



# Simulačná štúdia

## Rast ľadového dendritu

Varianta 11: Model pomocou celulárneho automatu

3. decembra 2022

**Tereza Magerková** (xmager00)  
**Tomáš Husár** (xhusar11)

# 1 Úvod

V tejto práci je riešená implementácia celulárneho automatu[2, p. 208], ktorý bude použitý pre účely simulovania vzniku ľadového dendritu, teda snehovej vločky. Zmyslom experimentov je sledovať rôzne podoby a tvary pri zmene parametrov okolia. Ide teda o fázu života vločky, ktorá sa nedá bez laboratórneho vybavenia sledovať, nakoľko pri ceste na povrch je vločka deformovaná.

## 2 Rozbor vybranej témy a použitých technológií

Téma rastu kryštálov je veľmi rozsiahla a dá sa na ňu pozeráť z viacerých vedeckých smerov. Pre naše účely sme sa rozhodli zamerať sa primárne na fyzikálnu rovinu, presnejšie o proces difúzie vody v okolí kryštálu a kinetický povrchový proces. Oba procesy popisujú rast - difúzia dodáva systému dostupnú vodu a kinetický proces túto vodu viaže na oblasť vrcholov hexagónu. [4]

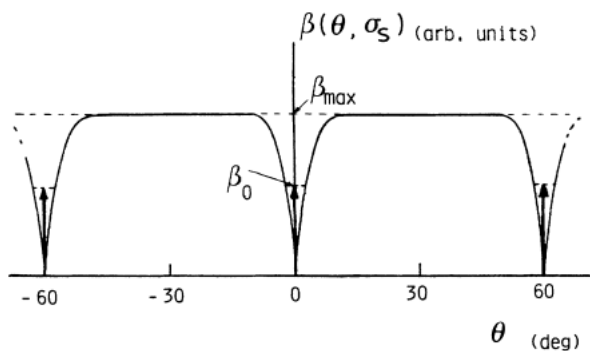
### 2.1 Povrchový kinetický proces

Proces je popísaný pomocou rovnice

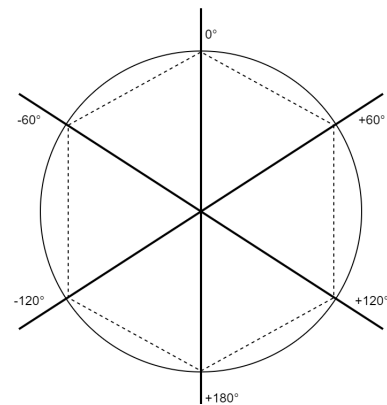
$$V_k = \beta(\theta, \sigma_s) \sigma_s \quad (1)$$

Kde  $\beta(\theta, \sigma_s)$  je kinetický koeficient,  $\theta$  je sklon od molekulárne rovního povrchu a  $\sigma_s$  je supersaturácia povrchu.

Na základe grafu [4] vyplývajúceho z kinetického koeficientu v závislosti na uhle  $\theta$  vieme odvodiť, že rast vločky sa bude najviac prejavovať na vrcholoch šesťhranného hranola, a najmenej na jeho stranách.



priebeh kinetického koeficientu[4]



Obr. 1: Grafické znázornenie priebehu kinetického koeficientu

### 2.2 Difúzny proces

Popisuje akým spôsobom sú molekuly vody dodávané kryštálovému povrchu.

$$V_d = \frac{v_c p_e}{kT} D q_s \quad (2)$$

Kde  $v_c$  je objem molekuly v kryštáli,  $p_e$  je tlak molekúl sublimovaných z ľadu,  $k$  Boltzmannova konštanta,  $T$  absolútna teplota,  $D$  difúzny koeficient a  $q_s$  gradient supersaturácie na povrchu.

