

«Псевдослучайные структуры точек на поверхности»

Багров А.М., Лукьянов А.В.

Осень 2025

Аннотация

В работе представлено глубокое теоретическое обоснование различных стратегий генерации точек на поверхности. Каждая стратегия анализируется через призму статистической физики, включая понятия энтропии, фазовых переходов, корреляций, флуктуаций и фрактальной размерности. Показано, как простые алгоритмы генерации точек моделируют сложные физические процессы и демонстрируют переход от хаоса к самоорганизации.

Содержание

1 Введение	4
2 Стратегии и физические аналоги	5
2.1 Папоротник Барнсли	5
2.1.1 Математическая постановка	5
2.1.2 Алгоритм (хаотическая игра)	5
2.1.3 Псевдокод	5
2.1.4 Параметры и рекомендации	5
2.2 Модель Изинга	6
2.2.1 Формулировка	6
2.3 Случайные точки (равномерное распределение)	6
2.3.1 Формулировка	6
2.3.2 Алгоритм	6
2.3.3 Оценки и измерения	6
2.4 Треугольник Серпинского (хаотическая игра)	6
2.4.1 Алгоритм (chaos game)	6
2.4.2 Параметры	7
2.4.3 Фрактальная размерность	7
2.5 Коррелированное поле (фильтрация белого шума)	7
2.5.1 Постановка	7
2.5.2 Спектральный метод (FFT-конволюция)	7
2.5.3 Нормализация	7
2.5.4 Альтернативы	7
2.6 Уравнение Ланжевена (сильнодействующее затухание и стохастика)	8
2.6.1 Формула	8
2.6.2 Дискретизация: метод Эйлера–Мариуама	8
2.6.3 Статистические свойства	8
2.6.4 Рекомендации по шагу	8
2.7 Дерево Пифагора (рекурсивная конструкция)	8
2.7.1 Построение	8
2.7.2 Алгоритм	8
2.7.3 Фрактальная размерность	9
2.8 Снежинка Коха	9
2.8.1 Правило построения	9
2.8.2 Длина и размерность	9
2.8.3 Реализация	9
2.9 Множество Жюлиа	9

2.9.1	Определение и критерий выхода	9
2.9.2	Алгоритм (псевдокод)	9
2.9.3	Рекомендации	10
2.10	Притяжение: распределение частиц в поле притягивающих центров	10
2.10.1	Постановка	10
2.10.2	Замечания:	10
2.11	Отталкивание: распределение частиц в поле отталкивающих центров	11
2.11.1	Постановка	11
2.11.2	Физические аспекты:	11
2.12	Больцмана (барометрическая формула: распределение в поле тяжести)	11
2.12.1	Общее распределение Больцмана имеет вид:	11
2.12.2	Интерпретации:	12
2.13	Кристаллизация (гексагональная решётка)	12
2.13.1	Симметрия в гармоническом приближении	12
2.13.2	Особенности:	12
2.14	Кристаллизация (квадратная решётка)	12
2.14.1	Замечание:	12
2.14.2	Отличия:	12
3	Описание программы	13
4	Заключение	16

1 Введение

В статистической физике системы с большим числом степеней свободы описываются через вероятностные распределения микросостояний. Макроскопические величины (энергия, энтропия, корреляционные функции) появляются из статистического усреднения. Цель работы — создать модельные распределения точек, которые иллюстрируют ключевые концепции статистической механики:

- Энтропия и хаотичность,
- Взаимодействия и локальная корреляция,
- Фазовые переходы и формирование доменов,
- Флуктуации и стохастическая динамика,
- Самоорганизация и масштабная инвариантность.

2 Стратегии и физические аналоги

2.1 Папоротник Барнсли

2.1.1 Математическая постановка

Имеется набор N аффинных преобразований $f_i : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$:

$$f_i(\mathbf{x}) = A_i \mathbf{x} + \mathbf{t}_i, \quad A_i = \begin{pmatrix} a_i & b_i \\ c_i & d_i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{t}_i = \begin{pmatrix} e_i \\ f_i \end{pmatrix},$$

$i = 1, \dots, N$, с вероятностями p_i , $\sum_i p_i = 1$. В вашей задаче $N = 4$.

