
1.VAJA: NAKLJUČNA ŠTEVILA

Dominik Primožič

17. MAREC 2025

1. Naloga

Napišite program, ki na daljico (1D), v kvadrat (2D) in kocko (3D) naključno postavi N trdih kroglic (v 1D je to daljica z dolžino premera, v 2D pa krog) s premerom 1 tako, da se ne prekrivajo. Velikost škatle določite iz podane gostote, ki je vhodni parameter. Končne koordinate kroglic naj program izpiše v datoteko in to narišite z Gnuplotom. Določite, do katere gostote lahko naključno porazdelite diske. Premislite, kakšne so možne kristalne strukture in kakšne so tu gostote? Določite še zasedenost prostora in poroznost! Upoštevajte periodične robne pogoje!

Metode

Problem je povsem identičen v vseh treh dimenzijah, zato sem se reševanja lotil za splošen n dimenzionalen prostor. Na podlagi vnesenih parametrov N in ρ , program najprej izračuna velikost celice, l :

$$l = \left(\frac{N}{\rho}\right)^{\frac{1}{\dim}}$$

Velikost prostora je nato nastavljena na dimenzije $-\frac{l}{2}$ do $\frac{l}{2}$ v vseh smereh, da je prostor centriran na izhodišče. V zanki sledi postavljanje atomov v preprostem zaporedju:

1. Naključno so izbrane vse koordinate atoma
2. V ugnezeni zanki se preveri, če na razdalji manjši od 1 že obstaja postavljen atom
3. Kolikor obstaja se nov atom ne postavi, označi se neuspeh poskus in generira nove koordinate za atom. Atom se lahko neuspešno postavi 250-krat preden program vrne prazno strukturo, torej celica ni mogoča. V primeru, da se nov atom postavi, program nadaljuje na postavljanje naslednjega atoma.

Pri računanju razdalje sem upošteval periodične robne pogoje, torej atom ima tudi navidezno sliko, čez rob celice v vseh smereh.

Na koncu se pred izpisom v datoteko izračuna tudi zasedenost prostora. Ta je izračunana kot razmerje med volumnom objektov v celici in volumnom celice.

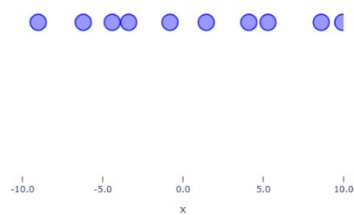
$$P = \frac{N \pi^{\frac{\dim}{2}}}{\Gamma\left(\frac{\dim}{2} + 1\right) l^{\dim}}$$

Za shranjevanje koordinat sem v objektu implementiral dvodimenzionalno polje, ki se dinamično dopolnjuje s polji koordinat. Pristop je učinkovit za dan problem, v katerem ne poznamo končnega števila elementov. V primeru, da bo število elementov vedno fiksirano, je bolj primeren pristop prealokiranja spomina v konstruktorju objekta. Tega nisem implementiral, ker program ne obravnava velikega števila delcev ali visokih dimenzij, zato na probleme s spominom nisem naletel.

Rezultati

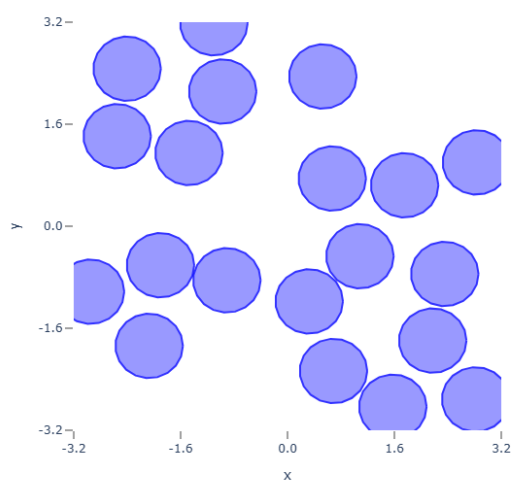
Za vizualizacijo sem generiral postavitev 10 delcev v eni dimenziji, 20 v dveh in 40 v treh, vse z gostoto delcev 0.5.

