Τυχαίοι περίπατοι.

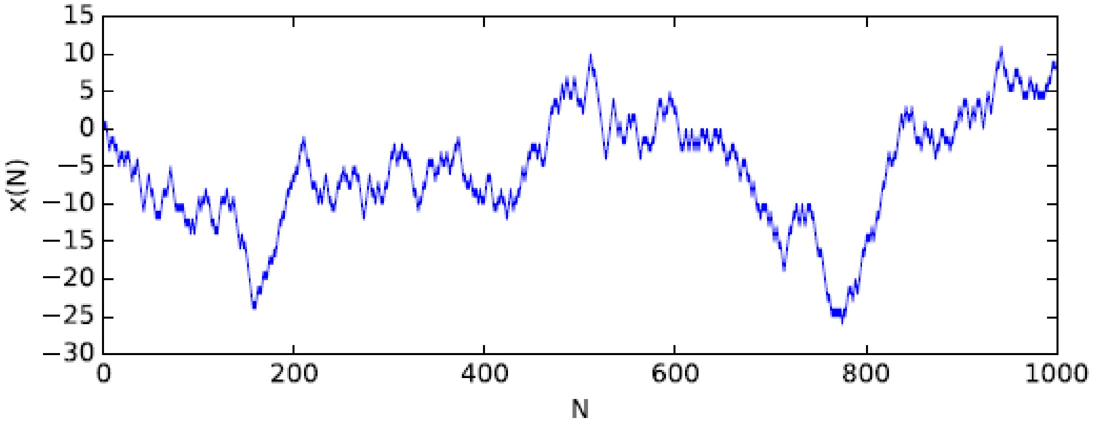
Η διάχυση ως τυχαίοι περίπατοι

Ο τυχαίος περιπατητής σε 1 διαστάση (random walker)

$$x(N) = \sum_{i=1}^{N} u_i \, .$$

$$u_i = \begin{cases} -1 & p = 1/2 \\ +1 & p = 1/2 \end{cases}$$

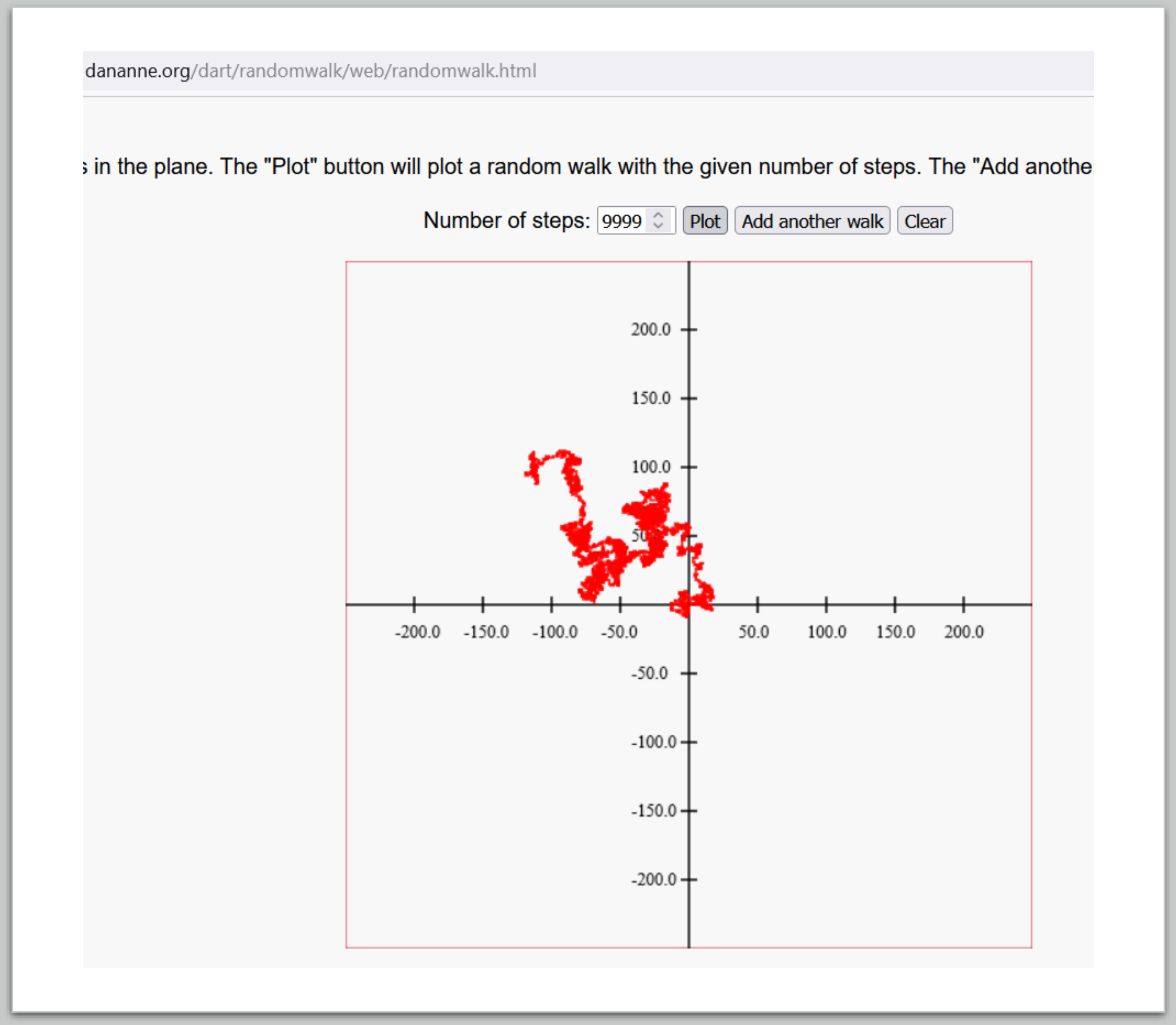
$$\langle x \rangle = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^{L} x(N)_k$$



$$\Delta x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$$

stp_RandomWalk1D.jar

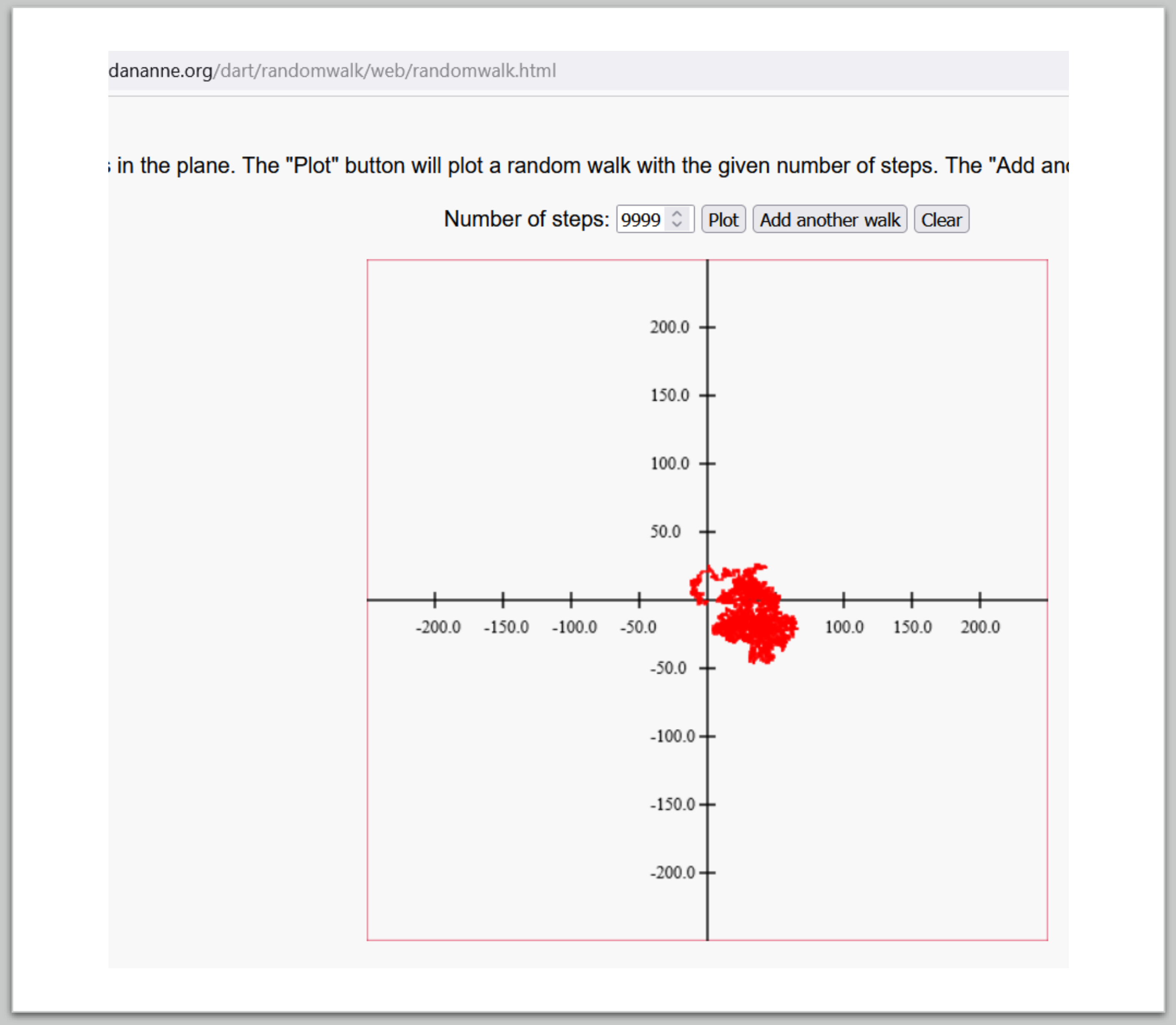
Ο τυχαίος περιπατητής σε 2 διαστάσεις (2D random walker)



