

## Úloha V.S . . . rostou nám diferenciální rovnice

10 bodů; průměr 3,73;

řešilo 11 studentů

- a) Řešte problém dvou těles pomocí Verletovy a Rungovy-Kuttovy metody 4. řádu přes několik (mnoho) period. Krok přitom volte tak velký, aby se projevil numerické chyby, a pozorujte, jakým způsobem se chyby v obou případech projevují na tvaru trajektorie.
- b) Řešte pohyb tlumeného lineárního harmonického oscilátoru daného rovnicí  $\ddot{x} + 2\delta\omega\dot{x} + \omega^2x = 0$ , kde  $\omega$  je úhlová frekvence a  $\delta$  tlumící člen. Parametry měňte a sledujte změny v chování oscilátoru. Pro jaké hodnoty parametrů se oscilátor utlumí nejrychleji?
- c) Modelujte růst povrchu metodou balistické depozice a studujte statistické chování hrubosti povrchu. Nalezněte mocniny  $\alpha$  a  $\beta$  popisující růst před saturací a po saturaci (viz seriál). Vyděte z kódu v seriálu. Volte takový počet kroků, abyste byli schopni dobře studovat oba režimy hrubnutí. Lineární rozměr povrchu volte alespoň  $L = 256$ . (Upozornění: simulace mohou trvat i několik hodin.)
- d) Simulujte na čtvercové mřížce šíření zhoubného nádoru pomocí Edenova modelu. Uvažujte přitom následující obměnu: s pravděpodobností  $p_1$  dojde k nákaze zdravé buňky v kontaktu s nádorovou a s pravděpodobností  $p_2$  dojde k uzdravení nakažené. Volte nejprve  $p_1 \gg p_2$ , pak  $p_1 > p_2$  a nakonec  $p_1 < p_2$ . Na počátku necht' je nakaženo pět buněk do tvaru kříže. Kvalitativně popište, co pozorujete.
- e) Přepište kód ze seriálu pro růst fraktálního krystalu (DLA model) na hexagonální mřížce na růst na čtvercové mřížce a spočítejte dimenzi výsledného fraktálu.

Poznámka Využití kódy přiložené k seriálu není nutné, ale doporučené.

*Algebru už Mirek s Lukášem vypěstovali, nyní mají jiné osivo.*

- a) Nejprve musíme odvodit správné pohybové rovnice, přičemž pro jednoduchost budeme celou dobu pracovat v kartézských souřadnicích. Gravitační síla, kterou první bod o hmotnosti  $m_1$  působí na druhý hmotný bod o hmotnosti  $m_2$ , je

$$\mathbf{F}_g = -\frac{Gm_1m_2}{r_{12}^3}\mathbf{r}_{12},$$

kde  $\mathbf{r}_{12}$  je polohový vektor druhého bodu vůči prvnímu bodu a  $r_{12}$  je jeho velikost. Silou o stejné velikosti, ale s opačným znaménkem, pak působí bod 2 na bod 1. Zrychlení bodu pak obdržíme vydělením síly hmotností daného bodu. Protože druhý Newtonův zákon má (ve verzi s konstantní hmotností) tvar  $\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{a}$ , máme sestaveny pohybové rovnice, jen je potřeba je upravit do tvaru vhodného pro danou metodu. U Verletovy metody máme splněno, neboť je očekávána diferenciální rovnice právě v tomto tvaru. Pro Rungovu-Kuttovu metodu musíme rovnici upravit na soustavu rovnic prvního řádu. To docílíme substitucí  $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{v}$ , díky čemuž automaticky obdržíme i okamžité rychlosti bodů, které budeme potřebovat při výpočtu energie. Pro Verletovu metodu musíme rychlosti získat oklikou, například aplikací numerické

derivace dle času na funkci polohy.<sup>1</sup> Výsledná soustava rovnic tedy je

$$\ddot{x}_1 = \frac{Gm_2(x_2 - x_1)}{|(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2|^{\frac{3}{2}}}, \quad \ddot{y}_1 = \frac{Gm_2(y_2 - y_1)}{|(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2|^{\frac{3}{2}}},$$

$$\ddot{x}_2 = \frac{Gm_1(x_1 - x_2)}{|(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2|^{\frac{3}{2}}}, \quad \ddot{y}_2 = \frac{Gm_1(y_1 - y_2)}{|(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2|^{\frac{3}{2}}}$$

pro Verletovu metodu a

$$\dot{v}_{x1} = \frac{Gm_2(x_2 - x_1)}{|(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2|^{\frac{3}{2}}}, \quad \dot{v}_{y1} = \frac{Gm_2(y_2 - y_1)}{|(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2|^{\frac{3}{2}}},$$

$$\dot{v}_{x2} = \frac{Gm_1(x_1 - x_2)}{|(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2|^{\frac{3}{2}}}, \quad \dot{v}_{y2} = \frac{Gm_1(y_1 - y_2)}{|(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2|^{\frac{3}{2}}},$$

