

# Reakciófrontok stabilitásának vizsgálata sztochasztikus szimulációval

Izsák Ferenc  
ELTE TTK Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai  
Tanszék

FRK szeminárium, BME

2012. február 28.

Munkatárs: Nagy Noémi, ELTE TTK Alkalmazott Analízis és  
Számításmatematikai Tanszék

# Megfigyelések - reakciófrontok terjedése

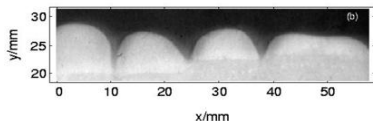
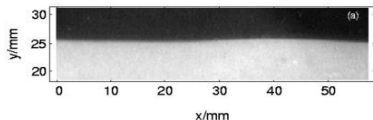
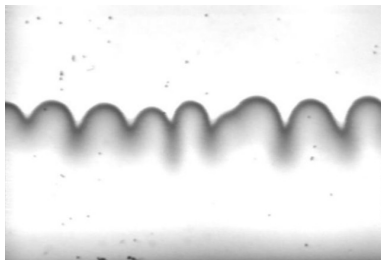
- ▶ Két konkrét reakcióban:

# Megfigyelések - reakciófrontok terjedése

- ▶ Két konkrét reakcióban:

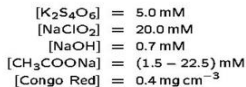
## Megfigyelések - reakciófrontok terjedése

- ▶ Két konkrét reakcióban:



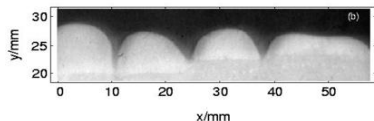
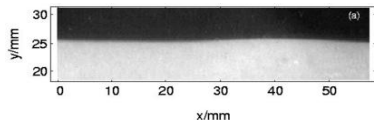
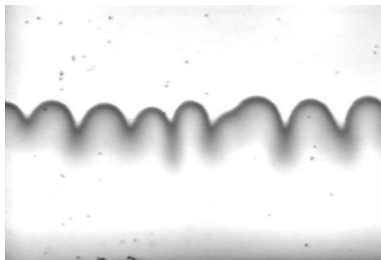
Images of fronts developed from planar initiation:  
(a)  $c_M = 6.0 \text{ mM}$  (20% binding of  $\text{H}^+$ ) at  $t = 2 \text{ h}$ ;  
(b)  $c_M = 21.0 \text{ mM}$  (70% binding of  $\text{H}^+$ ) at  $t = 12 \text{ h}$ .

The reactant concentrations:



## Megfigyelések - reakciófrontok terjedése

- ▶ Két konkrét reakcióban:



Images of fronts developed from planar initiation:  
(a)  $c_M = 6.0 \text{ mM}$  (20% binding of  $\text{H}^+$ ) at  $t = 2 \text{ h}$ ;  
(b)  $c_M = 21.0 \text{ mM}$  (70% binding of  $\text{H}^+$ ) at  $t = 12 \text{ h}$ .

The reactant concentrations:

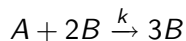
$[\text{K}_2\text{S}_4\text{O}_6] = 5.0 \text{ mM}$   
 $[\text{NaClO}_2] = 20.0 \text{ mM}$   
 $[\text{NaOH}] = 0.7 \text{ mM}$   
 $[\text{CH}_3\text{COONa}] = (1.5 - 22.5) \text{ mM}$   
 $[\text{Congo Red}] = 0.4 \text{ mg cm}^{-3}$

# RD rendszer

- ▶ A reakcióséma:

# RD rendszer

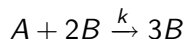
- ▶ A reakcióséma:



- ▶ Köbös autokatalízis.

# RD rendszer

- ▶ A reakcióséma:



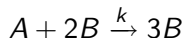
- ▶ Köbös autokatalízis.
- ▶ A RD - rendszer:

$$\begin{aligned}\frac{\partial a}{\partial t} &= D_A \nabla^2 a - kab^2, \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= D_B \nabla^2 b + kab^2,\end{aligned}\tag{1}$$



## RD rendszer

- ▶ A reakcióséma:



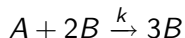
- ▶ Köbös autokatalízis.
- ▶ A RD - rendszer:

$$\begin{aligned}\frac{\partial a}{\partial t} &= D_A \nabla^2 a - kab^2, \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= D_B \nabla^2 b + kab^2,\end{aligned}\tag{1}$$

- ▶  $a$  és  $b$  változói:  $(t, x, y) \in (0, T) \times (0, X) \times (0, Y)$ ,

## RD rendszer

- ▶ A reakcióséma:



- ▶ Köbös autokatalízis.
- ▶ A RD - rendszer:

$$\begin{aligned}\frac{\partial a}{\partial t} &= D_A \nabla^2 a - kab^2, \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= D_B \nabla^2 b + kab^2,\end{aligned}\tag{1}$$

- ▶  $a$  és  $b$  változói:  $(t, x, y) \in (0, T) \times (0, X) \times (0, Y)$ ,
  - ▶  $D_A$  és  $D_B$ : diffúziós együtthatókat.