- http://dananne.org/dart/randomwalk/web/randomwalk.html

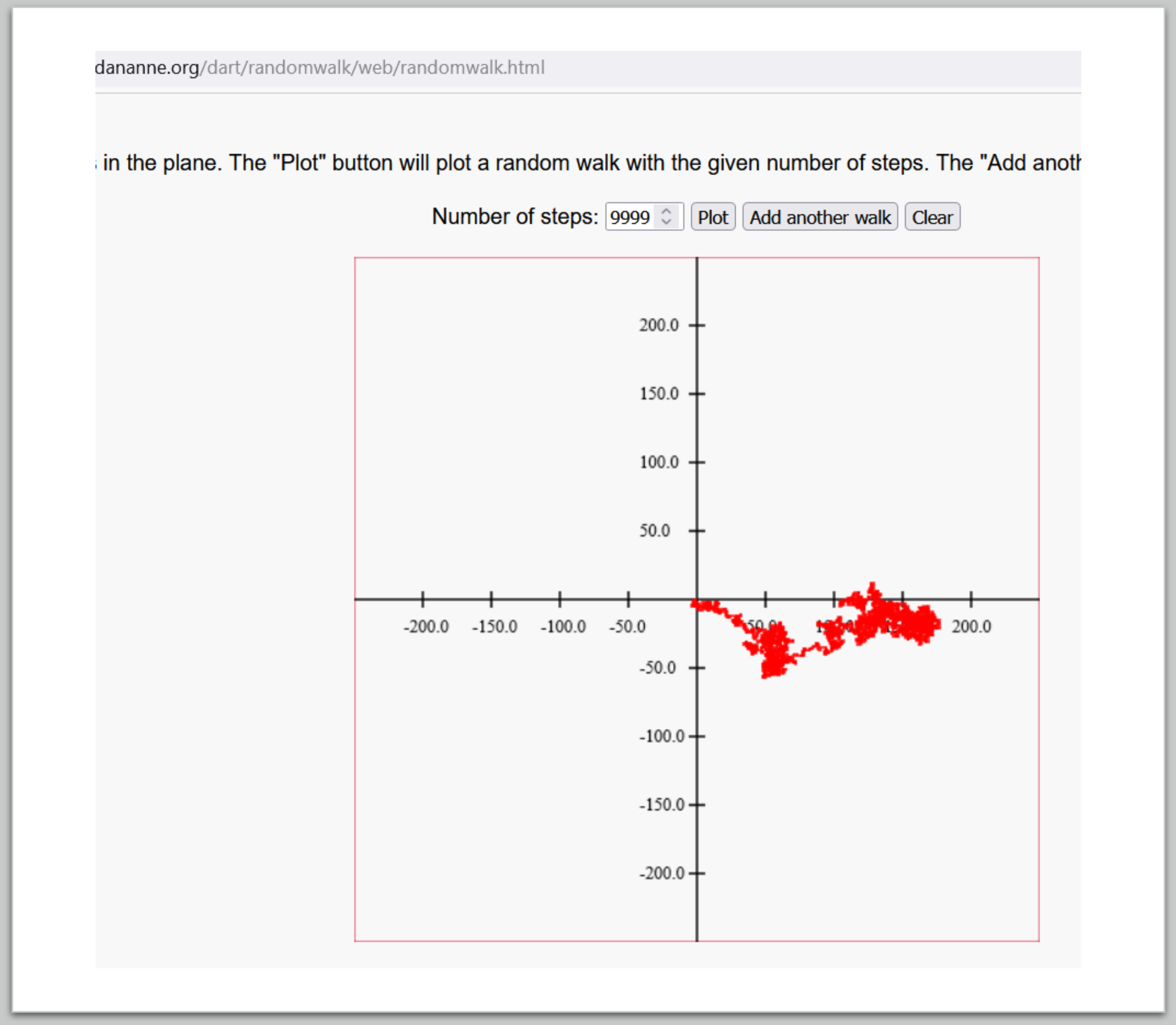
Ο τυχαίος περιπατητής σε 2 διαστάσεις
(2D random walker)

- http://dananne.org/dart/randomwalk/web/randomwalk.html



Ο τυχαίος περιπατητής σε 2 διαστάσεις (2D random walker)

- http://dananne.org/dart/randomwalk/web/randomwalk.html



$$\langle x \rangle = \langle \sum_i u_i \rangle = \sum_i \langle u_i \rangle = 0$$

$$\langle x^2 \rangle = \langle \sum_i \sum_j u_i u_j \rangle = \langle \sum_i u_i u_i \rangle = N \langle u_i^2 \rangle$$

Ο τυχαίος περιπατητής σε 1 διαστάση (random walker) – Θεωρία (p=0.50)

- Έστω ότι ο τυχαίος περιπατητής έχει πιθανότητα p να κάνει ένα βήμα προς τα δεξιά (+1) και πιθανότητα q=1-p να κάνει βήμα προς τα αριστερά (-1) άρα στο i βήμα έχουμε την τυχαία μεταβλητή u_i που με πιθανότητα p παίρνει την τιμή +1 και με πιθανότητα q(=1-p) την τιμή -1. Δεδομένου ότι ο περιπατητής έχει ξεκινήσει από την αρχή x(0)=0, η θέση του μετά από N βήματα θα είναι $x(N) = \sum_{i=1}^{N} u_i$.

- Θεωρούμε τώρα τις τυχαίες μεταβλητές Bernoulli $y_i = (u_i + 1)/2$ με πιθανότητα επιτυχίας (1) ίση με p και πιθανότητα αποτυχίας (0) ίση με q.