Diski v 1D

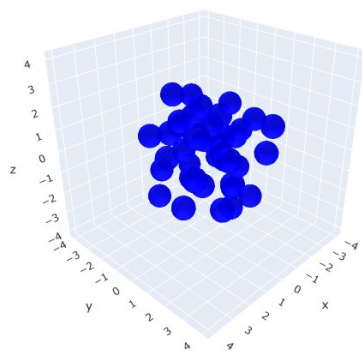


Slika 1: Porazdelitev delcev v eni dimenziji ($N=10$, $\rho=0.5$)

Diski v 2D

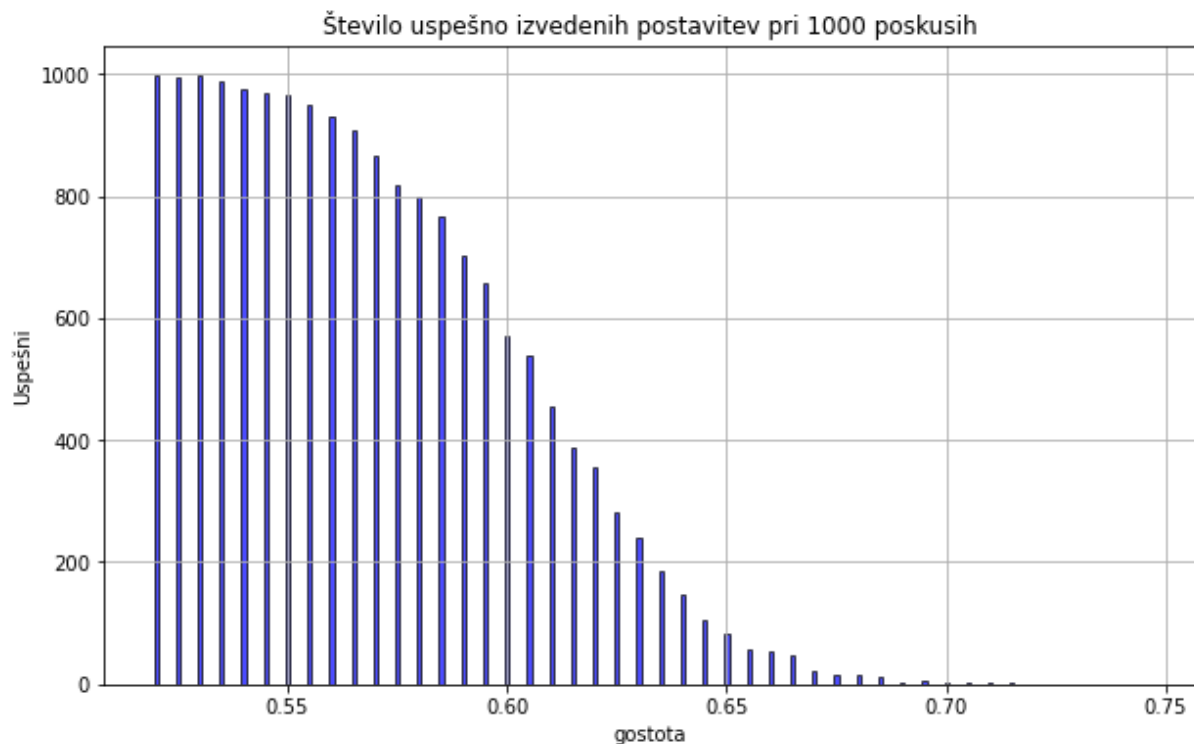


Slika 2 Porazdelitev delcev v dveh dimenzijah ($N=20$, $\rho=0.5$)



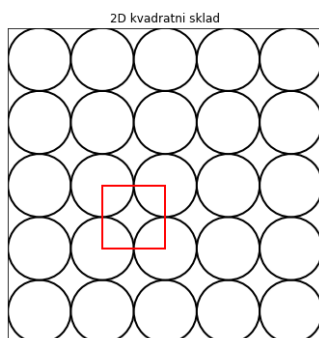
Slika 3: Porazdelitev delcev v trehi dimenzijah ($N=40$, $\rho=0.5$)

Gostoto, do katere lahko porazdelimo diske, sem določil samo v 2D, ker je vizualizacija najlažja. Uporabil sem »brute-force« način, kjer sem gostoto postopno spreminjal, dokler program ni več generiral ustreznih datotek. Maksimalna gostota s tem načinom je bila v preletu 0.65. V nadaljevanju sem naredil 1000 poskusov postavitve, kjer se za uspešno šteje le primer, ko je bilo postavljenih vseh N delcev. Za preverjanje odstopanja sem teh 1000 poskusov generiral v intervalu gostot 0.52 do 0.745. Pojem maksimalne gostote lahko opredelimo na dva načina. Največja gostota, da je postavitve uspešna v vseh poskusih, to je konkretno pri gostoti 0.53. Ali pa največja gostota, kjer uspeh ni le naključje. Vsekakor pa je iz grafa 1 razvidno, da nad gostoto 0.7 uspeh ni več verjeten.

