

## Sprawozdanie z laboratorium komputerowego

### Symulacje komputerowe w fizyce i inżynierii

## 1 Model Isinga

Model Isinga to matematyczny model fizyczny, który został zaproponowany przez fizyka Ernsta Isinga w 1925 roku. Model ten jest używany w fizyce statystycznej do badania właściwości magnetycznych substancji oraz do analizy przejść fazowych w układach fizycznych. Głównym celem modelu Isinga jest opisanie magnetyzmu w ciałach stałych poprzez uwzględnienie oddziaływań między spinami atomów lub magnetycznymi momentami dipolowymi. Model ten jest prostym, ale ważnym narzędziem do zrozumienia kolektywnego zachowania spinów w ciałach magnetycznych. W modelu Isinga każdy atom lub cząsteczka w ciele stałym ma spin, który może przyjmować jedną z dwóch wartości: "góra" lub "dół", co odpowiada kierunkowi magnetyzmu. Atomy są rozmiędziane na regularnej siatce, a sąsiednie spiny oddziałują ze sobą, co prowadzi do powstawania właściwości magnetycznych.

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i$$

gdzie:  $h$  - energia spinu w zewnętrznym polu magnetycznym,  $J_{ij}$  - całka wymiany Model Isinga jest często używany w kontekście fizyki statystycznej do analizy zachowań fazowych, takich jak przejścia ferromagnetyczne czy antyferromagnetyczne.

$J_{ij} > 0$  – ferromagnetyk

$J_{ij} < 0$  – antyferromagnetyk

$J_{ij} = 0$  – brak oddziaływania

Namagnesowanie:

$$M = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i \rangle$$

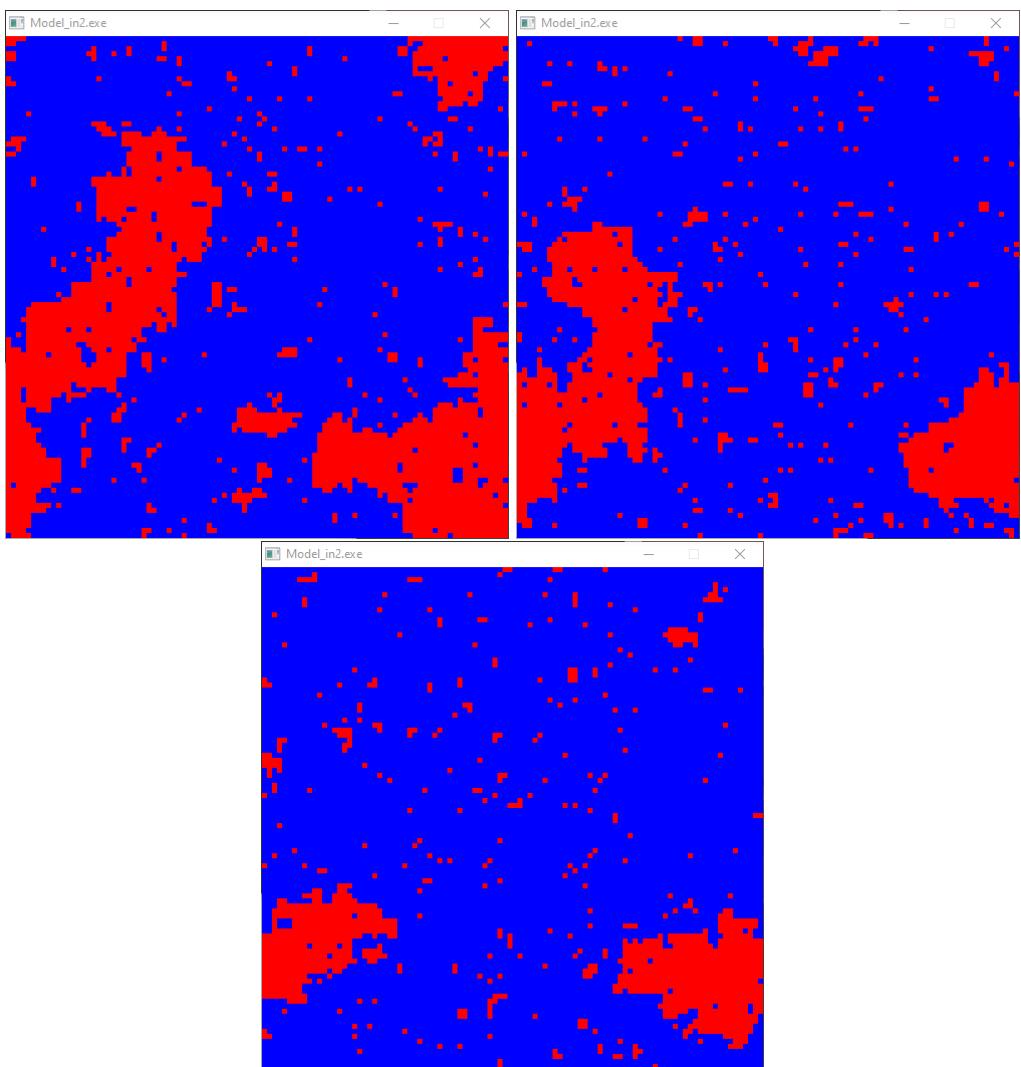
Podatność magnetyczna:

$$\chi = \frac{1}{T^2} [\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2]$$

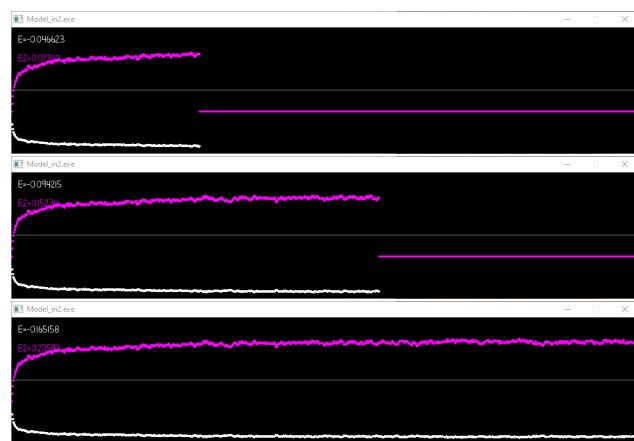
Ciepło właściwe:

$$C = \frac{1}{T^2} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2]$$

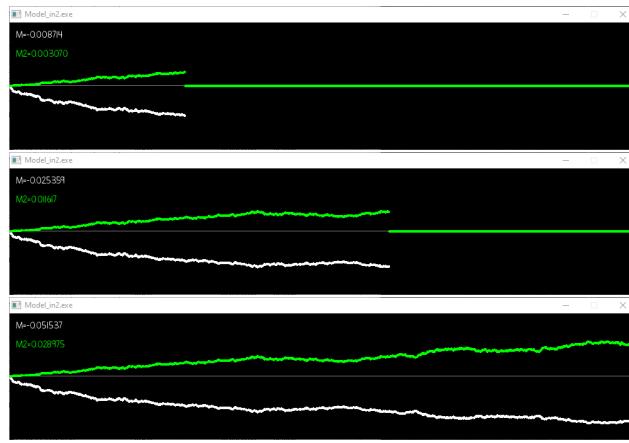
Celem ćwiczenia jest rozwiązywanie zagadnienia modelu Isinga w 2D, wyznaczając zależności średniej namagnesowania i energii od temperatury oraz narysowanie podatności magnetycznej i ciepła właściwego od temperatury.



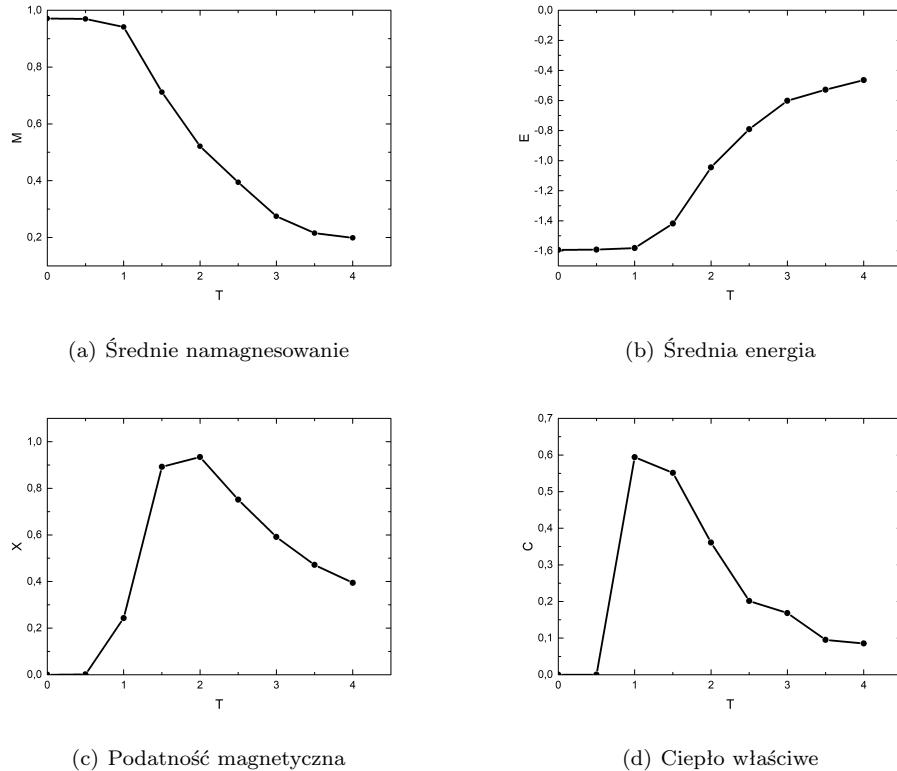
Rysunek 1: Działanie symulacji przy zewnętrznym polu magnetycznym  $h = 0.0$ , temperaturze równej  $T = 2.0$  oraz całce wymiany  $J = 1.0$ .



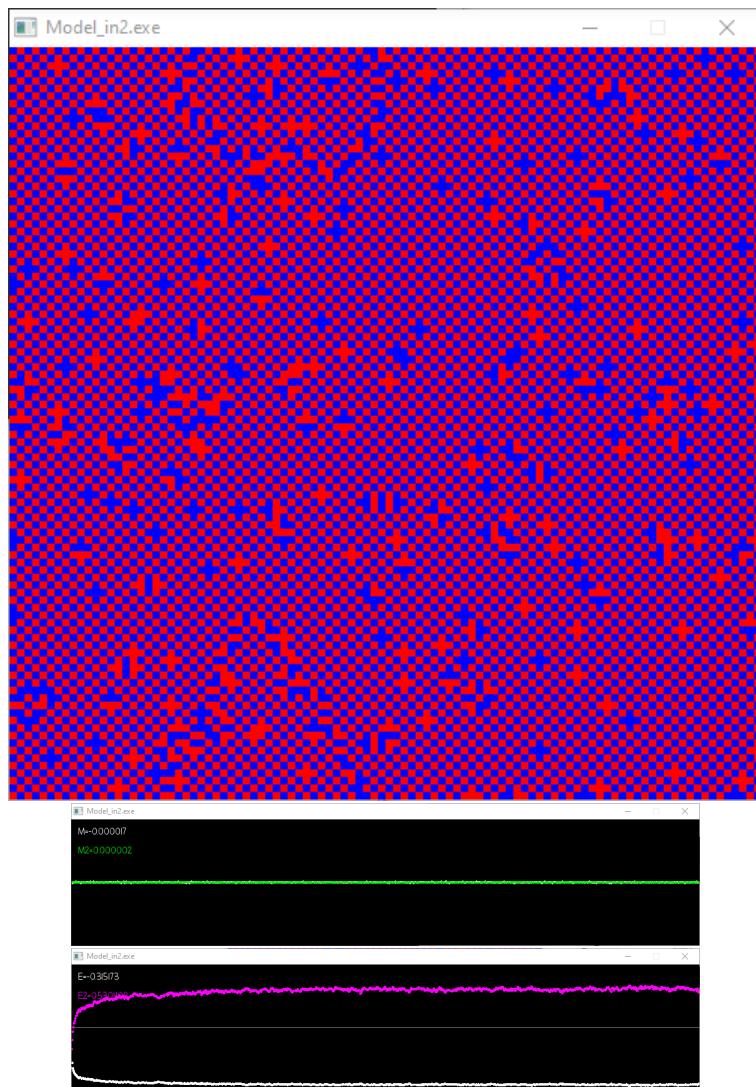
Rysunek 2: Rysowana na bieżąco krzywa energii (biała linia) oraz kwadratu energii (fioletowa linia) od czasu symulacji.



