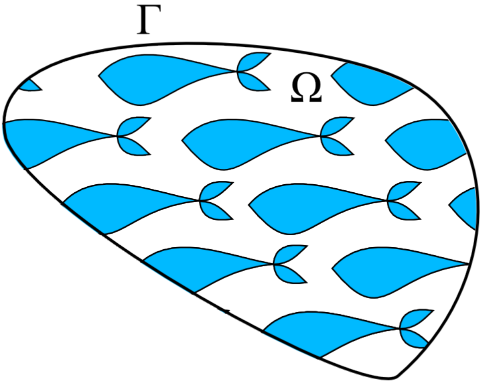
Random Walk

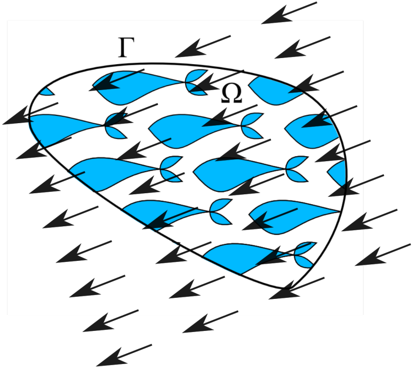
Jakub Jeřábek

28. března 2022

Euler's description



Euler's description



Continuity equation

for concentration

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega} c\,\mathrm{d}\Omega = \int_{\Gamma} cv\mathbf{n}\,\mathrm{d}\Gamma$$

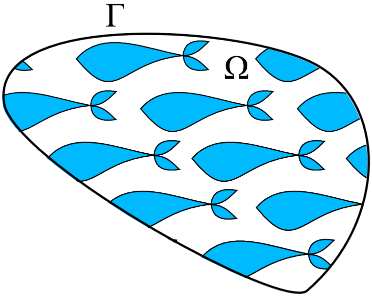
Gauss's theorem

$$\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}t} = \mathrm{div}\, cv$$

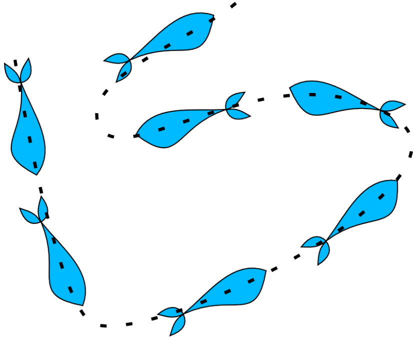
in local form

Euler and Lagrange description of a motion in continuum

Euler's description



Lagrange's description



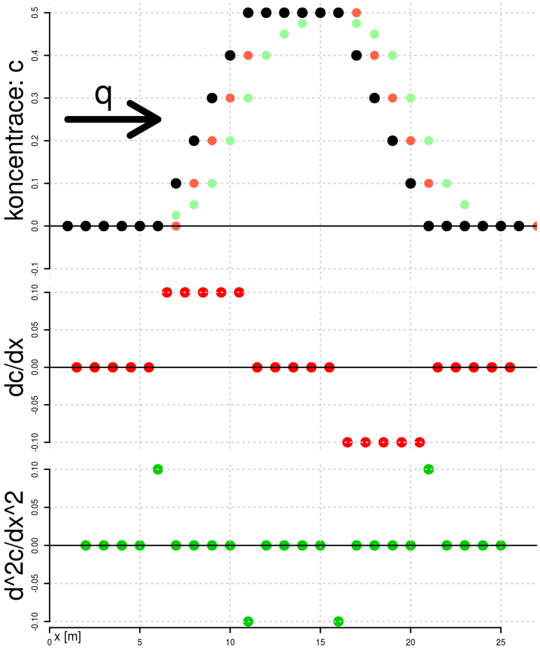
Advekčně disperzní rovnice

$$\frac{\partial \theta c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\theta D \frac{\partial c}{\partial x}\right) - \frac{\partial q c}{\partial x} + R$$

Disperzní koeficient (hydromechanická disperze) D $[L^2.t^{-1}]$:

$$\theta D = D_L|q| + \theta D_w \tau_w$$

c - koncentrace $[mmol, mg/l, ...]$; D_L - mechanická disperze (podélná) $[L]$; D_w - molekulární difuze $[L^2.t^{-1}]$;q - objemoví tok $[L.t^{-1}]$; τ_w - tortuozita $[-]$



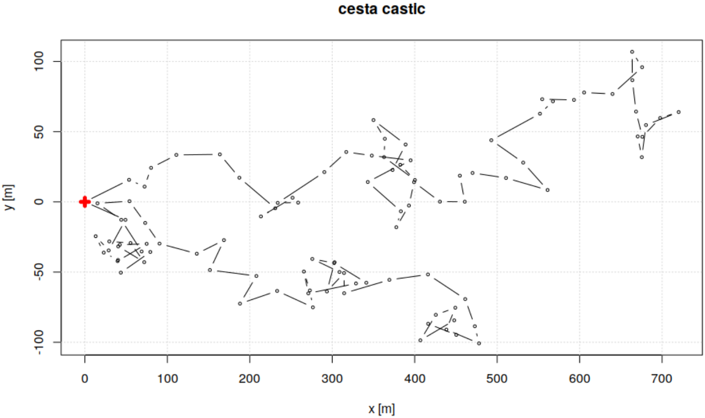
$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - q\frac{\partial c}{\partial x}$$

$$-q\frac{\partial c}{\partial x}$$

$$D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

Random walk

- use when numerical diffusion occurs
- for tracking of particles trajectory
- changing coordinates (steps) of discrete count of particles



How does it work?

