

Моделирование физических процессов и явлений (МРР)

Проекты для самостоятельной работы

1 Неравновесная агрегация, фрактальные кластеры

Существуют разнообразные физические процессы, основная черта которых — неравновесная агрегация. Примеры: образование частиц сажи, рост осадков при электрическом осаждении и т. п. Во всех случаях происходит необратимое прилипание частиц к растущему агрегату из-за сильного смещения равновесия в сторону твердой фазы (рост правильных ограниченных кристаллов происходит в равновесных условиях, когда возможно как прилипание частиц, так и их обратный переход в раствор). Примеры из других областей — «вязкие пальцы» при вытеснении вязкой жидкости менее вязкой в пористой среде (например, нефти — водой или газом внутри пласта), а также электрический пробой.

Простейший случай — агрегация, ограниченная диффузией (Diffusion Limited Aggregation, DLA). Возьмем регулярную сетку на плоскости, например, квадратную. В центр поместим затравочную частицу. Затем с достаточно большого расстояния будем выпускать по одной новые частицы. Далее частица блуждает по сетке, делая шаги в одном из четырех доступных направлений с равной вероятностью. Если частица оказывается по соседству с затравкой, она прилипает. Данный узел объявляется занятым, выпускаем следующую частицу, которая может прилипнуть к одному из занятых узлов.

Через некоторое время вырастает разветвленный агрегат, обладающий интересными свойствами. В частности, он является *фракталом* — его размерность выражается дробным числом, меньшим размерности пространства. Фрактальные объекты не редки в природе. В качестве примеров можно назвать кроны деревьев, кровеносную систему, береговые линии и многое другое. В данной задаче предлагается на простых примерах исследовать основные свойства неравновесной агрегации и получающихся фрактальных кластеров.

2 Электрический пробой

Электрический пробой – еще один яркий пример сильно неравновесных физических процессов. Под явлением электрического пробоя обычно понимают внезапную утерю диэлектриком (твердым, жидким или газообразным) своих изолирующих свойств под действием сильного электрического поля. В результате пробоя часть диэлектрика как правило разрушается. Феерическое зрелище представляет собой пробой очень длинных воздушных промежутков – молния.

Пробой – пример сложного физического явления, включающего в себя несколько стадий, причем на каждой протекают свои физические процессы – электрические, кинетические, квантовомеханические, гидродинамические. Наиболее важной является стадия формирования разряда, во время которой между двумя электродами формируется сложная структура проводящих каналов, напоминающая дерево. Возможно, вам приходилось видеть так называемые фигуры Лихтенберга – картины электрических деревьев при пробое газа вдоль поверхности твердого тела.

Рост электрического дерева определяется в основном напряженностью электрического поля на его кончиках. Совсем недавно было показано, что формирование электрических деревьев можно смоделировать, используя простой алгоритм. В модели вероятность роста кончиков проводящей структуры считается функцией локального электрического поля. На каждом шаге роста к электрическому дереву могут добавляться одна или несколько новых проводящих веточек. Вам предлагается смоделировать рост проводящих структур при электрическом пробое и исследовать их характеристики – форму, фрактальную размерность и др.

3 Молекулярная динамика

Метод молекулярной динамики (МД) рассматривает поведение вещества на микроуровне — мы наблюдаем за движением отдельных молекул. При этом мы хотим понять поведение сложной многочастичной системы. Ясно, что реальные тела содержат слишком много молекул, чтобы их можно было смоделировать. Однако, применение метода МД к «небольшим» системам, состоящих из нескольких сотен или тысяч частиц много дает для понимания наблюдаемых свойств газов, жидкостей и твердых тел. Кроме того, малые системы имеют свои особенности, изучение которых очень интересно.

Несмотря на то, что микрочастицы (атомы и молекулы) — кванто-

вые объекты, в некоторых практически интересных случаях возможно рассматривать их классически. Тогда влияние молекул друг на друга описывается *потенциалом взаимодействия* U . Далее движение частиц описывается вторым законом Ньютона.

После того, как рассчитаны траектории всех частиц, можно рассмотреть различные характеристики системы многих частиц и попытаться понять ее поведение. В этой задаче предлагается с помощью метода МД исследовать свойства вещества, получить уравнение состояния для неидеального газа, рассмотреть фазовые переходы в малых кластерах.

4 Решеточные газы, решеточное уравнение Больцмана

В методе молекулярной динамики изучается поведение вещества на уровне отдельных молекул (см. часть 3). Понятно, что описать таким способом макроскопические явления невозможно, так как число молекул даже в небольшом объеме слишком велико. Однако, идея МД очень привлекательна — не задавать заранее уравнения движения и состояния для вещества (как это делается в механике сплошной среды), а получать их автоматически, зная свойства отдельных частиц. К счастью, показано, что вовсе не обязательно задавать детальную микроскопическую модель для правильного описания гидродинамики. Поэтому можно попробовать выбрать микродинамику максимально просто.

В методе *решеточных газов* все пространство покрывается регулярной сеткой, в каждом узле которой могут находиться частицы единичной массы, движущиеся вдоль связей. Частицы в одном узле могут взаимодействовать друг с другом (происходят столкновения) с сохранением массы и импульса. Такая система достаточно проста для эффективного расчета и вместе с тем неплохо описывает динамику вязкой жидкости. Вам предлагается с помощью клеточных автоматов исследовать различные гидродинамические явления, включая диффузию, неустойчивости и химические реакции.