## 2.3 Súvis procesov

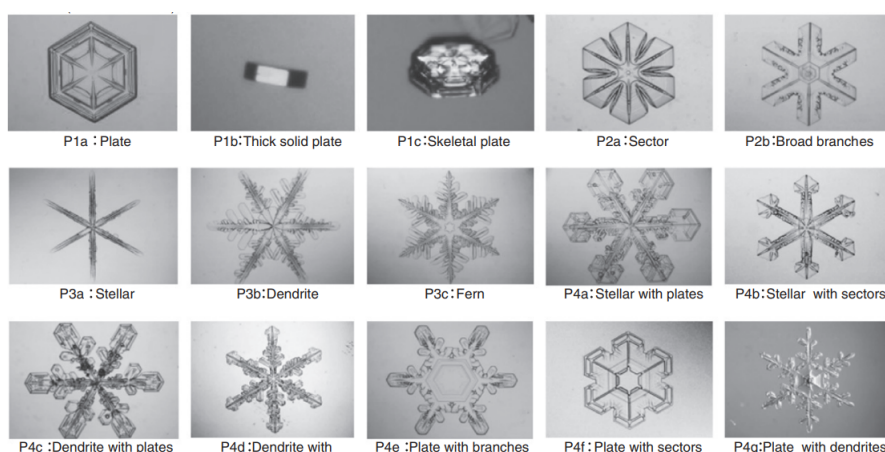
Oba vyššie popísané procesy popisujú rovnaký dej - rast. Nedávalo by teda zmysel, aby kryštál rástol neúmerne rýchlo ak nemá dostatok vody, a naopak aby nerástol v prítomnosti voľných molekúl[4]. Z toho vyplýva ich rovnosť.

$$V_d = V_k \quad (3)$$

## 2.4 Tvorba vločky a jej tvary

Najprv sa vytvorí sférická zamrznutá kvapka, ktorá adsorpciou okolitej vody rastie do perfektne hexagonálneho hranola. Rozvoj tohoto hranola je ďalej podmienený vonkajšími vplyvmi prostredia (teplota a saturácia), difúznym koeficientom vodnej pary a vodivosťou tepla v atmosfére (zanedbateľný vplyv na rast).[4]

Vločky vieme zaradiť do rôznych kategórií[1], ktoré majú svoje podkategórie. Pre účely tohoto projektu sú však podstatné iba dvojrozmerné útvary z kategórie P1 - P4.



Obr. 2: Výrez z globálnej klasifikácie tvarov snehových kryštálov [1]

## 2.5 Použité postupy

Na implementáciu modelu bol použitý jazyk C a na presnejšie vykreslenie výstupu v CSV formáte jazyk Python za pomoci knižnice `matplotlib`.

## 2.6 Pôvod použitých postupov

Algoritmus výpočtu a abstrakcia témy pochádza z článku *A local cellular model for snow crystal growth* [3]

## 3 Konceptia modelu

Procesy popísané v sekcii 2 boli zachované aj v abstrakcii návrhu.

Pridaná je konštanta  $\beta$ , z intervalu  $\langle 0, 1 \rangle$ , reprezentujúca podmienky prostredia v ktorom rast prebieha (ide teda o reprezentáciu supersaturácie okolia a teploty prostredia).

Povrchový proces mohol byť vďaka hexagonálnemu okoliu zanedbaný a nahradený simulovaním zamŕzania pomocou pripočítavania konštanty  $\gamma$  z intervalu  $\langle 0, 1 \rangle$ .

Úpravou prešla rovnica ?? popisujúca difúziu vody v okolí, ktorá bola aproximovaná na využitie v hexagonálnom poli [3]

$$u(t+1, P) \approx u(t, P) + \frac{\alpha}{12} \left( -6u(t, P) + \sum_{N \in nn(P)} u(t, N) \right) \quad (4)$$

kde  $P$  predstavuje stredovú bunku,  $N$  bunky v okolí a  $nn(P)$  hexagonálne okolie bunky  $P$ .

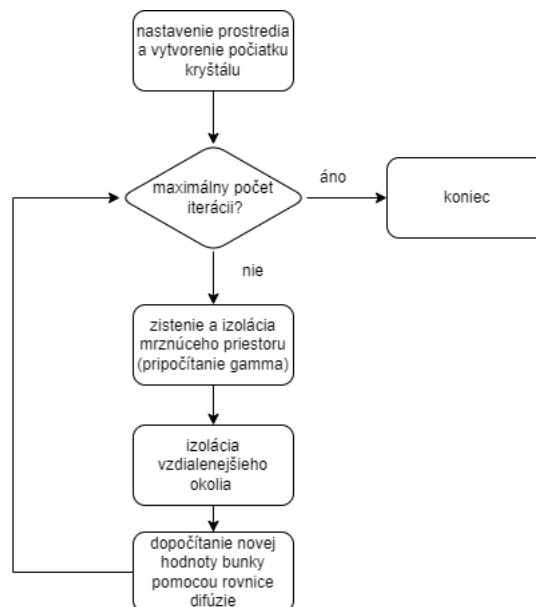
### 3.1 Implementácia modelu

Každá bunka má hodnotu nezáporného racionálneho čísla. Môže mať dva stavy. FROZEN bunky sú také, ktorých hodnota presiahla 1. Tento stav určuje hranicu vzniknutého kryštálu. Ostatné bunky sú stavu NOT\_FROZEN a delia sa na bunky v okolí kryštálu (vplyv kinetického procesu) a vzdialené bunky (vplyv difúzneho procesu).