Аттрактор F удовлетворяет ур-ю Хатчинсона:

$$F = \bigcup_{i=1}^N f_i(F).$$

2.1.2 Алгоритм (хаотическая игра)

1. Задать начальную точку \mathbf{x}_0 (например $(0, 0)$).
2. Для $n = 0 \dots N_{\text{iter}} - 1$:
 - (a) Выбрать индекс i с вероятностью p_i .
 - (b) $\mathbf{x}_{n+1} \leftarrow f_i(\mathbf{x}_n)$.
 - (c) Если $n > N_{\text{burn-in}}$, выводить/сохранять \mathbf{x}_{n+1} .

2.1.3 Псевдокод

```
x = x0
for n in range(N_iter):
    i = random_choice(p)
    x = A[i] @ x + t[i]
    if n > burn_in:
        save_point(x)
```

2.1.4 Параметры и рекомендации

- N_{iter} : для хорошей плотности точек обычно $10^5 - 10^7$.
- $N_{\text{burn-in}}$: от 20 до 500 в зависимости от контрактивности.
- Преобразования должны быть контрактными (спектральный радиус < 1), иначе нет гарантии сходимости.
- Для детерминированной визуализации рекомендуется сгруппировать точки в гистограмму (двумерная плотность) и логарифмировать счётчики.

2.2 Модель Изинга

2.2.1 Формулировка

Рассмотрим решётку (обычно квадратную) с переменными $s_i \in \{-1, +1\}$. Гамильтониан:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i.$$

Цель — либо найти стационарную конфигурацию при заданной T , либо смоделировать динамику релаксации.

2.3 Случайные точки (равномерное распределение)

2.3.1 Формулировка

Точки $\{x_i\}$ равномерны в квадрате $[0, 1]^2$. Плотность $p(\mathbf{x}) = \text{const} = 1$ на площади 1.

2.3.2 Алгоритм

Просто: $x \sim U(0, 1)$, $y \sim U(0, 1)$. Каждая точка независима.

2.3.3 Оценки и измерения

- Проверка равномерности: разбить область на $n \times n$ ячеек и оценить хи-квадрат для равенства частот.
- Корреляционная функция должна быть нулевой: $\hat{C}(r) \approx 0$ (стат. флуктуации $\sim 1/\sqrt{N}$).
- Энтропия: $S = - \int P \ln P$. Для равномерного P на единичной площади $S = 0$ в логарифме базе площади; важно интерпретировать относительную энтропию.

2.4 Треугольник Серпинского (хаотическая игра)

2.4.1 Алгоритм (chaos game)

Определены три вершины $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ треугольника. Итерация:

$$\mathbf{x}_{n+1} = \frac{\mathbf{x}_n + \mathbf{v}_k}{2},$$

где $k \in \{1, 2, 3\}$ случайно равновероятно (или с заданными весами).

2.4.2 Параметры

- N_{iter} от 10^4 до 10^7 .
- Начальная точка может быть произвольной.
- Возможна модификация коэффициента усреднения (не обязательно $1/2$) — получаются другие самоподобные множества.

2.4.3 Фрактальная размерность

$$D = \frac{\ln 3}{\ln 2} \approx 1.585.$$

2.5 Коррелированное поле (фильтрация белого шума)

2.5.1 Постановка

Хочется сгенерировать поле $\phi(\mathbf{r})$ с заданной корреляционной функцией $C(r)$, например гауссовой:

$$C(r) = \sigma_0^2 \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right).$$

2.5.2 Спектральный метод (FFT-конволюция)

1. Сгенерировать белый шум $\eta(\mathbf{r})$ (i.i.d. $\mathcal{N}(0, 1)$) на сетке $N_x \times N_y$.
2. Выбрать ядро $K(\mathbf{r})$ — например гауссово:

$$K(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}|^2}{2\sigma^2}\right).$$

3. Выполнить свёртку $\phi = K * \eta$ с помощью FFT:

$$\Phi(\mathbf{k}) = \hat{K}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\eta}(\mathbf{k}), \quad \phi = \mathcal{F}^{-1}(\Phi).$$

2.5.3 Нормализация

Подберите нормировку так, чтобы $\text{Var}[\phi] = \sigma_0^2$.