# Front stabilitásának vizsgálata - elméleti módszer

- ▶ PDE megoldása: egyenes front  $\rightarrow$  egyenes front

# Front stabilitásának vizsgálata - elméleti módszer

- ▶ PDE megoldása: egyenes front  $\rightarrow$  egyenes front
- ▶ front: utazó hullám megoldás  $\mathbb{R}$ -en

# Front stabilitásának vizsgálata - elméleti módszer

- ▶ PDE megoldása: egyenes front  $\rightarrow$  egyenes front
- ▶ front: utazó hullám megoldás  $\mathbb{R}$ -en
- ▶ utazó hullám megoldás sebességének becslése [Billingham, Needham '91], [Qi '09].

## Front stabilitásának vizsgálata - elméleti módszer

- ▶ PDE megoldása: egyenes front  $\rightarrow$  egyenes front
- ▶ front: utazó hullám megoldás  $\mathbb{R}$ -en
- ▶ utazó hullám megoldás sebességének becslése [Billingham, Needham '91], [Qi '09].
- ▶ Neumann-féle stabilitás-analízis: harmonikus perturbáció hatásának vizsgálata [Yang '02]:

# Front stabilitásának vizsgálata - elméleti módszer

- ▶ PDE megoldása: egyenes front  $\rightarrow$  egyenes front
- ▶ front: utazó hullám megoldás  $\mathbb{R}$ -en
- ▶ utazó hullám megoldás sebességének becslése [Billingham, Needham '91], [Qi '09].
- ▶ Neumann-féle stabilitás-analízis: harmonikus perturbáció hatásának vizsgálata [Yang '02]:
  - ▶ A sebességtől is függ, instabil lesz-e.

# Front stabilitásának vizsgálata - elméleti módszer

- ▶ PDE megoldása: egyenes front  $\rightarrow$  egyenes front
- ▶ front: utazó hullám megoldás  $\mathbb{R}$ -en
- ▶ utazó hullám megoldás sebességének becslése [Billingham, Needham '91], [Qi '09].
- ▶ Neumann-féle stabilitás-analízis: harmonikus perturbáció hatásának vizsgálata [Yang '02]:
  - ▶ A sebességtől is függ, instabil lesz-e.
  - ▶  $D \ll 1$  esetén lehet instabil.



# Front stabilitásának vizsgálata - elméleti módszer

- ▶ PDE megoldása: egyenes front  $\rightarrow$  egyenes front
- ▶ front: utazó hullám megoldás  $\mathbb{R}$ -en
- ▶ utazó hullám megoldás sebességének becslése [Billingham, Needham '91], [Qi '09].
- ▶ Neumann-féle stabilitás-analízis: harmonikus perturbáció hatásának vizsgálata [Yang '02]:
  - ▶ A sebességtől is függ, instabil lesz-e.
  - ▶  $D \ll 1$  esetén lehet instabil.
  - ▶ A becslések nem élesek.

## Valós paraméterek, mellékfeltételek

- ▶ Kísérlet egy jodát - arzénessav reakcióban [Horváth D. '94]:

## Valós paraméterek, mellékfeltételek

- ▶ Kísérlet egy jodát - arzénessav reakcióban [Horváth D. '94]:

$$D_A = \frac{D_B}{D} = 2 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, \quad k = 9 \cdot 10^3 \text{ M}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad Y = 4 \text{ cm},$$

## Valós paraméterek, mellékfeltételek

- ▶ Kísérlet egy jodát - arzénessav reakcióban [Horváth D. '94]:

$$D_A = \frac{D_B}{D} = 2 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, \quad k = 9 \cdot 10^3 \text{ M}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad Y = 4 \text{ cm},$$

vagyis a következő PDE rendszert kapjuk:

## Valós paraméterek, mellékfeltételek

- ▶ Kísérlet egy jodát - arzénessav reakcióban [Horváth D. '94]:

$$D_A = \frac{D_B}{D} = 2 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, \quad k = 9 \cdot 10^3 \text{ M}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad Y = 4 \text{ cm},$$

vagyis a következő PDE rendszert kapjuk:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} &= 2 \cdot 10^{-5} \nabla^2 a - 9 \cdot 10^3 \cdot ab^2, \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= D \cdot 2 \cdot 10^{-5} \nabla^2 b + 9 \cdot 10^3 \cdot ab^2. \end{aligned} \tag{2}$$

## Valós paraméterek, mellékfeltételek

- ▶ Kísérlet egy jodát - arzénessav reakcióban [Horváth D. '94]:

$$D_A = \frac{D_B}{D} = 2 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, \quad k = 9 \cdot 10^3 \text{ M}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad Y = 4 \text{ cm},$$

vagyis a következő PDE rendszert kapjuk:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} &= 2 \cdot 10^{-5} \nabla^2 a - 9 \cdot 10^3 \cdot ab^2, \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= D \cdot 2 \cdot 10^{-5} \nabla^2 b + 9 \cdot 10^3 \cdot ab^2. \end{aligned} \tag{2}$$

- ▶ Kezdetben  $x = x_0 \ll X$  helyen választják el a reagenseket:

## Valós paraméterek, mellékfeltételek

- ▶ Kísérlet egy jodát - arzénessav reakcióban [Horváth D. '94]:

$$D_A = \frac{D_B}{D} = 2 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, \quad k = 9 \cdot 10^3 \text{ M}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad Y = 4 \text{ cm},$$

vagyis a következő PDE rendszert kapjuk:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} &= 2 \cdot 10^{-5} \nabla^2 a - 9 \cdot 10^3 \cdot ab^2, \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= D \cdot 2 \cdot 10^{-5} \nabla^2 b + 9 \cdot 10^3 \cdot ab^2. \end{aligned} \quad (2)$$