$$\dot{x}_1 = v_{x1}, \quad \dot{y}_1 = v_{y1},$$

$$\dot{x}_2 = v_{x2}, \quad \dot{y}_2 = v_{y2}$$

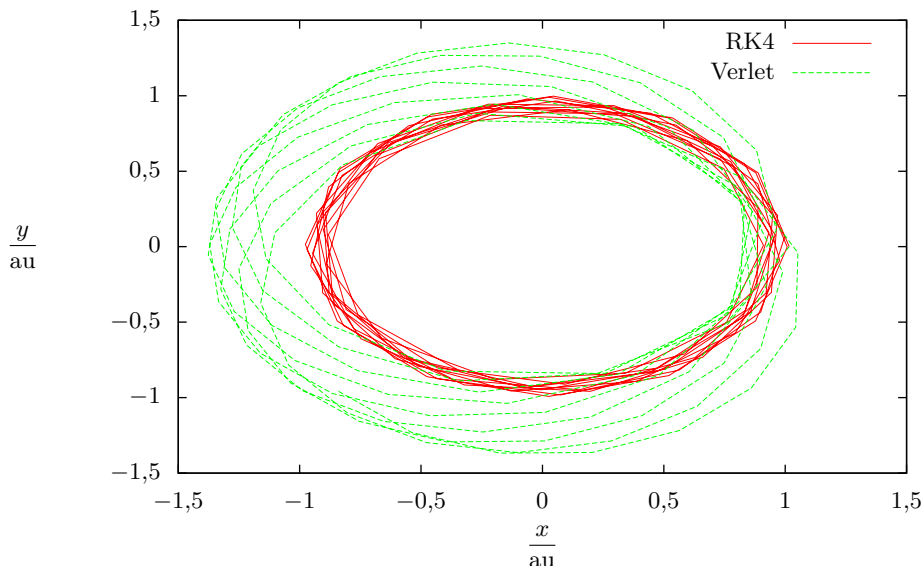
pro Rungovu-Kuttovu metodu. Tyto rovnice platí v inerciální soustavě spojené s těžištěm. Bylo by samozřejmě možné simulaci provádět i v jiné soustavě, bylo by ale potřeba příslušně transformovat polohy a rychlosti a v případě neinerciálních soustav započítat vliv setrvačných sil. Příkladem vhodné transformace je umístění jednoho z těles do počátku (nerotující) souřadné soustavy, pak totiž stačí simulovat pohyb pouze jednoho tělesa vůči druhému, což ve výsledku vede k menším numerickým chybám.

Pro porovnání vlastností metod si nyní problém zjednodušíme a budeme uvažovat, že platí  $m_1 \gg m_2$ , tedy například pohyb planety okolo Slunce. Slunce pak můžeme napevno posadit do středu a simulovat pouze pohyb planety.

V grafu 1 vidíme výsledek takové simulace po dobu 10 oběhů s poměrně velkým krokem. Na první pohled je vidět nesrovnalost ve velikosti velké poloosy mezi oběma metodami. Ta je způsobena tím, že Verletovu algoritmu je nutno dodat počáteční podmínky ve formě dvou poloh místo polohy a rychlosti, jako v případě Rungovy-Kuttovy metody. Pro výpočet tohoto prvního kroku byl (z důvodu lenosti) použit Eulerův algoritmus, který s tímto velkým krokem způsobil značnou chybu. Pokud bychom byli při volbě počátečních podmínek pečlivější, tato chyba by nevznikla, dále ji tedy budeme ignorovat.

Druhá věc, které si všimneme, je stáčení dráhy vypočtené Verletovou metodou, zatímco dráha vypočtená Rungovou-Kuttovou metodou je víceméně stále stejná. To je způsobeno tím, že Verletova metoda je metodou druhého řádu, zatímco použitá Rungova-Kuttova metoda je řádu čtvrtého, pro daný krok má tedy menší chybu. Všimneme si ale, že dráha je touto chybou pouze stáčena, nemění se její rozměry. To je právě důsledkem časové reverzibility a následného zachování energie u Verletovy metody. Pokud se podíváme na časovou závislost energie planety (vztažené na jednotkovou hmotnost planety) v grafu 1, vidíme, že v případě Verletovy metody energie osciluje s periodou jednoho oběhu. Není tedy vždy na zcela správné hodnotě, v průběhu času ale nikam nedriftuje, i s takto hrubým krokem se tedy bude takto držet, i kdybychom simulovali třeba 10 000 oběhů. Energie v případě Rungovy-Kuttovy metody oproti tomu v tomto úseku simulace drží lépe díky vyššímu řádu metody,

<sup>1</sup>V případě, že potřebujeme znát rychlosti, lze také použít metody, které jsou Verletovi ekvivalentní, jako leap-frog, či rychlostní Verlet. O těchto a dalších metodách jsme se v seriálu nezmiňovali, můžete si je ale dohledat.



Obr. 1: Simulace oběhu Země kolem Slunce pomocí Verletovy a Rungovy-Kuttovy metody 4. řádu s krokem 30 dní.

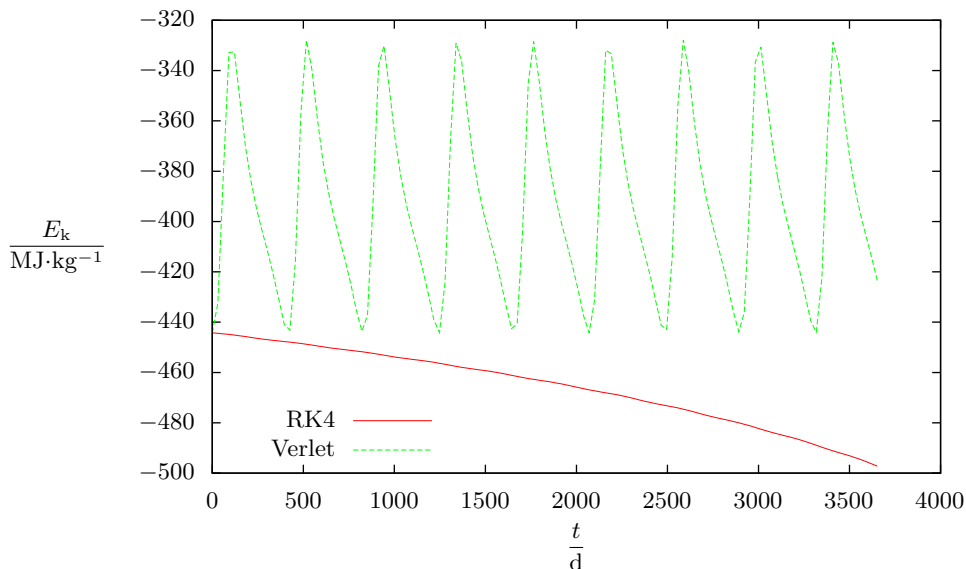
postupně se ale mění (a čím dál rychleji), po mnoha periodách by tedy vůbec neodpovídala skutečnosti.