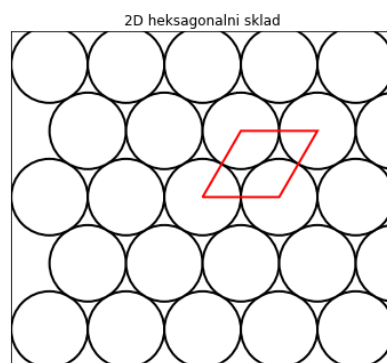


Graf 1: Število uspešno izvedenih postavitvev pri 1000 poskusih

V kristalografiji je bolj kot gostota smiselni podatek o zasedenosti prostora. Posebej zanimive so visoko gostotne limite, tako imenovani najgostejši skladi. V eni dimenziji je možen le en tak sklad z zasedenostjo prostora 1. Naključno se je tej vrednosti skoraj nemogoče približati. V dveh dimenzijah se pojavi raznolikost, na voljo sta dve kristalni strukturi najgostejšega tipa: kvadratni sklad in heksagonalni sklad, prikazana na slikah 4 in 5.



Slika 4: Kvadratni najgostejši sklad



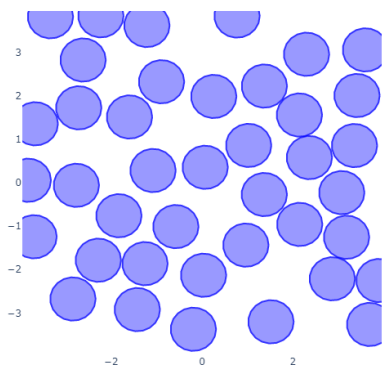
Slika 5: Heksagonalni najgostejši sklad

V treh dimenzijah je situacija podobna dvodimenzionalni le z eno dimenzijo več. Obravnava eno dimenzionalnega primera ni preveč zanimiva, dva in tri dimenzionalnega pa je skoraj identična, zato sem se osredotočil le na dve dimenziji. V tabeli 1 so podane teoretične zasedenosti prostora v teh skladih in zasedenosti prostora pri izbranih gostota naključnega postavljanja.

Gostota	Zasedenost prostora
1 (kvadratni najgostejši sklad)	0.7854
1.15 (heksagonalni najgostejši sklad)	0.9069
0.53	0.4163
0.7	0.5498

Tabela 1: Zasedenost prostora različnih skladov

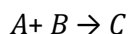
Iz slike 4 je razvidno, da je gostota kvadratnega najgostejšega sklada 1, čemur se program ne uspe približati. Pri gostoti 0.7 je zasedenost prostora le približno 55%, kar se izkazalo za zgornjo mejo naključne postavitve. Zadnja zares uspešna postavitve ima zasedenost prostora le 42%, kar je presenetljivo majhen delež. Poroznost je ekvivalentna zasedenosti prostora, definirana je kot delež nezasedenega prostora, torej velja: $P + V = 1$, kjer je V poroznost in P zasedenost prostora.



Slika 6: Naključno postavljeni diski ($N=40$, $\rho \approx 0.64$), ena gostejših uspešnih postavitvev

2. Naloga

Simulirajte naključno gibanje molekul v 2D kvadratnem reaktorju, ki lahko reagirajo po naslednji reakciji



Štartate iz naključne porazdelitve molekul A in B. Molekule so točkaste in se naključno premikajo ter reagirajo, če se približajo na manj kot neka mejna razdalja. Sledite koncentracijam A, B in C kot funkcija časa. Določite hitrost reakcije. Kako se ta spreminja od koncentracij A in B ter od mejne razdalje. Kako se spremeni hitrost reakcije, če začetni koncentraciji A in B nista enaki ali če se nahaja v poroznem mediju?