Hodnota buniek mimo kryštál je iteračne prepočítavaná upravenou rovnicou difúzie 4. Ide pritom o vážený priemer, kde váhu buniek ovplyvňuje parameter  $\alpha$ . Rovnica teda slúži ako prechodová funkcia [2, p.219].

### 3.2 Forma konceptuálneho modelu

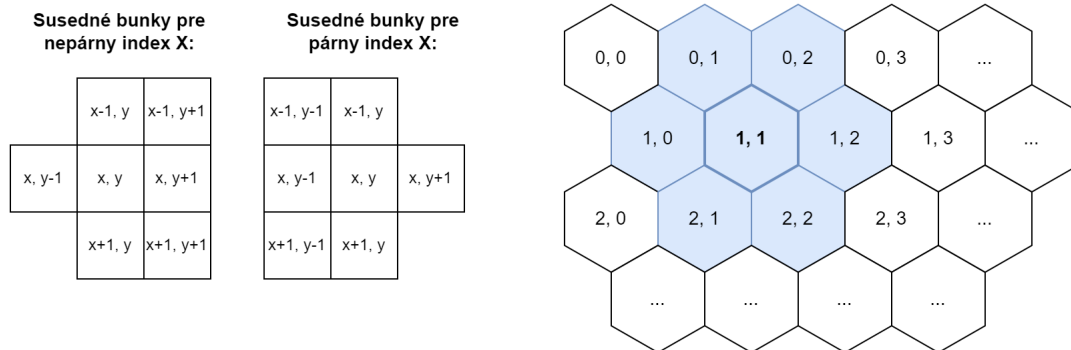
Model je vizualizovaný pomocou priebehu výpočtu zmeny stavu bunky



Obr. 3: Graf priebehu výpočtu

## 4 Architektúra simulačného modelu

Architektúra simulačného modelu je postavená na dvojrozmernom poli, ktoré je upravením okolia bunky aproximované na hexagonálne pole.[2, p.211]



Obr. 4: Vizualizácia hexagonálneho poľa a okolia buniek

Okolie má párnú a nepárnu podobu, aby sa kompenzovalo naklonenie osí pri prevode na hexagonálne pole.

Bunky nemajú samostatnú reprezentáciu nakoľko ide iba o hodnotu v nich a žiadne dodatočné údaje si nieje potrebné uchovať (stavy buniek nie sú uchované, pretože sú ľahko odvoditeľné z ich hodnôt)

### 4.1 Spustenie

Pred spustením je možné upraviť konfiguráciu parametrov programu. Ide o parametre  $\alpha$ ,  $\beta$  a  $\gamma$ , popísané v sekcii 3. Taktiež treba nastaviť veľkosť poľa a počet iterácií v súbore `Makefile`.

Po nastavení konfigurácie je program preložiteľný a spustiteľný pomocou príkazu

```
make run
```

Výstup je realizovaný do súboru `out.txt`. Ten je potom možné vykresliť pomocou priloženého python scriptu pomocou príkazu

```
$ python3 plot.py
```

## 5 Podstata simulačných experimentov a ich priebeh

Cieľom experimentov je zistiť ako podmienky okolia vplývajú na výsledný kryštál. Presnejšie na určenie podmienok pre rôzne kategórie tvarov, ktoré môžu vzniknúť.

### 5.1 Postup experimentovania

Pri experimentovaní sme nastavili parameter  $\alpha$  na hodnotu 1. Cieľom bolo zamedziť neprirodzenému rastu a plne ilustrovať vplyv parametrov prostredia. Pre najlepšie výsledky sme určili veľkosť poľa na hodnotu 400x400 buniek a počet iterácií upravili podľa sledovaného rastu.