2.5.4 Альтернативы

- **Circulant embedding** — точный метод для гауссовских полей с известной ковариационной матрицей.
- **Turning bands / Karhunen–Loëve** для уменьшения затрат.

2.6 Уравнение Ланжевена (сильнодействующее затухание и стохастика)

2.6.1 Формула

$$m \frac{dv}{dt} = -\gamma v + \xi(t), \quad \langle \xi(t) \xi(t') \rangle = 2\gamma k_B T \delta(t - t').$$

2.6.2 Дискретизация: метод Эйлера–Марьюамы

Для шага Δt :

$$v_{n+1} = v_n + \frac{\Delta t}{m}(-\gamma v_n) + \frac{1}{m} \sqrt{2\gamma k_B T \Delta t} \eta_n,$$

где $\eta_n \sim \mathcal{N}(0, 1)$.

Позиция:

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t.$$

2.6.3 Статистические свойства

В стационарном режиме v имеет гауссово распределение:

$$P_{\text{eq}}(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right).$$

2.6.4 Рекомендации по шагу

Δt выбирают так, чтобы $\gamma \Delta t / m \ll 1$ для точности Эйлера–Марьюамы или использовать схемы повышенной точности (Heun, Stochastic Runge–Kutta).

2.7 Дерево Пифагора (рекурсивная конструкция)

2.7.1 Построение

Начинается с квадратного основания стороны s_0 . На нём располагается прямоугольный треугольник, на катетах которого строятся меньшие квадраты со сторонами

$$s_n^{(1)} = s_{n-1} \cos \theta, \quad s_n^{(2)} = s_{n-1} \sin \theta.$$

Рекурсивно продолжаем для каждого из меньших квадратов.

2.7.2 Алгоритм

Рекурсивная функция `draw_square(center, size, angle, depth)`:

Нарисовать квадрат.

Если `depth==0`: `return`.

Вычислить позиции и размеры двух дочерних квадратов.

Рекурсивно вызвать `draw_square` для дочерних.

2.7.3 Фрактальная размерность

Численный расчёт box-counting даёт $D \approx 1.5$ (зависит от θ).

2.8 Снежинка Коха

2.8.1 Правило построения

Каждый отрезок заменяется на 4 сегмента: разделить отрезок на три части, на средней части построить равносторонний треугольник и удалить его основание.

2.8.2 Длина и размерность

Длина после n итераций:

$$L_n = L_0 \left(\frac{4}{3}\right)^n.$$

Фрактальная размерность:

$$D = \frac{\ln 4}{\ln 3} \approx 1.2619.$$

2.8.3 Реализация

Рекурсивная или итеративная (замена каждого сегмента) схема. Для визуализации лучше выбирать $n \leq 7$ (быстрый рост числа сегментов).

2.9 Множество Жюлиа

2.9.1 Определение и критерий выхода

Итерация:

$$z_{n+1} = z_n^2 + c, \quad z_0 = z.$$

Критерий выхода: $|z_n| > R_{\text{esc}}$ (обычно $R_{\text{esc}} = 2$ для квадратичных отображений) означает расходимость. Escape time n_{esc} даёт окраску пикселя.

2.9.2 Алгоритм (псевдокод)

```
for pixel in grid:
    z = complex(x,y)
    for n in range(max_iter):
        z = z*z + c
        if abs(z) > R_esc:
            color = colormap(n)
```

```

        break
else:
    color = interior_color

```

2.9.3 Рекомендации

- Использовать сглаживание escape-time (continuous coloring) для плавных цветов.
- Для высокого качества применять периодическую проверку на циклы (to speed up).

