Simulering og Statistikk – Intro til Modul 4: Diffusjon

***Siebe van Albada*, April 2018**

I. Introduksjon

I denne modulen skal vi studere og anvende forskjellige simuleringsmetoder for å undersøke et viktig naturfenomen: diffusjon. Diffusjon er spredning av et stoff i et annet stoff. Stoffet sprer seg ut fra høy til lav konsentrasjon i væske eller gass, som når en dråpe saft blir tilført vann. Dette er et resultat av den tilfeldige, termiske bevegelsen til molekyler.
Særlig når avstandene og partiklene er små spiller diffusjon en stor rolle. I biologiske celler, for eksempel, er diffusjon en viktig transportmekanisme for bl.a. proteiner. Proteinene i en celle beveger seg som en konsekvens av såkalt Brownsk bevegelse: Partiklene blir sparket i tilfeldige retninger som konsekvens av kontinuerlige kollisjoner med molekylene i væsken.

Når avstandene er store, spiller andre transportmekanismer, som strømning gjennom konveksjon, en større rolle.

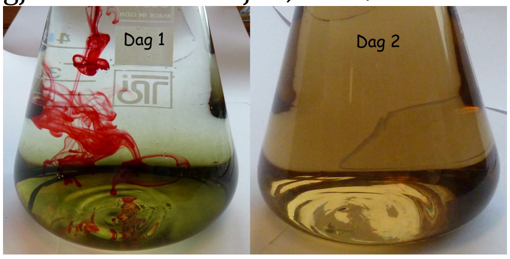

Fig. 1. Her ser vi et eksempel av diffusjon. Væsken sprer seg i løpet av en dag ut over vannet. I det første bildet var ikke diffusjon hovedårsaken til spredningen av væsken, men strømning. Kilde: http://ndla.no/nb/node/95891

Når vi følger én enkel partikkel, så følger den en såkalt *random walk.* Se for eksempel denne filmen av mikroskopiske partikler i vann, som beveger som konsekvens av Brownsk bevegelse.
http://www.youtube.com/watch?v=8FZwKFC75XI

Når vi følger mange partikler samtidig, så ser vi at de beveger seg mot regioner hvor konsentrasjonen er lavere. Se for eksempel denne videoen: http://www.youtube.com/watch?v=H7QsDs8ZRMI.

1. Forklar hvorfor partiklene beveger seg fra høy til lav konsentrasjon.

2. Forklar at partiklene gjennomsnittlig blir på samme plass, dvs. $\overline{x}(t) = \overline{x}(0)$.

Diffusjon av en partikkel

Når vi ser på *én enkel partikkel*, gjelder:
$\langle r^2 \rangle = 2dDt$
hvor:

- $\langle r^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle$ er gjennomsnittlig kvadratisk avstand fra startposisjonen som partikkelen har diffundert.
- d er dimensjonen (1, 2 eller 3).

- D er diffusjonskoeffisienten (for eksempel i $cm^2\ s^{-1}$).
- t er tiden.

Bevegelsen av en enkel partikkel skjer som konsekvens av at partikkelen hele tiden blir ”sparket” i forskjellige, tilfeldige retninger. Det er derfor slik at vi simulerer diffusjon av en enkel partikkel: Begynnende fra en bestemt posisjon, tar partikkelen i hvert tidskritt et steg i en fullstendig vilkårlig retning.

Simuleringsprosjektet

I denne modulen skal vi simulere tre ting:

- random walk av en enkel partikkel
- sannsynlighetsfordelingen for posisjonen til en enkel partikkel etter *n* tidssteg
- diffusjon av mange partikler samtidig

Simuleringsmetoden som vi skal implementere er en cellulær automaton. En cellulær automaton består av en raster av celler, som alle befinner seg i en bestemt tilstand. Tilstanden til hver celle er avhengig av tilstanden i cellen i det forrige tidspunktet, og av tilstandene i nabocellene.

Vi skal både se på diffusjon i 1, 2, og 3 dimensjoner.

Diffusjon

Når vi ser på *mange partikler* samtidig, gjelder *Ficks første lov*. Den lenker fluksen (”strømningen”) av partikler som konsekvens av diffusjon til konsentrasjonen av partiklene. Loven forteller oss at fluksen går fra regioner med høy konsentrasjon mot regioner med lav konsentrasjon, og at strømningen er proporsjonal med konsentrasjonsgradienten. For diffusjon i én dimensjon er Ficks første lov:

$$J = -D\frac{\partial C}{\partial x} \qquad (1)$$

hvor

- J er fluksen som konsekvens av diffusjon, mengden stoff som beveger seg gjennom et areal per tidsenhet.
- D er diffusjonskoeffisienten i enheter av [avstand^2 tid^{-1}], f. eks. i $\frac{cm^2}{s}$.
- C er konsentrasjonen i enheter av [mengde stoff per volum], f. eks. $\frac{mol}{cm^3}$.
- x er posisjonen.

Ficks andre lov forteller oss hvordan diffusjon endrer konsentrasjonen som funksjon av tid, for diffusjon i én dimensjon:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \qquad (2)$$

hvor t er tiden.

Vi ser at den samme diffusjonskoeffisienten D opptrer i både den makroskopiske beskrivelsen hvor vi tenker i konsentrasjoner og i den mikroskopiske beskrivelsen, hvor vi ser på én enkel partikkel. I simuleringsprosjektet skal vi gå ned til et enda lavere nivå, og kommer vi til å se hvordan vi kan lenke diffusjonskoeffisienten D til bevegelsen av en partikkel over ett enkelt tidskritt.