- particles travel through a space
- each step has a constant part of length A
- and a random part of length B

Step length probability

$$
\begin{array}{ll}
p(x) = 0 & \text{pro } x < (A - B) \\
p(x) = 1/2B & \text{pro } (A - B) < x < (A + B) \\
p(x) = 0 & \text{pro } x > (A + B)
\end{array}
$$

This leads to s step with mean size m of
$m = A$
and variation σ^2
$\sigma^2 = B^2/3$

Probability of particle occurrence in a given distance has a statistical distribution

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi S^2}} \exp\left(-\frac{(x-M)^2}{2S^2}\right)$$

$$M = Nm = NA$$

$$S^2 = N\sigma^2 = NB^2/3$$

where N is a particle steps count.

Probability of particle occurrence in a given distance has a statistical distribution

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi S^2}} \exp\left(-\frac{(x-M)^2}{2S^2}\right) \tag{1}$$

$$M = Nm = NA$$

$$S^2 = N\sigma^2 = NB^2/3$$

where N is a particle steps count.

Analytical solution of advection-dispersion equation

$$c/c_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x-Vt)^2}{4Dt}\right) \tag{2}$$

$$M = Vt$$

$$S^2 = 2Dt$$

where V is the velocity and D is the dispersion coefficient.

Random walk

Constant and random part of each step can be expressed from equations 1 and 2

$$NA = Vt -> \; A = Vt/N[L]$$

$$NB^2/3 = 2Dt -> \; B = \sqrt{(}6DA/V) \; [L]$$

Each step in the Random walk procedure has a deterministic step of length A (which represents advection) and random step of maximum size B (which represents diffusion).

Random walk - the procedure

Each next step of particle can be in **1D** calculated as

$$x_{i+1} = x_i + A + 2[rand() - 0.5]B$$

Each next step of particle can be in **2D** calculated as

$$x_{i+1} = x_i + A + 2[rand() - 0.5]B_l$$

$$y_{i+1} = y_i + 2[rand() - 0.5]B_t$$

where $B_l = \sqrt{(}6D_lA/V)$ a $B_t = \sqrt{(}6D_tA/V)$

Formulas for assignment:
particle position:

$$x_{i+1} = x_i + A + 2[rand() - 0.5]B_l$$

$$y_{i+1} = y_i + 2[rand() - 0.5]B_t$$

Constant and random step size:

$$A = Vdt$$

$$B_l = \sqrt(6D_l A/V), \ where \ D_l = a_l V$$

$$B_t = \sqrt(6D_t A/V), \ where \ D_t = 0.2D_l$$

Water flow in the aquifer: Darcy's law: $q = K\nabla H$
Mean porous flow velocity: $V = q/n$, where n stands for porosity

Úkol

S využitím MS Excel sestavte model náhodné procházky a simulujte 1D postup **1000** částic plně nasyceným porézním prostředím po dobu **3500** dní, délku časového kroku nastavte na **50 dní**. Prostředí je izotropní s nasycenou hydraulickou vodivostí **10 m/d**, pórovitostí **48 %** a podélnou disperzivitou **20 m**. Uvažujte příčnou disperzivitu **5 krát** menší než podélnou. Rychlost proudění stanovte podle dat z dvou piezometrů, které jsou od sebe vzdáleny **2000 m**, v piezometru 1 se hladina podzemní vody nachází na kótě **350 mnm** , v piezometru 2 na kótě **310 mnm**. Využijte Darcyho zákona a spočítejte střední pórovou rychlost. Geografická pozice zdroje kontaminantu je: $x0 = 0m$.

Dle vztahu z „teorie“ spočítejte hodnotu střední délky kroku vlivem advekce (A) a hodnotu maximální deviace v podélném směru (B_l). Spočítejte pozice jednotlivých částic v jednotlivých časech. Pro náhodný postup částic využijte funkci náhodného čísla (NÁHČÍSLO()/RAND()).

Vyneste histogram množství částic a koncentrace v čase 750 dnů a 3500 dnů. Užijte šířku intervalů 10 metrů. Na vynesení histogramu použijte funkci `FREQUENCY` a `Array formula`.

Vzorec na výpočet koncentrace. Jedná částice představuje 0.5 mmol. Výslednou koncentraci ukažte v mmol/l.

$$C = (pocet\ cistic\ v\ mmol)/(interval\ histogramu) * porovitost$$

Úkol nepovinný

S využitím MS Excel sestavte model náhodné procházky a simulujte 2D postup **10** částic plně nasyceným porézním prostředím po dobu **10000** dní, délku časového kroku nastavte na max. **20 dní**. Prostředí je izotropní s nasycenou hydraulickou vodivostí **140 cm/d**, pórovitostí **45 %** a podélnou disperzivitou **25 m**. Uvažujte příčnou disperzivitu **5 krát** menší než podélnou. Rychlost proudění stanovte podle dat z dvou piezometrů, které jsou od sebe vzdáleny **1000 m**, v piezometru 1 se hladina podzemní vody nachází na kótě **153 mnm** , v piezometru 2 na kótě **111 mnm**. Využijte Darcyho zákona a spočítejte střední pórovou rychlost. Geografická pozice zdroje kontaminantu je: $x0 = 100m$; $y0 = 1000m$.

Dle vztahu z „teorie“ spočítejte hodnotu střední délky kroku vlivem advekce (A) a hodnotu maximální deviace v podélném směru (B). Spočítejte pozice jednotlivých částic v jednotlivých časech. Pro náhodný postup částic využijte funkci náhodného čísla (NÁHČÍSLO()/RAND()). Pozice částic vyneste v grafu.

Assignment

Example of result (due to the randomness the results is always different)