- b) Po substituci  $\dot{x} = v$  dostáváme diferenciální rovnici  $\dot{v} = -2\delta\omega v - \omega^2 x$ , čímž jsme obdrželi systém dvou rovnic prvního řádu. Na jeho řešení použijeme Rungovu-Kuttovu metodu 4. řádu, protože je na rozdíl od Adamsových-Bashforthových-Moultonových metod jednokroková, není jí tedy potřeba startovat, navíc je Rungova-Kuttova metoda 4. řádu dokonce o něco vhodnější z hlediska stability.<sup>2</sup> Naopak explicitní Eulerovu metodu zde použít nemůžeme, neboť pro netlumený oscilátor  $\delta = 0$  je řešení nestabilní pro libovolně malý krok. Tvrzení opět souvisí s oblastí stability – tento pojem se pokusíme objasnit v příštím díle seriálu. Nicméně i bez těchto teoretických znalostí lze z chování řešení od pohledu usuzovat na jeho (ne)stabilitu. Nestabilita totiž znamená, že se chyby neúměrně zvětšují, řešení tedy roste k nekonečnu (či osciluje mezi kladným a záporným nekonečnem).<sup>3</sup> Jak takové nestabilní chování vypadá, vidíme na obrázku 3, kde je vykresleno nestabilní řešení rovnice  $\ddot{x} + \omega^2 x = 0$  explicitní Eulerovou metodou a pro porovnání stabilní řešení Rungovou-Kuttovou metodou. Kromě počátečních podmínek, které mají jasný význam počáteční rychlosti a polohy, můžeme měnit další dva parametry, úhlovou rychlost  $\omega$  a tlumící člen  $\delta$ . S trochou experimentování zjistíme, že mají význam odpovídající jejich názvu, parametr  $\omega$  ovlivňuje periodu kmitů, zatímco  $\delta$  řídí rychlost exponenciálního útlumu.<sup>4</sup> Jak jsme již zjistili, hodnota  $\delta = 0$  odpo-

<sup>2</sup>Má větší tzv. oblast stability, můžeme tedy volit o něco větší krok pro dané parametry při zachování stability.

<sup>3</sup>Je samozřejmě třeba dát pozor, jestli divergence není očekávaným správným řešením dané rovnice.

<sup>4</sup>Ve skutečnosti  $\delta$  také ovlivňuje periodu kmitů a  $\omega$  rychlost útlumu, jak si rozebereme dále.



Obr. 2: Simulace oběhu Země kolem Slunce pomocí Verletovy a Rungovy-Kuttovy metody 4. řádu s krokem 30 dní – vývoj celkové energie.

vídá kmitům bez tlumení. Čím větší pak faktor je, tím je tlumení silnější. Je ale zajímavé, že silnější tlumení nutně neznamená, že výchylka rychleji klesne k nule, jak můžeme vidět na obrázku 4, kde jsou vyneseny časové závislosti výchylky pro hodnotu parametru  $\delta = 0,7$ ,  $\delta = 1$  a  $\delta = 1,3$ . Je patrné, že nejrychleji se utlumí oscilátor při  $\delta = 1$ . Nejde jen o náš tip na základě experimentování s hodnotou parametru, ale jde o obecný výsledek. Říkáme, že takový oscilátor koná *mezní aperiodický pohyb*. Pokud je  $\delta < 1$ , oscilátor není zcela utlumen během jednoho kmitu, tlumení k nulové výchylce tedy trvá déle. Oscilátor koná *periodický* pohyb. Naopak pokud  $\delta > 1$ , oscilátor je přetlumený tak, že „tlumí i tlumení výchylky k nule“, výchylka tedy klesá pomalu, ale nepřekmitne a u nuly se ustálí, pohyb je *aperiodický*.

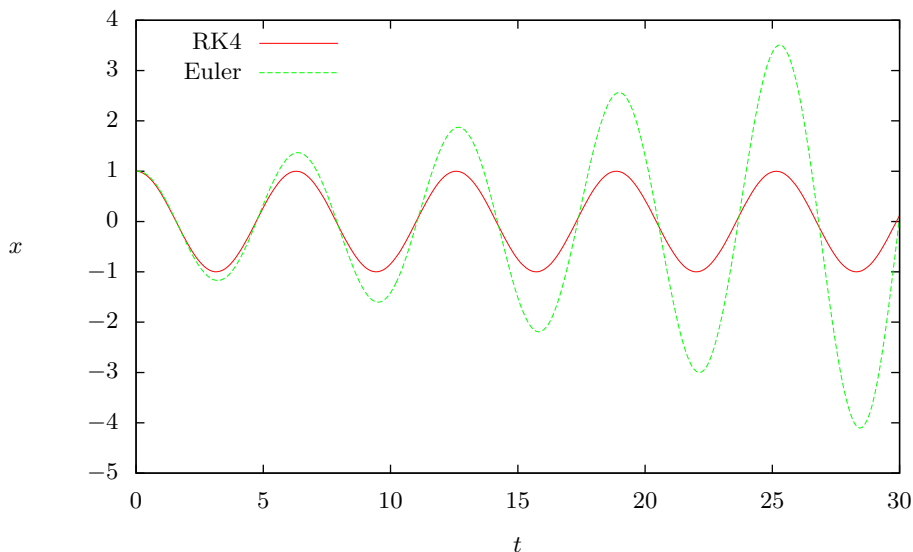
Doplňme, že pro tuto diferenciální rovnici lze nalézt analytické řešení ve tvaru