- Κατά συνέπεια, η τυχαία μεταβλητή $S_N = \sum_{i=1}^{N} y_i$ ακολουθεί τη διωνυμική κατανομή με N δοκιμές για k επιτυχίες. Όταν έχουμε k επιτυχίες, τότε

$$k = \sum_{i=1}^{N} y_i = \sum_{i=1}^{N} (u_i + 1)/2 = \sum_{i=1}^{N} u_i\,/2 + N/2 = x(N)/2 + N/2 \rightarrow x(N) = 2k - N$$

- Άρα η πιθανότητα $P[x(N) = m]$ ο περιπατητής να είναι στη θέση m=2k-N δίδεται από την διωνυμική κατανομή $P[S_N = k]$:

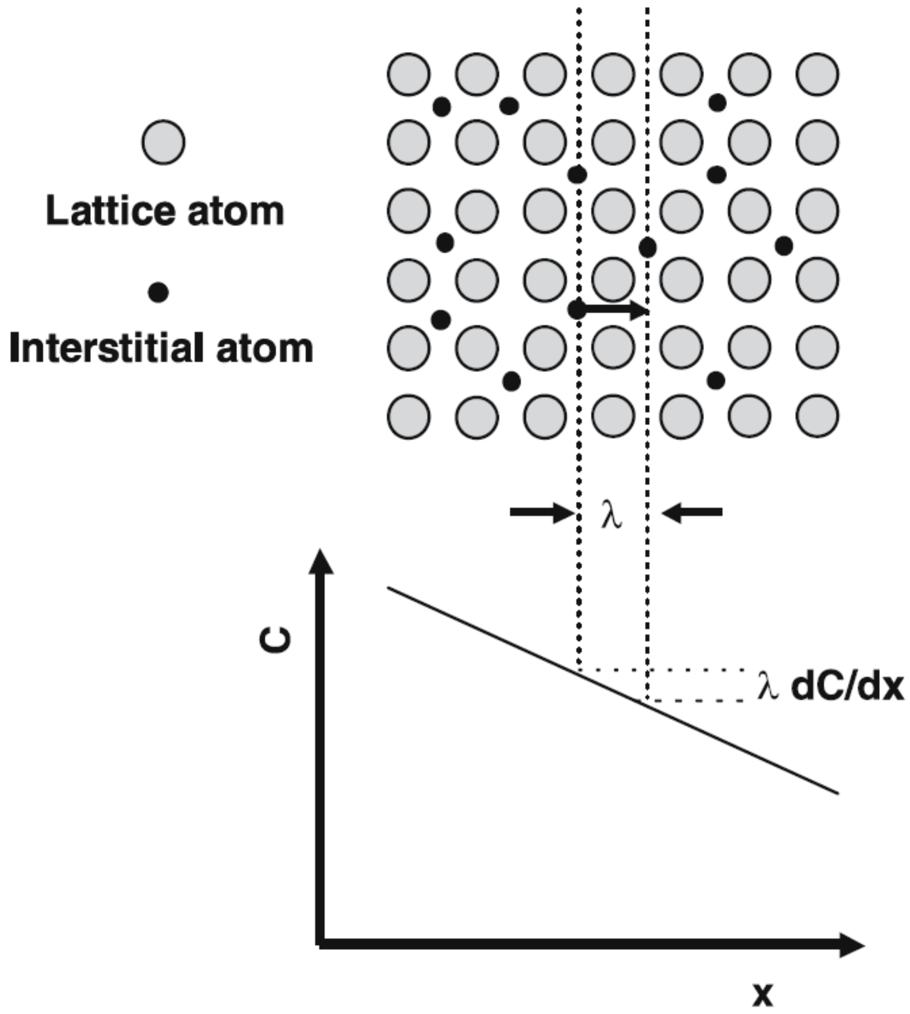
- Άρα η πιθανότητα $P[x(N) = m]$ ο περιπατητής να είναι στη θέση m=2k-N δίδεται από την διωνυμική κατανομή $P[S_N = k] = P[S_N = (m+N)/2]$ (για m=-N, -N+2, …,N):

$$P[S_N = k] = P[S_N = (m+N)/2] = \binom{N}{(m+N)/2} p^{(m+N)/2} q^{(N-m)/2}$$

$$x(N) = \sum_{i=1}^{N} u_i,\ y_i = (u_i + 1)/2,\ S_N = \sum_{i=1}^{N} y_i,\ x(N) = 2\,S_N - N$$

$$\boxed{\begin{gathered} P[x(N) = m] = \binom{N}{(m+N)/2} p^{(m+N)/2} (1-p)^{(N-m)/2} \\ \langle x(N) \rangle = N(2p-1),\ \langle (x(N) - \langle x(N) \rangle)^2 \rangle = 4Np(1-p) \end{gathered}}$$

Διάχυση (ο νόμος του Fick)



$$J = \Gamma n_1 - \Gamma n_2$$

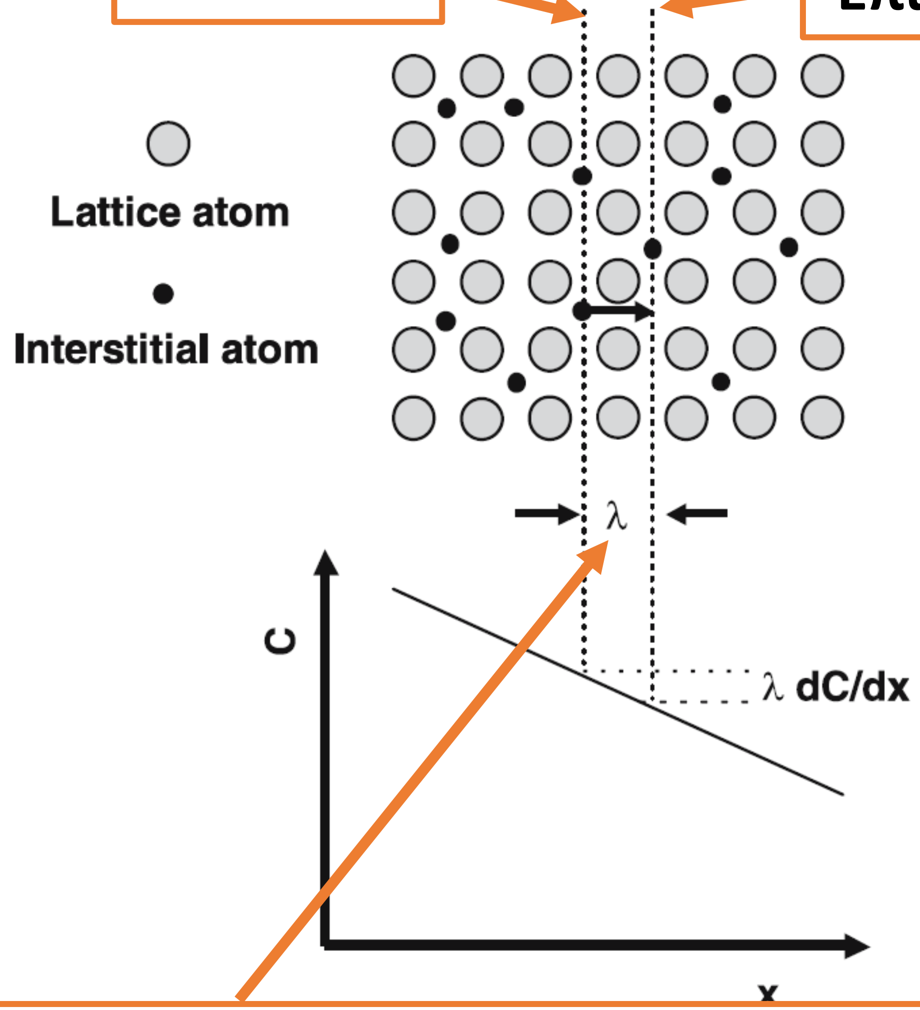
$$C_1 = \frac{n_1}{\lambda}, \quad C_2 = \frac{n_2}{\lambda}.$$

$$C_1 - C_2 = -\lambda \frac{\partial C}{\partial x}.$$

$$J = -\lambda^2 \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \qquad D = \Gamma \lambda^2$$

Διάχυση (ο νόμος του Fick)

Επίπεδο 1 **Επίπεδο 2**



$$J = \Gamma n_1 - \Gamma n_2$$

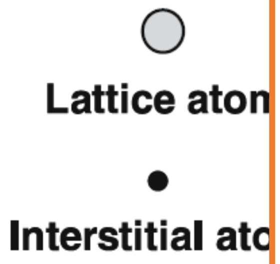
$$C_1 = \frac{n_1}{\lambda}, \quad C_2 = \frac{n_2}{\lambda}.$$

$$C_1 - C_2 = -\lambda \frac{\partial C}{\partial x}.$$

$$J = -\lambda^2 \Gamma \frac{\partial C}{\ldots} \qquad D = \Gamma \lambda^2$$

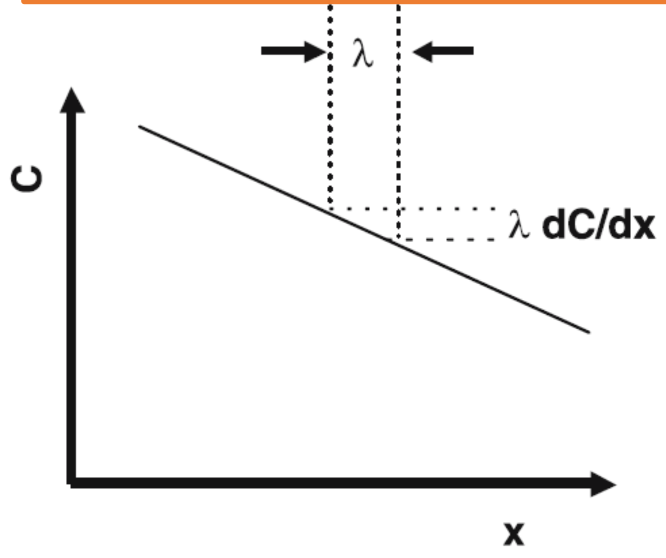
Απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών επιπέδων, δηλαδή η απόσταση από το επίπεδο 1 στο επίπεδο 2 [m]

