

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

3 kwietnia 2024

## 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  $N_t(x_0, \sigma_t)$ . 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)

$$X_i(t + \Delta t) = X_i(t) + \Delta X_i, \quad \Delta X \sim N_{\Delta t}(0, \sigma_{\Delta t}) \quad (5)$$

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

$$f(\Delta x, \Delta t) = \frac{1}{\sigma_{\Delta t} \sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{\Delta x^2}{2\sigma_{\Delta t}^2} \right], \quad \sigma_{\Delta t} = \sqrt{2D \Delta t} \quad (6)$$

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

$$\vec{r}_i(t) = [X_i(t), Y_i(t)] \quad (7)$$

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

$$D_{xx}(t) = \frac{\langle x(t) - \langle x(t) \rangle^2 \rangle}{2t} = \frac{\langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2}{2t} \quad (8)$$

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

$$D_{xy}(t) = \frac{\langle (x(t) - \langle x(t) \rangle)(y(t) - \langle y(t) \rangle) \rangle}{2t} = \frac{\langle x(t)y(t) \rangle - \langle x(t) \rangle \langle y(t) \rangle}{2t} \quad (9)$$

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

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

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

$$\langle D_{\alpha\beta}^m \rangle \approx \overline{D_{\alpha\beta}^m} = \frac{1}{N_t} \sum_{k=1}^{N_t} D_{\alpha,\beta}^m(t_k) \quad (10)$$

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

$$\sigma_{\overline{D_{\alpha\beta}}} = \sqrt{\frac{D_{\alpha\beta}^2 - (\overline{D_{\alpha\beta}^1})^2}{N_t}} \quad (11)$$

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

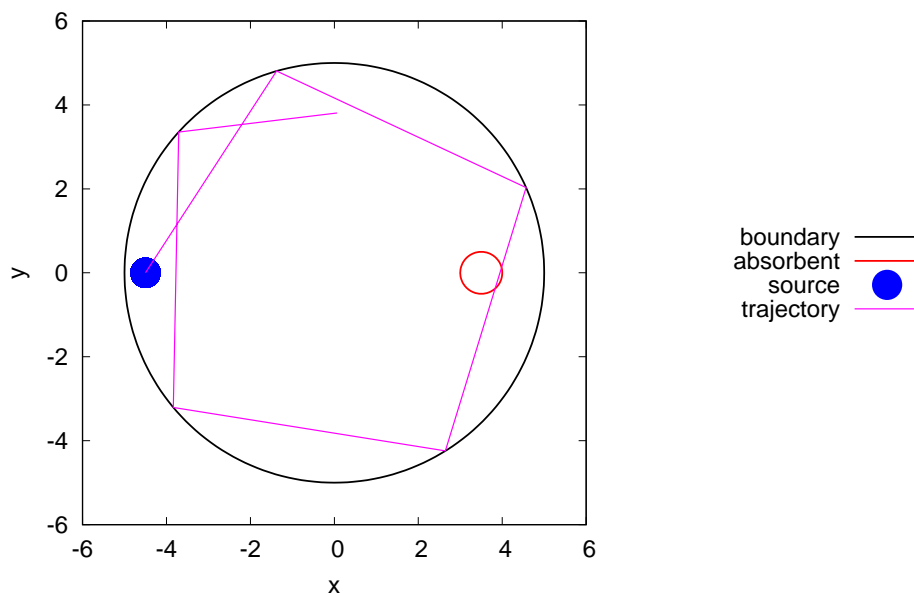
## 1.2 Symulacja dyfuzji i absorpcji w układzie zamkniętym

### 1.2.1 Postawienie problemu

Rozważamy teraz proces dyfuzji cząstek w układzie zamkniętym, którego brzeg stanowi okrąg (rys.1). W układzie jest źródło dostarczające do układu cząstki z wydajnością

$$\omega = \frac{\Delta n}{\Delta t} \quad (12)$$

Cząstka w układzie podlega dyfuzji w kierunkach  $xy$  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  $\Delta x, \Delta y$  losowane są z fgp danego wzorem (6). Docierając do brzegu obszaru odbija się on ścianki zewnętrznej zgodnie z prawem odbicia (kąt padania = kąt odbicia). Jeśli trajektoria cząstki przecina obszar absorbenta (czerwony okrąg na rys.1) zostaje pochłonięta. Przy stałym wydatku cząstek ze źródła  $\omega = \text{const}$  występowanie absorbenta ogranicza gęstość (liczbę) cząstek w układzie.



