

Краевой конкурс учебно-исследовательских и проектных работ учащихся
«Прикладные вопросы математики»

Математическое моделирование

Построение модели образования осадков

Морозов Максим Александрович,
Филимоновых Илья Сергеевич,
МОУ «Лицей №1» г. Перми, 11 кл.
Герцен Татьяна Анатольевна,
к. х. н., доцент ПНИПУ

ВВЕДЕНИЕ.

В промышленных, научных и других целях часто нужно получить какое-либо вещество, которое либо редко или вообще не встречается в природе в «чистом» виде, либо от которого следует избавиться. Для этого придуман способ называемый соосаждением.

Соосаждение - частичный переход компонента раствора (расплава, пара), присутствующего в малых концентрациях (микрокомпонента), в твердую фазу, образуемую в данной системе другим компонентом, который находится в значительно больших концентрациях.

Наша же работа не останавливается на видах соосаждения, каких-то химических аспектах данного процесса. Она описывает это количественно, с математической точки зрения.

ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ РАБОТЫ.

Цель нашей работы - построить модель образования осадка и оценить её.

Задачи:

Произвести отбор моделей образования осадка

1. Выбрать модель для построения
2. Построить модель
3. Оценить модель
4. Сделать выводы, полученные на основе полученных данных

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ.

Здесь разобраны основные понятия и особенности, которые использованы в экспериментальной части.

Существует несколько моделей образования осадка.

Явление перколяции (или протекания среды) определяется:

1. Средой, в которой наблюдается это явление;
2. Внешним источником, который обеспечивает протекание в этой среде;
3. Способом протекания среды, который зависит от внешнего источника.

В качестве простейшего примера можно рассмотреть модель протекания (например электрического пробоя) в двумерной квадратной решетке, состоящей из узлов, которые могут быть проводящими или непроводящими. В начальный момент времени все узлы сетки являются непроводящими. Со временем источник заменяет непроводящие узлы на проводящие, и число проводящих узлов постепенно растет. При этом узлы замещаются случайным образом, то есть выбор любого из узлов для замещения является равновероятным для всей поверхности решетки.

Перколяцией называют момент появления такого состояния решетки, при котором существует хотя бы один непрерывный путь через соседние проводящие узлы от одного до противоположного края. Очевидно, что с ростом числа проводящих узлов, этот момент наступит раньше, чем вся поверхность решетки будет состоять исключительно из проводящих узлов.

Модель Виттена-Сандера.

Представим способ построения фрактального кластера, образованного из отдельных частиц, в простейшей постановке задачи. Для этого ограничимся двумерным случаем и построим кластер согласно модели Виттена — Сандера. В соответствии с этой моделью разобьем ограниченное двумерное пространство на множество квадратных ячеек, поместим в него одну частицу и будем добавлять по одной частице. Если частица достигла границы пространства, она отражается от нее. Движение частицы продолжается до тех пор, пока она не окажется по соседству с одной из частиц кластера. Тогда она останавливается и закрепляется в данной ячейке, а в пространство запускается следующая частица. Таким способом «выращивается» фрактальный кластер *). Модель Виттена — Сандера сыграла важную роль в исследовании фрактальных кластеров, ибо она дала простой способ создания фрактального кластера. С появлением модели Виттена — Сандера началось широкое изучение таких структур, которое в течение относительно небольшого промежутка времени позволило создать четкое физическое представление об этих системах.



Рис. 1. Осадок, построенный методом Виттена-Сандера
Фракталы. Фрактальная размерность.

Осадок образуется случайным образом. Но и это можно описать математически.

Фрактал — это бесконечно самоподобная геометрическая фигура, каждый фрагмент которой повторяется при уменьшении масштаба.

Фрактал — самоподобное множество нецелой размерности.

Фрактал может употребляться, когда рассматриваемая фигура обладает какими-либо из перечисленных ниже свойств:

1. Обладает нетривиальной структурой на всех масштабах. В этом отличие от регулярных фигур (таких, как окружность, эллипс, график гладкой функции): если мы рассмотрим небольшой фрагмент регулярной фигуры в очень крупном масштабе, он будет похож на фрагмент прямой. Для фрактала увеличение масштаба не ведёт к упрощению структуры, на всех шкалах мы увидим одинаково сложную картину.
2. Является самоподобной или приближённо самоподобной.
3. Обладает дробной метрической размерностью или метрической размерностью, превосходящей топологическую.