Διάχυση (ο νόμος του Fick)



Πυκνότητα ρεύματος ύλης, δηλαδή αριθμός ατόμων που διέρχονται από το επίπεδο 1 στο επίπεδο 2 ανά μονάδα χρόνου και ανά μονάδα επιφανείας [1/(s.m^2)]

$$J = \Gamma n_1 - \Gamma n_2$$

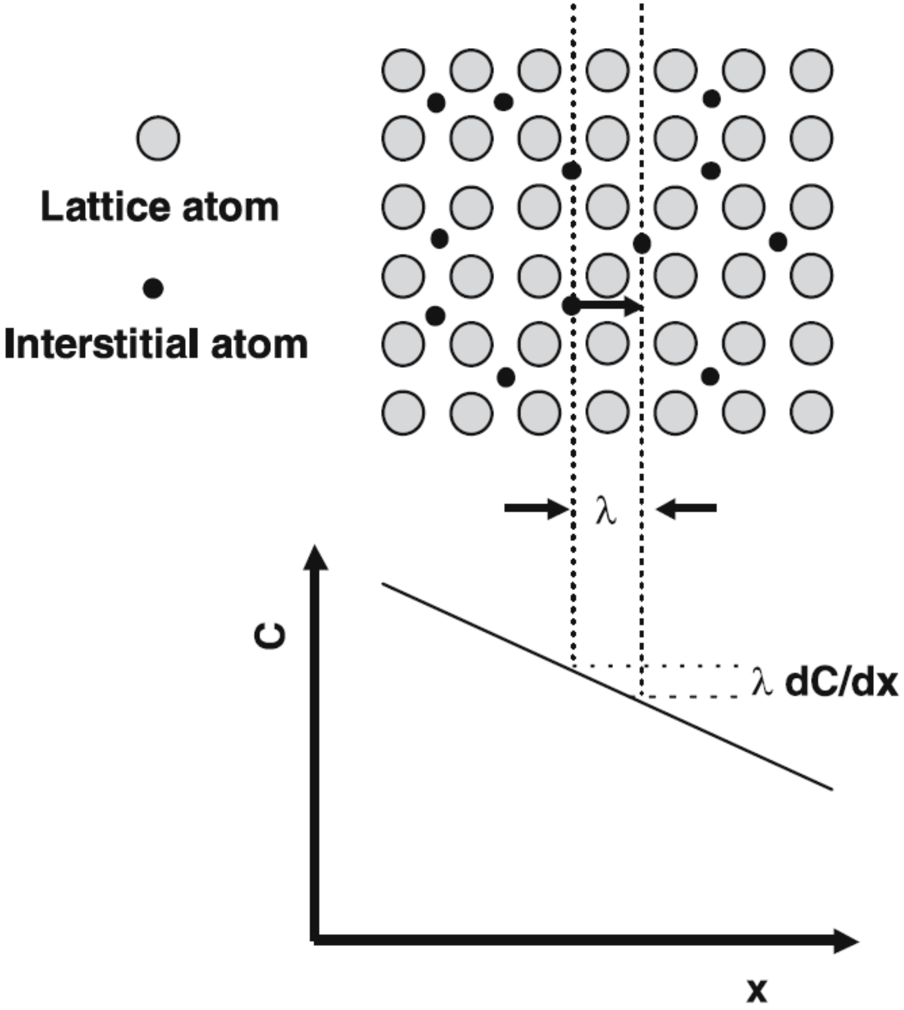


$$C_1 = \frac{n_1}{\lambda}, \quad C_2 = \frac{n_2}{\lambda}.$$

$$C_1 - C_2 = -\lambda \frac{\partial C}{\partial x}.$$

$$J = -\lambda^2 \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \qquad D = \Gamma \lambda^2$$

Διάχυση (ο νόμος του Fick)



$$J = \Gamma n_1 - \Gamma n_2$$

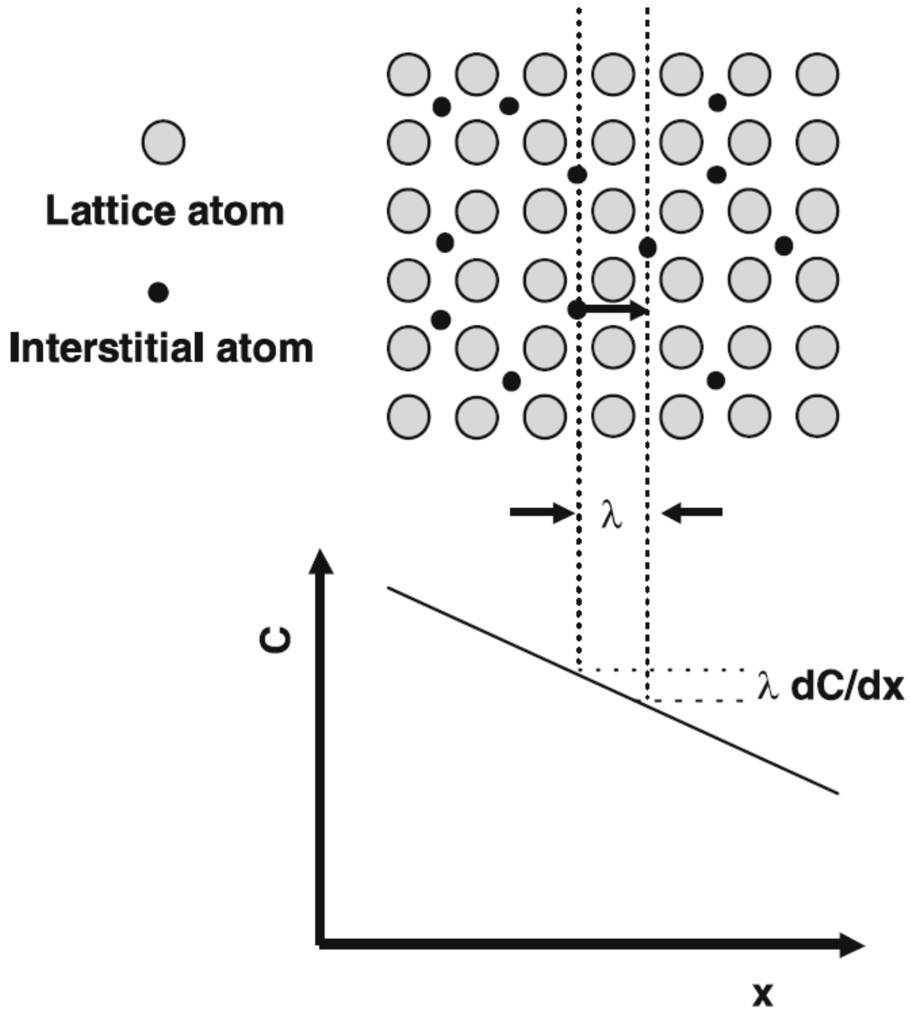
$$C_1 = \frac{n_1}{\lambda}, \quad C_2 = \frac{n_2}{\lambda}.$$

Ρυθμός μετάβασης ενός ατόμου από το επίπεδο 1 στο επίπεδο 2, δηλαδή ανά μονάδα χρόνου η «πιθανότητα» μετάβασης από το επίπεδο 1 στο επίπεδο 2 [1/s], **στο τέλος θα δούμε ότι *Γ*=*N*/(2τ)**.