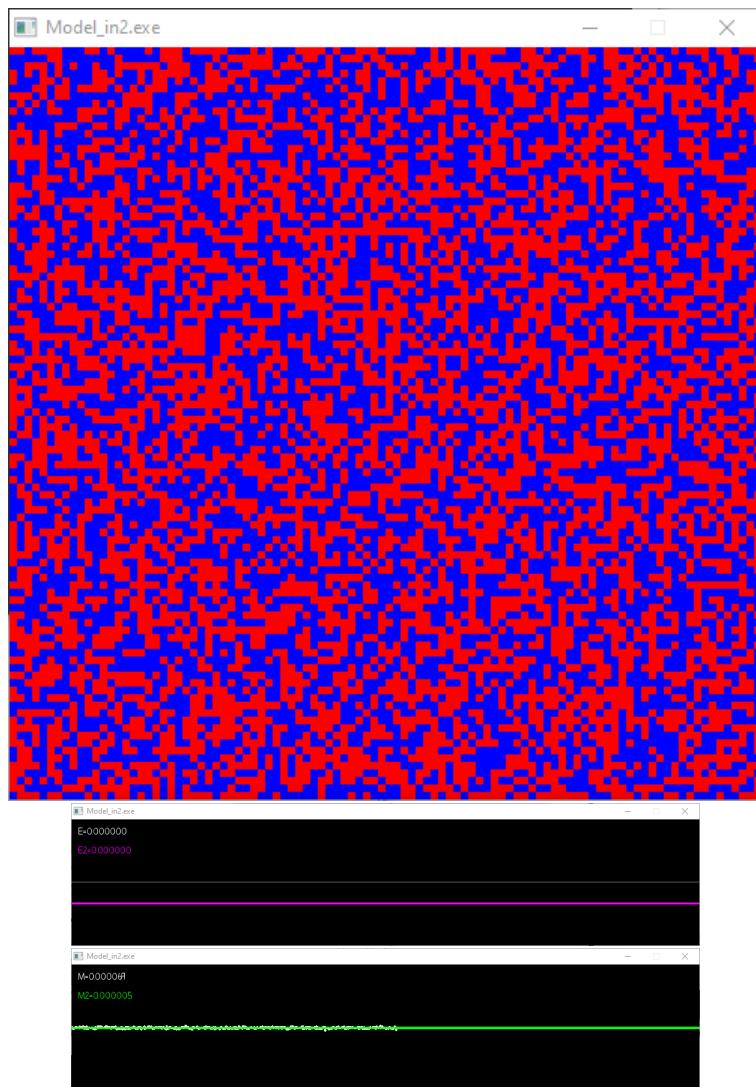
Rysunek 3: Rysowana na bieżąco krzywa namagnesowania (biała linia) oraz kwadratu namagnesowania (fioletowa linia) od czasu symulacji.



Rysunek 4: Krzywe średnich wartości dla powyższej symulacji.

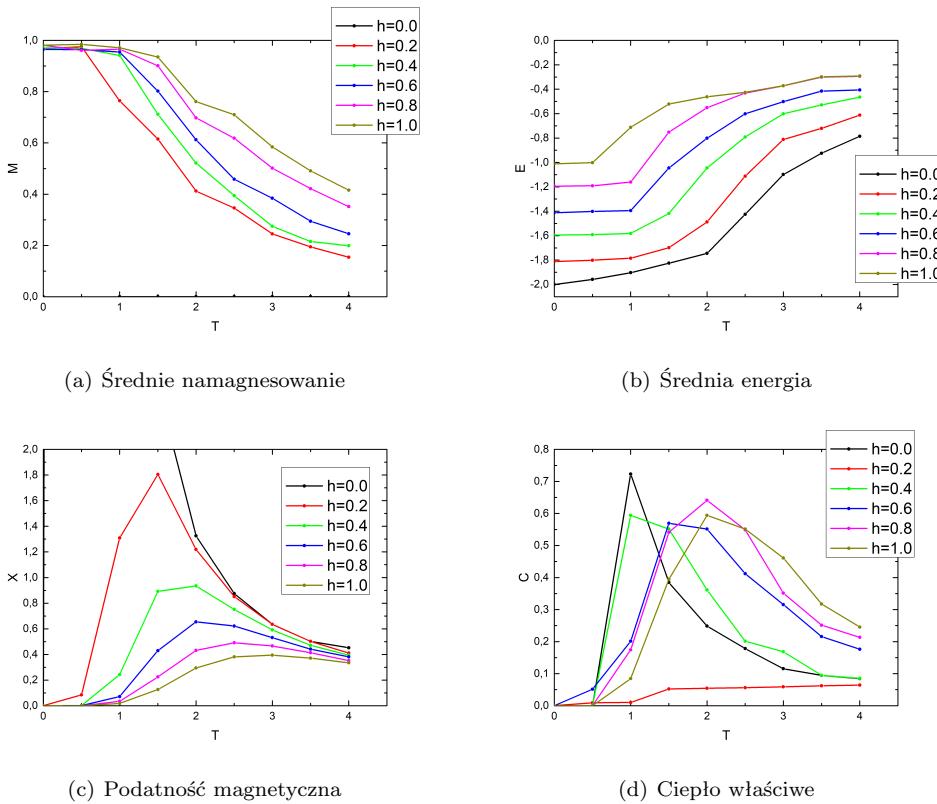


Rysunek 5: Działanie symulacji przy zewnętrznym polu magnetycznym  $h = 0.0$ , temperaturze  
równej  $T = 2.0$  oraz całce wymiany  $J = -1.0$ .



Rysunek 6: Działanie symulacji przy zewnętrznym polu magnetycznym  $h = 0.0$ , temperaturze równej  $T = 2.0$  oraz całce wymiany  $J = 0.0$ .

Zbadano również zależność namagnesowania i energii oraz podatności magnetycznej i ciepła właściwego od temperatury dodając do modelu zewnętrzne pole magnetyczne  $h$ .



Rysunek 7: Krzywe średnich wartości dla symulacji z ferromagnetykiem w zależności od przyłożonego zewnętrznego pola magnetycznego.

## 2 Model XY

Model XY, znany również jako model Heisenberga XY, jest jednym z kluczowych modeli w fizyce statystycznej, szczególnie w kontekście teorii magnetyzmu. W ramach tego modelu, który znalazł zastosowanie głównie w badaniach nad ferromagnetykami, analizuje się oddziaływanie między spinami w układach magnetycznych. Hamiltonian dany jest równaniem:

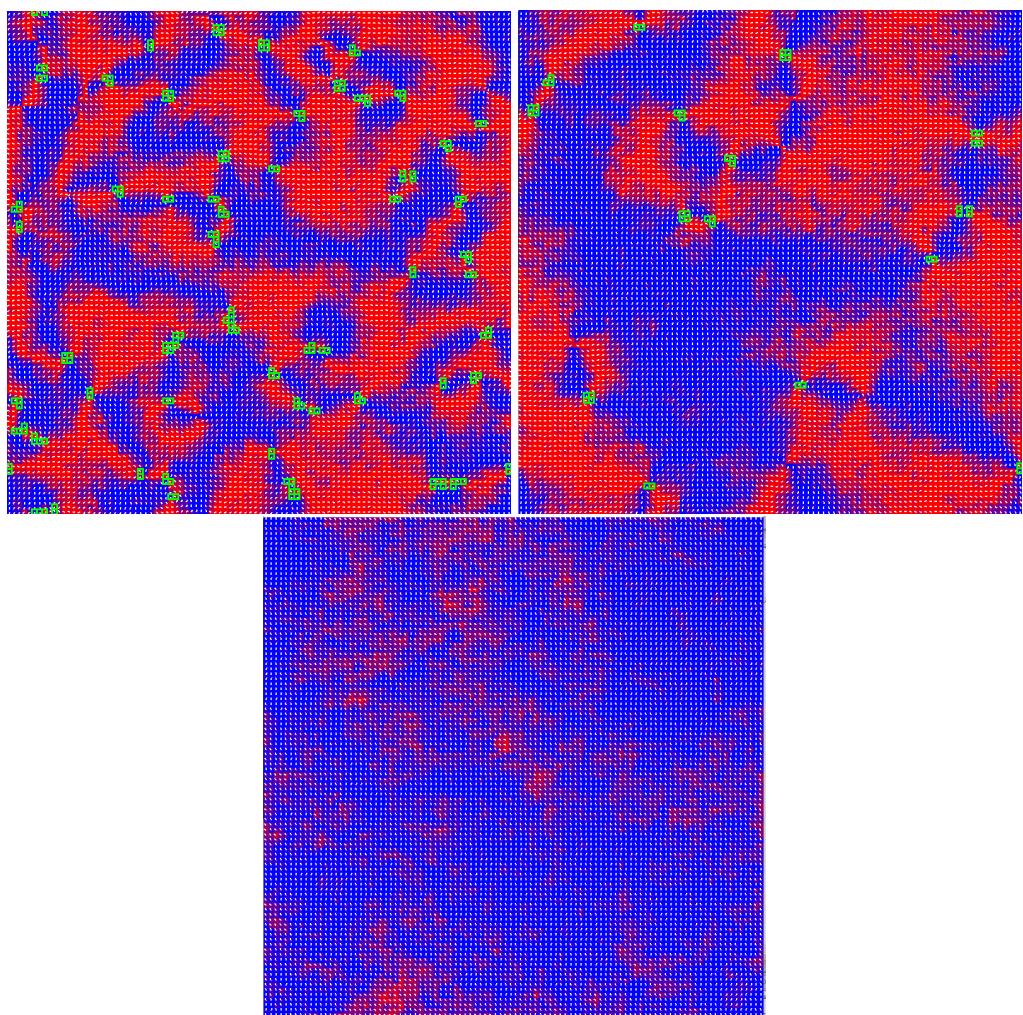
$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i * s_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos \theta_i - \theta_j$$

gdzie suma przebiega po wszystkich parach najbliższych spinów S, natomiast J jest stałą sprzężenia. Model z polem zewnętrznym:

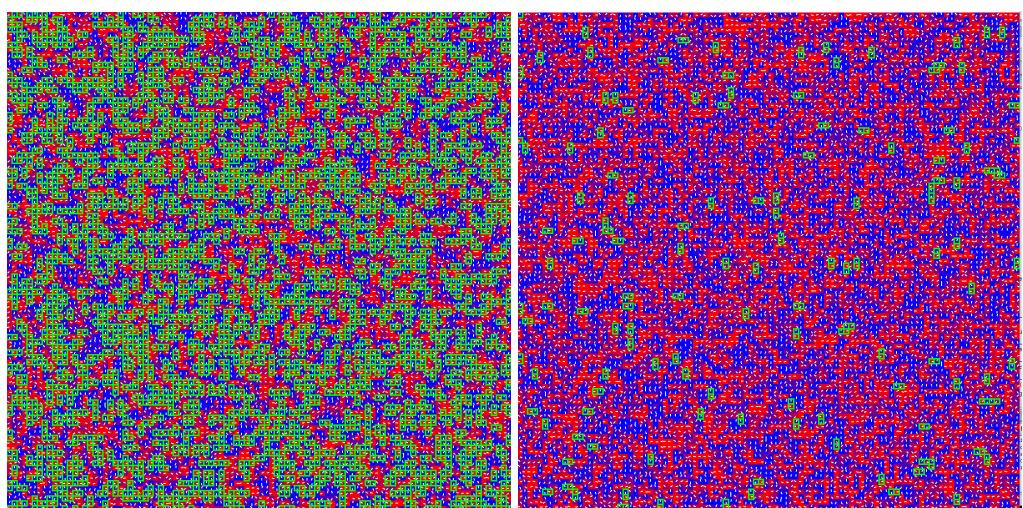
$$H(s) = - \sum_{i \neq j} J_{ij} s_i * s_j - \sum_j h_j * s_j = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \cos \theta_i - \theta_j - \sum_j h_j \cos \theta_j$$

Model XY jest często wykorzystywany do analizy przejścia fazowego, zwłaszcza przejścia Curie, które oznacza utratę globalnej magnetyzacji wraz ze wzrostem temperatury. Symetria ciągła: Model ten cechuje się symetrią ciągłą, co oznacza, że zmiany w wartości kąta spinu są ciągłe, co różni go od modeli opisujących spiny jako wektory o skończonych kierunkach.

Celem ćwiczenia jest rozwiązać zagadnienie modelu XY, wyznaczając średnie namagnesowanie i energię od temperatury oraz podatność magnetyczną i ciepło właściwe od temperatury. Zmodyfikowanie programu, aby znajdował wiry i antywiry.



Rysunek 8: Przebieg symulacji dla temperatury  $T = 0.1$  bez przyłożonego zewnętrznego pola magnetycznego.



Rysunek 9: Przebieg symulacji dla temperatury  $T = 3.0$  bez przyłożonego zewnętrznego pola magnetycznego.

Zbadano również zależność namagnesowania i energii oraz podatności magnetycznej i ciepła właściwego od temperatury dodając do modelu zewnętrzne pole magnetyczne  $h$ .

### 3 Model Lebwohla-Lashera

Teoria Landaua-de Gennesa jest używana do opisania zachowania ciekłych kryształów, zwłaszcza ciekłych kryształów nematicznych. W tej teorii energia swobodna jest rozwijana w szereg potęgowy tensora porządku  $Q$ , który opisuje stopień uporządkowania cząsteczek w ciekłym krysztale. Tensor porządku  $Q$  jest skorelowany z anizotropią w orientacji cząsteczek w ciekłym krysztale.