Фрактальная размерность.

$$D = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln N(\varepsilon)}{\ln(1/\varepsilon)}.$$

Объем фрактала в своем пространстве вложения всегда равен нулю. Он, однако, может быть отличен от нуля в пространстве меньшей размерности. Чтобы определить размерность этого пространства D , разобьем все n -мерное пространство на малые кубики с длиной ребра ε и объемом ε^n . Пусть $N(\varepsilon)$ - минимальное число кубиков, которые в совокупности полностью покрывают фрактальное множество. Фрактальная размерность выступает в качестве количественной меры структурности этих объектов

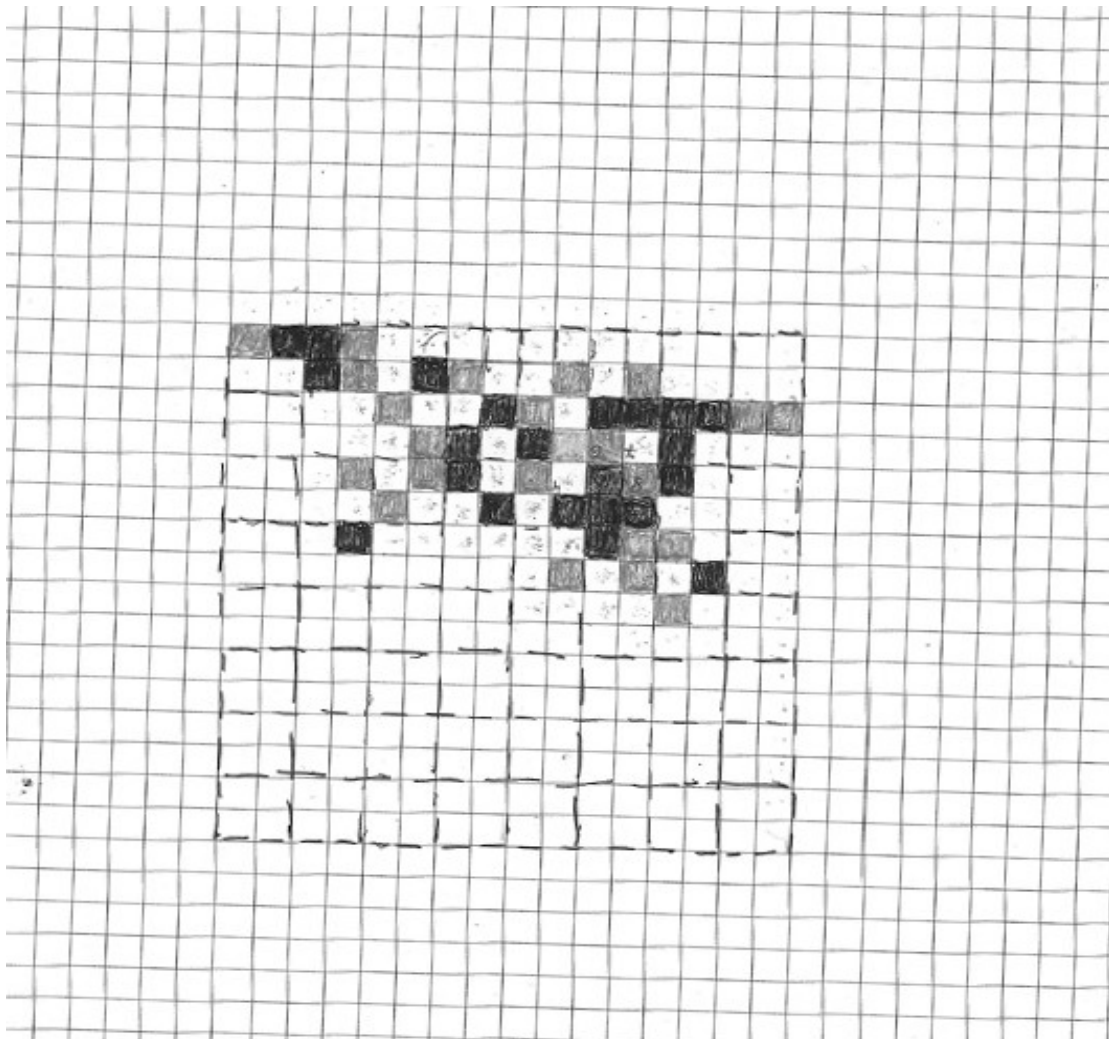
ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ.

