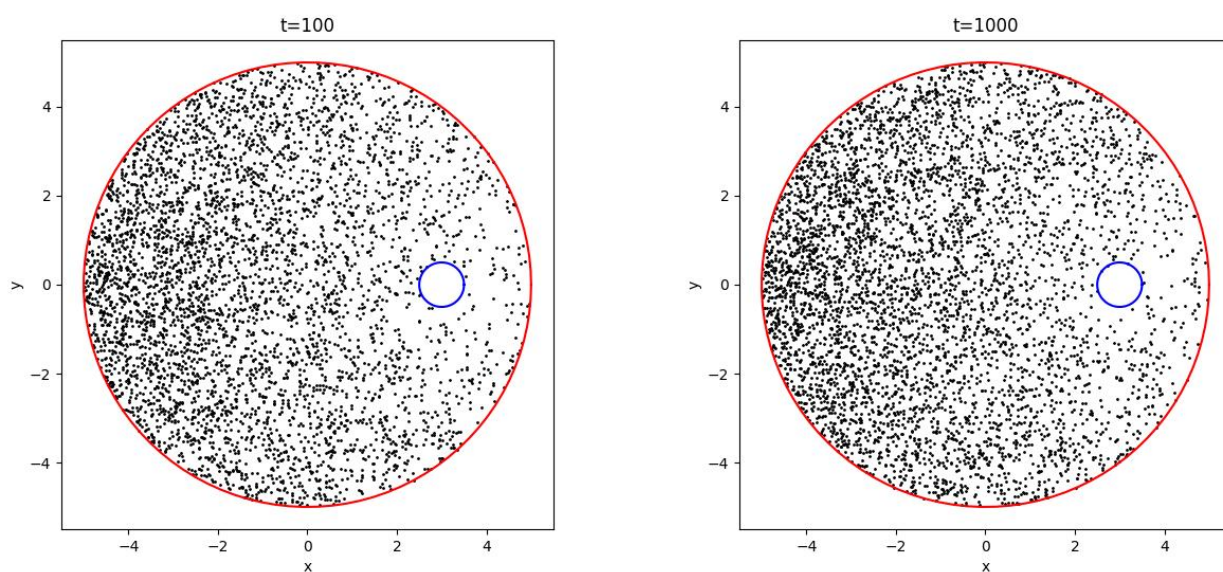


Rys. 7: Zależność liczby cząstek aktywnych n od czasu dla różnych wartości parametrów R_a oraz ω .

Na powyższych rysunkach wyraźnie widać, jak duży wpływ na aktywność n mają parametry R_a oraz ω . Oczywiście gdy większy jest promień obszaru absorpcji tym mniejsza liczba aktywnych cząstek. Natomiast im większa aktywność tym jest ich więcej.



Rys. 8: Rysunki przedstawiające wizualizację procesu dyfuzji i absorpcji w układzie zamkniętym. Niebieski okrąg oznacza obszar absorpcji.



Rys. 9: Rysunki przedstawiające wizualizację procesu dyfuzji i absorpcji w układzie zamkniętym. Niebieski okrąg oznacza obszar absorpcji.