- ▶ Kezdetben  $x = x_0 \ll X$  helyen választják el a reagenseket:

$$a(0, x, y) = \begin{cases} 0 \text{ M} & x \leq x_0 \\ 0.048 \cdot D \text{ M} & x > x_0, \end{cases} \quad b(0, x, y) = \begin{cases} 0.048 \text{ M} & x \leq x_0 \\ 0 \text{ M} & x > x_0. \end{cases} \quad (3)$$

# Valós paraméterek, mellékfeltételek

- ▶ Kísérlet egy jodát - arzénessav reakcióban [Horváth D. '94]:

$$D_A = \frac{D_B}{D} = 2 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, \quad k = 9 \cdot 10^3 \text{ M}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad Y = 4 \text{ cm},$$

vagyis a következő PDE rendszert kapjuk:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} &= 2 \cdot 10^{-5} \nabla^2 a - 9 \cdot 10^3 \cdot ab^2, \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= D \cdot 2 \cdot 10^{-5} \nabla^2 b + 9 \cdot 10^3 \cdot ab^2. \end{aligned} \quad (2)$$

- ▶ Kezdetben  $x = x_0 \ll X$  helyen választják el a reagenseket:

$$a(0, x, y) = \begin{cases} 0 \text{ M} & x \leq x_0 \\ 0.048 \cdot D \text{ M} & x > x_0, \end{cases} \quad b(0, x, y) = \begin{cases} 0.048 \text{ M} & x \leq x_0 \\ 0 \text{ M} & x > x_0. \end{cases} \quad (3)$$

A tartomány jobb és bal oldalán: fix koncentrációk, nulla



# Valós paraméterek, mellékfeltételek

- ▶ Kísérlet egy jodát - arzénessav reakcióban [Horváth D. '94]:

$$D_A = \frac{D_B}{D} = 2 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}, \quad k = 9 \cdot 10^3 \text{ M}^{-3} \text{ s}^{-1} \quad Y = 4 \text{ cm},$$

vagyis a következő PDE rendszert kapjuk:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} &= 2 \cdot 10^{-5} \nabla^2 a - 9 \cdot 10^3 \cdot ab^2, \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= D \cdot 2 \cdot 10^{-5} \nabla^2 b + 9 \cdot 10^3 \cdot ab^2. \end{aligned} \quad (2)$$

- ▶ Kezdetben  $x = x_0 \ll X$  helyen választják el a reagenseket:

$$a(0, x, y) = \begin{cases} 0 \text{ M} & x \leq x_0 \\ 0.048 \cdot D \text{ M} & x > x_0, \end{cases} \quad b(0, x, y) = \begin{cases} 0.048 \text{ M} & x \leq x_0 \\ 0 \text{ M} & x > x_0. \end{cases} \quad (3)$$

A tartomány jobb és bal oldalán: fix koncentrációk, nulla

## További paraméterek

- ▶ Térbeli diszkretizáció:  $L_y \times 100$  -as rács.

## További paraméterek

- ▶ Térbeli diszkretizáció:  $L_y \times 100$  -as rács.
  - ▶  $L_y$  elég hosszú, hogy a homogén peremfeltétel reális legyen.

## További paraméterek

- ▶ Térbeli diszkretizáció:  $L_y \times 100$  -as rács.
  - ▶  $L_y$  elég hosszú, hogy a homogén peremfeltétel reális legyen.
  - ▶  $L_y$  elég rövid, hogy a szimulációs idő rövid legyen.

## További paraméterek

- ▶ Térbeli diszkretizáció:  $L_y \times 100$  -as rács.
  - ▶  $L_y$  elég hosszú, hogy a homogén peremfeltétel reális legyen.
  - ▶  $L_y$  elég rövid, hogy a szimulációs idő rövid legyen.
  - ▶  $L_y$  függ  $D$  és  $T$  értékétől.

## További paraméterek

- ▶ Térbeli diszkretizáció:  $L_y \times 100$  -as rács.
  - ▶  $L_y$  elég hosszú, hogy a homogén peremfeltétel reális legyen.
  - ▶  $L_y$  elég rövid, hogy a szimulációs idő rövid legyen.
  - ▶  $L_y$  függ  $D$  és  $T$  értékétől.
- ▶ Első 5 oszlop: a rács „bal fele” (5. oszlop -  $x_0$ ), a többi a „jobb fele”.

## További paraméterek

- ▶ Térbeli diszkretizáció:  $L_y \times 100$  -as rács.
  - ▶  $L_y$  elég hosszú, hogy a homogén peremfeltétel reális legyen.
  - ▶  $L_y$  elég rövid, hogy a szimulációs idő rövid legyen.
  - ▶  $L_y$  függ  $D$  és  $T$  értékétől.
- ▶ Első 5 oszlop: a rács „bal fele” (5. oszlop -  $x_0$ ), a többi a „jobb fele”.
- ▶ Valós paraméterek

## További paraméterek

- ▶ Térbeli diszkretizáció:  $L_y \times 100$  -as rács.
  - ▶  $L_y$  elég hosszú, hogy a homogén peremfeltétel reális legyen.
  - ▶  $L_y$  elég rövid, hogy a szimulációs idő rövid legyen.
  - ▶  $L_y$  függ  $D$  és  $T$  értékétől.
- ▶ Első 5 oszlop: a rács „bal fele” (5. oszlop -  $x_0$ ), a többi a „jobb fele”.
- ▶ Valós paraméterek
  - ▶ rácshosszok:  $h_x = h_y = 0.04$  cm.