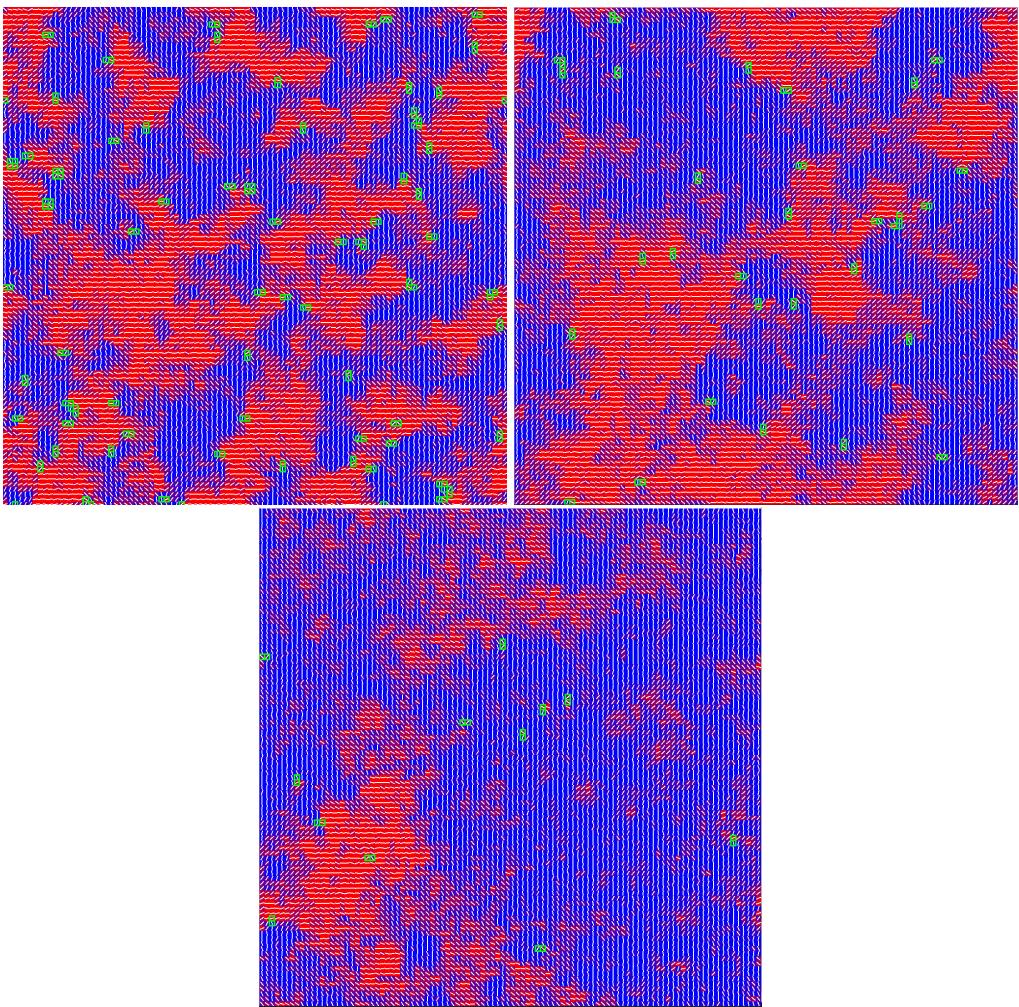
$$Q_{\alpha\beta} = S(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta})$$

Energia swobodna  $FF$  w teorii Landaua-de Gennesa może być rozwinięta w szereg potęgowy jako funkcja tensora porządku  $Q$ :

$$g = \frac{A}{2}Tr(Q^2) - \frac{B}{3}Tr(Q^3) + \frac{C}{4}Tr(Q^2)^2$$

Ponadto, rozwinięcie to jest dobre w pobliżu przejścia fazowego między fazą izotropową a fazą nematiczną, co oznacza, że jest to odpowiednie w obszarze bliskim krytycznej temperatury  $T^*$ .

Celem ćwiczenia jest rozwiązać zagadnienie modelu Lebwohla-Lashera ciekłych kryształów, wyznaczając parametr porządku.



Rysunek 10: Przebieg symulacji dla temperatury  $T = 0.1$  z przyłożonym zewnętrznym polem magnetycznym  $h * 0.707 * \cos(siec[i][j]) + h * 0.707 * \sin(siec[i][j])$ ,  $h = 0.1$ .

## 4 Model Onsagera

Lars Onsager badał szczególny przypadek, w którym cząsteczki są wydłużone i oddziałują ze sobą za pomocą potencjału międzymiążdżeczkowego  $V(1,2)$ , który zależy od pozycji i orientacji cząsteczek oznaczonych jako „1” i „2”. Jego prace w tym zakresie dotyczyły przede wszystkim teorii cieczy ciekłych krystalicznych.

Dla takiego systemu Onsager opracował formalizm oparty na potencjałach: chemicznego i zewnętrznego, który pozwolił mu opisać energię swobodną Helmholtza  $F$  dla takiego układu.

$$\beta F = \int \rho(1)[\log(\rho(1)\Lambda^3) - 1 - \beta\mu + \beta U(1)]d(1) - \frac{1}{2} \int f(1,2)\rho(1)\rho(2)d(2)d(1)$$

gdzie:  $\beta = \frac{1}{kT}$ ,  $\Lambda$  - to długość fali termicznej de Broglie'a,  $\mu$  - potencjał chemiczny,  $U$  to potencjał zewnętrzny, natomiast  $f(1,2)$  to funkcja Meyera:

$$f(1,2) = e^{-\frac{V(1,2)}{kT}} - 1$$

Wprowadzając współczynniki rozwinięcia zależne od temperatury, Onsager był w stanie uzyskać szczegółowe równania opisujące termodynamiczne właściwości cieczy ciekłych krystalicznych. Energia swobodna na

cząsteczkę jest równa:

$$\frac{\beta F}{N} = \frac{\beta F_0}{N} + \int f(\theta_1) [\log(df(\theta_1) - 1 - \beta\mu)] d\theta_1 + \frac{d}{2} \int V_{excl}(\theta_1, \theta_2) f(\theta_1) f(\theta_2) d\theta_1 d\theta_2$$

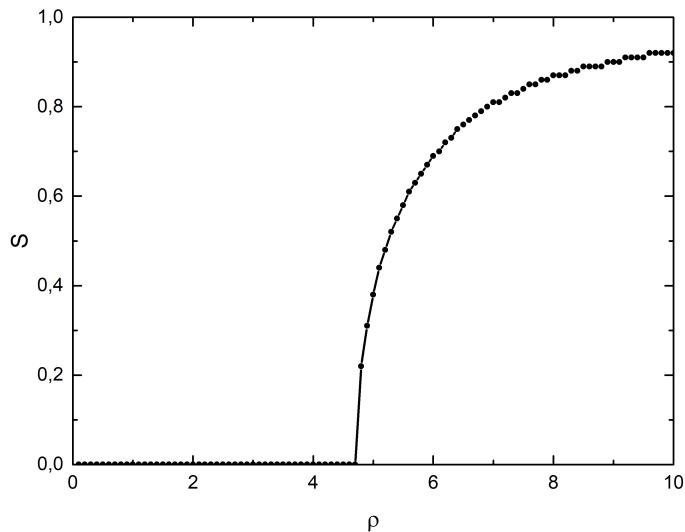
gdzie  $V_{excl}$  to objętość wykluczona dwóch igieł zorientowanych pod kątami  $\theta_1$  i  $\theta_2$  to orientacje molekuł,  $f(\theta)$  gęstość prawdopodobieństwa znalezienia molekuły pod kątem  $q$ ,  $\mu$  potencjał chemiczny, a  $d$  to gęstość cząsteczek na jednostkę powierzchni. Profil dystrybucji kątów molekuł obliczamy minimalizując energię swobodną. Stąd:

$$\log[f(\theta_1)] = -d \int V_{excl}(\theta_1, \theta_2) f(\theta_2) d\theta_2 - \log(d) - \beta\mu$$

Parametr porządku możemy wyznaczyć jako:

$$S = \int_0^{2\pi} \cos 2\theta f(\theta) d\theta$$

Celem ćwiczenia jest wykreszenie zależności parametru porządku od gęstości układu  $\rho = (0, 0.1, 0.2, 0.3, \dots, 10)$ .



Rysunek 11: Wykres parametru porządku  $S$  od gęstości układu  $\rho$ .

Wykres wyszedł zgodnie z teorią z wykładów, przy gęstości ok. 4,4 parametr porządku wzrasta logarytmicznie.

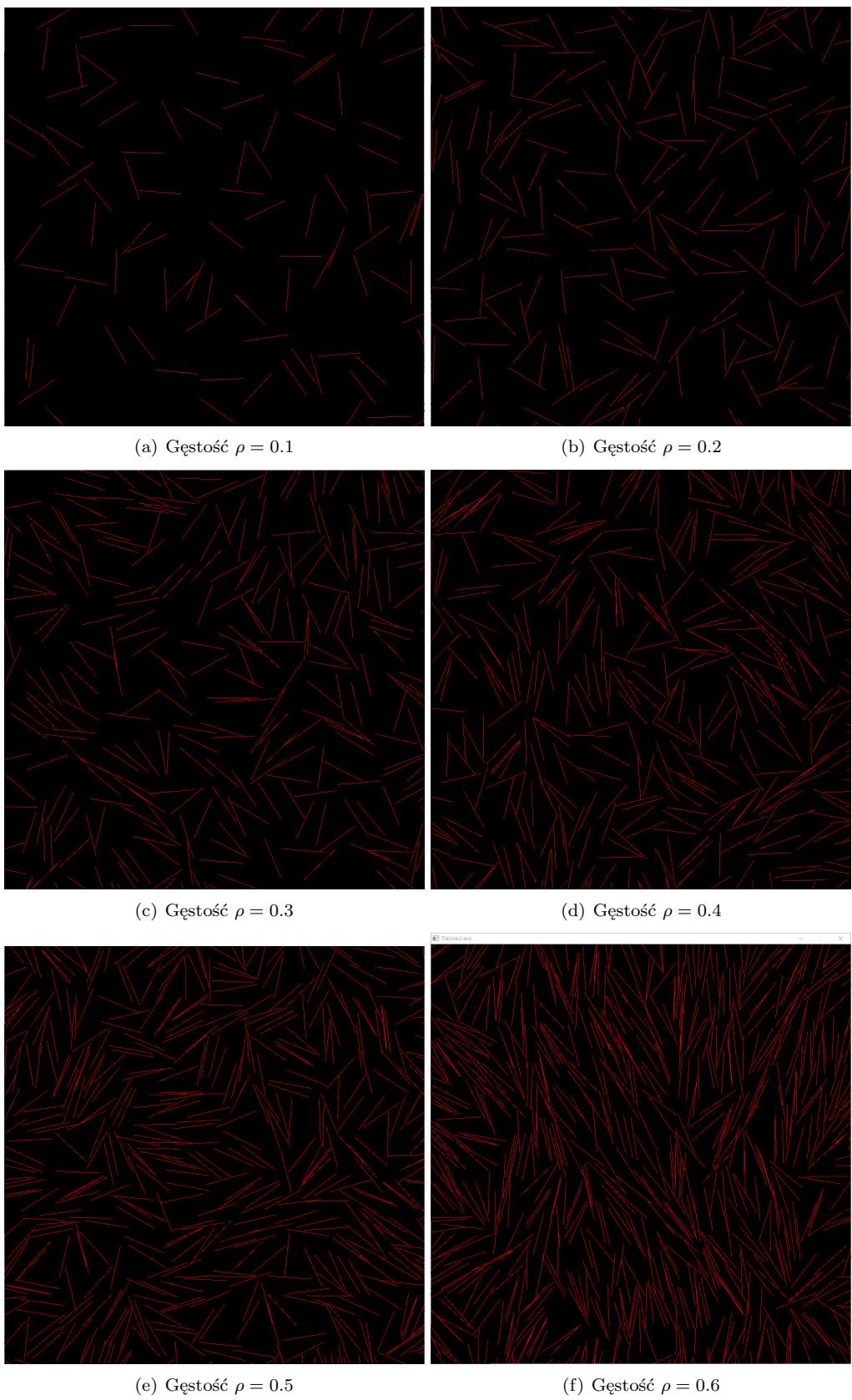
## 5 Przecinające się odcinki

Celem ćwiczenia jest napisanie programu, w którym wizualizowane będą dwa losowe odcinki. Wygenerować losową konfigurację nieprzekrywających się odcinków o zadanej gęstości  $\rho = N/(L*L)$  oraz wykreślić zależność parametru porządku od gęstości.

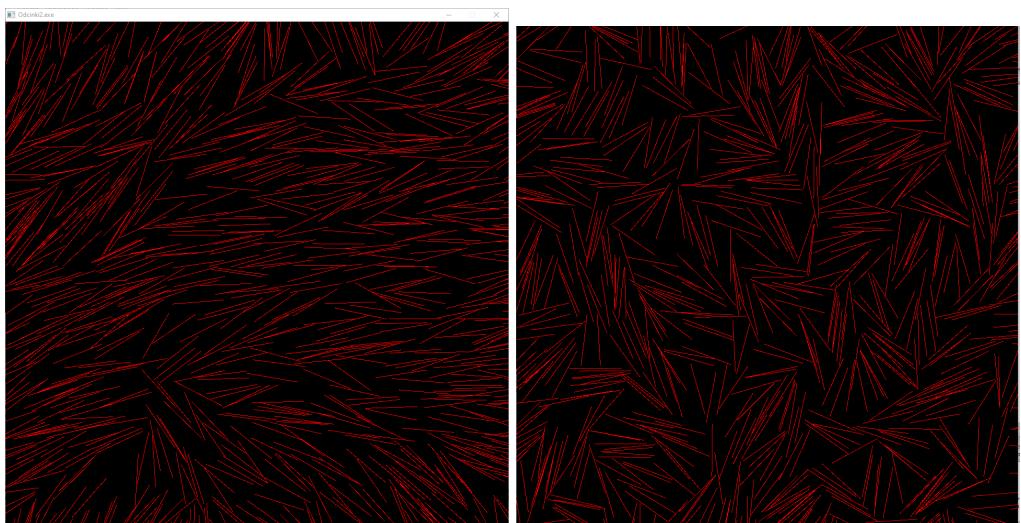


Rysunek 12: Losowa konfiguracja nieprzekrywających się odcinków o zadanej gęstości  $\rho = 5.0$ .