5 Химические реакции, горение (стохастическое)

Рассмотрим мономолекулярную экзотермическую химическую реакцию. В ней одна молекула вещества A превращается в одну молекулу вещества B , при этом выделяется энергия q (теплота реакции). Для нагляд-

ного представления происходящего процесса удобно ввести *координату реакции* x , которая меняется в пределах от 0 (вещество A) до 1 (вещество B). Промежуточные значения x соответствуют различным стадиям реакции. Физический смысл x может быть, например, расстояние между функциональными группами в молекуле. Примерный график зависимости потенциальной энергии от x приведен на рис. 1. Для того, чтобы произошла реакция, необходимо вначале затратить *энергию активации* E_a (взобраться на потенциальный барьер от точки A до точки C). Затем система скатывается в потенциальную яму до точки B с выделением теплоты реакции.

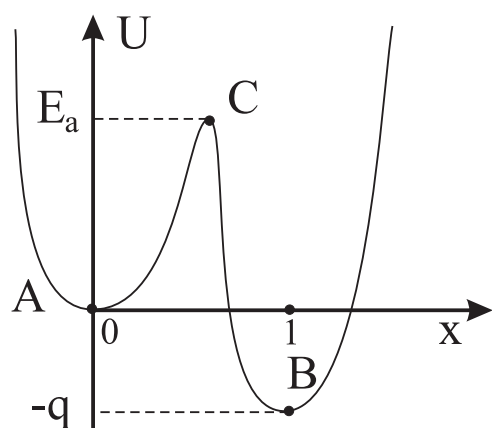


Рис. 1. Зависимость потенциальной энергии от координаты реакции

Обычно энергия активации $E_a \gg kT$, тем не менее, за счет теплового движения частицы иногда могут получать необходимую энергию. Далее возможны различные случаи в зависимости от судьбы выделившегося тепла. Оно либо остается в том же месте (нулевая теплопроводность или очень быстрый теплоотвод), либо мгновенно распределяется между всеми частицами (бесконечная теплопроводность). Это две крайности, в реальности теплопроводность и теплоотвод конечны. В разных случаях возможны интересные явления: тепловой взрыв,

волны горения. Кроме того, все реакции обратимы, это приводит к тому, что исходное вещество не расходуется полностью, а устанавливается равновесное состояние, в котором скорости прямой и обратной реакций равны. В данной задаче предлагается исследовать особенности протекания химической реакции в различных условиях.

6 Теплопроводность, горение (детерминированное)

Горение — это завораживающий и зрелищный феномен природы, одновременно являющийся интересным объектом для исследований. Несмотря на множество сложных и разнообразных физико-химических процессов его определяющих, удастся качественно описать многие его реальные особенности, используя довольно простые модели. В простейшем случае среда должна обладать теплопроводностью и возможностью протекания экзотермической реакции, скорость которой сильно возрастает при уве-

личении температуры. Уже в такой простой системе возможны различные режимы горения. Оказывается, обычное стационарное горение, при котором скорость фронта не зависит от времени, может быть неустойчивым. Быстрые выгорания вещества чередуются со стагнационными периодами. В двумерном случае фронт может искривляться и состоять из нескольких горячих очагов которые движутся вдоль его поверхности, сталкиваются, исчезают и появляются снова.

Предлагается рассмотреть среду, в которой возможны теплопроводность и экзотермическая химическая реакция. Численно решая систему дифференциальных уравнений, исследовать различные режимы горения в одномерном и двумерном случаях.

7 Образование планетной системы

Программа моделирует один из этапов эволюции Вселенной — образование некой солнечной системы из межзвездного газа. В результате весьма ограниченного числа задаваемых частиц можно сказать, что в этой модели планеты образуются из уже сформировавшихся газопылевых уплотнений, которыми и являются задаваемые частицы.

Задается некоторое количество частиц. Считается, что они вначале вращаются вокруг центра, скорость вращения удовлетворяет третьему закону Кеплера.

Предлагается исследовать поведение облака частиц в двумерном и трехмерном случае при введении сил трения и отталкивания. Также предложено промоделировать ситуацию слияния облаков при сближении на определенное расстояние.

8 Колебания цепочек

Все тела состоят из атомов. Каждый атом имеет 3 степени свободы, поэтому система из N атомов будет иметь $3N$ степеней свободы. В кристаллах подавляющее большинство этих степеней свободы — колебательные. Из термодинамики известно, что в состоянии теплового равновесия на каждое колебание приходится энергия kT . Поэтому молярная теплоемкость любого кристалла должна быть $c_V = 3R$ (закон Дюлонга и Пти, который хорошо выполняется при не слишком низких температурах, пока влияние квантовых эффектов невелико).

В этой задаче Вам предлагается исследовать, какие условия необходимы для установления равновесия, как происходит приближение к равновесию, и какие интересные явления возможны в простейшем, одномерном, случае.

9 Рост дендритов

С *дендритами*¹ знакомы все, хотя, может, и не все знают это слово. Достаточно посмотреть на снежинки или на морозные узоры на оконном стекле. Не так наглядно, но практически более важно появление дендритов в металлургии — при затвердевании различных металлов и сплавов, при сварке и т.п. Микроструктура образующихся дендритов во многом определяет свойства полученных материалов, поэтому изучение их свойств важно не только для теории, но и для практики.



Рис. 2. Ксеноновый дендрит

По внешнему виду и особенностям процесса роста дендриты (рис. 2) представляют собой нечто среднее между обычными четко ограненными кристаллами и фрактальными кластерами. В них сочетается шероховатая на микроуровне поверхность и выраженная структура на больших масштабах, связанная с наличием анизотропии.

В этой задаче Вам предлагается, используя комбинированную модель, исследовать рост дендритов, выяснить характеристики полученных «образцов», а также выяснить влияние параметров системы на режим роста.

¹Дендрит — от греческого слова *το δένδρον*, обозначающего *дерево*