В ходе работы мы провели эксперименты на бумаге и на компьютере.

Мы использовали разлинованную бумагу в клетку, на которой по очереди расставляли молекулы (клетки). Для того, что бы клетки расставлялись в случайном порядке, использовался генератор случайных чисел.

В центре листка ставится молекула. Около неё очерчивается квадрат со стороной равной трём клеткам. Случайным образом определяется, куда попадёт следующая молекула. Если молекула попала на последний слой осадка, то ширина квадрата увеличивается, а количество возможных мест для молекул возрастает.

Массив с использованием осадка и примеси в одинаковом соотношении показан на рис.:

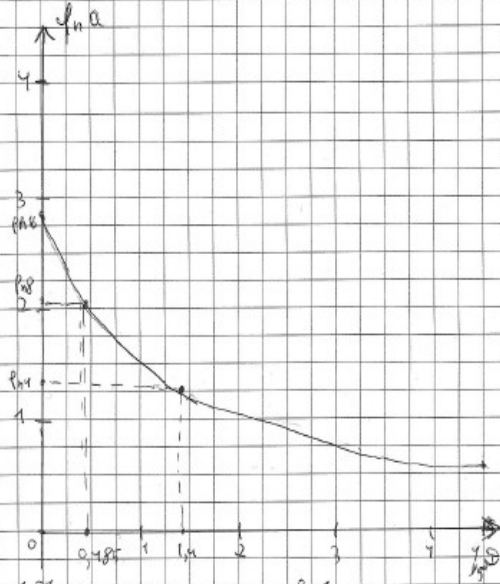


Фрактальная размерность осадка.

50-50.

а - число квадратов, в которых есть жемчужина

Φ - фрактальная размерность.



$$1) \Phi = \frac{r_{n3}}{r_{n2}} \approx \frac{1,01}{2,38} = 0,425 \quad 4) \Phi = \frac{r_{n1}}{r_{n6}} = 0$$

$$r_{n3} \approx 2,08$$

$$r_{n6} \approx 2,44$$

$$2) \Phi = \frac{r_{n4}}{r_{n1}} \approx \frac{1,94}{1,38} \approx 1,4$$

$$r_{n4} \approx 1,38$$

$$3) \Phi = \frac{r_{n23}}{r_{n2}} \approx \frac{3,13}{0,69} = 4,5$$

Компьютерный вариант:

Была использована программа на языке Pascal. Работа программы идентична работе на бумаге.

```

program uir;
var a:array[1..100,1..100] of char;
    L1,l,n,K,i,n1,n2,j,x:integer;
    f1:text;
    {K – количество точек на плоскости}
    {L1 – высота(y) }
    {l - ширина(x) }
    {n – ширина квадрата осадка}
    {i – доп. Переменная для цикла}
    {f1 файл, создаваемый для редактирования осадка}
begin
for i:=1 to 100 do
for j:=1 to 100 do
    a[i,j]:=' ';
assign(f1, 'file1.txt');
rewrite(f1);
a[50,50]:='1';n:=1;

```



```

L1:=0;l:=0;
n1:=1 ;
n2:=1 ;
{заполнение массива}
randomize;
repeat
n1:=50-n;
n2:=50+n;
begin
L1:=random(2*n+1) + (50-n);
writeln(L1);
l:=random(2*n+1) + (50-n);
writeln(l);
x:=random(99);
if x=0 then
a[L1,l]:='8' else
a[L1,l]:='0';
if (L1=n1)or(L1=n2)or(l=n1)or(l=n2) then
n:=n+1;
end;
until n=50;
{запись в файл}
For n:= 1 to 100 do
begin
for i:= 1 to 100 do
begin
write(a[n,i]);
write(f1,a[n,i],#);
end;
writeln;
writeln(f1,'/',n);
end;
close(f1);
readln;
end.