## További paraméterek

- ▶ Térbeli diszkretizáció:  $L_y \times 100$  -as rács.
  - ▶  $L_y$  elég hosszú, hogy a homogén peremfeltétel reális legyen.
  - ▶  $L_y$  elég rövid, hogy a szimulációs idő rövid legyen.
  - ▶  $L_y$  függ  $D$  és  $T$  értékétől.
- ▶ Első 5 oszlop: a rács „bal fele” (5. oszlop -  $x_0$ ), a többi a „jobb fele”.
- ▶ Valós paraméterek
  - ▶ rácshosszok:  $h_x = h_y = 0.04$  cm.
  - ▶ időlépés:  $\delta_t = 0.1$  s,  $T = 2.5$  h.

# Determinisztikus szimuláció

- ▶ Kezdeti feltételek:  $a(0, x, y) = 0.048$  és  $b(0, x, y) = 0.048$  a tartomány jobb ill. bal felében.

# Determinisztikus szimuláció

- ▶ Kezdeti feltételek:  $a(0, x, y) = 0.048$  és  $b(0, x, y) = 0.048$  a tartomány jobb ill. bal felében.
- ▶ Explicit Euler-módszer.

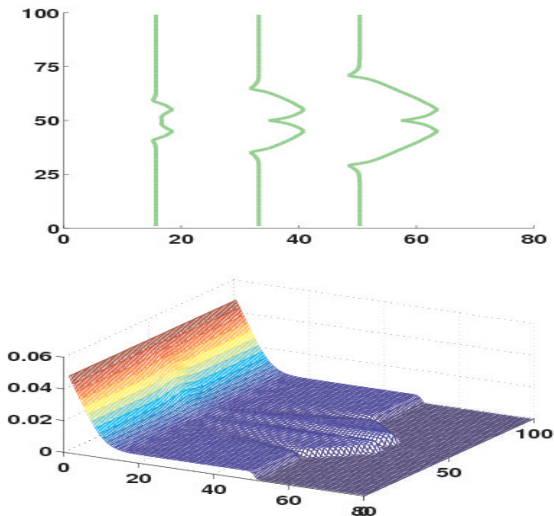
# Determinisztikus szimuláció

- ▶ Kezdeti feltételek:  $a(0, x, y) = 0.048$  és  $b(0, x, y) = 0.048$  a tartomány jobb ill. bal felében.
- ▶ Explicit Euler-módszer.
- ▶ Perturbáció: a 6. oszlop néhány középső tagjában is  $b(0, x, y) = 0.048$ .

## Determinisztikus szimuláció

- ▶ Kezdeti feltételek:  $a(0, x, y) = 0.048$  és  $b(0, x, y) = 0.048$  a tartomány jobb ill. bal felében.
- ▶ Explicit Euler-módszer.
- ▶ Perturbáció: a 6. oszlop néhány középső tagjában is  $b(0, x, y) = 0.048$ .
- ▶ Példa instabil reakciófrontra;  $D = 0.1$ .

# Példa instabil reakciófrontra



## Sztochasztikus szimuláció: alapelv

- ▶ A szimuláció diszkrét:  $a(t, x, y)$ ,  $b(t, x, y)$  az egyes részecskék száma  $t$ -ben.

## Sztochasztikus szimuláció: alapelv

- ▶ A szimuláció diszkrét:  $a(t, x, y)$ ,  $b(t, x, y)$  az egyes részecskék száma  $t$ -ben.
- ▶ Csak a diffúzió szimulációja sztochasztikus.



## Sztochasztikus szimuláció: alapelv

- ▶ A szimuláció diszkrét:  $a(t, x, y)$ ,  $b(t, x, y)$  az egyes részecskék száma  $t$ -ben.
- ▶ Csak a diffúzió szimulációja sztochasztikus.
- ▶ Nem az egyes részecskéket mozgatjuk, hanem időlépésenként többet; a [Vamos 03'] munka többdim. általánosítása:

# Sztochasztikus szimuláció: alapelv

- ▶ A szimuláció diszkrét:  $a(t, x, y)$ ,  $b(t, x, y)$  az egyes részecskék száma  $t$ -ben.
- ▶ Csak a diffúzió szimulációja sztochasztikus.
- ▶ Nem az egyes részecskéket mozgatjuk, hanem időlépésenként többet; a [Vamos 03'] munka többdim. általánosítása:
  - ▶ Adott idő alatt egy helyről elmozduló részecskék száma binomiális eloszlású, ezen belül az egyes irányokba mozdulók száma is. Ezek aránya  $r_A$  és  $r_B$ , ahol

$$D_A = \frac{r_A \delta_x^2}{4\delta_t}, \quad D_B = \frac{r_B \delta_x^2}{4\delta_t}, \quad (5)$$

# Sztocasztikus szimuláció: a szokásos megközelítés

- ▶ Gradient random walk (reakció-diffúziós egyenletekre: [Sherman '94]).