Rysunek 1: Źródło (niebieski) i obszar absorbenta (czerwony okrąg) znajdują się w obszarze czynnym o geometrii kołowej. Cząstka wychodząc ze źródła porusza się w sposób przypadkowy w kierunkach  $xy$  (proces Wienera) odbijając się od brzegu obszaru. W trakcie przejścia przez obszar absorbenta cząstka znika (na rysunku pokazano także dalszy przebieg trajektorii bez absorpcji).

### 1.2.2 Algorytm symulacji dyfuzji i absorpcji

W poniższym algorytmie zmienna  $\theta_i$  wskazuje czy cząstka jest aktywna ( $\theta_i = 1$ ) czy jest nieaktywna ( $\theta_i = 0$ ).

inicjalizacja:

```

 $x_r, y_r, R_r$  - środek i promień obszaru
 $x_a, y_a, R_a$  - środek i promień absorbenta
 $x_s, y_s$  - położenie źródła
 $N_{max}$  - maksymalna liczba aktywnych cząstek w układzie
 $t_{max}, \Delta t, N = t_{max}/\Delta t$  - czas trwania symulacji, krok czasowy i liczba kroków
 $\omega = \Delta n/\Delta t$  - wydajność źródła
for(i=1; i<= $N_{max}$ ; i++)  $\theta_i = 0$  //brak cząstek w układzie w chwili startowej

```

```

for(it=1; it<= N; it++){
    n=0 //licznik aktywnych cząstek
     $n_{new} = 0$  //licznik nowych-dodawanych cząstek ze źródła
    for(i=1; i<= $N_{max}$ ; i++){

        //próbujemy dodać cząstkę
        if( $\theta_i == 0$  &&  $n_{new} < \Delta n$ ){
             $\theta_i = 1$ 
             $x_i = x_s$ 
             $y_i = y_s$ 
             $n_{new}++$ 
        }
    }
}

```

```

// przesuwamy aktywne cząstki
if ( $\theta_i == 1$ ) {
     $\vec{P}_1$  :
         $x_1 = x_i$ 
         $y_1 = y_i$ 
     $\vec{P}_2$  :
         $\Delta x \sim N_{\Delta t}(0, \sigma_{\Delta t})$ 
         $\Delta y \sim N_{\Delta t}(0, \sigma_{\Delta t})$ 
         $x_2 = x_i + \Delta x$ 
         $y_2 = y_i + \Delta y$ 
        jeśli  $|\vec{P}_2| > R_r$  wykonaj odbicie od brzegu obszaru
        sprawdź absorpcję (możliwe odbicia wielokrotne):
         $|\vec{r}_i(t_i \leq t \leq t_i + \Delta t) - \vec{r}_a|^2 \leq R_a^2 \implies \theta_i = 0$ 
        zachowaj nowe położenie:
         $x_i = x_2$ 
         $y_i = y_2$ 
        if ( $\theta_i == 1$ )  $n++$  //zliczamy aktywne cząstki
    }
}
}

```

Uwagi:

- $N_{max}$  to maksymalna dopuszczalna liczba cząstek, a  $n$  to rzeczywista liczba aktywnych cząstek. Oczywiście stosujemy warunek  $N_{max} > n$ , a ponieważ nie wiemy ile może wynosić  $n$  więc  $N_{max}$  dobieramy empirycznie z pewnym nadmiarem.
- Parametry wszystkich cząstek  $(x_i, y_i, \theta_i)$  najlepiej jest trzymać w jednej tablicy
- $\vec{r}_i(t_i \leq t \leq t_i + \Delta t)$  oznacza trajektorię cząstki pomiędzy chwilami  $t_i$  oraz  $t_i + \Delta t$ . Trajektorja może być krzywą łamaną w przypadku wielokrotnych odbić od brzegu (patrz rys.1), dlatego należy sprawdzać warunek przejścia przez absorbent dla każdego odcinka - dowolne przecięcie brzegu absorbenta kasuje cząstkę.
- sprawdzenie czy cząstka przechodzi przez brzeg oraz operację odbicia realizujemy za pomocą gotowej procedury

```

void particle_translation(
double & x1, double & y1, double & x2, double & y2,
double xr, double yr, double Rr, double xa, double ya, double Ra,
int &  $\theta$ , double & length)