$$x(t) = Ae^{\lambda_1 t} + Be^{\lambda_2 t},$$

kde  $\lambda_{1,2} = -\delta\omega \pm i\omega\sqrt{\delta^2 - 1}$  a  $A$  a  $B$  jsou integrační konstanty (odvoditelné z počátečních podmínek). Pro  $\delta \in (0, 1)$  je výraz pod odmocninou záporný, odmocnina má tedy komplexní hodnotu. Pak platí  $\lambda_{1,2} = -\delta\omega \pm i\omega\sqrt{1 - \delta^2}$ , řešení tedy pomocí úpravy přes Eulerův vzorec pro komplexní exponenciálu a triku využívajícího fakt, že součet dvou různých řešení je také řešení, můžeme přepsat do tvaru

$$x(t) = e^{-\delta\omega t} \left( C \cos(t\omega\sqrt{1 - \delta^2}) + D \sin(t\omega\sqrt{1 - \delta^2}) \right), \quad (1)$$

kde  $C$  a  $D$  jsou reálné integrační konstanty. Z tohoto výsledku vidíme, že tlumení působí s faktorem  $\delta\omega$  a oscilace mají úhlovou frekvenci  $\omega\sqrt{1 - \delta^2}$ . Pro mezní případ  $\delta = 1$  pak



Obr. 3: Porovnání stabilního a nestabilního řešení rovnice  $\ddot{x} + \omega^2 x = 0$  se stejnými počátečními podmínkami, s krokem 0,1 a  $\omega = 1$ .

z rovnice (1) oscilace vymizí a zůstane jen tlumící exponenciála. Zároveň ale<sup>5</sup> bude řešením rovnice i  $x(t) = Kte^{-\omega t}$ , kde  $K$  je konstanta. A protože součet řešení homogenní diferenciální rovnice je také řešením, je celkové řešení pro případ  $\delta = 1$  rovno

$$x(t) = (F + Gt)e^{-\omega t},$$

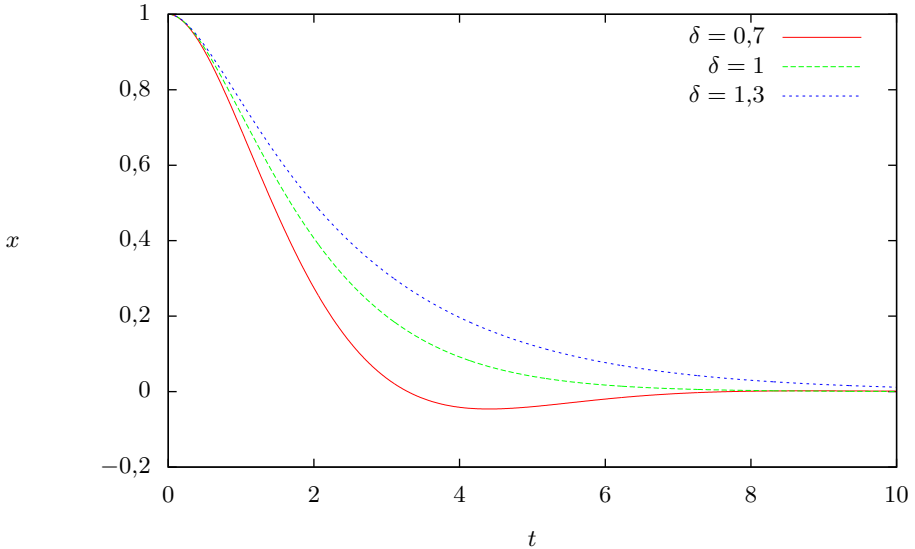
kde  $F$  a  $G$  jsou integrační konstanty. Můžete si derivováním ověřit, že toto řešení klesá k nule monotónně a (pro stejné počáteční podmínky) rychleji než periodické řešení nebo součet dvou exponenciál z aperiodického řešení.

Celou dobu jsme měli představu mechanického oscilátoru, například závaží na pružině. Uvědomme si ale, že stejná rovnice popisuje i jiné, neméně významné systémy, například RLC obvod, kde výchylka odpovídá elektrickému náboji (který je úměrný napětí) na kondenzátoru a rychlost proudu protékajícímu obvodem.

- c) V této úloze je zásadní dodržet limit na minimální velikost mřížky, nebo lépe použít ještě větší rozměry<sup>6</sup>  $L = 512$  či  $L = 1024$ . Lze si snadno rozmyslet, že pro  $L = 2$  a podobně malé mřížky bude balistická depozice vykazovat jiné odlišné chování od velkých mřížek. Chceme-li tedy získat správné hodnoty škálovacích parametrů, musíme volit tak velkou mřížku, aby se neprojevovala její konečnost.

<sup>5</sup>Protože jde o případ s vícenásobnými kořeny tzv. charakteristického polynomu dané ODR. Detaily teoretického řešení dif. rovnic si můžete dohledat ve vhodné literatuře.