Metode

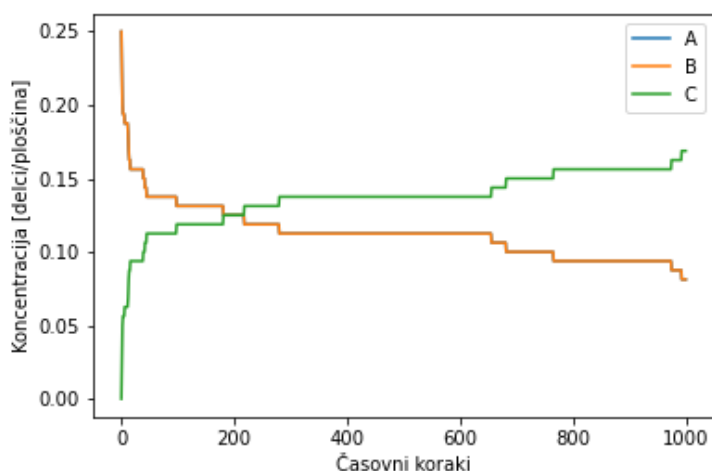
Problema sem se lotil kot nadgradnjo prve naloge. Vnos v program je tokrat število delcev A, število delcev B, njuni gostoti in razdalja na kateri delca reagirata. Prvotna konfiguracija delcev je preprosto $A + B$ delcev z gostoto $\rho = \rho_A + \rho_B$ naključno postavljenih s programom iz naloge 1.

Za reakcijo sem privzel, da so molekule idealni plini, torej nimajo volumna in lahko se prosto premikajo. Reakcija se zgodi, če delec po premiku sreča nasprotni delec. V primeru, da se srečata med premikom tega program ne šteje kot reakcijo. Lahko bi delce implementiral kot trde diske, a potem bi bilo potrebno reševati enačbe gibanj (molekulske dinamike pa še nismo obravnavali). Program je zasnovan, da se v vsakem časovnem koraku vsi delci premaknejo za naključno razdaljo v naključno smer. Koordinate delcev sem shranil v dvodimenzionalno polje, nato pa oznake katere koordinata pripada kateri molekuli shranil v iskalno tabelo. Tak pristop omogoča zelo hitro iskanje, če sta molekuli za reakcijo pravi. Pojavila pa se mi je težava, da moram obdržati prazne markerje ali pa porabiti veliko časa za preurejanje. Alternativno bi lahko držal posebno polje s koordinatami za A, B in C molekule. Sistem nikoli ni postal dovolj velik, da bi se moj pristop izkazal za problematičnega, zato sem ga ohranil.

Reakcija v poroznem mediju predstavlja drugačen problem. Program v tem primeru sprejme še število krogel, ki tvorijo porozen medij. Začetna konfiguracija se postavi enako kot v prvi nalogi, kar ni najbolj učinkovito, a zadostuje za preprosto simulacijo. Naključno se postavljene delce nato označi kot molekulo A, B ali kroglo. V tem primeru posamezne delce shranjujem kot polja s koordinatami, namesto markerjev. Sledi enak pristop kot pri prvem delu naloge, le da sedaj program preverja ali je po končanem premiku v krogli medija, kolikor je se premik označi kot neveljaven in tisti atom se ne premakne. Enako, če je po reakciji nastala molekula v krogli medija, se reakcija označi kot neveljavna in se ne zgodi.