```

Działanie:

- Do procedury przekazujemy punkt startowy  $\vec{P}_1 = [x_1, y_1]$  oraz proponowany końcowy  $\vec{P}_2 = [x_2, y_2]$  oraz  $\theta = 1$  (WAŻNE). Procedura sprawdza czy punkt  $\vec{P}_2$  znajduje się poza obszarem. Jeśli nie, to ustawia  $x_1 = x_2$ ,  $y_1 = y_2$  oraz  $length = 0$  (odległość  $\vec{P}_2$  od  $\vec{P}_1$ ). Jeśli trajektorja przechodzi przez obszar absorbenta to zwraca wartość  $\theta = 0$ , więc wiemy że cząstkę należy wtedy skasować.

- Gdy  $\vec{P}_2$  leży poza brzegiem obszaru, to procedura przesuwa punkt  $\vec{P}_1$  na brzeg do punktu przecięcia pierwotnej trajektorii z brzegiem ( $\vec{P}_3$ ) a punkt  $\vec{P}_2$  zostaje umieszczony na kierunku odbicia tak aby całkowita długość trajektorii była zachowana. Jeśli  $\vec{P}_1 \neq \vec{P}_2$  wówczas  $length > 0$  i należy wywołać procedurę kolejny raz z argumentami, które zwróciła. Gdy po kilku wywołaniach otrzymamy  $length < 10^{-6}$  (porównujemy double) to nowe położenie cząstki  $x_i = x_1$  oraz  $y_i = y_1$ , jeśli któryś z generowanych odcinków przetnie obszar absorbenta wówczas procedura zwraca  $\theta = 0$ .

Do wywołania procedury najlepiej jest użyć pętli *do – while* gdyż nie wiemy ile wywołań będzie potrzebnych, a pętla wykona się conajmniej raz

```
theta = 1
do{
    particle_translation(x1,y1,x2,y2,xr,yr,Rr,xa,ya,Ra,theta,length)
}while( length > 10-6 )
```

## 2 Zadania do wykonania

1. Wykonać symulację dyfuzji  $N_{max}$  cząstek w układzie otwartym (proces Wienera) i wyznaczyć zależność czasową współczynników dyfuzji:  $D_{xx}(t)$ ,  $D_{yy}(t)$  i  $D_{xy}(t)$ . Symulacje wykonać dla parametrów

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

Sporządzić wykresy  $D_{xx}(t)$ ,  $D_{yy}(t)$  i  $D_{xy}(t)$  na jednym rysunku dla każdego  $N_{max}$  (3 rysunki). Wyznaczyć wartości średnie współczynników dyfuzji oraz ich niepewności dla  $N_t = t_{max}/\Delta t$ .