# Sztochasztikus szimuláció: a szokásos megközelítés

- ▶ Gradient random walk (reakció-diffúziós egyenletekre: [Sherman '94]).
  - ▶ A gradiensre vonatkozó egyenlet. (reakció-diffúziós egyenletekre: [Sherman '94]).

# Sztochasztikus szimuláció: a szokásos megközelítés

- ▶ Gradient random walk (reakció-diffúziós egyenletekre: [Sherman '94]).
  - ▶ A gradiensre vonatkozó egyenlet. (reakció-diffúziós egyenletekre: [Sherman '94]).
  - ▶ Diszkrét szimuláció arra.

# Sztochasztikus szimuláció: a szokásos megközelítés

- ▶ Gradient random walk (reakció-diffúziós egyenletekre: [Sherman '94]).
  - ▶ A gradientsre vonatkozó egyenlet. (reakció-diffúziós egyenletekre: [Sherman '94]).
  - ▶ Diszkrét szimuláció arra.
  - ▶ Eredeti mennyiség: integrálással.

# Sztochasztikus szimuláció: a szokásos megközelítés

- ▶ Gradient random walk (reakció-diffúziós egyenletekre: [Sherman '94]).
  - ▶ A gradiensre vonatkozó egyenlet. (reakció-diffúziós egyenletekre: [Sherman '94]).
  - ▶ Diszkrét szimuláció arra.
  - ▶ Eredeti mennyiség: integrálással.
- ▶ Indoklás: kevés részecske - kis számítási idő, de nagy szórás.

# Sztochasztikus szimuláció: a szokásos megközelítés

- ▶ Gradient random walk (reakció-diffúziós egyenletekre: [Sherman '94]).
  - ▶ A gradientsre vonatkozó egyenlet. (reakció-diffúziós egyenletekre: [Sherman '94]).
  - ▶ Diszkrét szimuláció arra.
  - ▶ Eredeti mennyiség: integrálással.
- ▶ Indoklás: kevés részecske - kis számítási idő, de nagy szórás.
- ▶ Indoklás: szórás csökkentése: integrálás.



# Sztochasztikus szimuláció: a szokásos megközelítés

- ▶ Gradient random walk (reakció-diffúziós egyenletekre: [Sherman '94]).
  - ▶ A gradientsre vonatkozó egyenlet. (reakció-diffúziós egyenletekre: [Sherman '94]).
  - ▶ Diszkrét szimuláció arra.
  - ▶ Eredeti mennyiség: integrálással.
- ▶ Indoklás: kevés részecske - kis számítási idő, de nagy szórás.
- ▶ Indoklás: szórás csökkentése: integrálás.
- ▶ Konvergenciaeredmények: [Lu '98].

## Az algoritmus - egy időlépés

- ▶ Kiszámítjuk a mozgó részecskék számát:

$$a_m(t, x, y) = \lceil r_A \cdot A(t, x, y) \rceil \quad b_m(t, x, y) = \lceil r_B \cdot B(t, x, y) \rceil$$

## Az algoritmus - egy időlépés

- ▶ Kiszámítjuk a mozgó részecskék számát:

$$a_m(t, x, y) = \lceil r_A \cdot A(t, x, y) \rceil \quad b_m(t, x, y) = \lceil r_B \cdot B(t, x, y) \rceil$$

- ▶ Binomiális eloszlású véletlenszámokat generálunk az alábbi paraméterekkel:  $(a_m(t, x, y), 0.5)$  és  $(b_m(t, x, y), 0.5)$ . Ezeket  $a_{mh}(t, x, y)$ , ill.  $b_{mh}(t, x, y)$  jelöli: vízszintesen mozog ennyi, a többi függőlegesen.

## Az algoritmus - egy időlépés

- ▶ Kiszámítjuk a mozgó részecskék számát:

$$a_m(t, x, y) = \lceil r_A \cdot A(t, x, y) \rceil \quad b_m(t, x, y) = \lceil r_B \cdot B(t, x, y) \rceil$$

- ▶ Binomiális eloszlású véletlenszámokat generálunk az alábbi paraméterekkel:  $(a_m(t, x, y), 0.5)$  és  $(b_m(t, x, y), 0.5)$ . Ezeket  $a_{mh}(t, x, y)$ , ill.  $b_{mh}(t, x, y)$  jelöli: vízszintesen mozog ennyi, a többi függőlegesen.
- ▶ Binomiális eloszlású véletlenszámokat generálunk az alábbi paraméterekkel:  $(a_{mh}(t, x, y), 0.5)$  és  $(b_{mh}(t, x, y), 0.5)$ . Ennyi részecske mozog a fentiekből jobbra, ill. balra.

## Az algoritmus - egy időlépés

- ▶ Kiszámítjuk a mozgó részecskék számát:

$$a_m(t, x, y) = \lceil r_A \cdot A(t, x, y) \rceil \quad b_m(t, x, y) = \lceil r_B \cdot B(t, x, y) \rceil$$

- ▶ Binomiális eloszlású véletlenszámokat generálunk az alábbi paraméterekkel:  $(a_m(t, x, y), 0.5)$  és  $(b_m(t, x, y), 0.5)$ . Ezeket  $a_{mh}(t, x, y)$ , ill.  $b_{mh}(t, x, y)$  jelöli: vízszintesen mozog ennyi, a többi függőlegesen.
- ▶ Binomiális eloszlású véletlenszámokat generálunk az alábbi paraméterekkel:  $(a_{mh}(t, x, y), 0.5)$  és  $(b_{mh}(t, x, y), 0.5)$ . Ennyi részecske mozog a fentiekből jobbra, ill. balra.
- ▶ Minden pontra kiszámítva ezt, összeszámoljuk, hány részecske lenne ez alapján a következő időlépésben  $(x, y)$ -ban:  
Ezeket  $a_s(t, x, y)$ , ill.  $b_s(t, x, y)$  jelöli.