Dodano do programu licznik, aby działał przez 20 minut (dla  $\rho$  od 0.1 do 0.3 było to 10 minut, bo nie widziałem sensu, aby program działał dłużej), aby po pierwsze odcinki wytworzyły pewne obszary, w których są w jednym kierunku, oraz po drugie pomiary były na tyle duże, aby przy liczeniu średniej zniwelować wyliczenia przy ustawianiu początkowej konfiguracji.

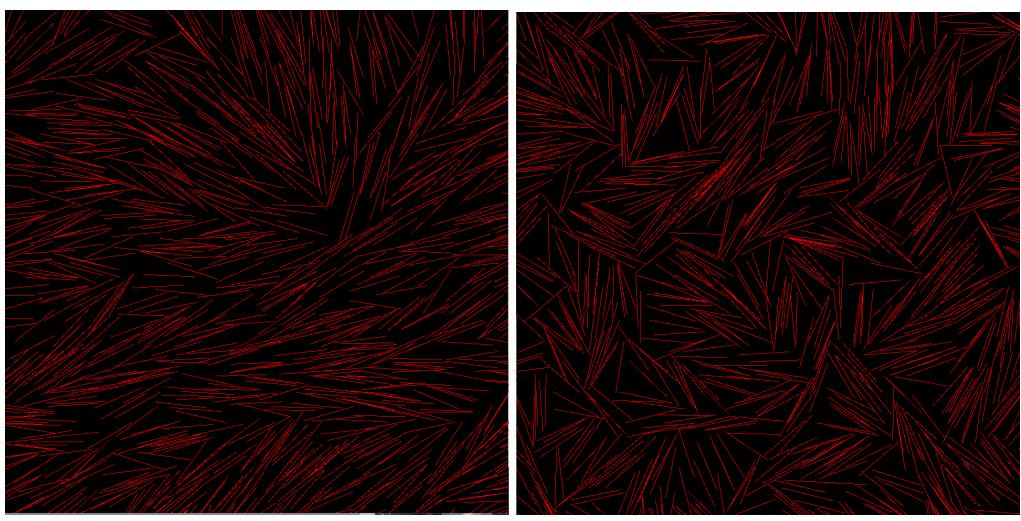


Rysunek 13: Losową konfigurację nieprzekrywających się odcinków o zadanej gęstości wizualizując układ twardych igieł.



(a) Gęstość  $\rho = 0.7$

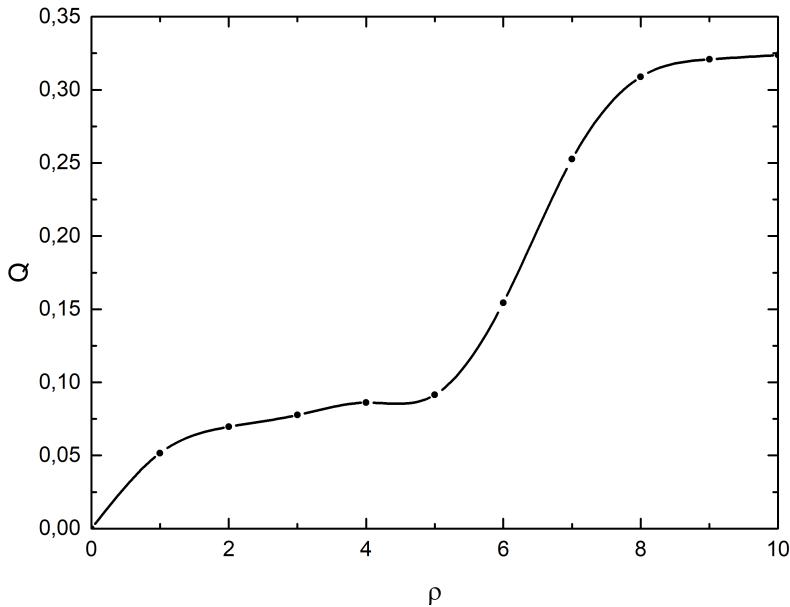
(b) Gęstość  $\rho = 0.8$



(c) Gęstość  $\rho = 0.9$

(d) Gęstość  $\rho = 0.9$

Rysunek 13: Losową konfigurację nieprzekrywających się odcinków o zadanej gęstości wizualizując układ twardych igieł.



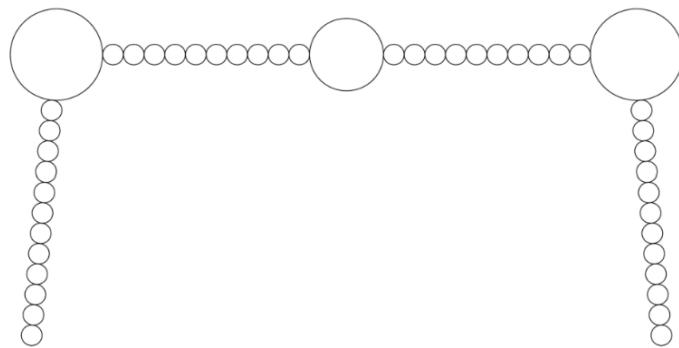
Rysunek 14: Zależność parametru porządku od gęstości  $\rho$ .

Wykres teoretyczny jest prawidłowy, przy wzroście gęstości wzrasta parametr porządku. Przy ostatniej gęstości, parametr nie ma dużej wartości, ale należy pamiętać, że tworzymy tu losową konfigurację odcinków, które później się porządkują oraz czas trwania symulacji nie był aż tak długi.

## 6 Adsorpcja cząsteczek fibrynogenu

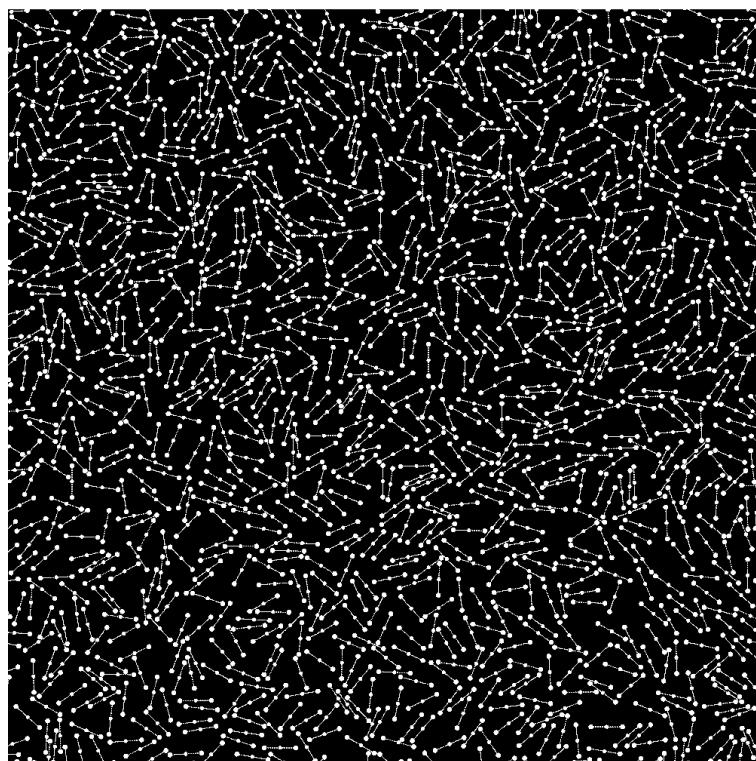
Metoda losowej sekwencyjnej adsorpcji (Random Sequential Adsorption, RSA) została po raz pierwszy zastosowana do opisu adsorpcji białek na powierzchniach i została opisana w artykule "Colloid Interface Sci. 78, 144 (1980)". W modelu RSA zaniedbano oddziaływanie pomiędzy molekułami, co oznacza, że nie uwzględnia się sił przyciągania lub odpychania między adsorbuje. Kształt cząsteczek jest przybliżony do formy dysków, co jest uproszczeniem mającym na celu ułatwienie analizy matematycznej. Metoda ta umożliwia wyznaczanie maksymalnego losowego pokrycia powierzchni przez obiekty adsorbuje (na przykład białka) oraz kinetyki ich osadzania. Metoda RSA pozwala określić, jakie maksymalne pokrycie powierzchni może zostać osiągnięte w warunkach losowego adsorbowania cząsteczek. Ograniczenie modelu polega na tym, że przewiduje jedynie możliwość osadzania co najwyżej monowarstwy cząsteczek, co odzwierciedla sytuację, w której cząsteczki adsorbowują się na powierzchni w jednej warstwie.

Celem ćwiczenia jest napisanie programu ukazującego adsorpcję cząsteczek fibrynogenu, zbudowanych z kulek:

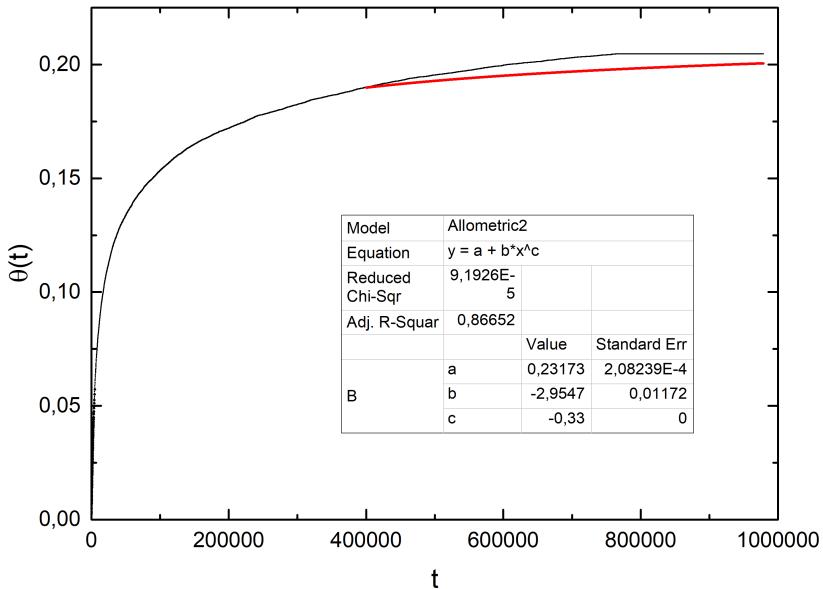


Małe kulki mają średnice 1.5nm, środkowa 5.3nm, a zewnętrzne 6.7nm. Zbadanie pokrycia substratu częsteczkami fibrynogenu przez dofitowanie krzywej Federa  $\theta(\infty) - \theta(t) \sim t^{-1/d}$  do wykresu pokrycia od czasu, gdzie  $\theta(\infty)$  to pokrycie maksymalne powierzchni,  $\theta(t)$  to pokrycie w chwili  $t$ , a  $d$  to ilość stopni swobody osadzanych obiektów. Pokrycie:

$$\theta(t) = \text{zaabsorbowane cząsteczki} \frac{\text{powierzchnia fibrogenu}}{\text{powierzchnia substratu}}$$



Rysunek 15: Obraz symulacji po wygenerowaniu wyników do wykreślenia potrzebnego wykresu