## 5.2 Výsledky experimentovania

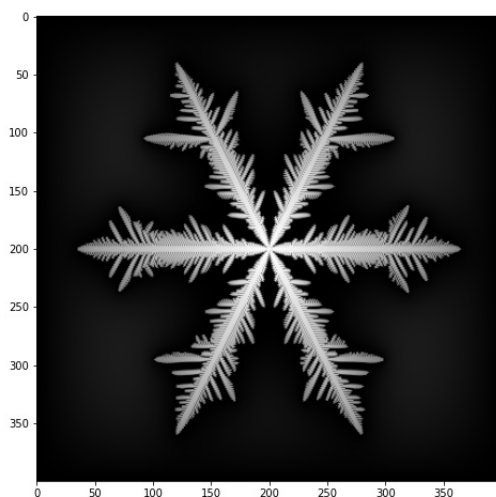
Nižšie popísané experimenty mali navolené parametre aby najlepšie ukázali povahu rastu pri viditeľne odlišiteľných podmienkach.

Prítomný bol aj experiment s nulovými hodnotami parametrov, kde sme podľa očakávania, žiadny rast nezaznamenali.

Povahu rastu v čase sa dalo sledovať postupným generovaním obrázkov pri rôznom počte iterácií s rovnakými parametrami. Jeden takýto priebeh je priložený s zložke pod menom `priebeh.gif`

## 5.3 Experiment 1

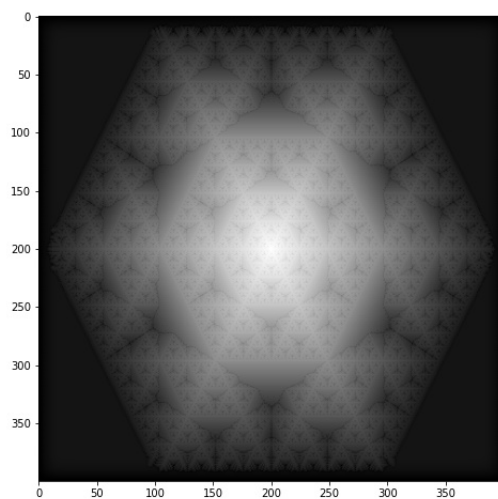
Pri tomto experimente boli parametre nastavené tak, aby vznikol rast dendritov. Ide o nižšiu hodnotu  $\beta = 0,3$  a veľmi nízku hodnotou  $\gamma = 0,0001$ . Sledovalo sa tým, ako tieto parametre vplývajú na šírku ramien a vetvenie pri raste.



Obr. 5:  $\beta = 0,3$   $\gamma = 0,0001$ , 10 000 iterácií

## 5.4 Experiment 2

Oproti experimentu 5.3 boli parametre upravené aby rast dendritov nenastal, ale aby bol pozorovateľný fraktálny rast. Ide o vysokú hodnotu  $\beta = 0,9$  a zvýšenú hodnotou  $\gamma = 0,05$ . Zvýšenie  $\gamma$  ukázalo, že rast do šírky je urýchlený a zanikajú tým jemné detaily a útvary.

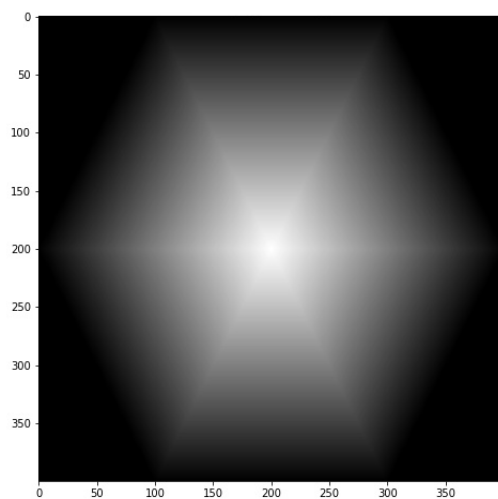


Obr. 6:  $\beta = 0,9$   $\gamma = 0,05$ , 200 iterácií

### 5.5 Experiment 3

Experiment 3 ukázal správanie pri extrémnych hodnotách  $\beta$  a  $\gamma$ . Rast tu nevykazuje žiadne špeciálne útvary. ide o jednoduchú štruktúru, ktorá rastie rovnomerne do všetkých smerov.

Toto správanie bolo odpozorované pre všetky skúšané hodnoty kde bola  $\gamma = 1$ . Je teda plne nezávislé na hodnote  $\beta$  a plne dokazuje citlivosť parametru  $\gamma$ .