<sup>6</sup>Že se jedná o mocniny dvojky není příliš podstatné, leda že bychom chtěli využít způsob ukládání čísel do paměti.



Obr. 4: Časová závislost výchylky lineárního harmonického oscilátoru pro tři různé hodnoty parametru  $\delta$  při  $\omega = 1$  a stejných počátečních podmínkách.

Podívejme se nejprve na kritický škálovací koeficient  $\alpha$  a prozradme si dopředu, že exaktní analytické řešení diferenciální rovnice příslušné balistické depozice vede na  $\alpha = 0.5$ . S využitím kódu v seriálu nyní vypočteme vývoj hrubosti pro dvě mřížky  $L_1 = 256$  a  $L_2 = 512$ . Jelikož v asymptotě velkých časů platí  $W(L) \sim L^\alpha$ , srovnáním dvou simulací dostaneme

$$\frac{W(L_2)}{W(L_1)} = \left(\frac{L_2}{L_1}\right)^\alpha,$$

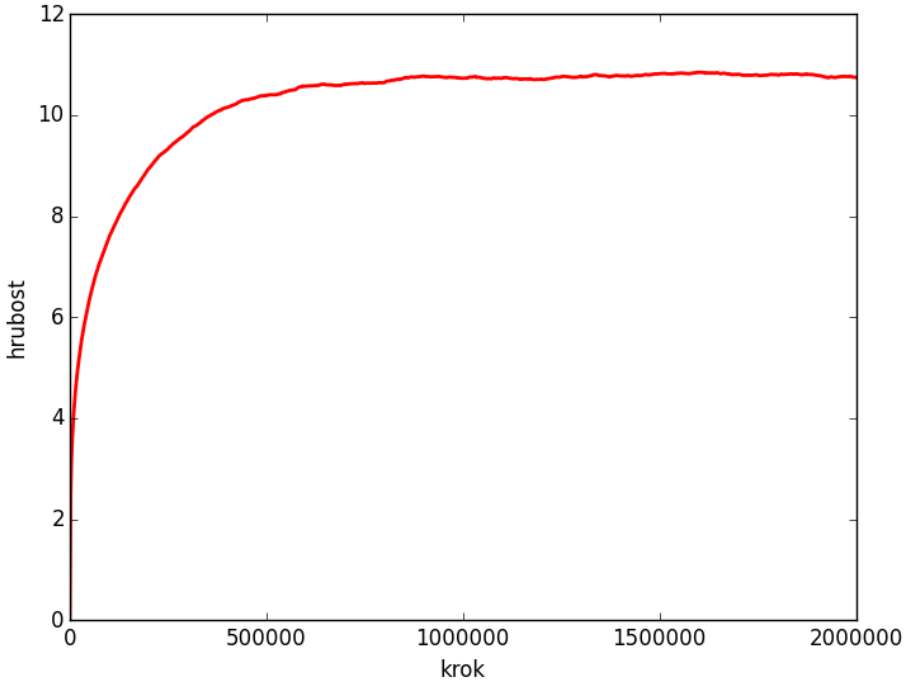
neboli

$$\alpha = \log_2 \frac{W(L_2)}{W(L_1)}. \quad (2)$$

Abychom splnili podmínku  $t \gg t_x$ , tj. že se pohybujeme v časech výrazně větších, než je charakteristický čas přechodu od růstu k saturaci, vykreslíme si graf a odhadneme, kdy už je hrubost saturována. Jako příklad uvádíme obr. 5, kde jsme vykreslili pro mřížku  $L_2$  hrubost zprůměrovanou přes  $5 \cdot 10^3$  běhů na  $2 \cdot 10^6$  krocích. Vidíme, že po  $10^6$  krocích je hrubost již bezpečně saturována. Také si můžeme všimnout, že i přes průměrování není graf zcela hladký. Jelikož není v našich časových možnostech provést tolik běhů, budeme za saturovanou hrubost považovat průměr hrubostí na intervalu  $10^6 < t < 2 \cdot 10^6$ , který je v našem případě roven  $\bar{W}(L_2) = 10,76$ . Simulaci provedeme též pro  $L_1$  a podobným zpracováním získáme  $\bar{W}(L_1) = 7,82$ . Ze vztahu (2) pak vypočteme<sup>7</sup>  $\alpha = 0,46$ . To není úplně špatný výsledek,

<sup>7</sup>Pravděpodobně jste si všimli, že jsme v seriálu již před delší dobou upustili od počítáním směrodatných odchylek. Je to proto, že nás obvykle více trápí nejistoty způsobené nastavením naší simulace než nejistoty způsobená statistikou.