```

Программа создаёт осадок до тех пор, пока молекула не коснётся внешней стенки массива. Расставляются молекула осадка и искомого вещества. Процент искомого вещества – 1%.

Для нескольких массивов осадка мы посчитали фрактальную размерность и её зависимость от ширины данной сетки.

По X – D (фрактальная размерность), по Y – Ширина данной сетки.

График сделан для всего массива.

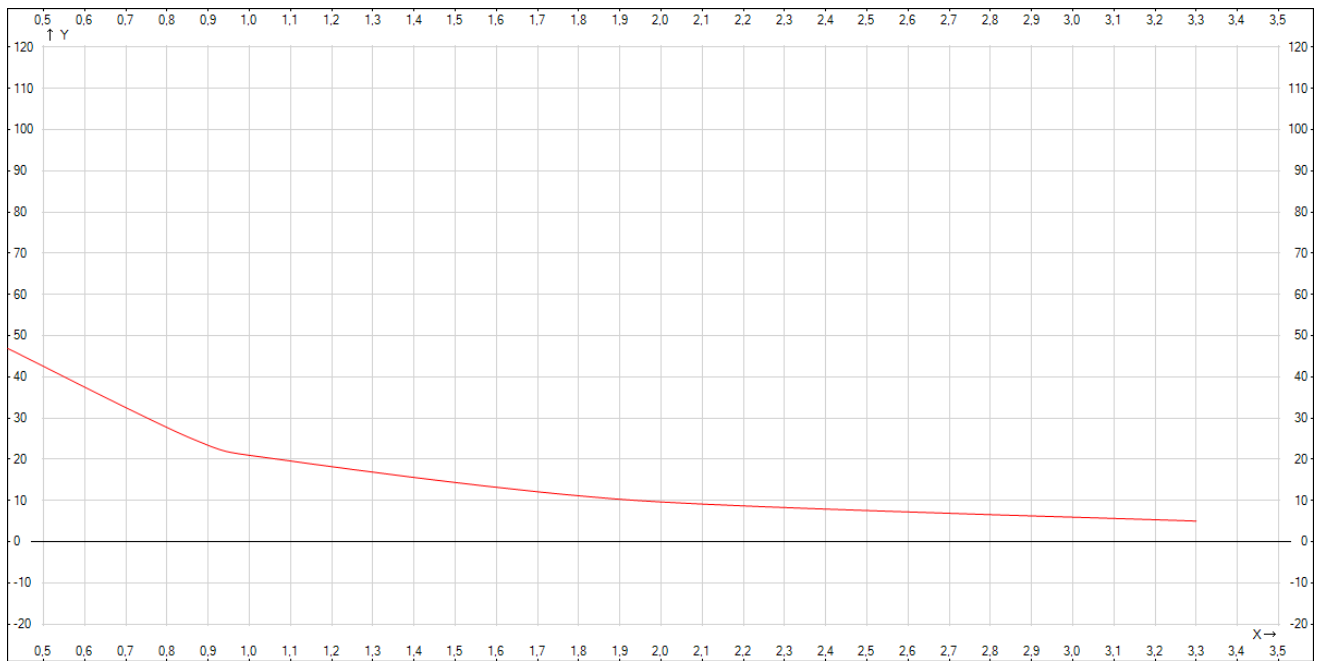