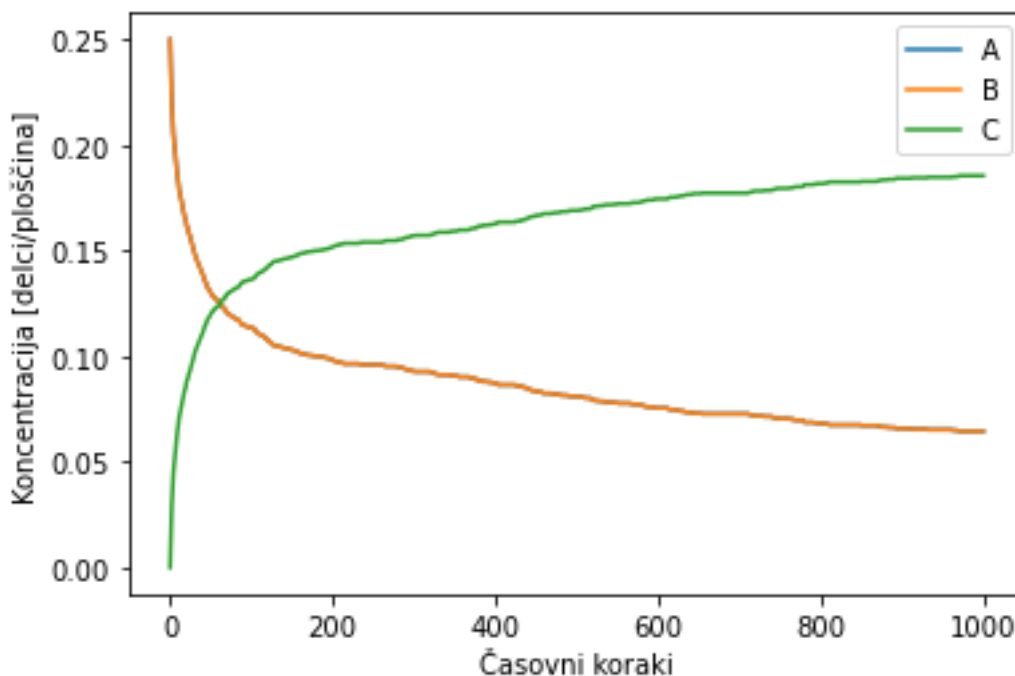
Rezultati

Spreminjanje koncentracij A, B in C pri $p=0.5$ in 20 A in B delcev je prikazano na grafu 2. Reakcija je simulirana v periodičnem reaktorju, zato sem nastavljal majhno število delcev. Delci A in B reagirajo in nastajajo delci C do neke konstante koncentracije, pri kateri se delci ne najdejo več po naključju.



Graf 2: Spreminjanje koncentracij po časovnih korakih

Bolj gladke grafe dobim, če simuliram večje število delcev, kar je prikazano na grafu 3. Za same naloge se mi je zdelo to nepomembno, zato sem simuliral manjša števila delcev.

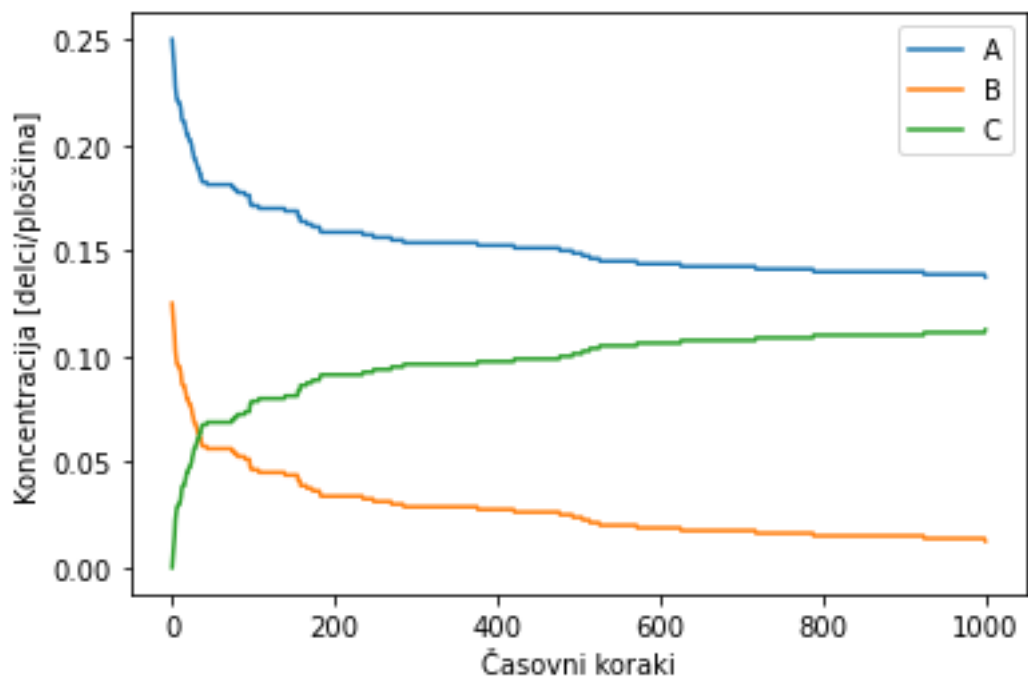


Graf 3: Spreminjanje koncentracij pri večjem številu delcev (1000 A in 1000 B)