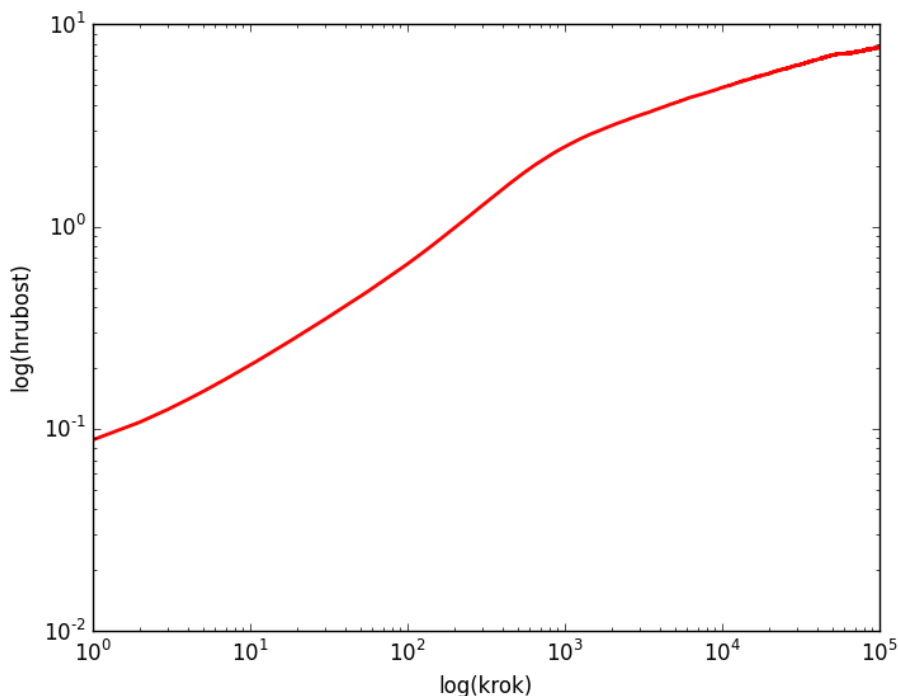
ale pořád se od exaktního výsledku nezanedbatelně odchylujeme. Pro  $L_3 = 1024$  dostaneme porovnáním s  $L_2$  koeficient  $\alpha = 0,48$ .



Obr. 5: Vývoj hrubosti povrchu spočtený na základě modelu balistické depozice na mřížce délky  $L = 512$ , průměrováno přes 5 000 běhů.

Pro nalezení škálovacího parametru  $\beta$  nepotřebujeme porovnávat více mřížek, stačí pouze fitovat evoluce hrubosti v oblasti  $t \ll t_x$  (jak v Pythonu fitovat jsme se učili v třetím díle seriálu, který se věnoval náhodným procházkám). Z lineárního grafu však jen špatně odhadneme, kdy se ve vztahu  $W(t, L) \sim t^\beta$  začíná exponent měnit. Proto si nakreslíme log-log graf (obě osy logaritmické), viz obrázek 6. Krok indexujeme od 1, čímž se taky vyhneme logaritmování nuly. Jelikož děláme simulaci pouze pro  $10^5$  kroků na mřížce  $L_1 = 256$ , mohli jsme si dovolit nefiltrovat body v grafu. Průměrovali jsme přes 1000 běhů.

Vidíme, že hrubost v naší simulaci vykazuje na počátku komplikovanější chování. Během prvních několika desítek kroků vidíme lineární chování a v oblasti několika tisíců až desítek tisíc kroků také, ale v obou případech s jiným sklonem. Dále již graf plynule přechází k saturaci (není zde vyobrazeno, ale víme z obr. 5). Fitováním prvního lineárního úseku na intervalu 20–50 kroků získáme koeficient  $\beta_1 \doteq 0,50$ , na druhém úseku získáme na intervalu 8 000–20 000 kroků  $\beta_2 \doteq 0,26$ . Koeficient  $\beta_1$  není ten, který hledáme. Pro takto malé počty



Obr. 6: Vývoj hrubosti povrchu spočtený na základě modelu balistické depozice na mřížce délky  $L = 256$ , v logaritmickém grafu. Průměrováno přes 1 000 běhů.

kroků je totiž malá pravděpodobnost, že se nová částice treťí do blízkosti nějaké předešlé, a chování je proto téměř nezávislé na modelu.<sup>8</sup> Pro čtyřnásobně velkou mřížku se intervaly linearit posunou v čase doprava,  $\beta_1$  se nezmění, ale dostaneme  $\beta_2 = 0,28$ . Pokud půjdeme ještě dál a provedeme výpočet na mřížce velikosti 4 096, dostaneme koeficient  $\beta_2 = 0,29$ , pro mřížku velikosti 65 536 pak  $\beta_2 = 0,32$ . I v tomto případě existuje analytické řešení, které dává  $\beta = 1/3$ . Vidíme, že konvergence je velice pomalá,<sup>9</sup> navíc pro menší mřížky je obtížné najít lineární interval pro fitování koeficientu  $\beta$ .

Všimněme si také chování křivky mezi našimi dvěma lineárními oblastmi. Její sklon nejdříve z 0,5 roste a pak prudce poklesne na  $\approx 1/3$ , přičemž v grafu udělá (na obr. 6 kolem tisíce kroků) kopeček. Toto chování je celkem atypické a nevíme, jak ho teoretický model, ze kterého plyne  $\alpha$  a  $\beta$ , vysvětlí. Nejde pouze o chybu způsobenou malým  $L$  – pro větší  $L$  je sice křivka „rovnější“, ale kopeček mezi dvěma oblastmi linearit je stejně výrazný.

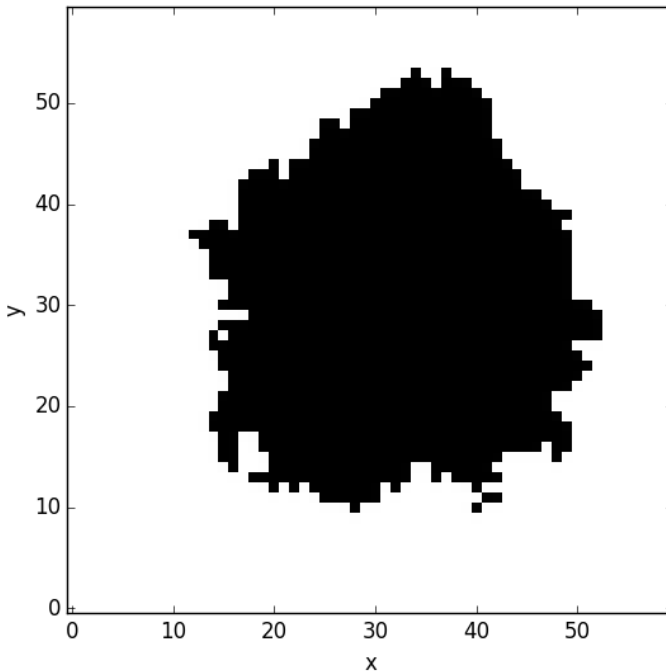
<sup>8</sup>Podle tzv. narozeninového paradoxu víme, že tohle chování bychom měli pozorovat pro řádově prvních  $\sqrt{L}$  kroků.