$$-\lambda \frac{\partial C}{\partial x}.$$

$$D = \Gamma \lambda^2$$

Διάχυση (ο νόμος του Fick)



$$J = \Gamma n_1 - \Gamma n_2$$

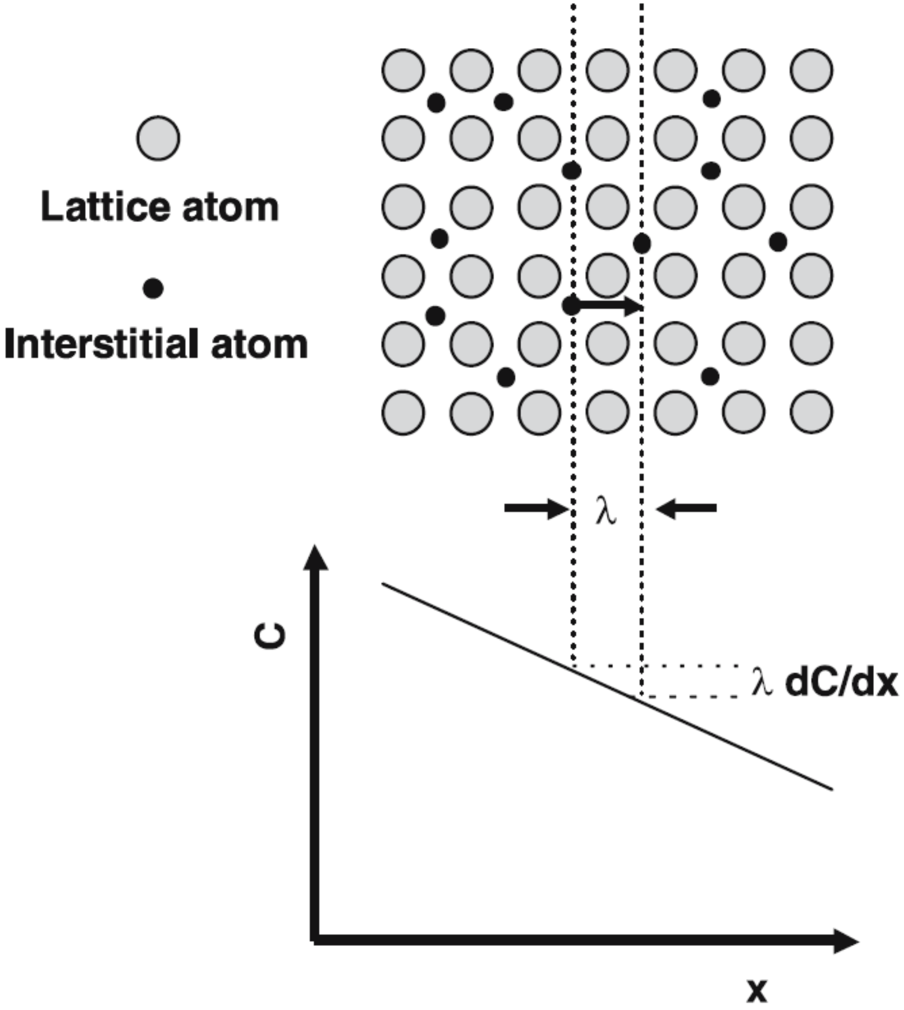
Επιφανειακή συγκέντρωση ατόμων στο επίπεδο 1 $[1/m^2]$

$$\ldots_2 = \frac{n_2}{\lambda}\,.$$

$$C_1 - C_2 = -\lambda \frac{\partial C}{\partial x}\,.$$

$$J = -\lambda^2 \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \qquad D = \Gamma \lambda^2$$

Διάχυση (ο νόμος του Fick)



$$J = \Gamma n_1 - \Gamma n_2$$

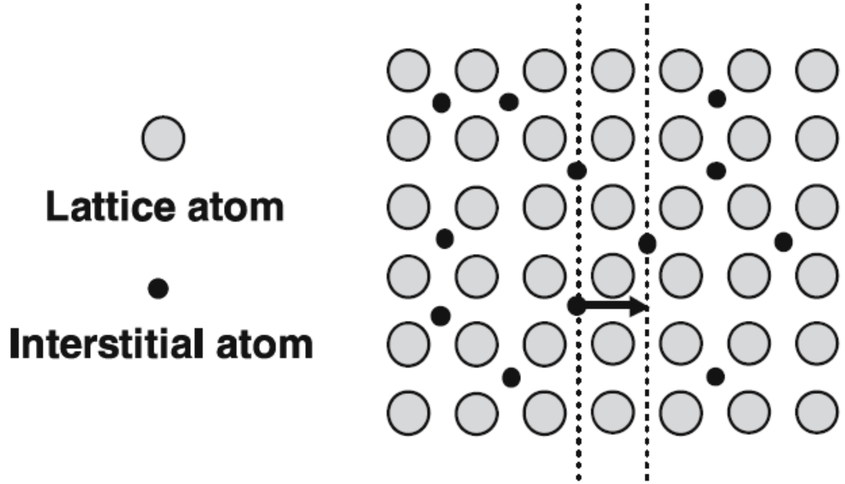
Επιφανειακή συγκέντρωση
ατόμων στο επίπεδο 2 [1/m^2]

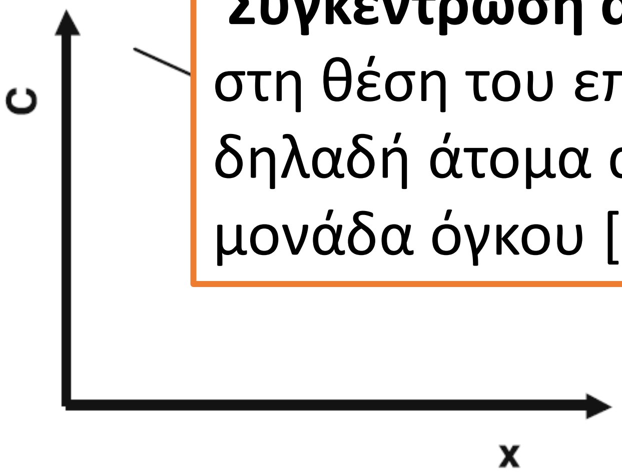
$$_2 = \frac{n_2}{\lambda}\,.$$

$$C_1 - C_2 = -\lambda \frac{\partial C}{\partial x}\,.$$

$$J = -\lambda^2 \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \qquad D = \Gamma \lambda^2$$

Διάχυση (ο νόμος του Fick)





Συγκέντρωση ατόμων στη θέση του επιπέδου 1, δηλαδή άτομα ανά μονάδα όγκου [$1/m^3$]