## Az algoritmus - egy időlépés(folyt.)

- ▶ Kiszámítjuk a reakció során keletkezett mennyiségeket is; végrehajtjuk az időlépést:

## Az algoritmus - egy időlépés(folyt.)

- ▶ Kiszámítjuk a reakció során keletkezett mennyiségeket is; végrehajtjuk az időlépést:

$$\begin{aligned}a(t + \delta_t, x, y) &= a(t, x, y) - \delta_t \cdot 9 \cdot 10^{-10} \cdot a_{\delta_t}(t, x, y) b_{\delta_t}^2(t, x, y), \\b(t + \delta_t, x, y) &= b(t, x, y) + \delta_t \cdot 9 \cdot 10^{-10} \cdot a_{\delta_t}(t, x, y) b_{\delta_t}^2(t, x, y).\end{aligned}\tag{6}$$

- ▶ Részecskeszámok, paraméterek:

## Az algoritmus - egy időlépés(folyt.)

- ▶ Kiszámítjuk a reakció során keletkezett mennyiségeket is; végrehajtjuk az időlépést:

$$\begin{aligned}a(t + \delta_t, x, y) &= a(t, x, y) - \delta_t \cdot 9 \cdot 10^{-10} \cdot a_{\delta_t}(t, x, y) b_{\delta_t}^2(t, x, y), \\ b(t + \delta_t, x, y) &= b(t, x, y) + \delta_t \cdot 9 \cdot 10^{-10} \cdot a_{\delta_t}(t, x, y) b_{\delta_t}^2(t, x, y).\end{aligned}\tag{6}$$

- ▶ Részecskeszámok, paraméterek:
  - ▶  $1.5 \cdot 10^5$  részecske a nemnulla kezdeti feltételek esetén.



## Az algoritmus - egy időlépés(folyt.)

- ▶ Kiszámítjuk a reakció során keletkezett mennyiségeket is; végrehajtjuk az időlépést:

$$\begin{aligned}a(t + \delta_t, x, y) &= a(t, x, y) - \delta_t \cdot 9 \cdot 10^{-10} \cdot a_{\delta_t}(t, x, y) b_{\delta_t}^2(t, x, y), \\b(t + \delta_t, x, y) &= b(t, x, y) + \delta_t \cdot 9 \cdot 10^{-10} \cdot a_{\delta_t}(t, x, y) b_{\delta_t}^2(t, x, y).\end{aligned}\tag{6}$$

- ▶ Részecskeszámok, paraméterek:
  - ▶  $1.5 \cdot 10^5$  részecske a nemnulla kezdeti feltételek esetén.
  - ▶  $1 \text{ M} - \frac{1.5 \cdot 10^5}{0.048}$  részecske

## Az algoritmus - egy időlépés(folyt.)

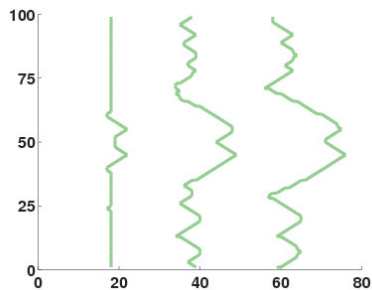
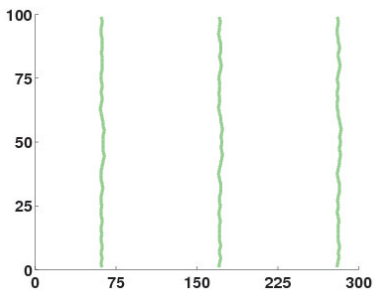
- ▶ Kiszámítjuk a reakció során keletkezett mennyiségeket is; végrehajtjuk az időlépést:

$$\begin{aligned}a(t + \delta_t, x, y) &= a(t, x, y) - \delta_t \cdot 9 \cdot 10^{-10} \cdot a_{\delta_t}(t, x, y) b_{\delta_t}^2(t, x, y), \\ b(t + \delta_t, x, y) &= b(t, x, y) + \delta_t \cdot 9 \cdot 10^{-10} \cdot a_{\delta_t}(t, x, y) b_{\delta_t}^2(t, x, y).\end{aligned}\tag{6}$$

- ▶ Részecskeszámok, paraméterek:
  - ▶  $1.5 \cdot 10^5$  részecske a nemnulla kezdeti feltételek esetén.
  - ▶  $1 \text{ M} - \frac{1.5 \cdot 10^5}{0.048}$  részecske
  - ▶ Innen kaphatók a (6) séma paraméterei.

## Egy szimuláció a sztochasztikus esetben

- ▶ Stabil és instabil reakciófrontok a sztochasztikus esetben: szintvonalak  $D = 0.25$  (bal oldal) és  $D = 0.1$  (jobb oldal) esetén 15000, 45000 és 75000 lépés után.