<sup>9</sup>Viz např. <http://www.thp.uni-koeln.de/krug/teaching-Dateien/SS2012/Farnudi2011.pdf>



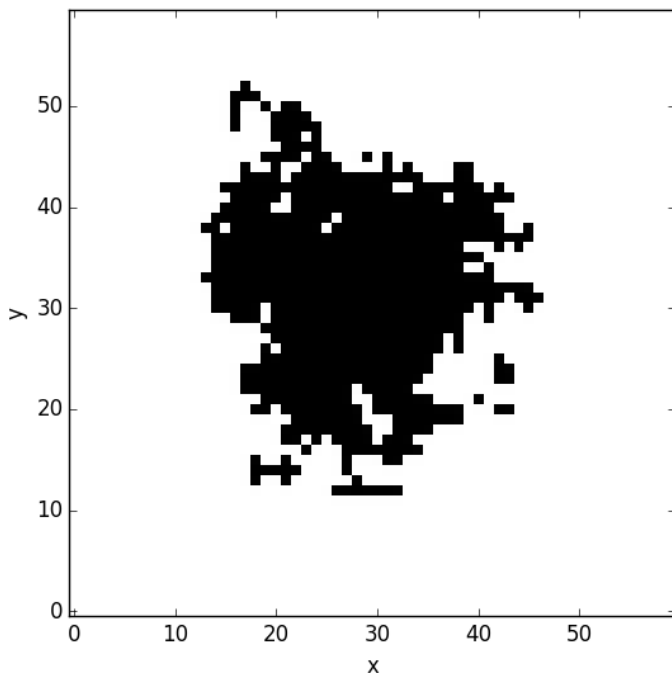
Alternativním numerickým přístupem, kterým taky vyřešíme těžce pozorovatelnou vlnitost křivky, může být výpočet numerické derivace naší log-log křivky a hledání intervalu, ve kterém je tato derivace konstantní. U balistické depozice je ale problém v tom, že numerická derivace výrazně osciluje a musíme hrubost průměrovat přes příliš mnoho běhů (nebo počítat derivaci přes hodně sousedních bodů) na to, aby byla pro výpočet koeficientu  $\beta$  použitelná. Obecně můžeme říct, že jsme u této úlohy naráželi na problém s výpočetním časem. Pro seriózní simulační výpočty se proto nepoužívají interpretované jazyky jako Python, ale C, C++ či Fortran.

- d) Uzdravování nakažených buněk implementujeme do modelu jednoduše: před řádky kódu provádějící nakažení jedné ze sousedních buněk necháme vygenerovat náhodné číslo od 0 do 1 a pokud je menší než pravděpodobnost uzdravení, právě vybraná buňka se uzdraví a vybíráme jinou buňku. Také již nebudeme označovat nemocné buňky obklopené nemocnými indexem 2. Navíc předpokládáme  $p_1 + p_2 = 1$ ; nemá smysl uvažovat kroky, kdy nedojde k nakažení žádné buňky, protože v simulaci nesledujeme skutečný čas (tj. s klidem vyřazujeme kroky, kdy se nic neděje).



Obr. 7: Stav nakažených buněk po 1500 krocích Edenova modelu s pravděpodobností uzdravení 0,1.

Pokud zvolíme  $p_1 < p_2$ , tedy že pravděpodobnost nakažení je menší než pravděpodobnost uzdravení, dojde v několika málo krocích (čím větší  $p_2$ , tím méně kroků) k uzdravení všech buněk a simulace končí. Pokud zvolíme  $p_1 \gg p_2$ , například  $p_1 = 0,9$ , nebude se výsledek příliš lišit od případu  $p_1 = 1$ , pouze mírně naroste porozita a rozeklanost povrchu, viz obrázek 7. Zajímavý je případ  $p_1 \gtrsim p_2$ . Pro volbu  $p_1 = 0,55$  jsme dostali obrázek 8, přičemž simulace měla pětikrát více kroků než v případě  $p_1 = 0,9$ . Porozita je mnohem vyšší, dokonce vznikají oddělené ostrůvky nakažených buněk. Celý vývoj nákazy si můžete prohlédnout v animaci na webu.<sup>10</sup>



Obr. 8: Stav nakažených buněk po 7500 krocích Edenova modelu s pravděpodobností uzdravení 0,45.

- e) Model pro simulaci DLA obsahuje dva parametry, jejichž hodnoty se výrazně projeví na výsledku. Jsou to počáteční vzdálenost každé difundující částice a velikost oblasti, mimo kterou nesmí částice utéct.<sup>11</sup> Také vyvstává otázka, jak měřit vzdálenost částice od počátku. Na šestiúhelníkové mřížce jsme radiální vzdálenost interpretovali jako „šestiúhelníkovou slupku“

<sup>10</sup><http://fykos.cz/rocnik31/ulohy/serie5>

<sup>11</sup>Existují samozřejmě alternativní postupy, například místo omezení pohybu na určitou oblast můžeme zavést limit na délku trajektorie difundující částice.