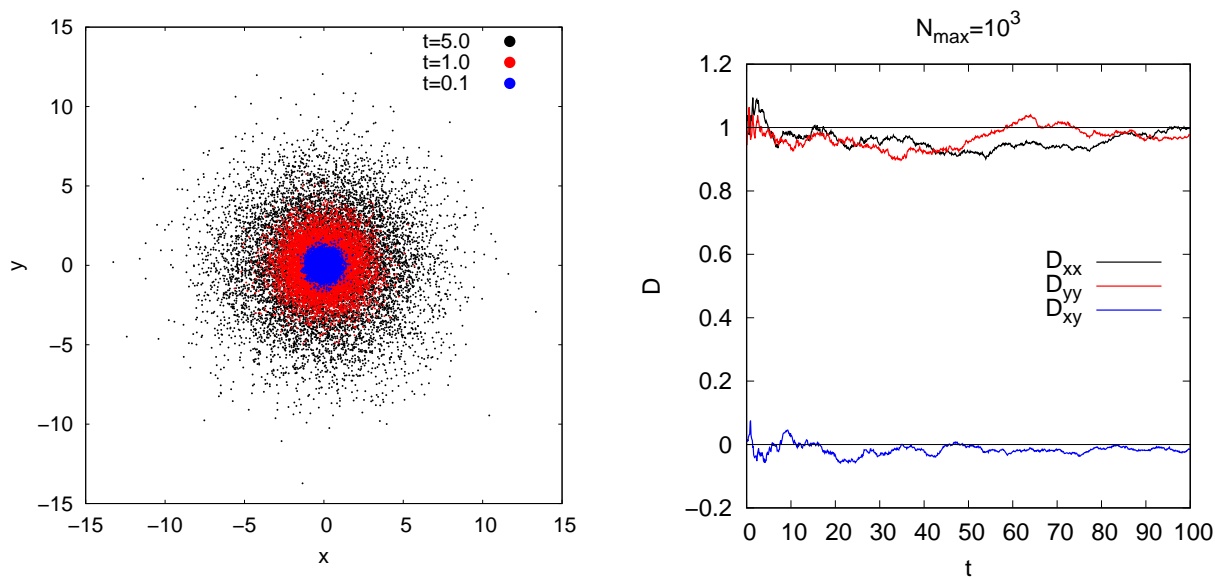
2. Wykonać symulacje procesu dyfuzji i absorpcji w układzie zamkniętym o geometrii kołowej. Symulacje wykonać dla parametrów

$$\begin{aligned} D &= 1 \\ N_{max} &= 10^4 \\ \Delta t &= 0.1 \\ t_{max} &= 10^3 \\ \omega &= \Delta n / \Delta t = 1; 5; 10 \\ x_r &= 0, y_r = 0, R_r = 5 \\ x_a &= 3, y_a = 0, R_a = 0.1; 0.5 \\ x_2 &= -4.5, y_s = 0 \end{aligned}$$

Narysować zależność liczby cząstek aktywnych od czasu  $n(t)$ . Na podstawie ich analizy określić wpływ wartości parametrów  $\omega$  oraz  $R_a$  na maksymalną liczbę cząstek aktywnych  $n$ . Sporządzić kilka rysunków pokazujących rozkład cząstek w początkowych chwilach symulacji (część narażająca  $n(t)$ ) oraz rysunek rozkładu końcowego cząstek (gdy  $n(t)$  przestanie rosnąć, a jedynie fluktuuje).