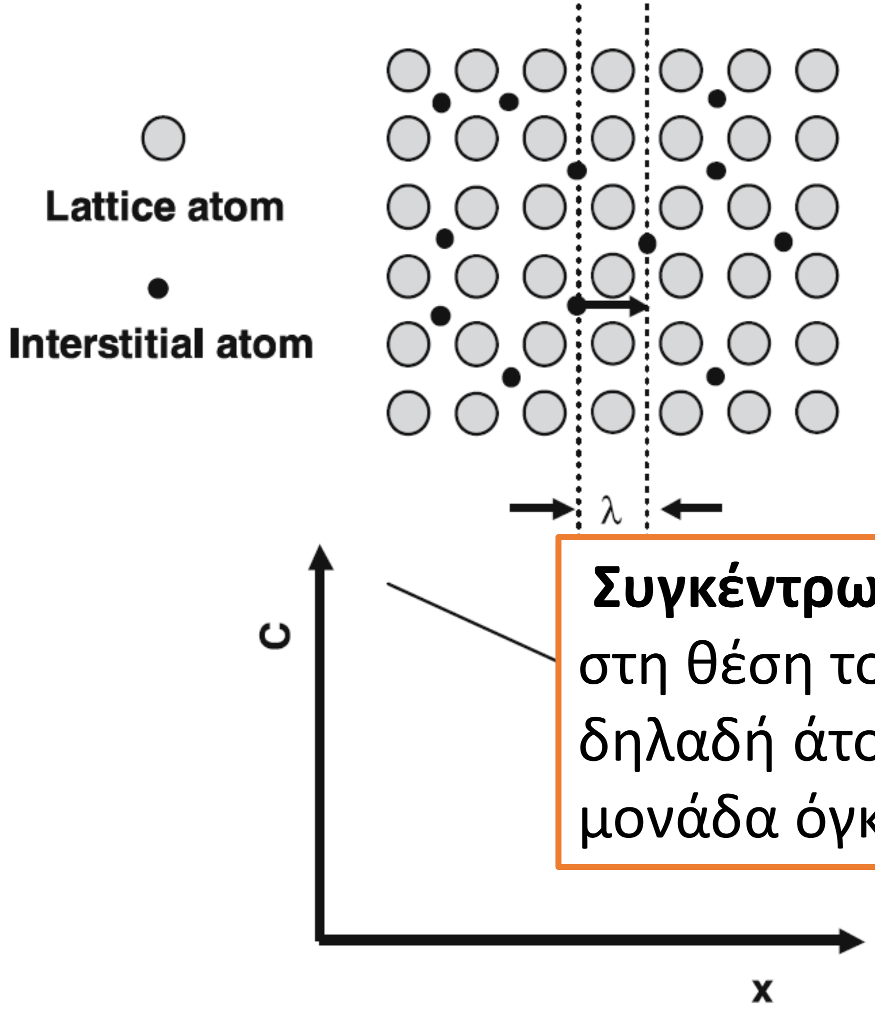
$$J = \Gamma n_1 - \Gamma n_2$$

$$C_1 = \frac{n_1}{\lambda}, \quad C_2 = \frac{n_2}{\lambda}.$$

$$C_1 - C_2 = -\lambda \frac{\partial C}{\partial x}.$$

$$J = -\lambda^2 \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \qquad D = \Gamma \lambda^2$$

Διάχυση (ο νόμος του Fick)



$$J = \Gamma n_1 - \Gamma n_2$$

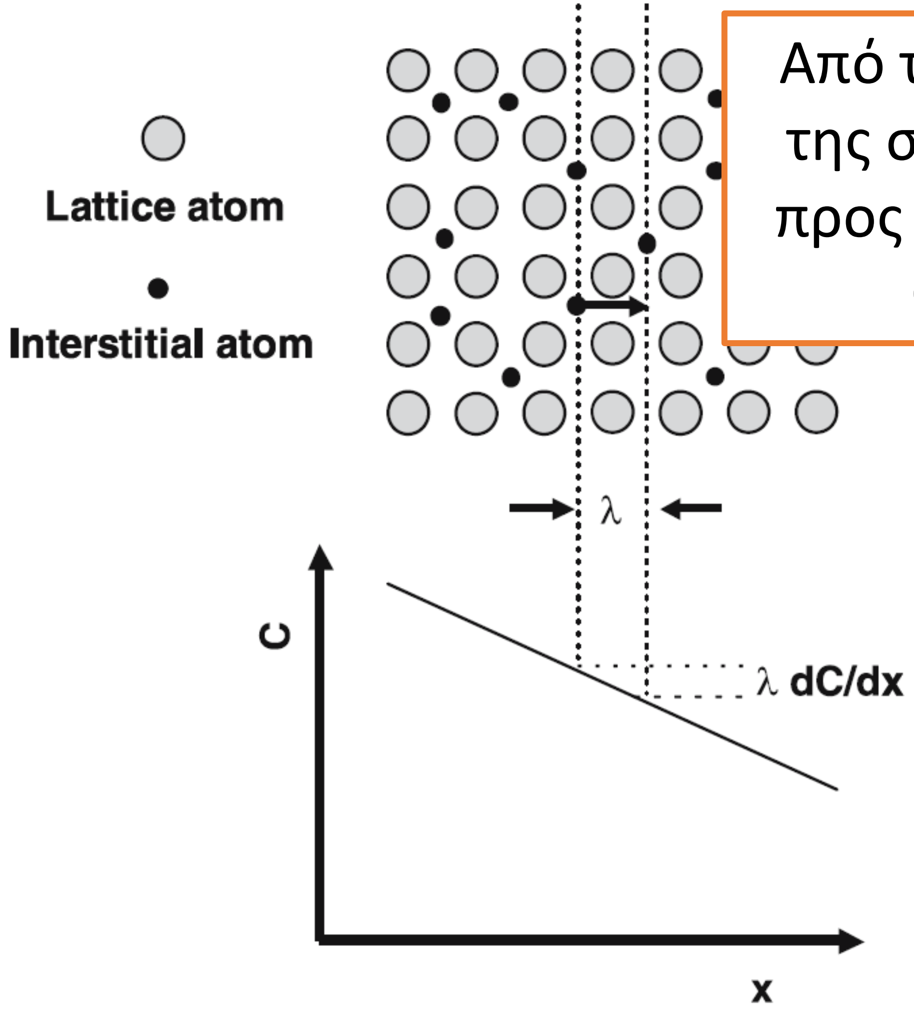
$$C_1 = \frac{n_1}{\lambda}, \quad C_2 = \frac{n_2}{\lambda}.$$

Συγκέντρωση ατόμων στη θέση του επιπέδου 2, δηλαδή άτομα ανά μονάδα όγκου [1/m^3]

$$C_1 - C_2 = -\lambda \frac{\partial C}{\partial x}.$$

$$J = -\lambda^2 \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \qquad D = \Gamma \lambda^2$$

Διάχυση (ο νόμος του Fick)



Από το ανάπτυγμα Taylor της συγκέντρωσης C_1 ως προς την συγκέντρωση C_2
$C_1 = C_2 - \lambda \, dC/dx$

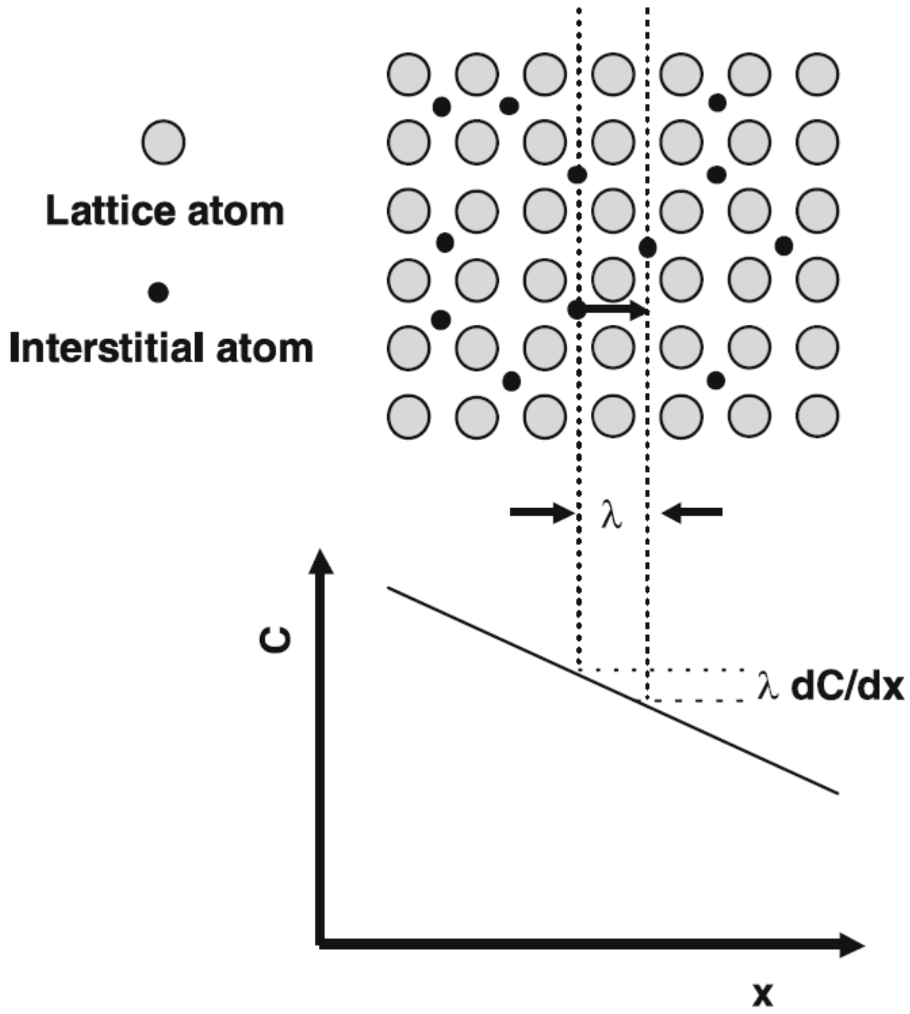
$$J = \Gamma n_1 - \Gamma n_2$$

$$C_1 = \frac{n_1}{\lambda}, \quad C_2 = \frac{n_2}{\lambda}.$$

$$C_1 - C_2 = -\lambda \frac{\partial C}{\partial x}.$$

$$J = -\lambda^2 \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \qquad D = \Gamma \lambda^2$$