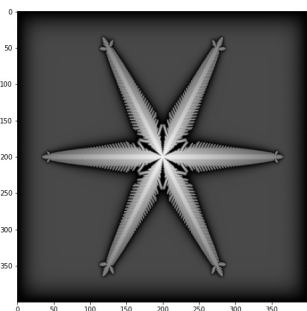
Obr. 7:  $\beta = 0$   $\gamma = 1$ , 200 iterácií



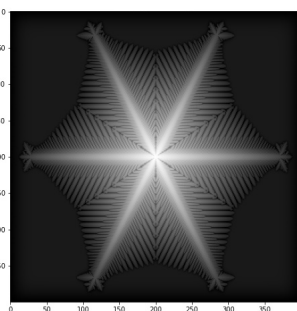
## 6 Zhrnutie simulačných experimentov a záver

V tomto projekte bol implementovaný celulárny automat pomocou ktorého sme vytvorili sadu experimentov, na ktorých sme sledovali útvary a povahu rastu ľadových dendritov v závislosti na parametroch okolia. Z experimentov vyplynulo, že povaha rastu je najcitlivejšia na parameter  $\gamma$ , ktorý udáva mieru zamŕzania. Taktiež sa dá pozorovať vplyv parametru  $\beta$ , saturácie okolia, na rýchlosť rastu (počet iterácií potrebných na vykreslenie kryštálu).

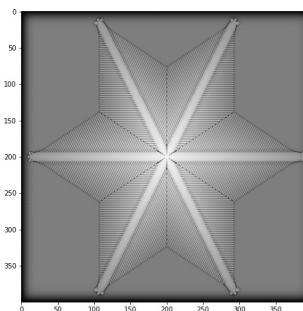
Všeobecne sa dá zhodnotiť, že najjemnejšie útvary sa dajú dosiahnuť pri minimálnych hodnotách  $\gamma$  a hodnotách  $\beta$  z okolia stredu intervalu prípustných hodnôt. Ide teda o prípady kde je zamŕzanie pomalé a v prostredí nieje priveľa vlhkosti.



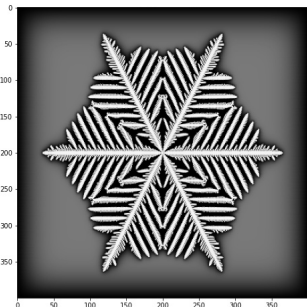
$\beta = 0,6 \quad \gamma = 0,001, 1\,000$  iterácií



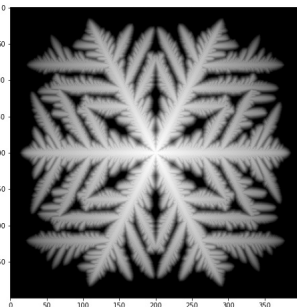
$\beta = 0,7 \quad \gamma = 0,01, 600$  iterácií



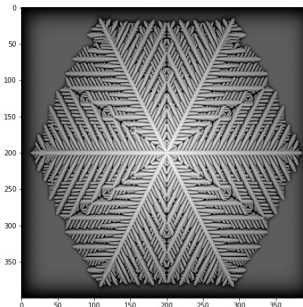
$\beta = 0,9 \quad \gamma = 0,0035, 200$  iterácií



$\beta = 0,5 \quad \gamma = 0, 2\,000$  iterácií



$\beta = 0,4 \quad \gamma = 0,001, 10\,000$  iterácií



$\beta = 0,7 \quad \gamma = 0,001, 800$  iterácií

Obr. 8: Vybrané výsledky ostatných experimentov a ich parametre

## Referencie

- [1] Katsuhiro Kikuchi et al. „A global classification of snow crystals, ice crystals, and solid precipitation based on observations from middle latitudes to polar regions“. In: *Atmospheric Research* 132-133 (2013), s. 460–472. ISSN: 0169-8095. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169809513001841>.
- [2] Hrubý M. Peringr P. *Modelování a simulace*. VUT FIT. URL: <http://www.fit.vutbr.cz/study/courses/IMS/public/prednasky/IMS.pdf>.
- [3] Clifford A. Reiter. „A local cellular model for snow crystal growth“. In: *Chaos, Solitons Fractals* 23.4 (2005), s. 1111–1119. ISSN: 0960-0779. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960077904003741>.
- [4] Etsuro Yokoyama a Toshio Kuroda. „Pattern formation in growth of snow crystals occurring in the surface kinetic process and the diffusion process“. In: *Phys. Rev. A* 41 (4 feb. 1990), s. 2038–2049. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.41.2038>.