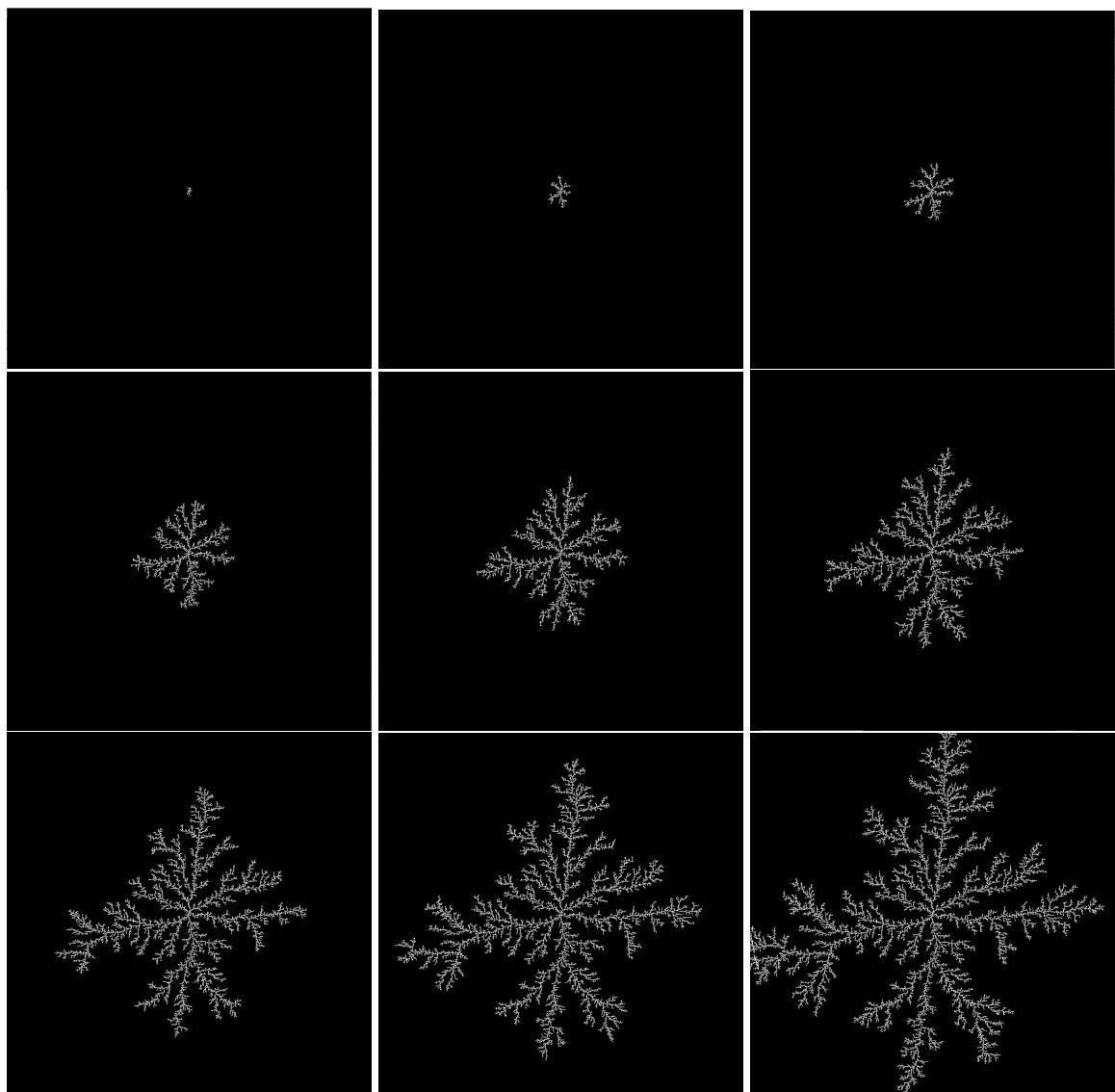
Rysunek 16: Wykres pokrycia substratu od czasu symulacji.

Zfitowano do wykresu funkcję  $y = a + b * x^c$ , gdzie  $y = \theta(t)$ ,  $a = \theta(\infty)$ ,  $x = t$ ,  $c = -\frac{1}{d_f} = -\frac{1}{3} = -0.3333$ ,  $b$  to stała. Maksymalne pokrycie wyniosło  $\theta(\infty) = 0.232$ , program działał ok. 50 minut, dalsze działanie nieznacznie poprawiło wartość maksymalnego pokrycia.

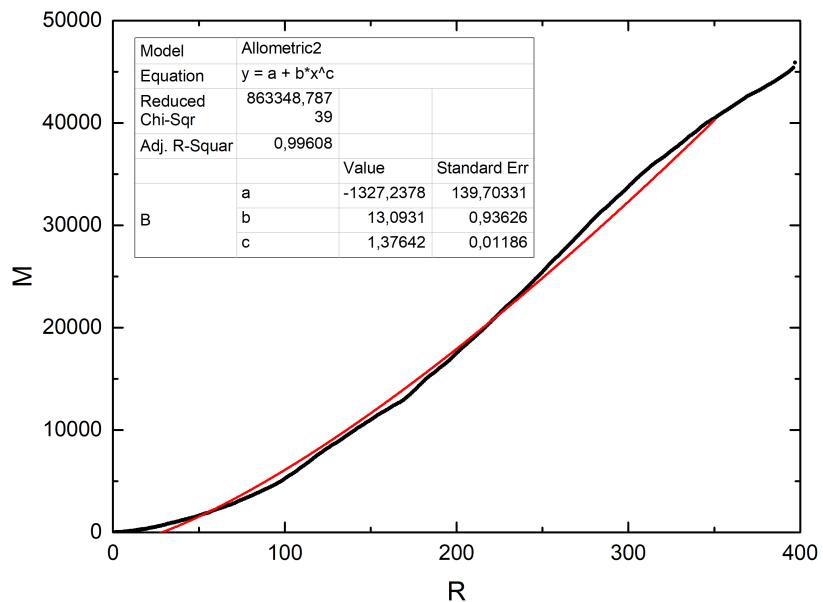
## 7 Agregacja limitowana dyfuzją

Metoda Agregacji Limitowanej Dyfuzji (DLA) to model, który został wprowadzony jako sposób na modelowanie procesów agregacji w fizyce i innych dziedzinach. Proces polega na: umieszczeniu pojedynczej cząsteczki w początkowym punkcie układu współrzędnych. Ta cząsteczka jest zwykle uważana za ziarno, od którego zaczyna się proces agregacji. Kolejne cząsteczki są dodawane poprzez błądzenie losowe. Zaczynają swój ruch z losowego punktu w przestrzeni. Każda z tych cząsteczek porusza się losowo, wybierając swoją trasę w sposób przypadkowy. Jeśli nowa cząsteczka napotka wcześniej utworzony agregat (zwaną też klastrum), to przyłącza się do niego. To zjawisko symuluje proces agregacji, gdzie nowe cząsteczki łączą się z już istniejącymi. Proces ten jest powtarzany, dodając kolejne cząsteczki, które poruszają się losowo, łącząc się z agregatem, gdy napotkają na niego. W rezultacie tego procesu powstają struktury, które często wykazują fraktalne właściwości. Struktury te są bardzo złożone i pełne detali na różnych skalach. Jest używana do symulowania tworzenia struktur, takich jak dendryty w procesie krystalizacji, wzorce wzrostu roślin, czy też struktury w reakcjach chemicznych. Ta technika jest również stosowana w grafice komputerowej do generowania fraktali i struktur podobnych do natury.

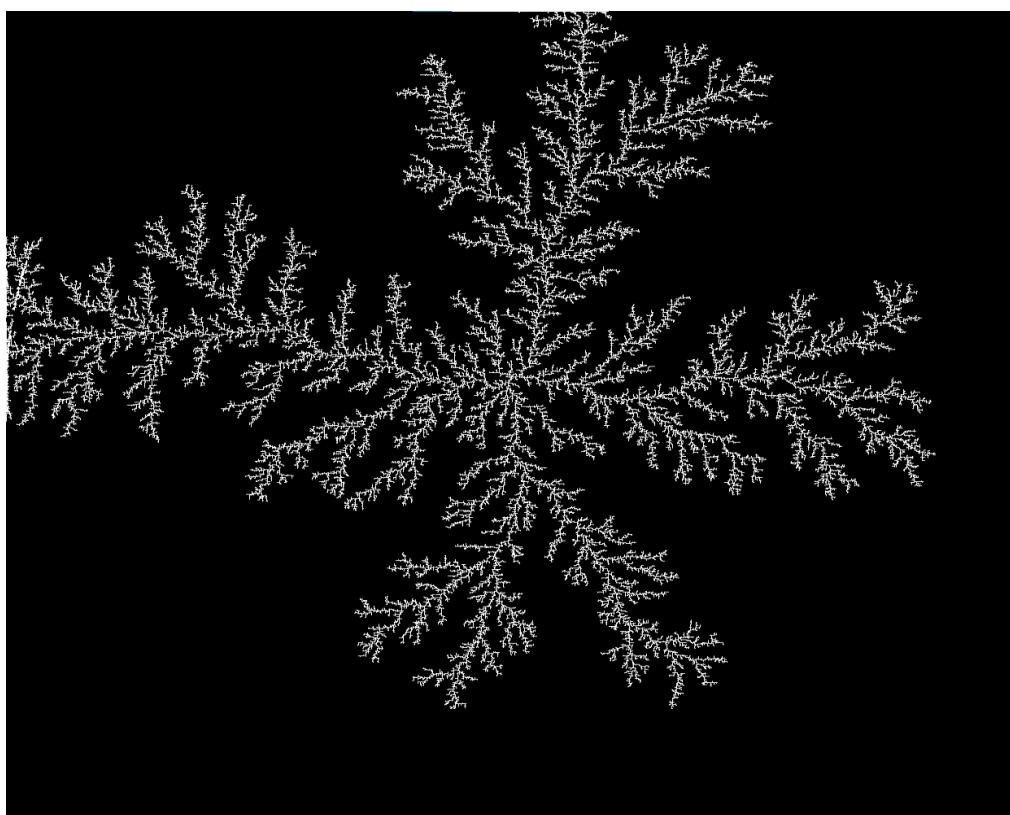
Celem ćwiczenia jest napisanie programu wizualizującego osadzanie cząsteczek w geometrii kwadratowej metodą DLA dla sieci kwadratowej, z początkową cząsteczką umieszczoną pośrodku sieci. Wyrysowanie wykresu masy agretatu  $M$  (ilości dołączonych cząsteczek) w kole od jego promienia  $R$  oraz wyznaczenie wymiaru fraktalnego dopasowując krzywą  $M \sim R^{d_f}$ .



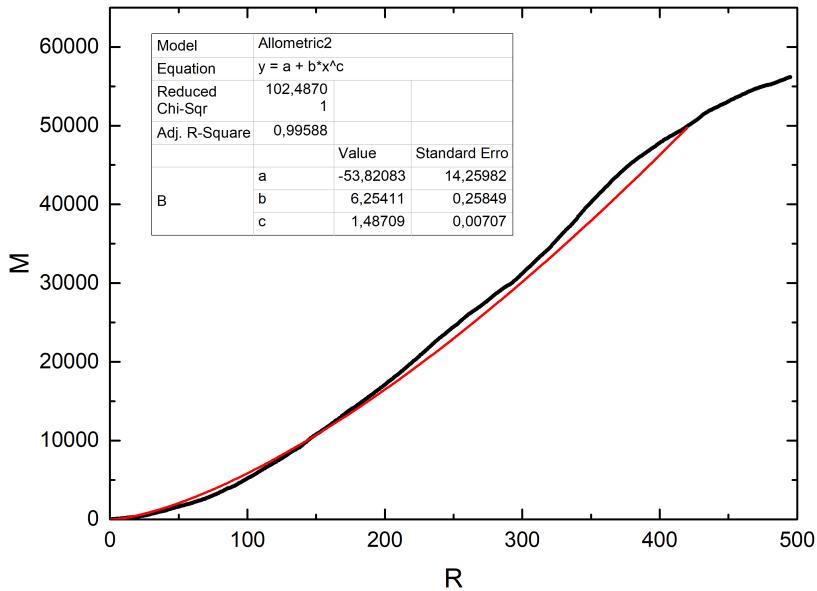
Rysunek 17: Tworzenie fraktala w pudele o rozmiarze 1000x1000.



Rysunek 18: Wykres zależności masy agregatu  $M$  do promienia powyższego fraktala.



Rysunek 19: Stworzony fraktal w pudle o rozmiarze 1400x1400.



Rysunek 20: Wykres zależności masy agregatu M do promienia powyższego fraktala.

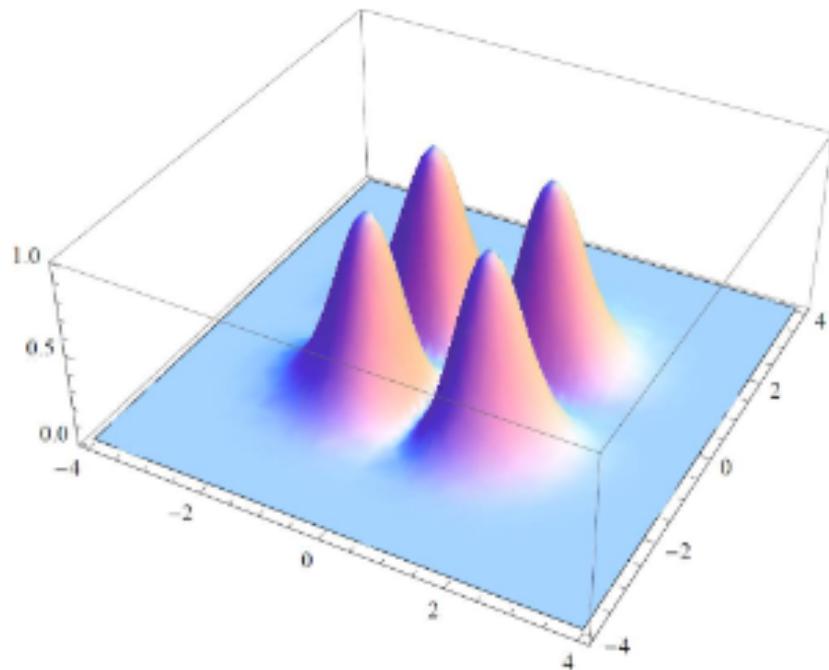
Wyznaczono wymiar fraktałny dla dwóch fraktali dla pudła symulacyjnego 1000x1000 oraz 1400x1400. Odpowiednio dla większego fraktala wartość wymiaru jest większa, z 1,3764 przeszedł na 1,467.