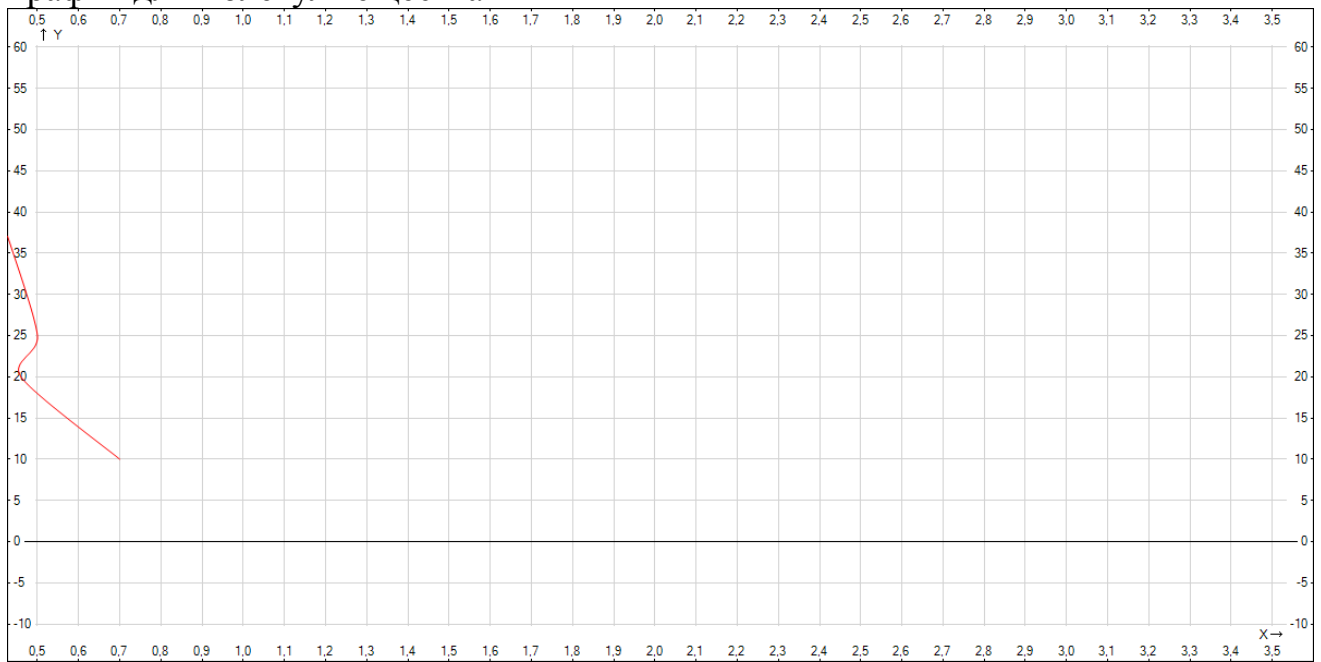
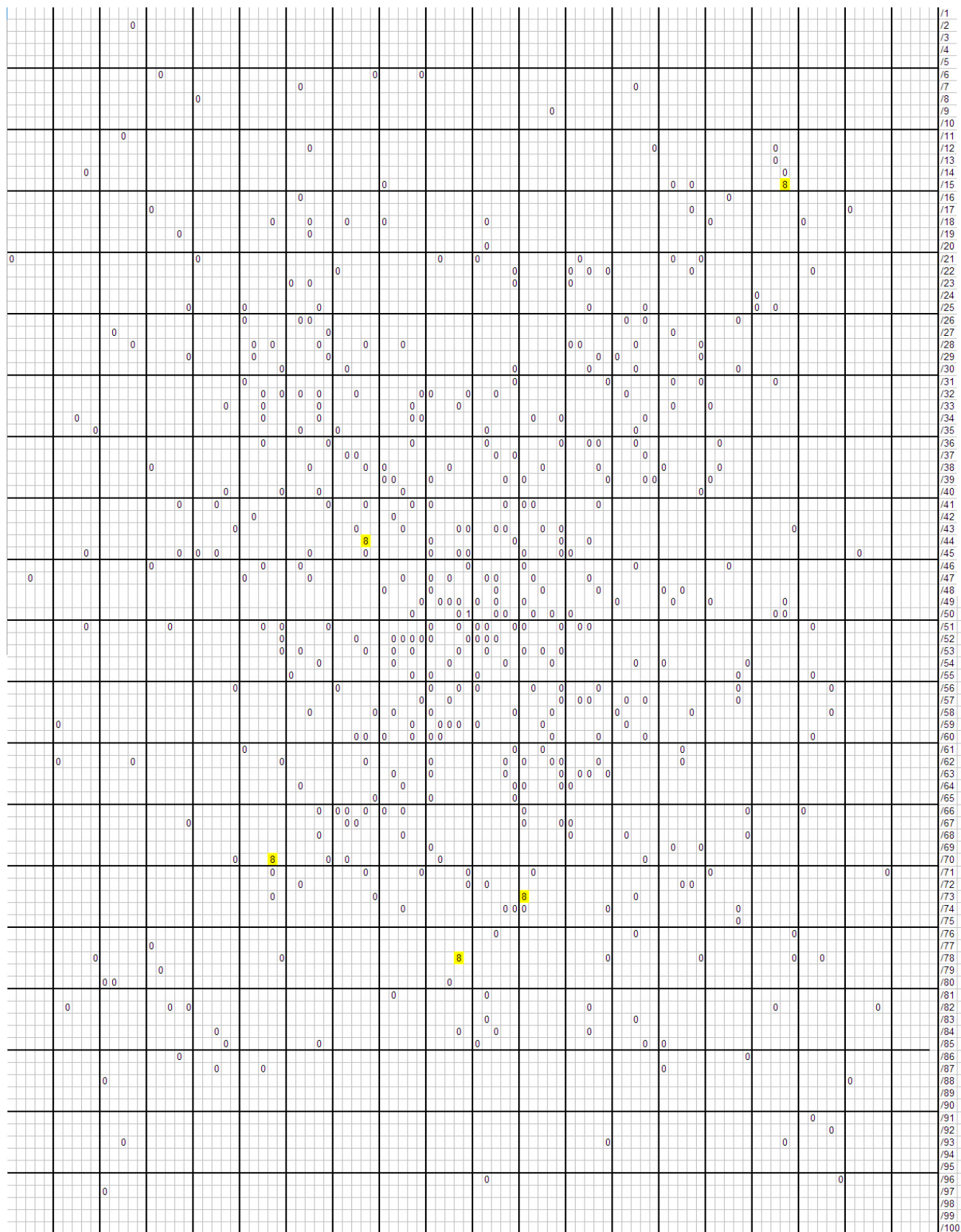
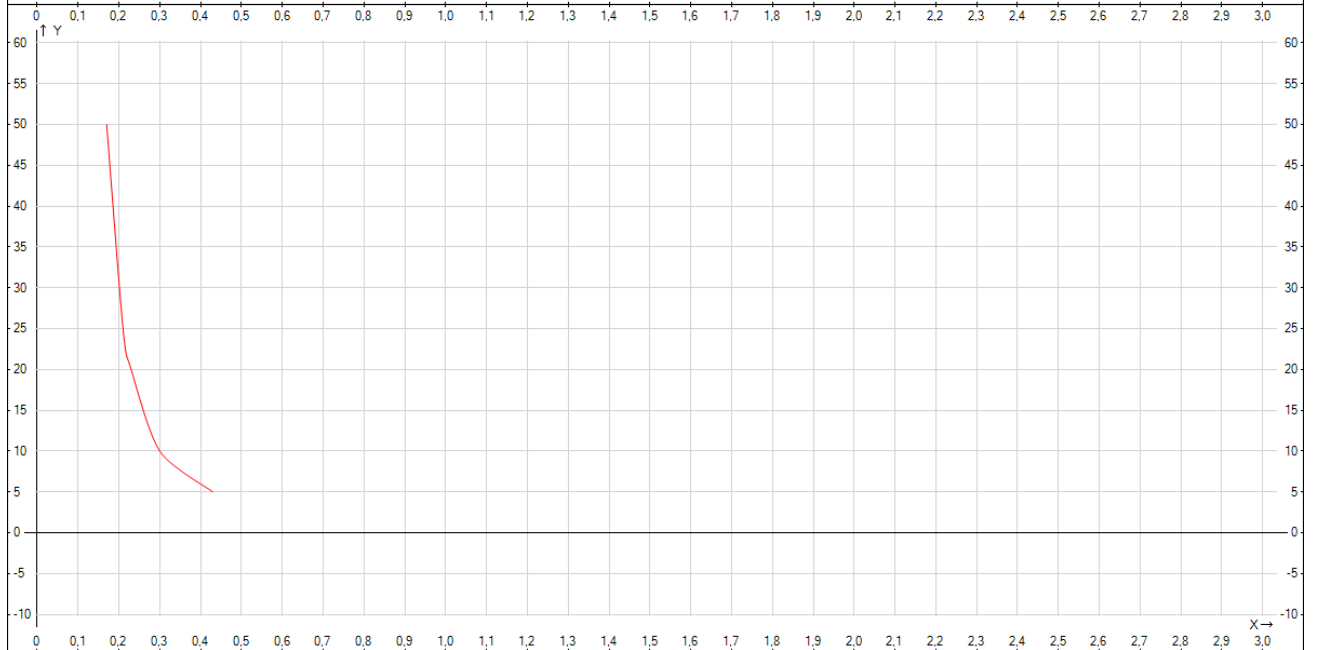
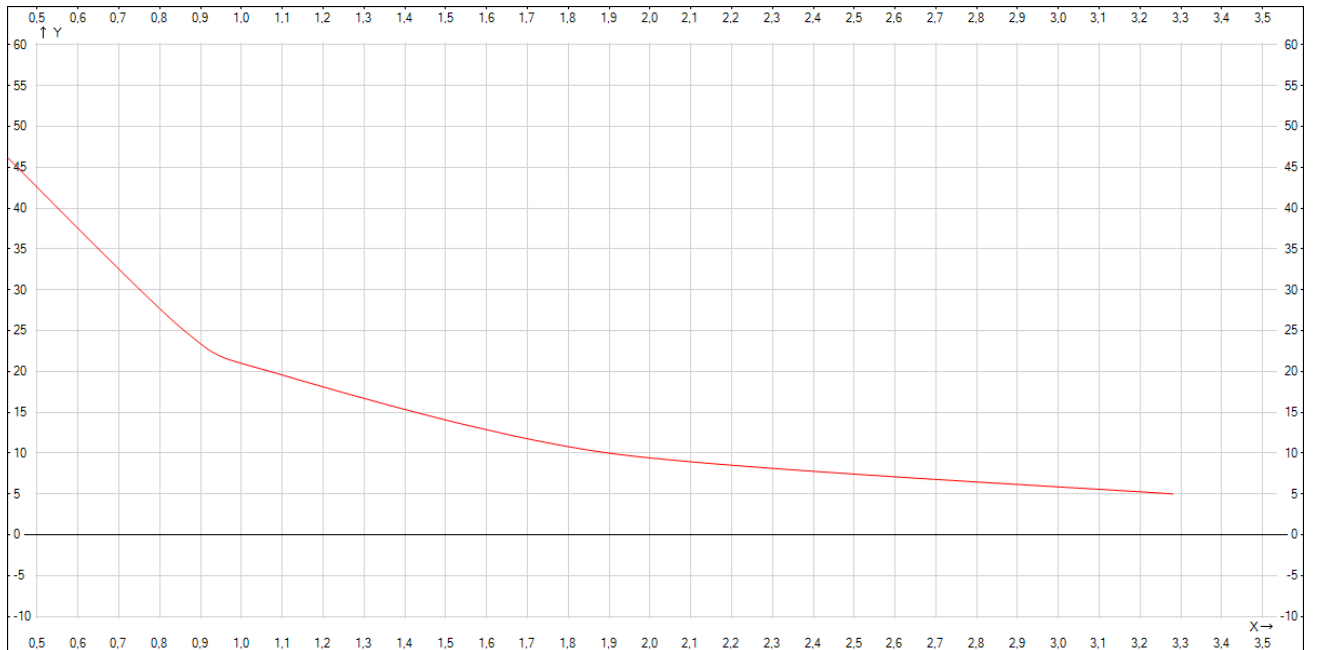