Διάχυση (ο νόμος του Fick)



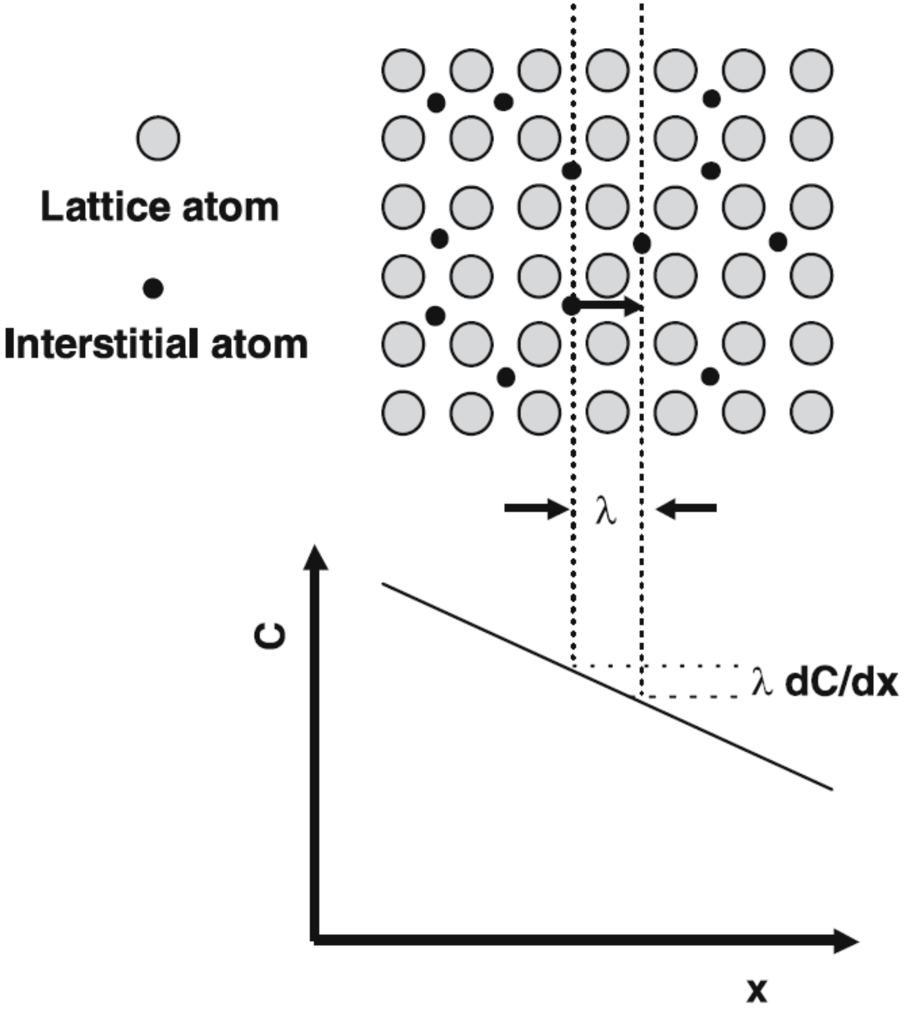
$$J = \Gamma n_1 - \Gamma n_2$$

$$C_1 = \frac{n_1}{\lambda}, \quad C_2 = \frac{n_2}{\lambda}.$$

$$C_1 - C_2 = -\lambda \frac{\partial C}{\partial x}.$$

$$J = -\lambda^2 \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \qquad D = \Gamma \lambda^2$$

Διάχυση (ο νόμος του Fick)

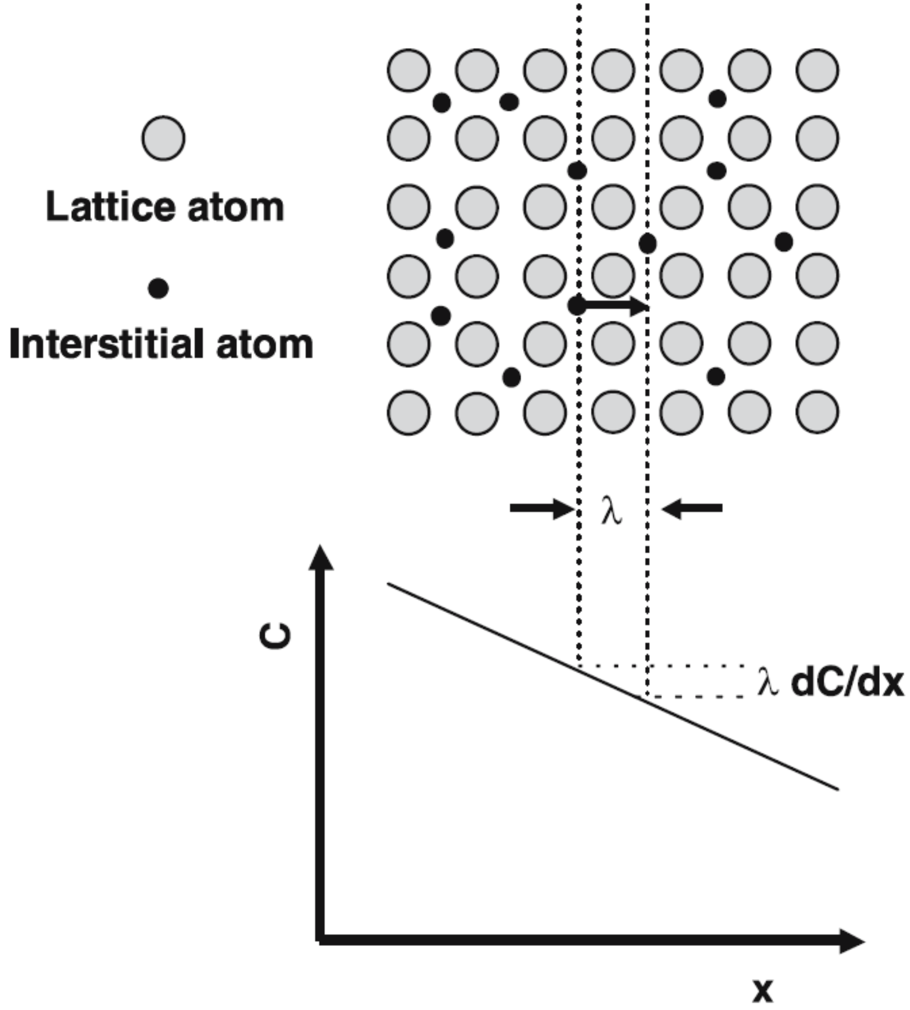


Συντελεστής διαχύσεως
$[m^2/s]$, όταν $<x>=0$ μπορεί να αποδειχθεί ότι $D=<x^2>/(2\tau)$ όπου $<x^2>$ η διασπορά της θέσης του ατόμου (από τυχαίο περιπατητή) μετά από χρόνο τ.

$$C_1 - C_2 = -\lambda \frac{\partial C}{\partial x} \, .$$

$$J = -\lambda^2 \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \qquad D = \Gamma \lambda^2$$

Διάχυση (ο νόμος του Fick)



Επομένως, εάν ο τυχαίος περιπατητής μας έκανε βήματα απόστασης λ κάθε φορά, τότε για $\langle x \rangle = 0$ έχουμε p=1/2 και επομένως

