

Diffusjon – om diffusjonskoeffisienten

Siebe van Albada, April 2018

I. Diffusjonskoeffisienten

I dette prosjektet skal vi simulere diffusjon av partikler. Vi skal både studere diffusjon av en enkel partikkel (en såkalt *random walk*), og diffusjon av mange partikler samtidig. Det finnes mange forskjellige måter å simulere random walks på. Essensen til alle disse modellene er at en partikkel beveger seg over en liten avstand i en retning som er gitt ved en sannsynlighetsfordeling. Det letteste er å betrakte modeller hvor sannsynlighetsfordelingen er identisk for hvert tidskritt, og uavhengig av det forrige tidskrittet. Det vil si at en partikkel som nettopp har beveget seg mot høyre, har like stor sannsynlighet for å bevege seg mot venstre og høyre i det neste tidskrittet.

La oss først betrakte en random walk i én dimensjon. Hvis en partikkel begynner på posisjon $x=0$ på tidspunkt $t=0$, er posisjonen til partikkelen etter n tidskritt summen av avstandene som partikkelen har gått i alle tidskritt så langt. Hvis sannsynligheten for å bevege seg i forskjellige retninger er konstant, og uavhengig av bevegelsen i det forrige tidskrittet, er sannsynlighetsfordelingen etter n tidskritt lik summen av n uavhengige sannsynlighetsfordelinger for ett tidskritt. Som vi har lært, er sannsynlighetsfordelingen etter n tidskritt da tilnærmet normalfordelt, ifølge sentralgrensesetningen.

Som vi har lært forrige gang, er forventningsverdien til den kvadratiske avstanden fra startpunktet $\langle r^2 \rangle$ i en random walk gitt ved

$$\langle r^2 \rangle = 2dDt \quad (1)$$

hvor d er dimensjonen og D diffusjonskoeffisienten, og $\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle$ er gjennomsnittlig kvadratisk avstand fra startpunktet. For én dimensjon blir dette: $\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = 2Dt$. Vi er nå interessert i hvordan vi kan bestemme diffusjonskoeffisienten for en gitt diffusjonsmodell. La oss betrakte ett enkelt tidskritt Δt . Forventningsverdien til den kvadratiske avstanden fra startpunktet, $\langle r^2 \rangle$, er ingenting annet enn *variansen* til partikkelens forflytning etter ett tidskritt. Denne variansen er avhengig av hvordan vi implementerer partikkelens bevegelse i løpet av ett tidskritt, og vi kan beregne den. For eksempel, hvis partikkelen i hvert tidskritt enten beveger seg en avstand 1 til høyre eller til venstre på en rett linje, med lik sannsynlighet 0,5, er populasjonsvariansen i posisjonen lik $\sigma_x^2 = \langle (x-\mu)^2 \rangle = \langle (x-0)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_i (x_i)^2 = \frac{1}{2} [(-1)^2 + (1)^2] = 1$. Når vi vet $\langle r^2 \rangle$ (som er lik $\langle x^2 \rangle$ for én dimensjon), kan vi regne ut diffusjonskoeffisienten D med hjelp av formel (1).

Om likning (1) stemmer etter ett tidskritt, så stemmer den fortsatt etter mange tidskritt (med samme diffusjonskoeffisient D). Betrakt fortsatt 1-dimensjonal diffusjon.



1. Regn ut diffusjonskoeffisienten for de følgende algoritmene:

- En partikkel beveger seg enten 0.5 μm mot høyre, eller mot venstre med lik sannsynlighet 0.5 i et tidssteg på 1 ms.

- En partikkel beveger seg enten 0.5 μm mot høyre, eller mot venstre med lik sannsynlighet 0.25 i et tidssteg på 1 ms, og blir med 0.5 sannsynlighet på samme sted.

Om et system har flere dimensjoner, kan vi regne ut forventningsverdien til den kvadratiske avstanden fra startpunktet, $\langle r^2 \rangle$, på samme måte som vi har gjort for 1-dimensionale systemer. For hvert tidskritt betrakter vi bare komponenten til bevegelsen i x-retningen. På samme måte kan vi regne ut forventningsverdien til den kvadratiske avstanden, $\langle y^2 \rangle$ i y- og $\langle z^2 \rangle$ i z-retningen. Den totale kvadratiske avstanden er da lik $\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle$.



2. Regn ut den kvadratiske avstanden i x-retningen $\langle x^2 \rangle$, når en partikkel beveger seg til en av 6 nabopunkt på avstand 1 på et kubisk raster, med sannsynlighet 1/6 for alle retningene. Regn deretter ut diffusjonskoeffisienten D .

II. Oppgave: modellering / implementering / simulering

- Simuleringsmetoden som vi skal bruke i denne metoden er en *cellulær automaton*.
- De følgende 3 prosessene skal simuleres:
 1. Simulering av en random walk av en enkel partikkel på et raster. (metode: *agentbasert simulering*)
 2. Simulering av mange partikler på et raster, hvor hver celle kan inneholde mange partikler. (metode: *cellulær automaton*)

Sampling av en binomisk fordeling kan man gjøre slik (fra *Non-Uniform Random Variate Generation* (PDF)):

```
// Denne metoden er ikke raskest, men den er lettest å
// implementere.
public static int getBinomial(int n, double p) {
    int x = 0;
    for(int i = 0; i < n; i++) {
        if(Math.random() < p)
            x++;
    }
    return x;
}
```

3. Sannsynlighetsfordelingen for posisjon vs. tid for et system med én partikkel. (metode: *cellulær automaton*)
- Det er fritt valg for reglene på mikronivå.
 1. Bestem til hvilke (nabo)cellene partiklene kan bevege seg.
 2. Hva er sannsynlighetene for hver av posisjonene?
 3. Kan partikkelen forbli på samme sted?
 4. Sannsynlighetsfordelingen skal være symmetrisk.