2.10 Притяжение: распределение частиц в поле притягивающих центров

2.10.1 Постановка

Рассмотрим систему независимых частиц в фиксированном внешнем потенциальном поле $U(\mathbf{r})$, создаваемом наборами притягивающих центров $\{\mathbf{r}_k\}$. В каноническом ансамбле (температура T , постоянная Больцмана k_B) плотность вероятности обнаружить частицу в точке \mathbf{r} пропорциональна вероятности термостата иметь энергию, соответствующую положению частицы в этом поле. Следовательно,

$$\rho(\mathbf{r}) \propto \exp(-\beta U(\mathbf{r})), \quad \beta = \frac{1}{k_B T}.$$

Для модели с локальными притягивающими центрами потенциал запишем как

$$U(\mathbf{r}) = - \sum_k \frac{\varepsilon_k}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_k|^2}, \quad (\varepsilon_k > 0),$$

и тогда

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{Z} \exp\left(\beta \sum_k \frac{\varepsilon_k}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_k|^2}\right), \quad Z = \int_{\Omega} \exp\left(\beta \sum_k \frac{\varepsilon_k}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_k|^2}\right) d^d r.$$

2.10.2 Замечания:

- Приближение независимых частиц справедливо только при малых плотностях.
- Потенциал $\propto 1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}_k|^2$ требует регуляризации на малых расстояниях.
- При $k_B T \gg \varepsilon_k$ плотность приближается к однородной; при $T \rightarrow 0$ — наблюдается кластеризация.

2.11 Отталкивание: распределение частиц в поле отталкивающих центров

2.11.1 Постановка

Плотность частиц в каноническом ансамбле при внешнем положительном потенциале $U(\mathbf{r}) \geq 0$:

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\beta U(\mathbf{r})\right),$$

где

$$U(\mathbf{r}) = \sum_k \frac{\varepsilon_k}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_k|^2}, \quad \varepsilon_k > 0.$$

Вблизи центров $\rho(\mathbf{r})$ сильно уменьшается — эффект исключённого объёма.

2.11.2 Физические аспекты:

- Отталкивание создаёт области пониженной плотности (excluded volume).
- При наличии межчастичных взаимодействий требуется учитывать корреляционные функции.
- Для динамики:

$$\partial_t \rho = D \nabla \cdot (\nabla \rho + \beta \rho \nabla U)$$

(уравнение Фоккера–Планка).

2.12 Больцмана (барометрическая формула: распределение в поле тяжести)

2.12.1 Общее распределение Больцмана имеет вид:

$$\rho(\mathbf{r}) \propto \exp\left(-\frac{U(\mathbf{r})}{k_B T}\right).$$

Если выбрать потенциальную энергию в виде гравитационного поля:

$$U(h) = mgh,$$

то распределение принимает вид:

$$\rho(h) = \rho_0 \exp\left(-\frac{mgh}{k_B T}\right),$$

что и есть барометрическая формула.

Вывод следует из уравнения гидростатического равновесия:

$$\frac{dP}{dh} = -\rho g, \quad P = \frac{\rho k_B T}{m} \Rightarrow \frac{d\rho}{dh} = -\frac{m g}{k_B T} \rho.$$

2.12.2 Интерпретации:

- Характерная высота $H = \frac{k_B T}{mg}$.
- При $T \gg \frac{mgH}{k_B}$ распределение почти равномерное.
- При низких T — концентрация частиц у основания.

2.13 Кристаллизация (гексагональная решётка)

2.13.1 Симметрия в гармоническом приближении

Гексагональная структура (например, лед Ih) имеет симметрию $P6_3/mmc$. В гармоническом приближении:

$$\langle u^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right).$$

При $k_B T \gg \hbar\omega$:

$$\langle u^2 \rangle \approx \frac{k_B T}{m\omega^2},$$

а при $T \rightarrow 0$ остаются нулевые колебания.

2.13.2 Особенности:

- Координационное число $z = 6$.
- Среднее смещение определяется интегралом по плотности фононных состояний $g(\omega)$.
- Критерий Линдемана: плавление, если $\sqrt{\langle u^2 \rangle}/a \gtrsim 0.1 - 0.2$.