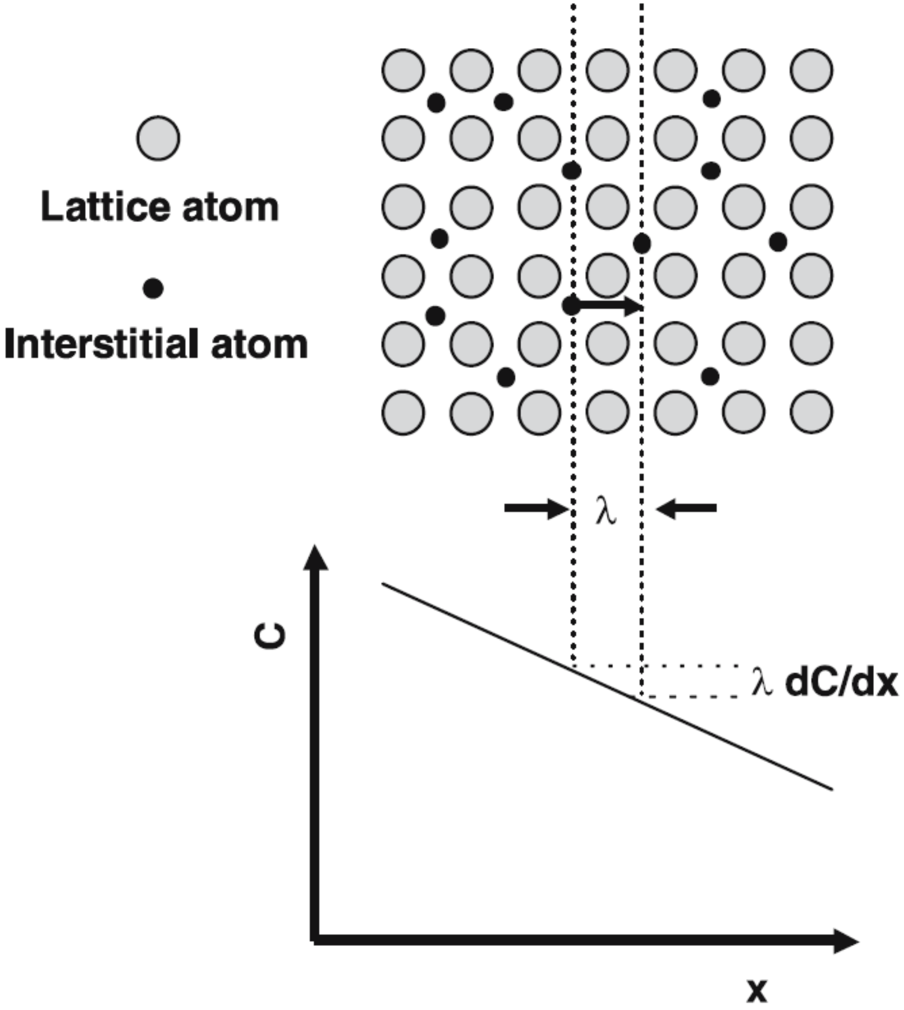
$$\langle (x(N) - \langle x(N) \rangle)^2 \rangle = \langle x(N)^2 \rangle = 4Np(1-p) = N$$

δηλαδή $\langle x^2 \rangle = N\lambda^2$ και από τη σχέση $D = \langle x^2 \rangle / (2\tau) = N\lambda^2/(2\tau)$ έχουμε $\Gamma = N/(2\tau)$.

$$C_1 - C_2 = -\lambda \frac{\quad}{\partial x}.$$

$$J = -\lambda^2 \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \qquad D = \Gamma \lambda^2$$

Διάχυση (ο νόμος του Fick)



Επομένως, εάν ο τυχαίος περιπατητής μας έκανε βήματα απόστασης λ κάθε φορά, τότε για $\langle x\rangle=0$ έχουμε p=1/2 και επομένως

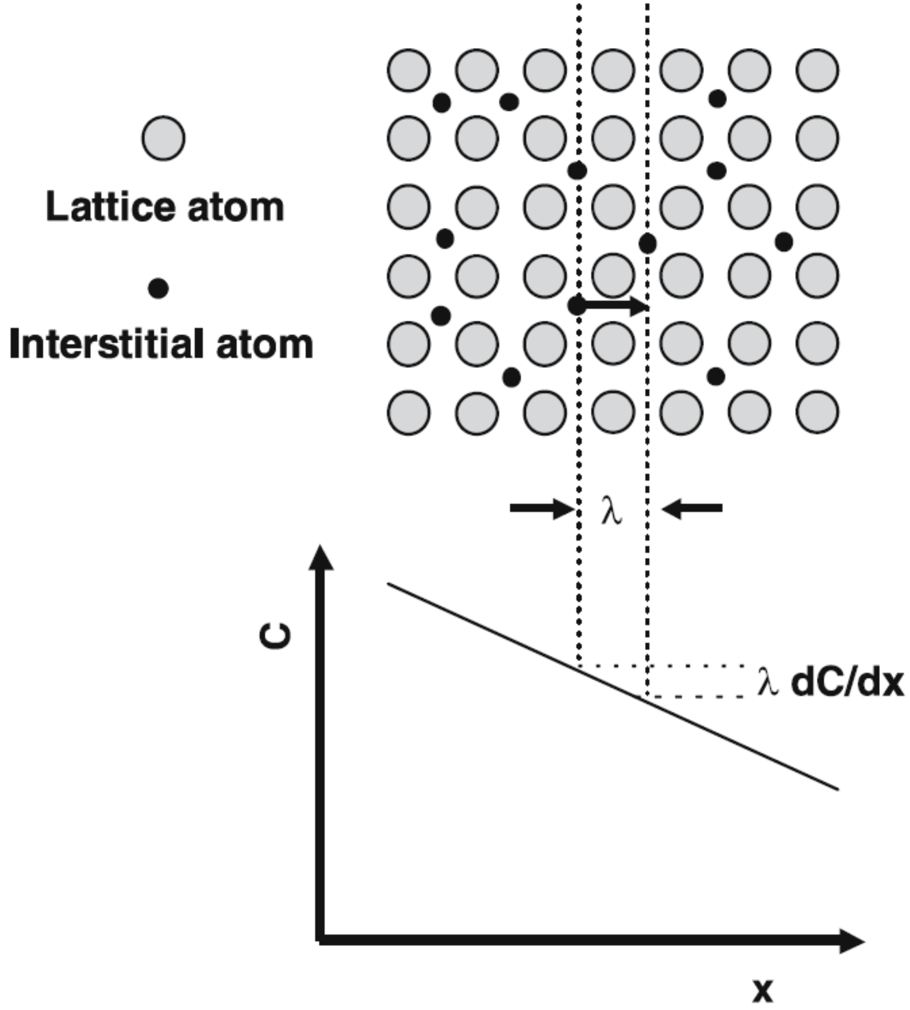
$$\langle (x(N) - \langle x(N)\rangle)^2\rangle = \langle x(N)^2\rangle = 4Np(1-p) = N$$

δηλαδή $\langle x^2\rangle = N\lambda^2$ και από τη σχέση $D=\langle x^2\rangle/(2\tau)$ έχουμε $\Gamma=N/(2\tau)$.

$$C_1 - C_2 = -\lambda \frac{\quad}{\partial x} \,.$$

$$J = -\lambda^2 \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \qquad D = \Gamma \lambda^2$$

Διάχυση (ο νόμος του Fick)



$$J = \Gamma n_1 - \Gamma n_2$$

$$C_1 = \frac{n_1}{\lambda}, \quad C_2 = \frac{n_2}{\lambda}.$$

$$C_1 - C_2 = -\lambda \frac{\partial C}{\partial x}.$$

$$J = -\lambda^2 \Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \qquad D = \Gamma \lambda^2$$

όπου *Γ=N/(2τ)*

Βιβλιογραφία

- Kontogiannis, I., & Toumpis, S. (2015). ELEMENTS OF PROBABILITY [Undergraduate textbook]. Kallipos, Open Academic Editions. http://hdl.handle.net/11419/2810
- Δαμιανού Χ., Χαραλαμπίδης Χ., Παπαδάτος Ν. (2010). Εισαγωγή στις Πιθανότητες και τη Στατιστική, ΕΚΔΟΣΕΙΣ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑ Μ. ΑΘΑΝΑΣΟΠΟΥΛΟΥ Σ. ΑΘΑΝΑΣΟΠΟΥΛΟΣ Ο.Ε
- Κοκολάκης Γ. (2016). Στοχαστικές Ανελίξεις – Βιντεομάθημα, ΣΕΜΦΕ, ΕΜΠ https://ocw.aoc.ntua.gr/courses/SEMFE101/
- Mehrer, H. (2007). Diffusion in Solids, Fundamentals, Methods, Materials, Diffusion-Controlled Processes, Springer Berlin, Heidelberg, https://doi.org/10.1007/978-3-540-71488-0