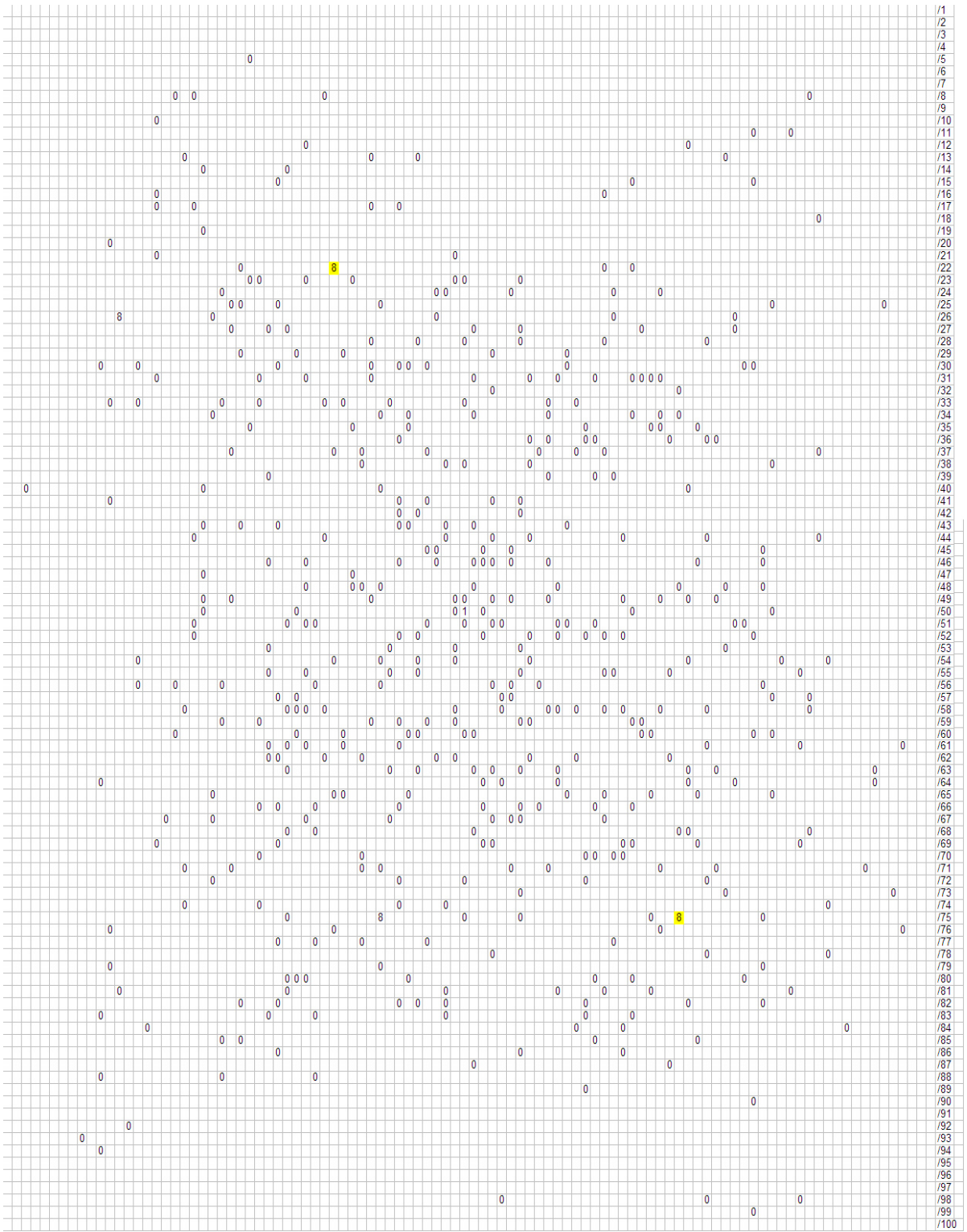
График для молекул вещества





Графики для второго массива





ЗАКЛЮЧЕНИЕ.

Мы провели опыты и исследования. Все наши задачи были выполнены. А цель была достигнута.

Из опытов мы узнали, что при соосаждении молекулы примеси будут захватываться молекулами осадка, т.к. фрактальная размерность осадка при равных масштабах больше фрактальной размерности примеси.

БИБЛИОГРАФИЯ

- 1) Большая советская энциклопедия
- 2) <http://www.random.org>
- 3) <http://edu.ioffe.ru/register/?doc=physica3/fractal.tex> - фрактальная размерность