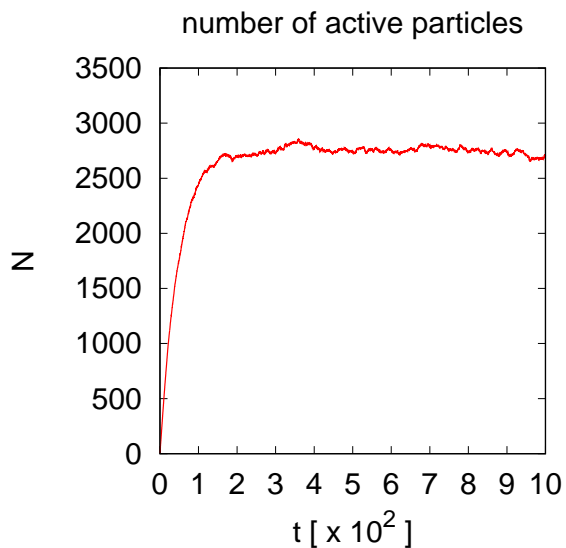
### 3 Przykładowe wyniki

#### 3.1 Proces Wienera

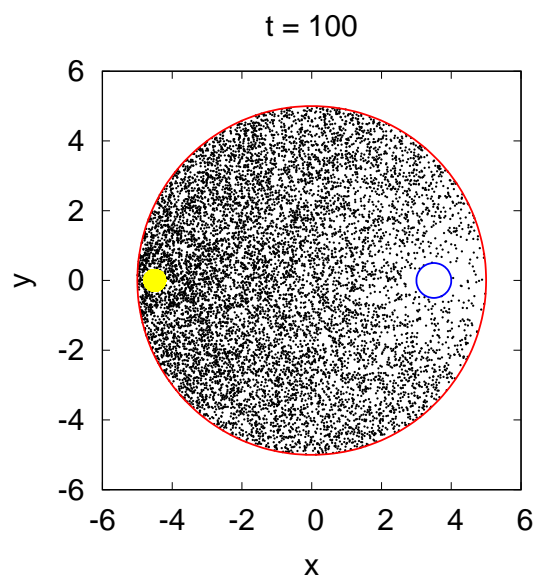
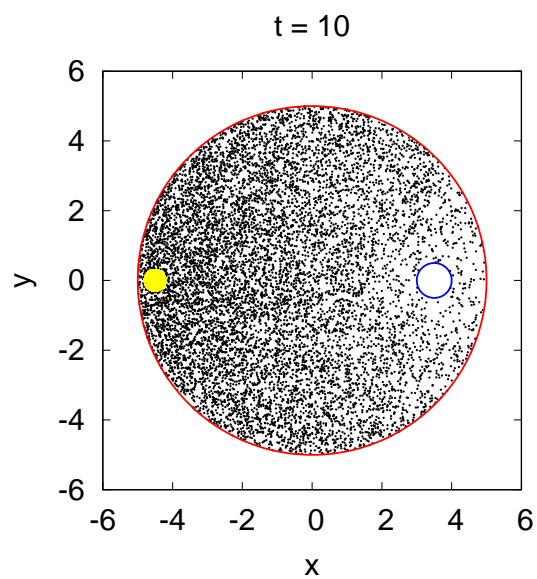
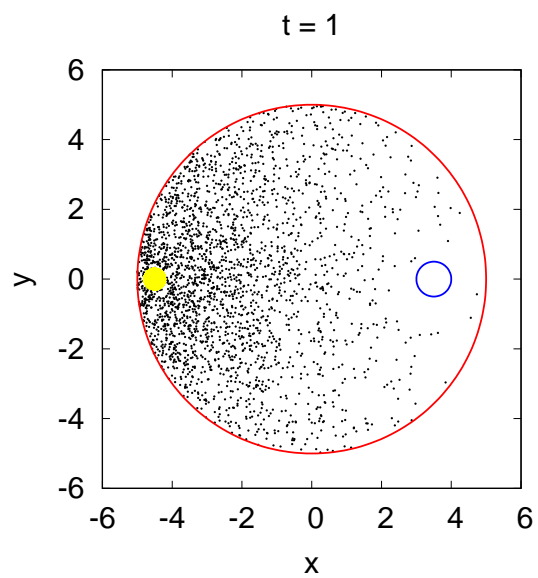
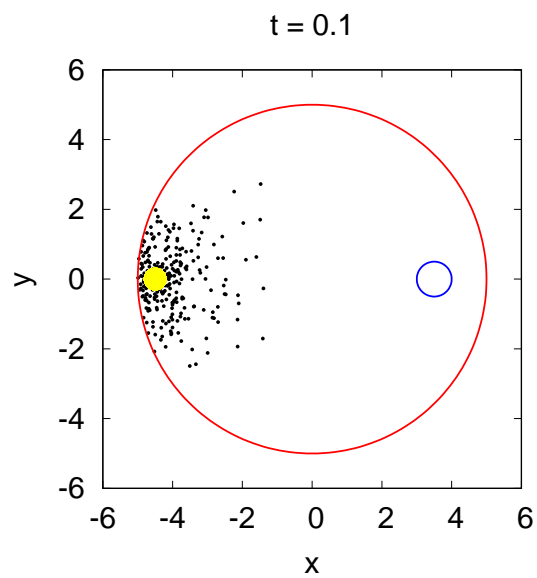


Rysunek 2: Szacowanie współczynnika dyfuzji w procesie Wienera dla układu otwartego: (a) rozkład przestrzenny cząstek w kilku chwilach czasowych, (b) wartości współczynników dyfuzji

#### 3.2 Dyfuzja i absorpcja w układzie zamkniętym



Rysunek 3: Przykładowa zależność liczby aktywnych cząstek w układzie od numeru iteracji.



Rysunek 4: Proces dyfuzji cząstek uwalnianych ze źródła  $\vec{P}_s = (-4.5, 0)$  (żółte kółko), niebieski okrąg to brzeg absorbenta.