# Instabilitás

- ▶ Ugyanazt a rögzített perturbációt alkalmaztuk:

# Instabilitás

- ▶ Ugyanazt a rögzített perturbációt alkalmaztuk:  
a 6. oszlop középső 11 cellájában is legyen  
 $b(0, x, y) = 1.5 \cdot 10^5$ .
- ▶ Reakciófront helyzete

# Instabilitás

- ▶ Ugyanazt a rögzített perturbációt alkalmaztuk:  
a 6. oszlop középső 11 cellájában is legyen  
 $b(0, x, y) = 1.5 \cdot 10^5$ .
- ▶ Reakciófront helyzete
  - ▶ sztochasztikus eset:  $D \cdot 0.75 \cdot 10^5$  értékhez tartozó szintvonal,  
x komponenseinek szórása

# Instabilitás

- ▶ Ugyanazt a rögzített perturbációt alkalmaztuk:  
a 6. oszlop középső 11 cellájában is legyen  
 $b(0, x, y) = 1.5 \cdot 10^5$ .
- ▶ Reakciófront helyzete
  - ▶ sztochasztikus eset:  $D \cdot 0.75 \cdot 10^5$  értékhez tartozó szintvonal,  
x komponenseinek szórása
  - ▶ determinisztikus eset:  $D \cdot 0.5 \cdot 0.048$  értékhez tartozó  
szintvonal.

# Instabilitás

- ▶ Ugyanazt a rögzített perturbációt alkalmaztuk:  
a 6. oszlop középső 11 cellájában is legyen  
 $b(0, x, y) = 1.5 \cdot 10^5$ .
- ▶ Reakciófront helyzete
  - ▶ sztochasztikus eset:  $D \cdot 0.75 \cdot 10^5$  értékhez tartozó szintvonal,  
x komponenseinek szórása
  - ▶ determinisztikus eset:  $D \cdot 0.5 \cdot 0.048$  értékhez tartozó  
szintvonal.
- ▶ Reakciófront helyzetének szórása: az egyes x komponensek  
szórása.

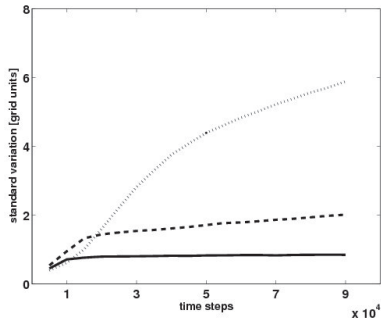
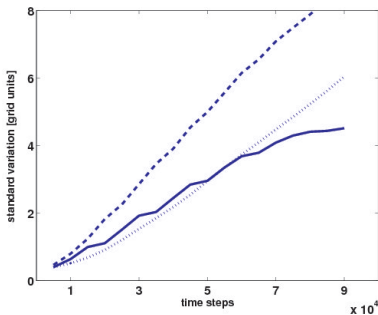


## Instabilitás - szimulációs eredmények

- ▶ Balra: determinisztikus, jobbra: sztochasztikus szimulációk.

# Instabilitás - szimulációs eredmények

- ▶ Balra: determinisztikus, jobbra: sztochasztikus szimulációk.



ábra: A reakciófront  $x$  irányú pozíciójának szórása különböző  $D$  értékekre:  $D = 0.1$  (pontosított vonal),  $0.17$  (szaggatott vonal) és  $0.25$  (folytonos vonal) 6 futtatásból átlagolva.

## Instabilitás - különböző perturbációk

- ▶ A hatodik oszlop celláinak egy részét állítjuk be olyanra, amilyen a kezdeti feltétel a bal oldalon:

## Instabilitás - különböző perturbációk

- ▶ A hatodik oszlop celláinak egy részét állítjuk be olyanra, amilyen a kezdeti feltétel a bal oldalon:
  - ▶  $P_0$ : nincs perturbáció

## Instabilitás - különböző perturbációk

- ▶ A hatodik oszlop celláinak egy részét állítjuk be olyanra, amilyen a kezdeti feltétel a bal oldalon:
  - ▶  $P0$ : nincs perturbáció
  - ▶  $P1$ : középső 11 cella

## Instabilitás - különböző perturbációk

- ▶ A hatodik oszlop celláinak egy részét állítjuk be olyanra, amilyen a kezdeti feltétel a bal oldalon:
  - ▶  $P0$ : nincs perturbáció
  - ▶  $P1$ : középső 11 cella
  - ▶  $P2$ : középső 27 cella

## Instabilitás - különböző perturbációk

- ▶ A hatodik oszlop celláinak egy részét állítjuk be olyanra, amilyen a kezdeti feltétel a bal oldalon:
  - ▶  $P_0$ : nincs perturbáció
  - ▶  $P_1$ : középső 11 cella
  - ▶  $P_2$ : középső 27 cella
  - ▶  $P_3$ : a 10-20 és a 43-53 cellák

## Instabilitás - különböző perturbációk

- ▶ A hatodik oszlop celláinak egy részét állítjuk be olyanra, amilyen a kezdeti feltétel a bal oldalon:
  - ▶  $P_0$ : nincs perturbáció
  - ▶  $P_1$ : középső 11 cella
  - ▶  $P_2$ : középső 27 cella
  - ▶  $P_3$ : a 10-20 és a 43-53 cellák
  - ▶  $P_4$ : középső 45 cella