Hitrost reakcije sem izračunal po preprostem načinu. Za konec reakcije sem vzel čas, ko se koncentracija C približno izravna in izračunal $v = \frac{\Delta c}{t}$. Za reakcijo iz grafa 3 je to približno 0.0002 delcev na časovno enoto, v nadaljevanju brez enote. Reakcija je veliko hitrejša na začetku, tako da bi

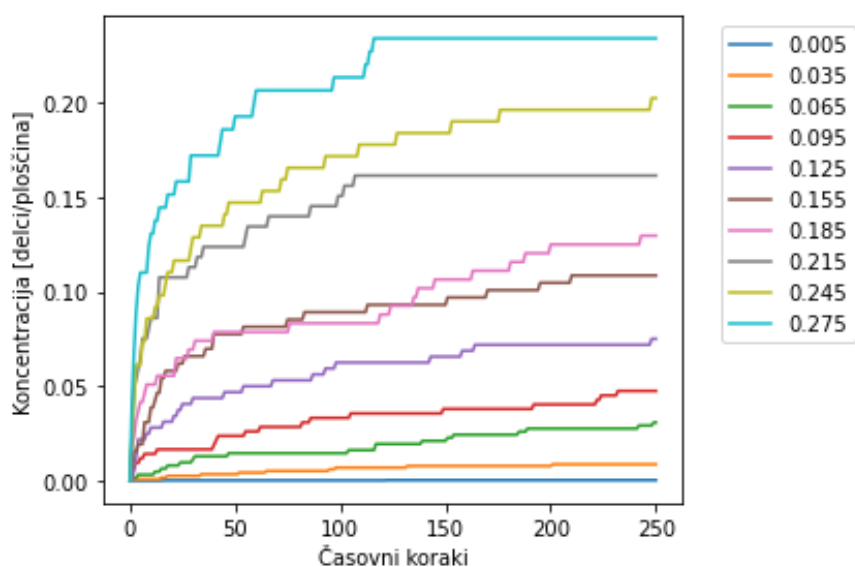
lahko za hitrost vzel le interval do 200 časovnih korakov, potem je hitrost 0.0006. Izračuni hitrosti so manj zanesljivi za simulacije z manj delci, a za hitro oceno so dovolj dobri.

Zmanjšanje začetne koncentracije B napram A povzroči, da se reakcija zaključi hitreje, to je prikazano na grafu 4. Reakcija se praktično zaključi po 600 korakih, medtem kot se pri enaki koncentracijah ni. Hitrost te reakcije je približno 0.00018, kar je manj od reakcije enakih koncentracij.



Graf 4: Spreminjanje koncentracij z različnimi začetnimi koncentracijami (200 A in 100 B)

Nato sem preveril vpliv spreminjanja začetne koncentracije A in B. Sprva, da sta A in B v enakih začetnih koncentracijah. Poskus sem simuliral pri nastavljenih gostotah od 0.005 do 0.275. Pričakovano je hitrost reakcije večja, če sta koncentraciji A in B večji. Rezultati so prikazani na grafu 5 in v tabeli 2.