## 8 Rozpraszanie cząstek na potencjale

Celem ćwiczenia jest zwizualizowanie rozpraszanie cząstek na potencjale:

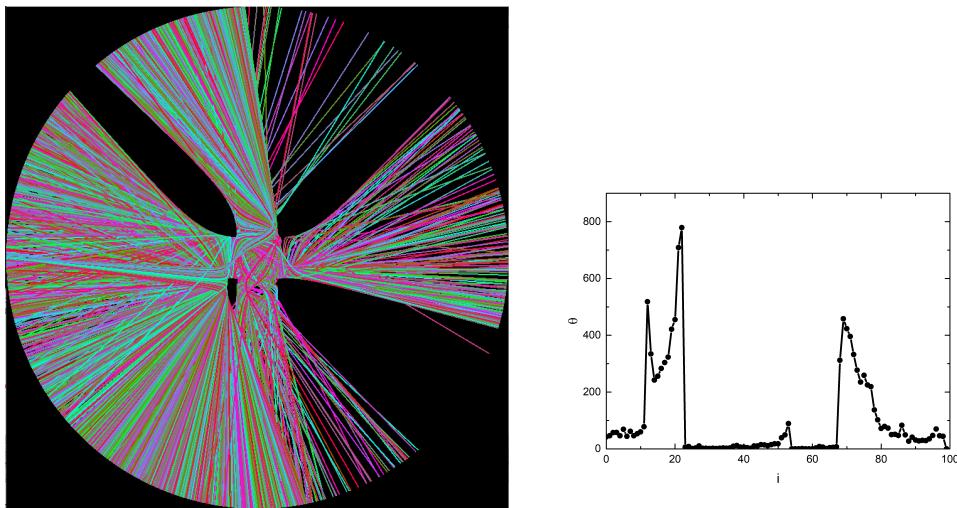
$$U(x, y) = Ax^2y^2e^{-x^2-y^2}$$

Zbadanie histogramów kątów rozproszenia dla różnych początkowych pakietów cząsteczek (o różnych parametrach początkowych i rozmyciach).



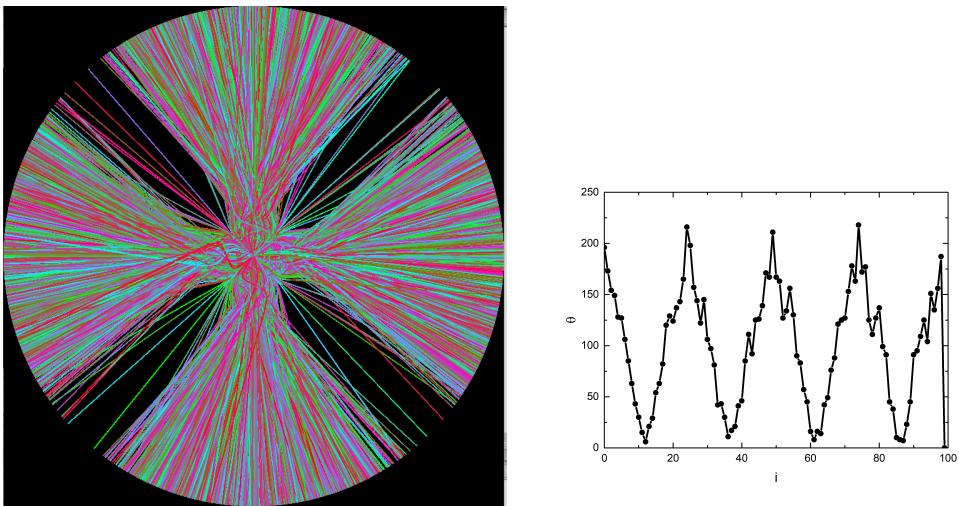
Rysunek 21: Rysunek potencjału rozpraszającego.

Pakiety cząstek jest wysyłany z krańca okna do pola potencjału  $x0 = -10.0, y0 = 0.0$ , z prędkością początkową  $v0 = 0.5$  oraz losowym kątem początkowym na podstawie losowanej stałej  $u$ ,  $kat0 = 0.05 + 0.1*u$ . Parametry początkowe:



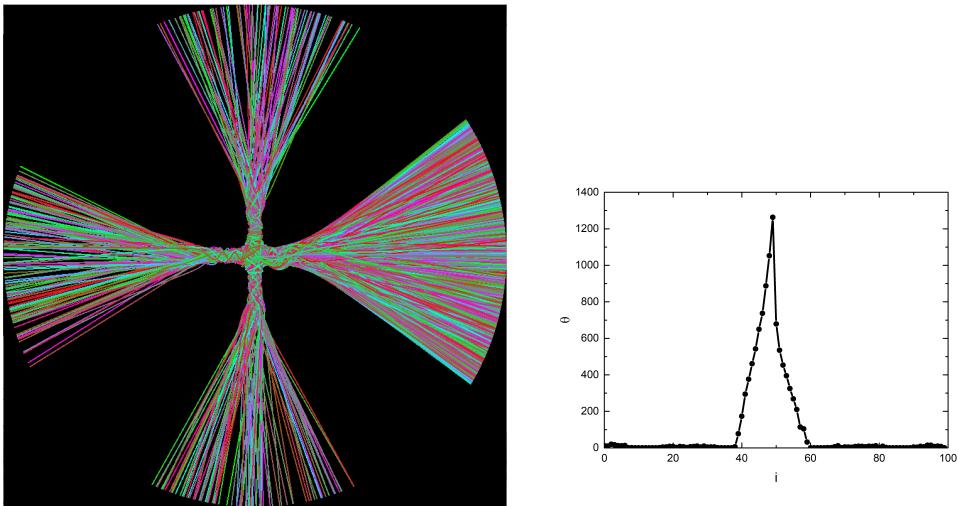
Rysunek 22: Przykład 1.

Pakiety cząstek jest wysyłany z środka okna symulacji, między stożkami pola potencjału  $x0 = 0.0, y0 = 0.0$ , z prędkością początkową losowaną  $v0 = 0.1+0.4*((double)(rand()%RAND_MAX)/(double)RAND_MAX)$  oraz losowym kątem początkowym na podstawie losowanej stałej  $u$ , ale pakiety mogą być wysyłane z każdej strony,  $kat0 = 2.0 * M_PI * u$ .



Rysunek 23: Przykład 2.

Pakiety cząstek jest wysyłany z środka okna symulacji, między stożkami pola potencjału  $x0 = 0.0, y0 = 0.0$ , z prędkością początkową losowaną  $v0 = 0.1 + 0.4 * ((double)(rand()) \% RAND\_MAX) / (double)RAND\_MAX$  oraz losowym kątem początkowym na podstawie losowanej stałej  $u$ , wysyłana tylko na prawą stronę symulacji,  $kato = 0.05 + 0.1 * u$ .



Rysunek 24: Przykład 3.

## 9 Potencjał Lennarda-Jonesa

Potencjał Lennarda-Jonesa to funkcja matematyczna opisująca oddziaływanie między dwoma niemal wszystkimi atomami lub cząsteczkami, które nie mają ładunku elektrycznego. Jest ona jednym z najważniejszych modeli w chemii i fizyce molekularnej, stosowana do opisu interakcji między atomami i cząsteczkami w cieczy, gazie i ciele stałym.

Potencjał ten ma postać:

$$V(r) = 4\epsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6],$$

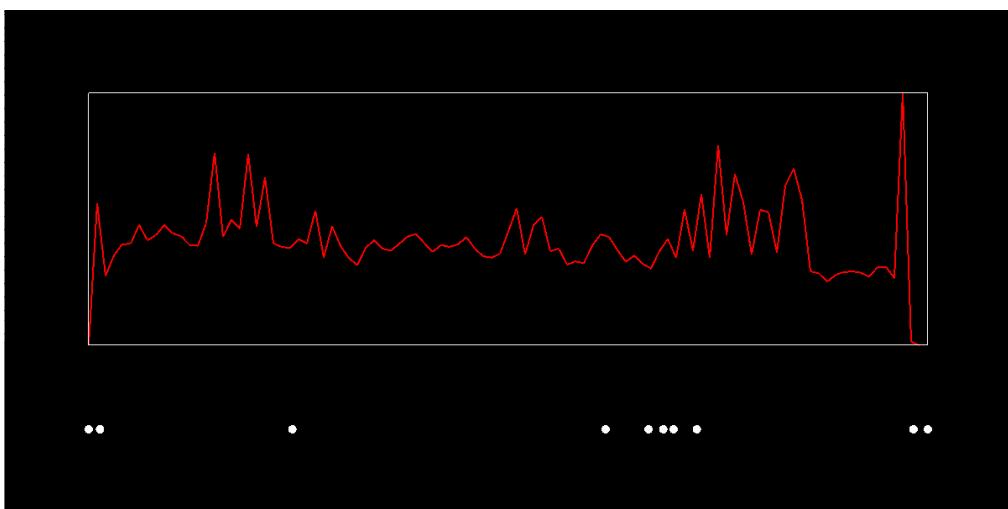
gdzie  $r$  oznacza odległość między atomami,  $\sigma$  jest odległością, dla której energia potencjalna wynosi zero, a  $\epsilon$  jest głębokością studni potencjału, czyli maksymalnym ujemnym potencjałem pomiędzy atomami.

Pierwszy człon potencjału,  $(\sigma/r)^{12}$ , opisuje odpychanie elektrostatyczne między atomami, wynikające z faktu, że elektrony w atomach są ujemnie naładowane i odpychają się nawzajem. Drugi człon,  $(\sigma/r)^6$ , opisuje przyciąganie van der Waalsa między atomami, wynikające z występowania dipoli elektrycznych w atomach.

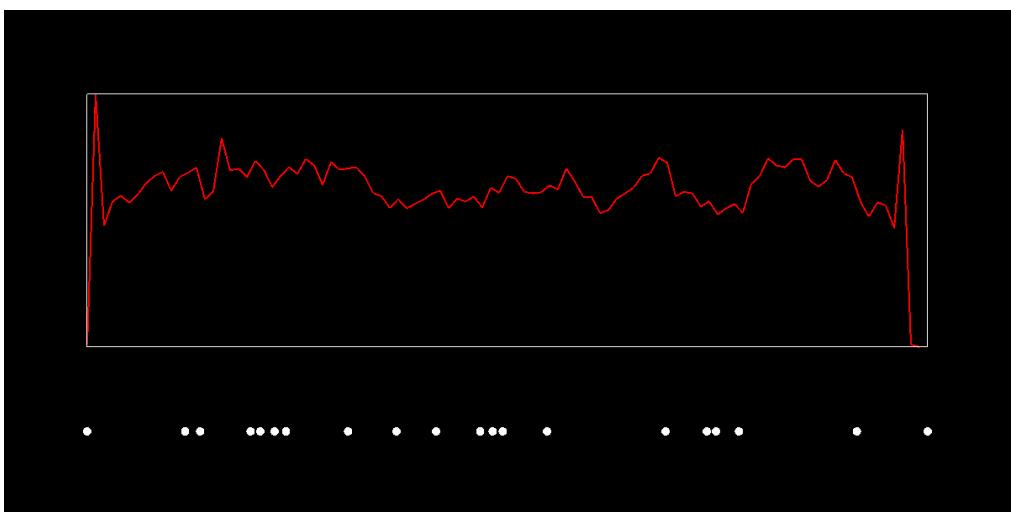
Potencjał Lennarda-Jonesa ma wiele zastosowań w modelowaniu zachowania cieczy, gazu i ciała stałego, w tym w symulacjach numerycznych, takich jak program LAMMPS. Jego parametry ( $\sigma$  i  $\epsilon$ ) mogą być dostosowane do konkretnych przypadków, co pozwala na uzyskanie bardziej precyzyjnych wyników. W naszym przypadku używaliśmy go do zobrazowania zerwania warstwy atomów, gdzie oddziaływanie między nimi było opisane właśnie tym potencjałem.

Celem ćwiczenia jest napisanie programu, który będzie wizualizował symulację jednowymiarowego systemu częstek Lennarda-Jonesa. Pomiędzy ściankami, którymi będą 2 nieruchome cząsteczki Lennarda-Jonesa. Dla różnych energii i gęstości cząsteczek (od 0.1 do 1.0 co 0.1) wyznaczamy profile gęstości pomiędzy ściankami oraz wyznaczenie temperatur z zasady ekwipartycji Boltzmanna.