# Instabilitás - szimulációs eredmények I.

- ▶ Összehasonlítás különböző  $D$  értékekre; minden esetben  $P1$ -et alkalmazva;  $N_{\delta_t} = 1000$  lépésszám.

| $N_{\delta_t}$ | diffúziós ráta ( $D$ ) & szimulációs módszer |      |      |      |      |      |      |      |      |      |      |      |
|----------------|----------------------------------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
|                | 0.05                                         |      | 0.1  |      | 0.15 |      | 0.2  |      | 0.25 |      | 0.3  |      |
|                | det.                                         | szt. | det. | szt. | det. | szt. | det. | szt. | det. | szt. | det. | szt. |
| 15             | 0.42                                         | 0.55 | 0.68 | 1.01 | 1.20 | 1.50 | 1.23 | 1.07 | 1.00 | 0.77 | 0.34 | 0.   |
| 30             | 0.49                                         | 0.97 | 1.53 | 2.82 | 2.80 | 2.04 | 2.67 | 1.24 | 1.92 | 0.80 | 0.76 | 0.   |
| 45             | 0.57                                         | 1.72 | 2.54 | 4.08 | 4.43 | 2.22 | 4.05 | 1.30 | 2.84 | 0.82 | 1.11 | 0.   |
| 60             | 0.70                                         | 2.72 | 3.73 | 4.83 | 6.20 | 2.36 | 5.39 | 1.35 | 3.68 | 0.84 | 1.51 | 0.   |
| 75             | 0.82                                         | 3.78 | 4.85 | 5.37 | 7.66 | 2.51 | 6.44 | 1.39 | 4.30 | 0.84 | 1.91 | 0.   |
| 90             | 0.99                                         | 4.96 | 6.04 | 5.83 | 9.06 | 2.67 | 6.92 | 1.41 | 4.71 | 0.85 | 2.20 | 0.   |

## Instabilitás - szimulációs eredmények II:

- Összehasonlítás különböző perturbációkra  $D = 0.17$  esetén.

| $N_{\delta_t}$ | perturbáció & szimulációs módszer |      |      |      |      |      |      |      |      |      |
|----------------|-----------------------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
|                | P0                                |      | P1   |      | P2   |      | P3   |      | P4   |      |
|                | det.                              | szt. | det. | szt. | det. | szt. | det. | szt. | det. | szt. |
| 15000          | 0                                 | 0.80 | 1.24 | 1.33 | 1.23 | 1.28 | 1.56 | 1.54 | 1.07 | 1.22 |
| 30000          | 0                                 | 1.09 | 2.86 | 1.54 | 2.83 | 1.49 | 3.15 | 1.84 | 2.53 | 1.47 |
| 45000          | 0                                 | 1.20 | 4.54 | 1.65 | 4.44 | 1.62 | 4.15 | 1.97 | 3.94 | 1.60 |
| 60000          | 0                                 | 1.28 | 6.15 | 1.79 | 5.87 | 1.74 | 4.22 | 2.08 | 5.02 | 1.72 |
| 75000          | 0                                 | 1.35 | 7.49 | 1.89 | 6.87 | 1.88 | 4.21 | 2.16 | 5.39 | 1.80 |
| 90000          | 0                                 | 1.42 | 8.60 | 2.01 | 7.33 | 2.02 | 4.20 | 2.21 | 5.41 | 1.86 |

## Instabilitás - szimulációs eredmények III:

- ▶ Monte Carlo - hiba, azaz mennyire megbízható egy szimulációs eredmény?

## Instabilitás - szimulációs eredmények III:

- ▶ Monte Carlo - hiba, azaz mennyire megbízható egy szimulációs eredmény?
- ▶ A front pozíciójának relatív szórása 90000 időlépés után (%) különböző  $y$  értékekre.

| $y$ | diffúziós ráta ( $D$ ) & perturbáció |          |          |          |          |          |          |      |
|-----|--------------------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|------|
|     | 0.05, P1                             | 0.10, P1 | 0.15, P1 | 0.17, P0 | 0.17, P2 | 0.17, P3 | 0.17, P4 | 0.20 |
| 10  | 2.10                                 | 3.23     | 1.03     | 0.73     | 0.43     | 0.81     | 0.25     | 0.3  |
| 30  | 0.34                                 | 2.89     | 1.83     | 0.46     | 0.30     | 0.08     | 0.52     | 0.0  |
| 50  | 0.40                                 | 0.35     | 0.21     | 0.85     | 0.48     | 0.36     | 0.90     | 0.3  |
| 70  | 1.45                                 | 0.75     | 1.18     | 1.29     | 0.20     | 0.24     | 0.12     | 0.0  |
| 90  | 1.24                                 | 2.97     | 1.06     | 0.97     | 1.07     | 0.54     | 0.18     | 0.3  |

## Számítási tapasztalatok:

- ▶ Nem annyira instabil - nem is szabad exponenciálisan növekednie.

## Számítási tapasztalatok:

- ▶ Nem annyira instabil - nem is szabad exponenciálisan növekednie.
- ▶ Az instabilitás mértéke alig függ a perturbációtól.

## Számítási tapasztalatok:

- ▶ Nem annyira instabil - nem is szabad exponenciálisan növekednie.
- ▶ Az instabilitás mértéke alig függ a perturbációtól.
- ▶ Sebesség: képes  $3 \cdot 10^9 = 1.5 \times 10^5 \times 100 \times 200$  részecskét kezelni 90000 lépésen át.