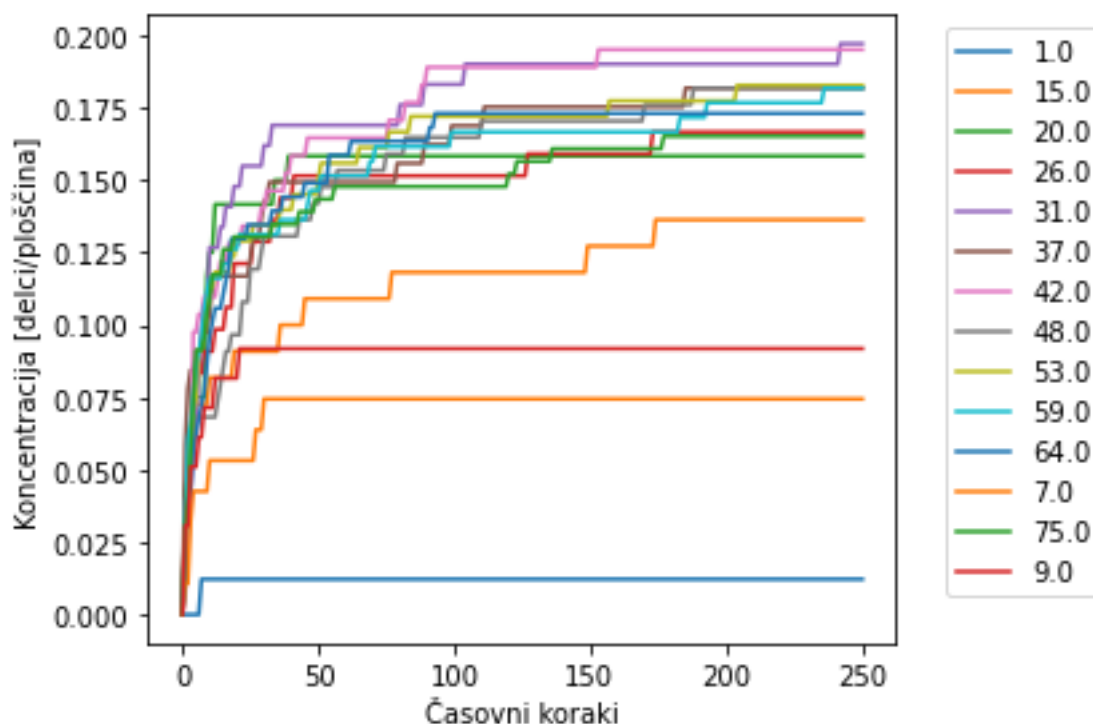


Graf 5: Sprememba koncentracije C s spreminjanjem enakih koncentracij A in B

Koncentraciji A in B	Hitrost
0.005	0
0.035	0.00002
0.065	0.001
0.095	0.00016
0.125	0.00032
0.155	0.0004
0.185	0.0005
0.215	0.00064
0.245	0.0008
0.275	0.00092

Tabela 2: Hitrosti reakcij glede na spreminjanje koncentracije A in B

Nato sem preveril še vpliv razmerja A in B, tako da sem spreminjal število delcev B. Koncentracijski profil C je prikazan na grafu 6. Največja hitrost reakcije je, ko sta A in B v enakem razmerju. Večina reakcije poteče povsem do konca pri majhnem številu delcev B. Hitrost kot pričakovano narašča z večanjem števila delcev B. Izbrane hitrosti so izračunane v tabeli 3.