– ta má svým tvarem již poměrně blízko ke kružnici. Měli bychom počáteční vzdálenost na čtvercové mřížce interpretovat jako poloměr kružnice, nebo rozměr čtverce?

Položená otázka nemá jednoznačnou odpověď, oba přístupy mohou přinést zajímavý výsledek. Jelikož je ale cílem naší simulace napodobit přírodní jev růstu krystalů z roztoku, necháme startovat částice na kružnici a podobně jako u úloh s náhodnými procházkami budeme předpokládat, že pro simulace velkých rozměrů přestane hrát roli, že jsme skutečný všesměrový pohyb omezili na mřížku. Co se týče dvou zmíněných parametrů, jedná se o trade-off mezi rychlostí a přesností simulace. Čím dále bude částice startovat a čím méně omezíme její pohyb, tím přesnější výsledek dostaneme – na druhou stranu, náročnost simulace bude prudce růst. Zde jsme zvolili počáteční vzdálenost jako  $1,2r_{\max}$  a šíření jsme zastavili, když částice utekla za  $1,5r_{\max}$ . Zde použitý kód naleznete jako přílohu u řešení na webu, na obrázku 9 je pak výsledný krystal složený z 8 000 částic. Na základě vzorečku z seriálu<sup>12</sup>

$$D_{\text{DLA}} = \frac{\log N}{\log r_{\max}}, (??)$$

jsme určili fraktální dimenzi  $D = 1,79$ ; opakováním simulace si můžeme ověřit, že se první tři platné číslice nemění. Řešení diferenciálních rovnic definujících DLA, kde se částice pohybují Brownovým pohybem (tj. nejsou vázány na mřížku), vede na hodnotu dimenze  $D = 1,71$ . Všimněte si, že na čtvercové mřížce jsme dostali vyšší hodnotu dimenze než na šestiúhelníkové v seriálu (1,75). Mohli bychom se tedy domnívat, že povolení pohybu do více směrů přibližuje náš odhad výsledku pro skutečnou, na mřížku nevázanou difúzi. Nesmíme však zapomínat, že u obou simulací jsme výrazně omezili prostor, ve kterém se částice smí pohybovat, nemáme tedy dostatečně dobrý podklad pro vyvozování podobných závěrů.

Ještě uveďme, že existují různé modifikace DLA. Například můžeme zavést pravděpodobnost navázání částice na krystal. Pokud je výrazně menší než 1, může se částice dostat hlouběji do keříčků krystalu. Fraktál pak začíná být geometricky hustý, tzn. jeho dimenze se blíží hodnotě 2 (dimenze prostoru, ve kterém se pohybujeme).

*Miroslav Hanzelka*  
mirek@fykos.cz

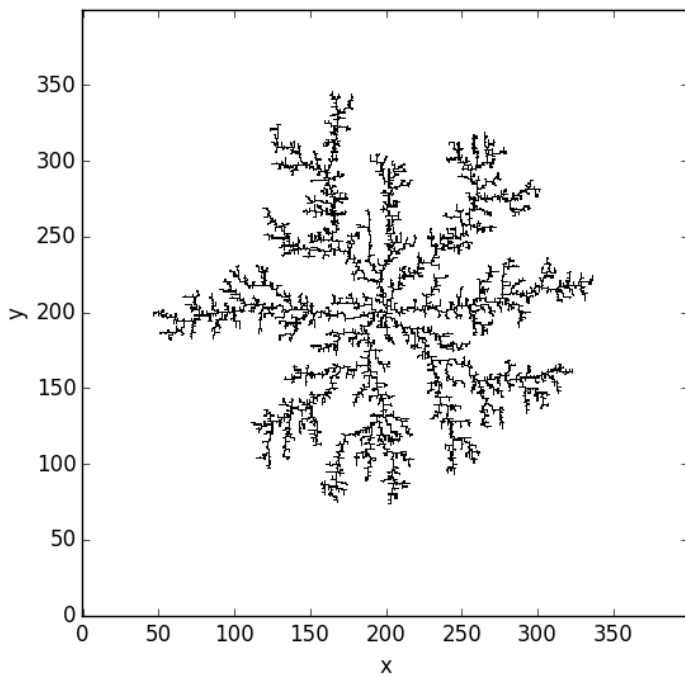
*Lukáš Timko*  
lukast@fykos.cz

---

Fyzikální korespondenční seminář je organizován studenty MFF UK. Je zastřešen Oddělením pro vnější vztahy a propagaci MFF UK a podporován Ústavem teoretické fyziky MFF UK, jeho zaměstnanci a Jednotou českých matematiků a fyziků.

Toto dílo je šířeno pod licencí Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported.  
Pro zobrazení kopie této licence navštivte <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>.

<sup>12</sup>V seriálu bylo napsáno, že zatímco v případě Kochovy vločky měříme velikost strany trojúhelníku, u DLA měříme rozměr krystalu. Nebylo tam však již zmíněno, že tato záměna má být provedena podle jako  $1/\varepsilon \rightarrow r_{\max}$ . Pokud prostě dosadíme místo  $\varepsilon$  hodnotu  $r_{\max}$ , dostaneme výsledek s opačným znaménkem. Proto za řešení uvádějící chybné znaménko nebyly strhávány body. Matematická definice dimenze ovšem může být libovolná, jde pouze o to, jak interpretujeme výsledky – klidně bychom dimenzi mohli zadefinovat tak, aby byla pro fraktál jako Kochova vločka, který neroste, ale „houstne“, záporná.



Obr. 9: Výsledek simulace růstu podle DLA modelu na čtvercové mřížce. Počet částic v krystalu je 8 000.