2.14 Кристаллизация (квадратная решётка)

2.14.1 Замечание:

Для квадратной (2D) или простой кубической (3D) решётки справедлива аналогичная формула:

$$\langle u^2 \rangle = \int \frac{\hbar}{2m\omega} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) g(\omega) d\omega.$$

2.14.2 Отличия:

- Координационное число $z = 4$ (2D квадратная решётка).
- Простая кубическая решётка имеет $Pm\bar{3}m$ симметрию (координация 6).
- Структура NaCl на самом деле $Fm\bar{3}m$, не простая кубическая.

3 Описание программы

Данная программа позволяет строить различные стратегии построения точек на поверхности.

Главное меню выглядит следующим образом:

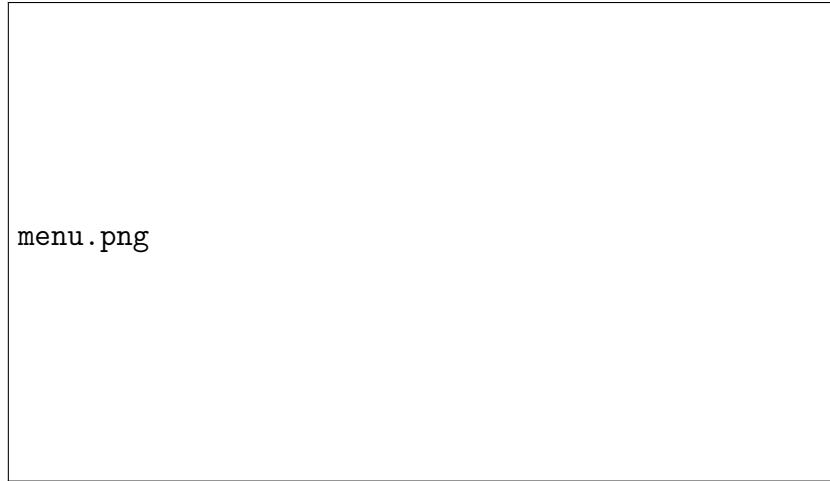


Рис. 1: Главное меню

Нажимаем на **Модель** и видим основной интерфейс:

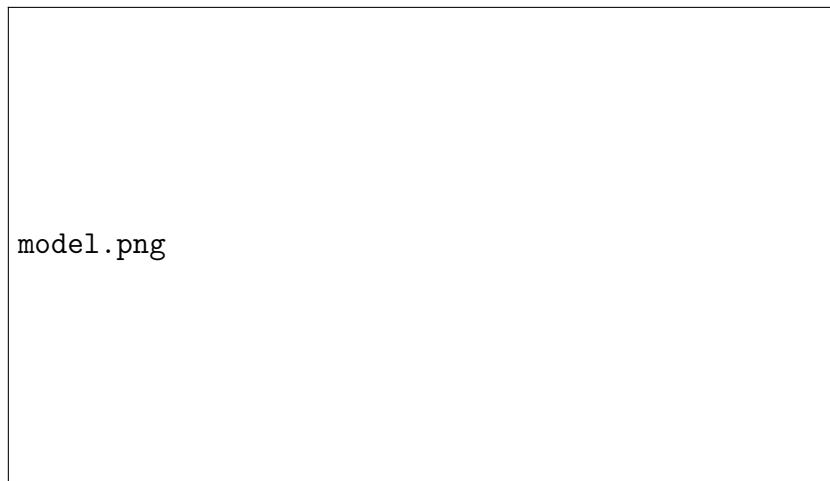


Рис. 2: Меню с моделью

На выбор можно выбрать 3 уровня сложности:

- **Лёгкий** — будет сгенерировано 1000 точек.
- **Средний** — будет сгенерировано 300 точек.
- **Тяжёлый** — будет сгенерировано 100 точек.