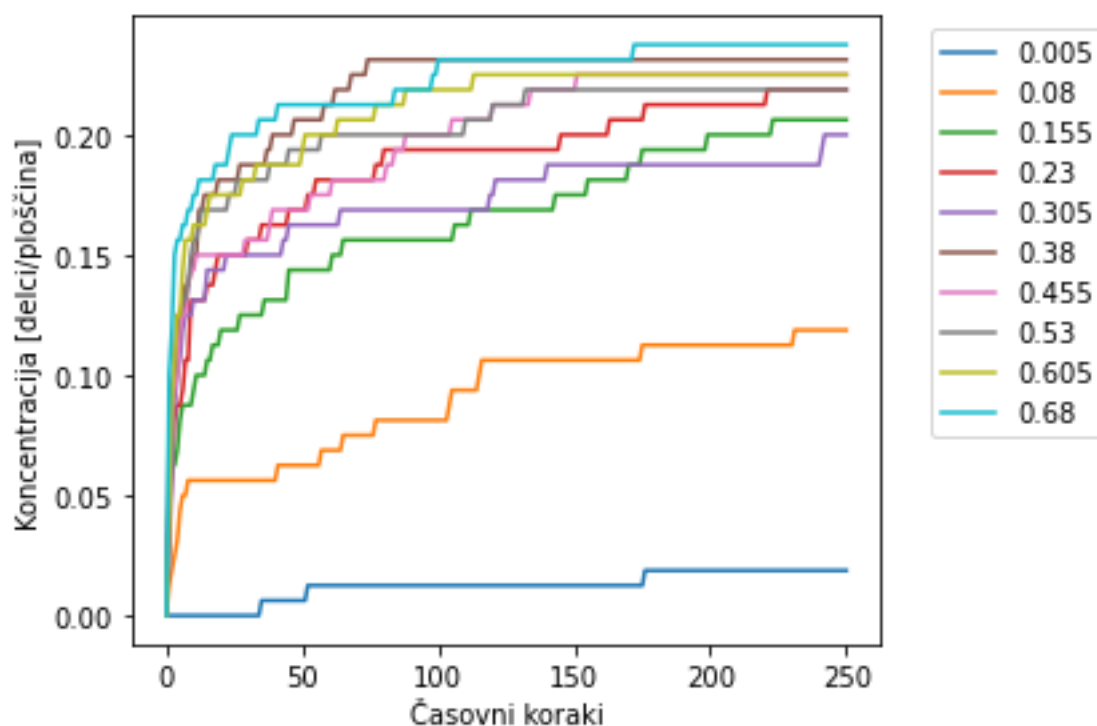


Graf 6: Spreminjanje koncentracije C s spreminjanjem števila delcev B pri 40 delcih A in skupni gostoti 0.5

Koncentracija B (število B)	Hitrost
0.012 (1)	0.000048
0.1 (10)	0.0004
0.17 (20)	0.00062
0.25 (40)	0.00076
0.30 (60)	0.00074

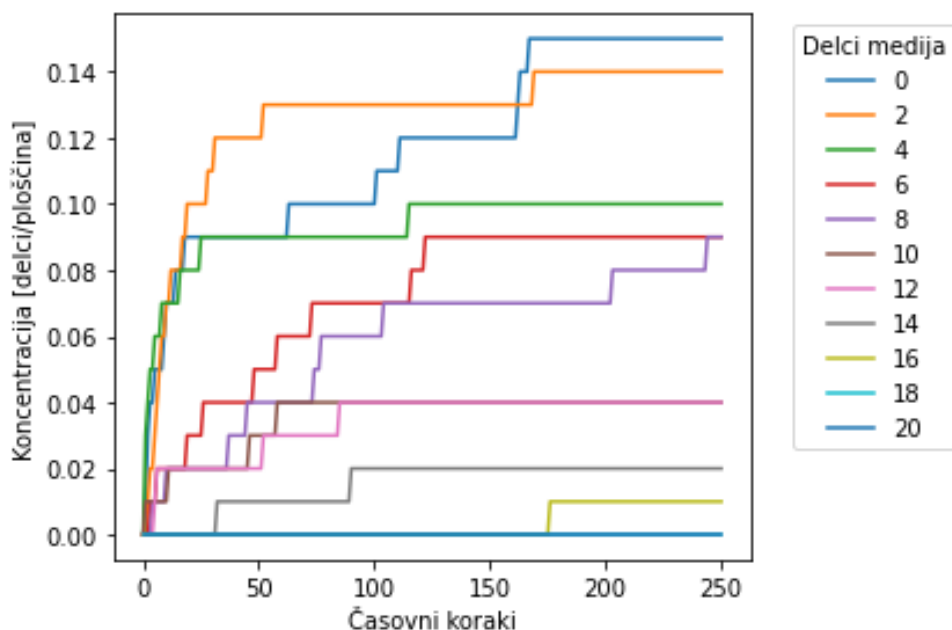
Tabela 3: Hitrosti reakcij glede na spreminjanje koncentracije B

Preveril sem še vpliv dolžine koraka v naključnem premiku na hitrost reakcije. Koncentracijski profil je prikazan na grafu 7, izračunane hitrosti pa v tabeli. Pričakovano je hitrost reakcije večja pri večjih premikih, ker je verjetnost, da se delci srečajo večja.



Graf 7: Spreminjanje koncentracije C s spreminjanjem dolžine premika, A in B pri enakih koncentracijah

Vpliv poroznosti medija sem preverjal z večanjem števila por in manjšanjem števila delcev v škatli konstantne velikosti. Nastavljeni parametri so bili: 20 A, 20 B, skupna gostota 0.4 in razdalja reakcije 1 s premikom v časovnih korakih 0.1. Število krogel medija se je povečevalo iz 0 do 40. Koncentracija zvrsti C se manjša z manjšanjem poroznosti medija, reakcija je vedno manj verjetna, če je med A in B veliko drugih delcev. Trend je prikazan na grafu 7. Izbrane hitrosti reakcij so izračunane v tabeli 4. Kot pričakovano se hitrost reakcije zmanjšuje z manjšanjem poroznosti.



Graf 8: Spreminjanje koncentracije C z večanjem števila delcev medija

Število krogel medija	Hitrost
0	0.0006
4	0.0004
10	0.00016
14	0.00008
20	0

Tabela 4: Hitrosti reakcij glede na spreminjanje poroznosti