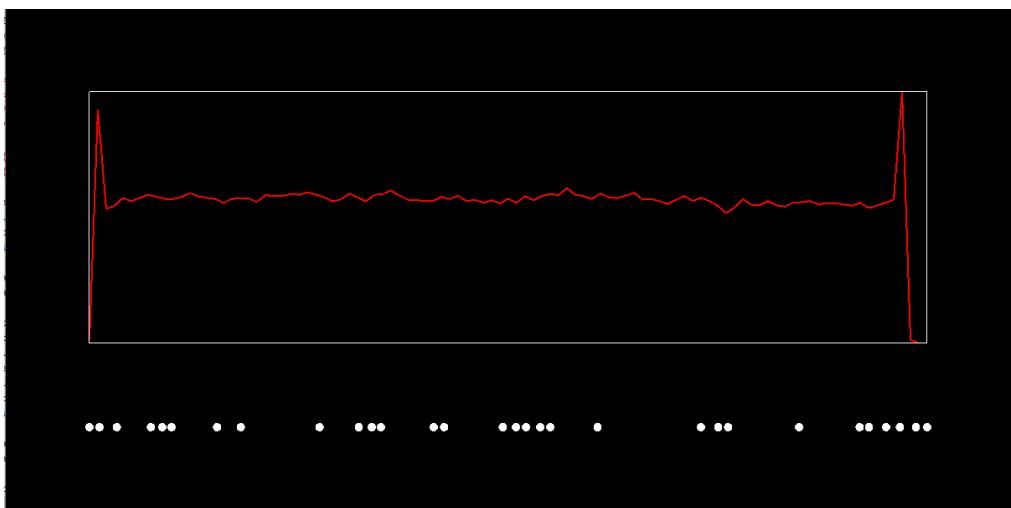
Symulacje przeprowadzono dla systemu o długości  $L = 100.0$ , z ilością cząsteczek  $N = 10, 20, 30, \dots, 100$ . Prędkości losowane z przedziału od -0.5 do 0.5.



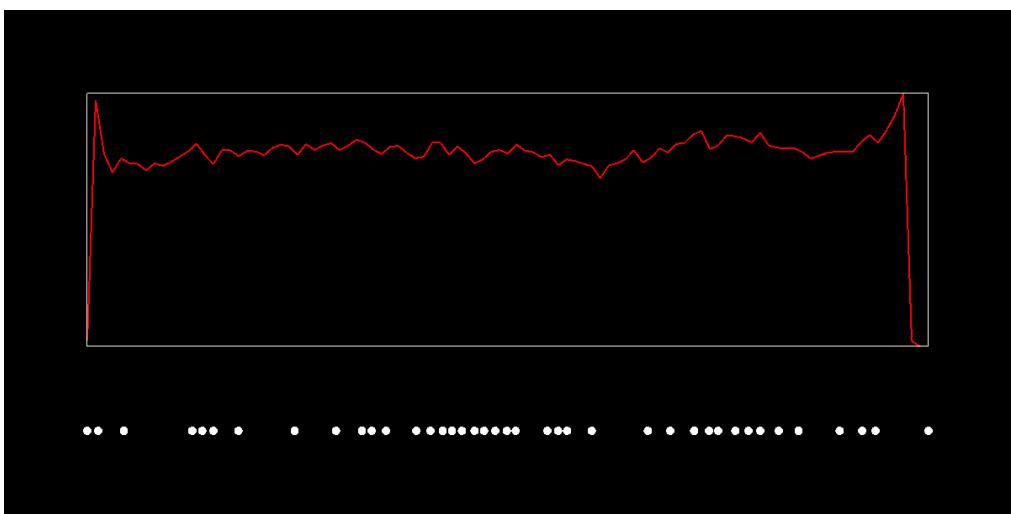
Rysunek 25: Profil gęstości pomiędzy ściankami, dla  $\rho = 0.1$



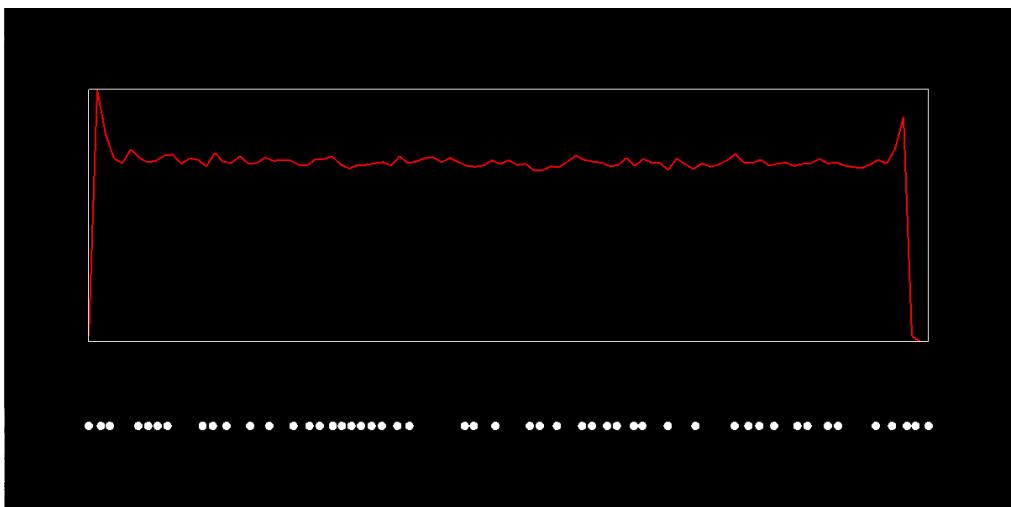
Rysunek 26: Profil gęstości pomiędzy ściankami, dla  $\rho = 0.2$



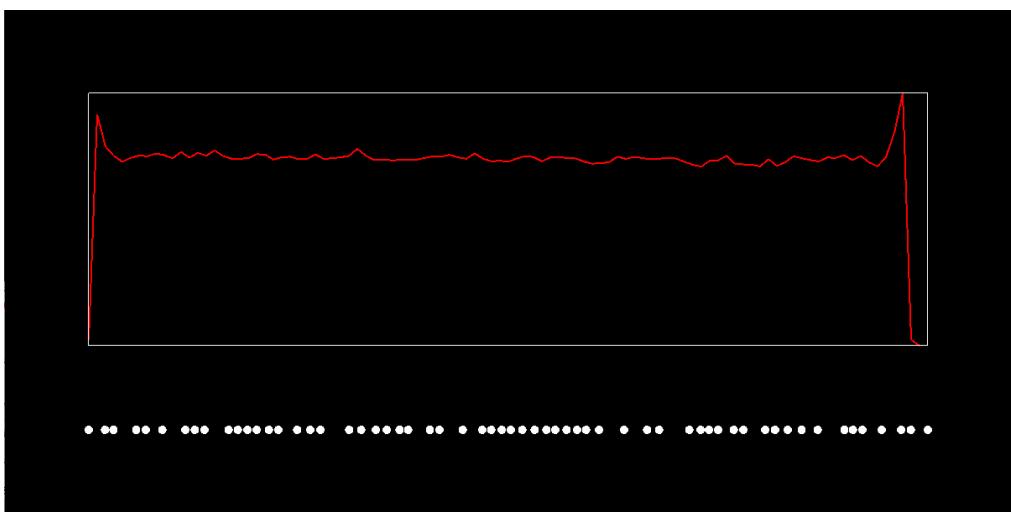
Rysunek 27: Profil gęstości pomiędzy ściankami, dla  $\rho = 0.3$



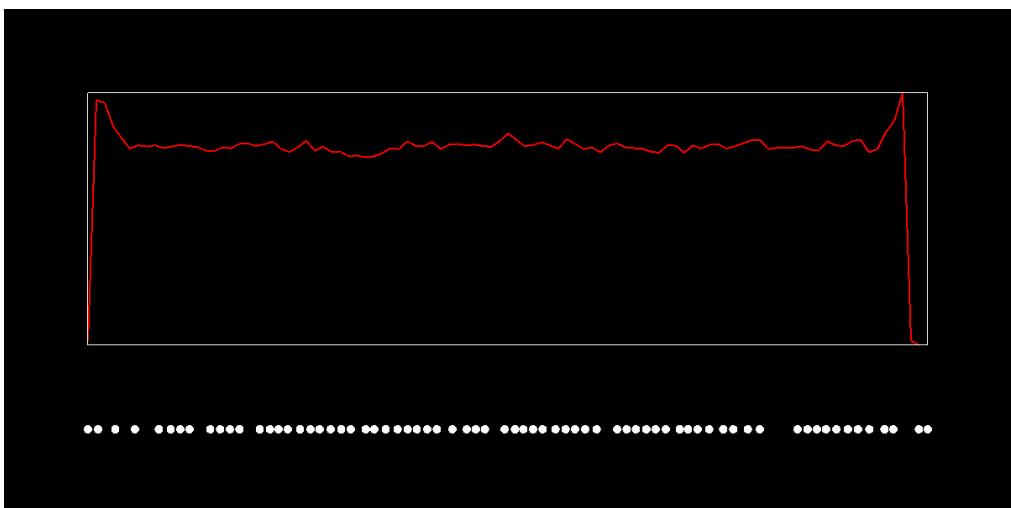
Rysunek 28: Profil gęstości pomiędzy ściankami, dla  $\rho = 0.4$



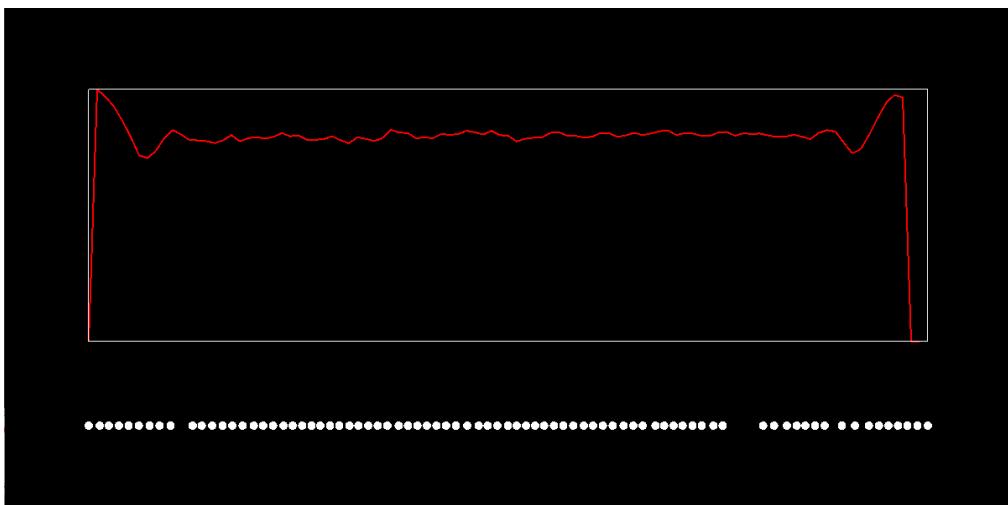
Rysunek 29: Profil gęstości pomiędzy ściankami, dla  $\rho = 0.5$



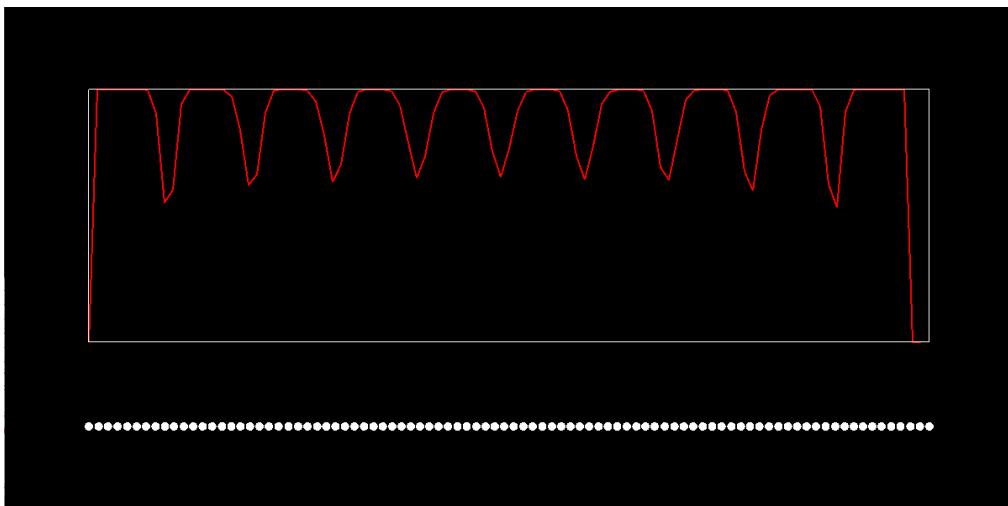
Rysunek 30: Profil gęstości pomiędzy ściankami, dla  $\rho = 0.6$



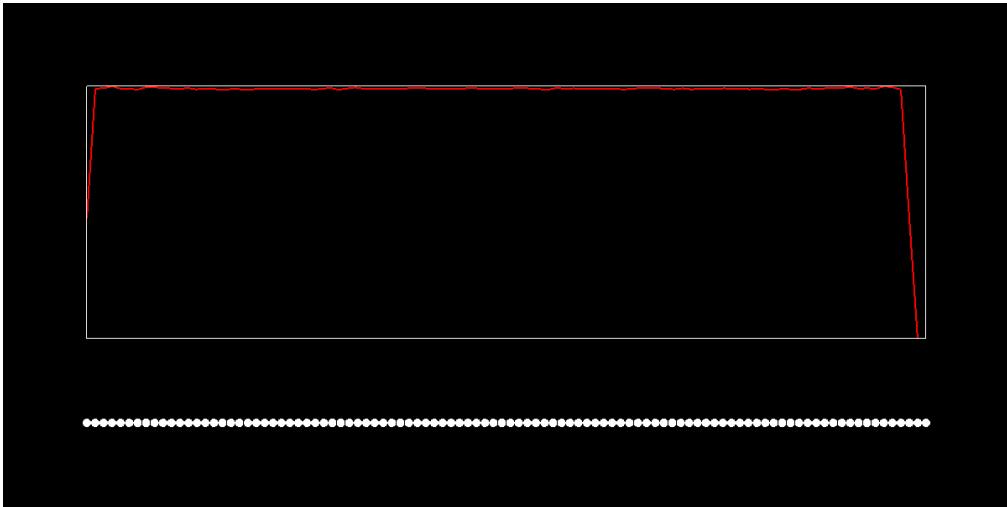
Rysunek 31: Profil gęstości pomiędzy ściankami, dla  $\rho = 0.7$



Rysunek 32: Profil gęstości pomiędzy ściankami, dla  $\rho = 0.8$



Rysunek 33: Profil gęstości pomiędzy ściankami, dla  $\rho = 0.9$



Rysunek 34: Profil gęstości pomiędzy ściankami, dla  $\rho = 1.0$

Przy zwiększaniu wartości gęstości cząsteczek w jednowymiarowym systemie Lennarda-Jonesa zauważamy kilka efektów. Wzrost gęstości oznacza większą liczbę cząsteczek w danym obszarze, co prowadzi do zwiększenia częstości kolizji między nimi. W rezultacie zwiększa się ciśnienie w systemie. Przy niższych gęstościach, cząsteczki mogą mieć tendencję do rozproszenia się, a profile gęstości będą bardziej chaotyczne. Wraz ze wzrostem gęstości, cząsteczki będą miały tendencję do zbliżania się, co może prowadzić do bardziej zorganizowanej struktury. Wzrost liczby cząsteczek może zwiększyć kinetyczną energię cząsteczek, co przekłada się na wyższą temperaturę. Przy bardzo wysokich gęstościach, istnieje ryzyko, że system może ulegać skondensowaniu w formę ciała stałego, co widzimy przy  $\rho = 1.0$ .