Также можно выбрать следующие стратегии: (их описание было дано выше)

- Случайная стратегия
- Случайные точки
- Треугольник Серпинского
- Притяжение
- Отталкивание
- Больцмана
- Кристаллизация (гексагональная)
- Кристаллизация (квадратная)
- Изинг
- Кореллированое поле
- Ланжевен
- Дерево Пифагора
- Снежинка Коха
- Папоротник Барнсли
- Множество Жюлиа

Как видно на Рис.2 пользователь может менять:

- **Скорость анимации:** в пределах 10 - 500 мс.
- **Количество точек за шаг:** в пределах 0 - 100.
- **Размер точек:** в пределах 0 - 20

Чтобы начать игру, пользователь должен нажать на кнопку **Генерировать**. Также можно узнать правильный ответ, ниже представлены примеры ответов для некоторых стратегий.

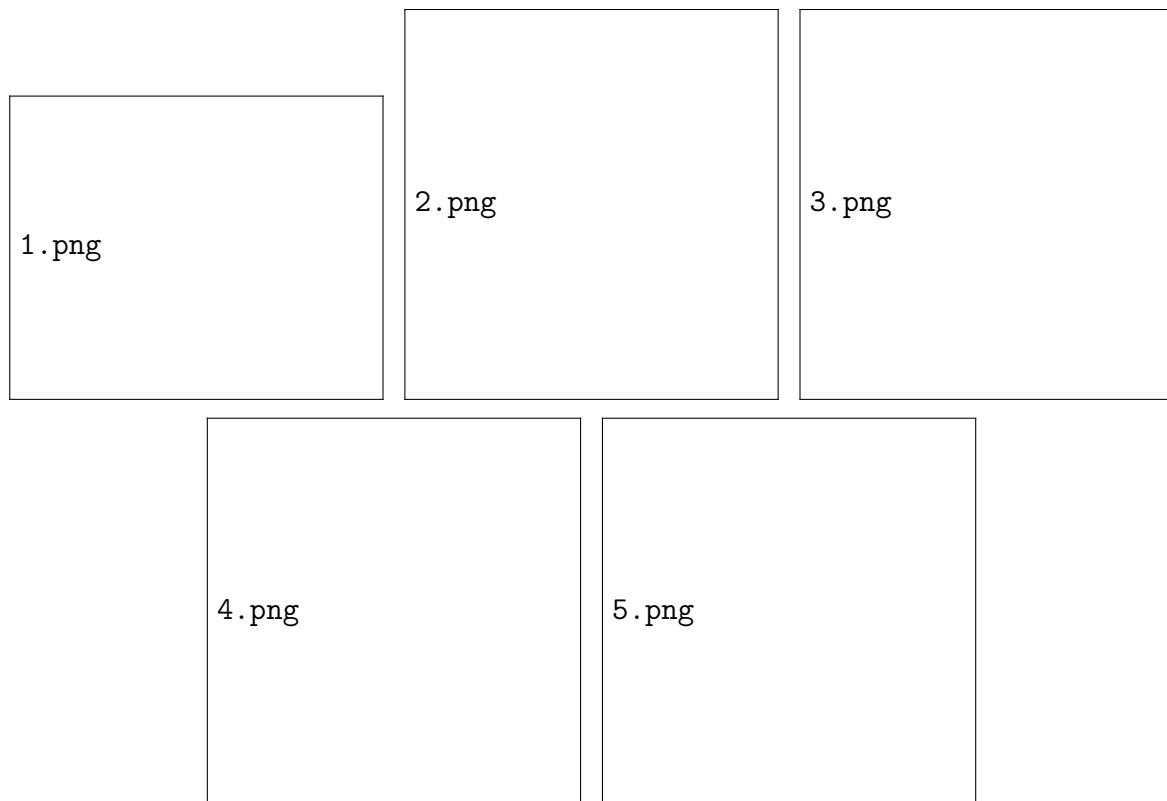


Рис. 3: Сетка из 5 изображений.

4 Заключение

Все стратегии демонстрируют связь между микрохаотическими правилами генерации точек и макроскопическими характеристиками системы. Программа позволяет наблюдать переход от хаоса к упорядочению, иллюстрируя ключевые концепции статистической физики: энтропию, взаимодействие, флуктуации, фазовые переходы и самоорганизацию.