## 10 Symulacje aktywnej materii - ruch muszki owocowej

Muszka owocowa, czyli *Drosophila melanogaster*, stanowi obiekt intensywnych badań ze względu na jej złożoną biologię oraz istotny udział w badaniach genetycznych. Jednak w ostatnich latach zainteresowanie skierowano także na bardziej makroskopowy poziom - zrozumienie kolektywnego zachowania muszek w kontekście aktywnej materii.

Położenie muszki we współrzędnych biegunkowych:

$$\mathbf{r}(t) = \begin{pmatrix} r(t)\cos(\beta(t)) \\ r(t)\sin(\beta(t)) \end{pmatrix}$$

Jego zmiana:

$$\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} = \mathbf{v}(t) = \begin{pmatrix} v_0(t)\cos(\theta(t)) \\ v_0(t)\sin(\theta(t)) \end{pmatrix}$$

Konieczne oznaczenia:

$$z(t) = \theta(t) - \beta(t)$$

$$\beta(t) = \arctan \frac{y(t)}{x(t)}$$

Mając dwie zmienne  $U_1$  i  $U_2$  o rozkładzie jednostajnym na odcinku  $(0,1)$ , należy dokonać transformacji, aby uzyskać zmienne o rozkładzie Levy'ego z parametrem  $\alpha$ :

$$V = \pi(U_1 - \frac{1}{2})$$

$$W = -\log(U_2)$$

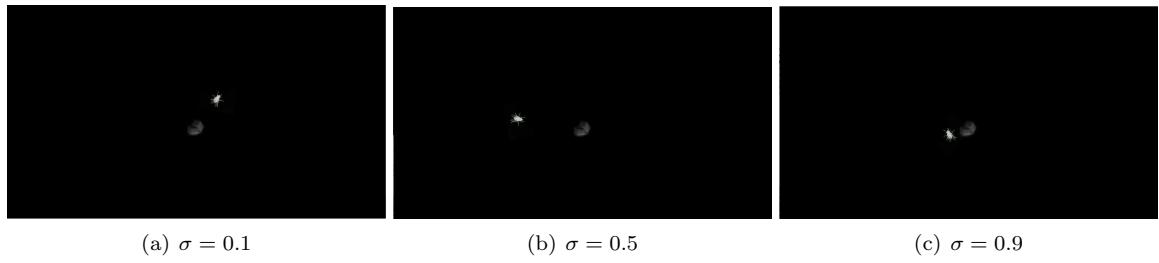
$$X = \begin{cases} \frac{\sin(\alpha V)}{\cos(V)^{(1/\alpha)}} [\frac{\cos((\alpha-1)V)}{W}]^{\frac{1-\alpha}{\alpha}}, & \alpha \neq 1 \\ \tan(V), & \alpha = 1 \end{cases}$$

Trajektorię oczu muszki tworzymy następująco:

$$\theta(t + \Delta t) = \theta(t) + \kappa \sin(\theta - \beta) \Delta t + \frac{\sigma}{v_0} X \Delta t^{\frac{1}{\alpha}}$$

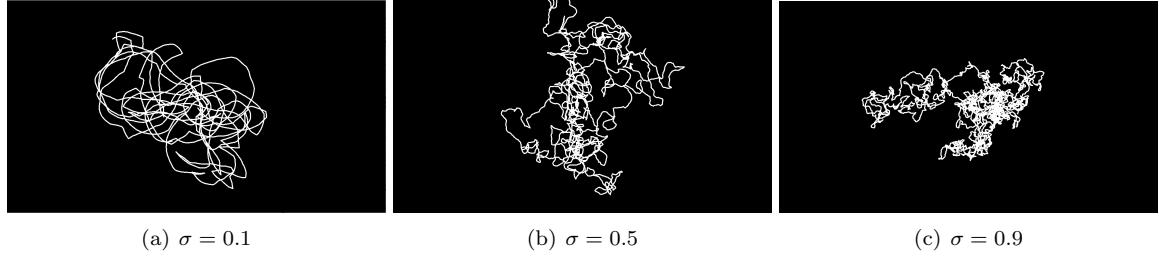
Celem ćwiczenia jest napisanie programu, który będzie wizualizował ruch muszki owocowej oraz przeanalizowanie torów ruchu w zależności od parametrów  $\alpha$  i  $\sigma$ .

Używając bitmap muchy oraz kostek cukru możemy w ładny sposób przedstawić jak muszka mogłaby poruszać się wokół punktu. Parametry w trakcie poniższej symulacji  $\alpha = 1.01$ ,  $\sigma = 0.1$ ,  $\kappa = 0.1$ .

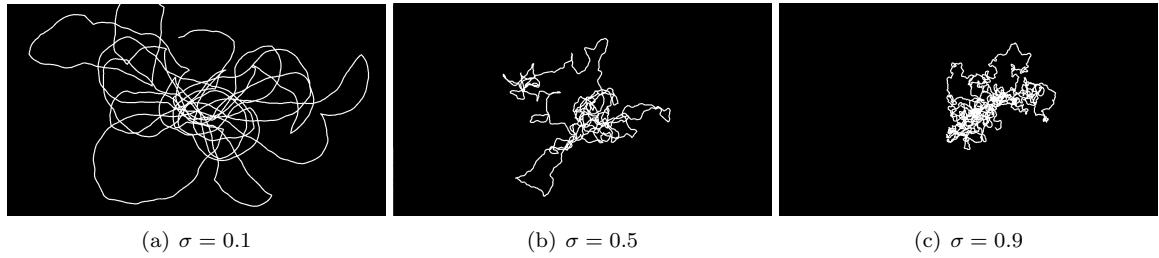


Rysunek 35: Ruch muszki owocowej wokół kosteczek cukru.

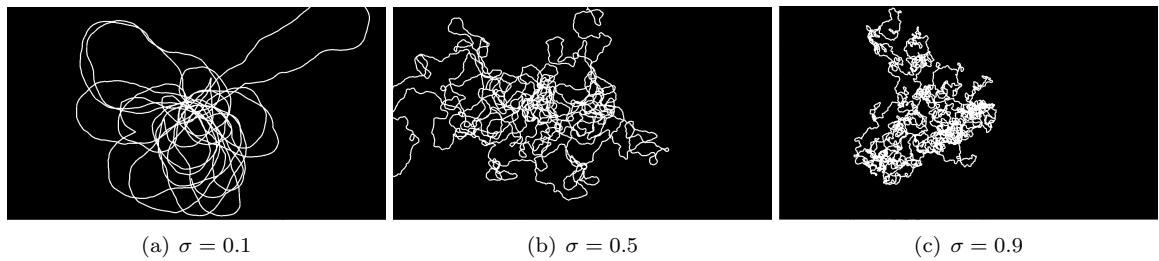
Poniżej zbadano jak zmienia się tor ruchu w zależności od wartości parametrów symulacji.



Rysunek 36: Ruch muchy przy stałych parametrach  $\alpha = 1.3, \kappa = 0.1$ , z zmieniającym się parametrem  $\sigma$ .

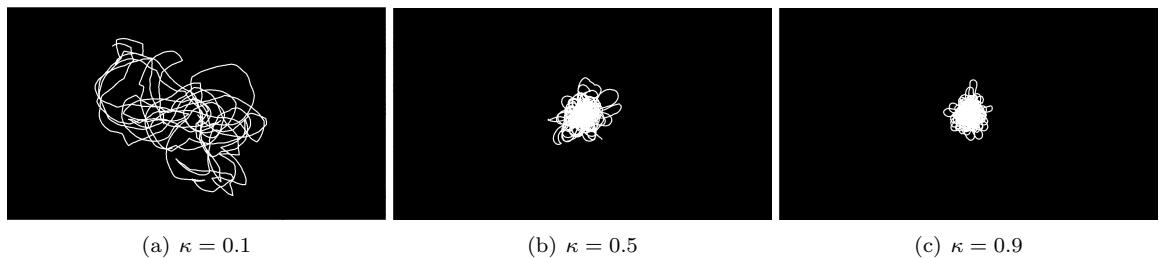


Rysunek 37: Ruch muchy przy stałych parametrach  $\alpha = 1.6, \kappa = 0.1$ , z zmieniającym się parametrem  $\sigma$ .

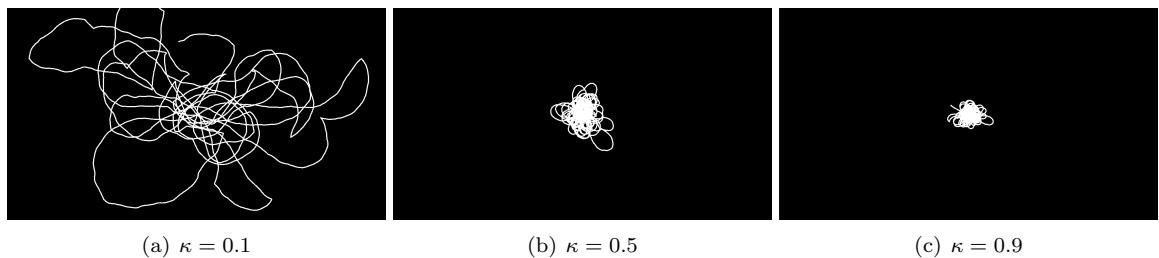


Rysunek 38: Ruch muchy przy stałych parametrach  $\alpha = 1.9, \kappa = 0.1$ , z zmieniającym się parametrem  $\sigma$ .

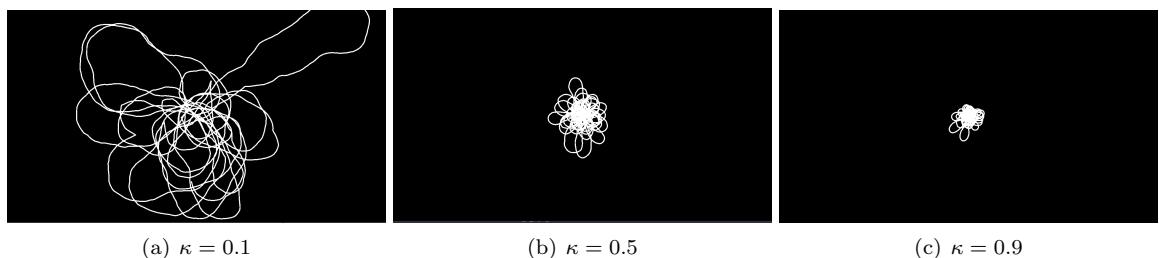
Parametr  $\sigma$  odpowiada szumom otoczenia (błędzeniu oczu). Im wartość parametru jest większa, tym ruchy muszki są bardziej losowe.



Rysunek 39: Ruch muchy przy stałych parametrach  $\alpha = 1.3, \sigma = 0.1$ , z zmieniającym się parametrem  $\kappa$ .



Rysunek 40: Ruch muchy przy stałych parametrach  $\alpha = 1.6, \sigma = 0.1$ , z zmieniającym się parametrem  $\kappa$ .



Rysunek 41: Ruch muchy przy stałych parametrach  $\alpha = 1.9, \sigma = 0.1$ , z zmieniającym się parametrem  $\kappa$ .

Parametr  $\kappa$  jest amplitudą oscylacji kierunku ruchu oczu muszki. Przekładając to na symulację, muszka

będzie bardziej zwracać w stronę celu, kostek cukru, im większy jest ten parametr.