

FOLYADÉK-MODELL

Szlávi Péter

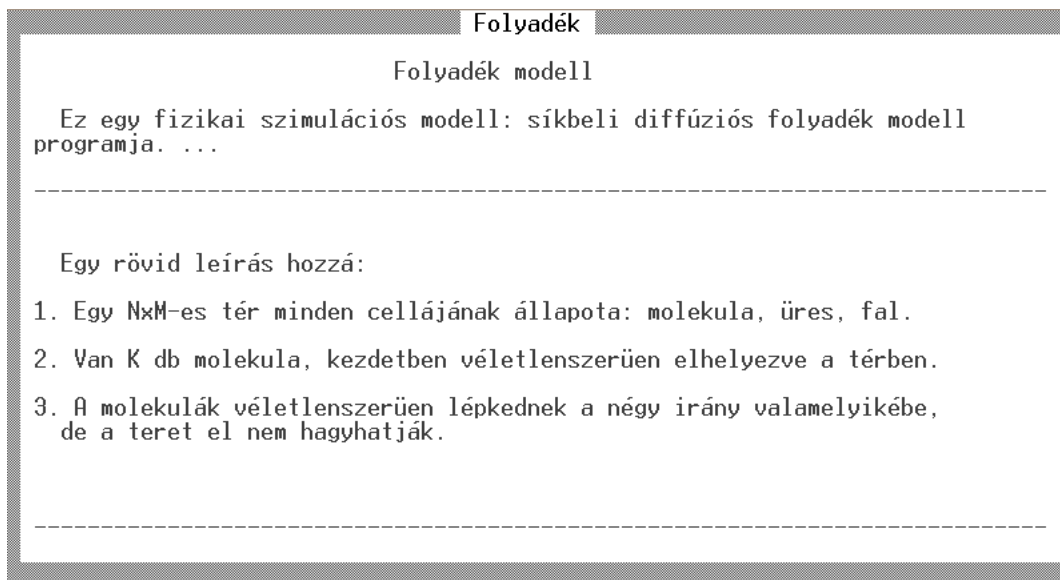
2000-2012

TARTALOM

FOLYADÉK-MODELL.....	1
1. Elvárások.....	2
2. A problémák.....	3
2.1. Szimulációs keret	4
2.2. Szimulációs lépés – a lényeg.....	4
2.2.1. A szimulációhoz tartozó reprezentáció	4
2.2.2. A szimulációhoz tartozó implementáció	5
3. A keretprogram	6
4. Feladatok.....	6
4.1. Alapfeladat.....	6
4.2. Modellezési feladatok.....	6
4.3. Szorgalmi feladat.....	6
5. A teljes anyag.....	6

1. Elvárások

Az elvárásokat legjobban az alábbi, futás során keletkezett ábrásor fejezi ki.



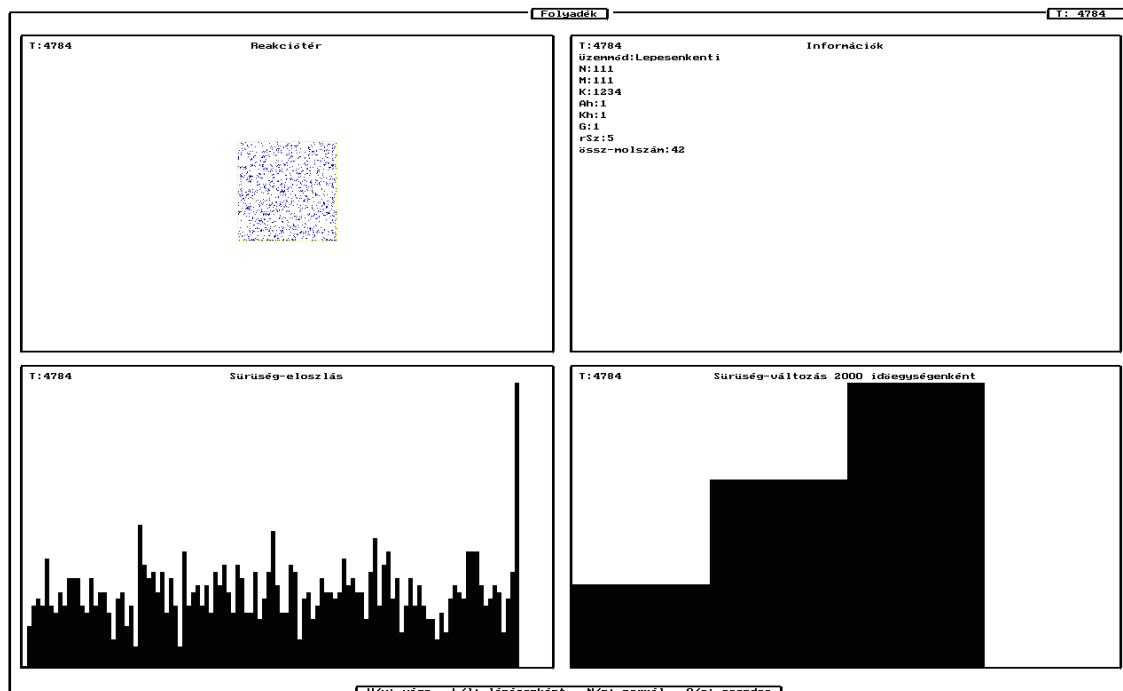
Lapozhatunk?/_

1. ábra. Egy futási kép – Tájékoztató

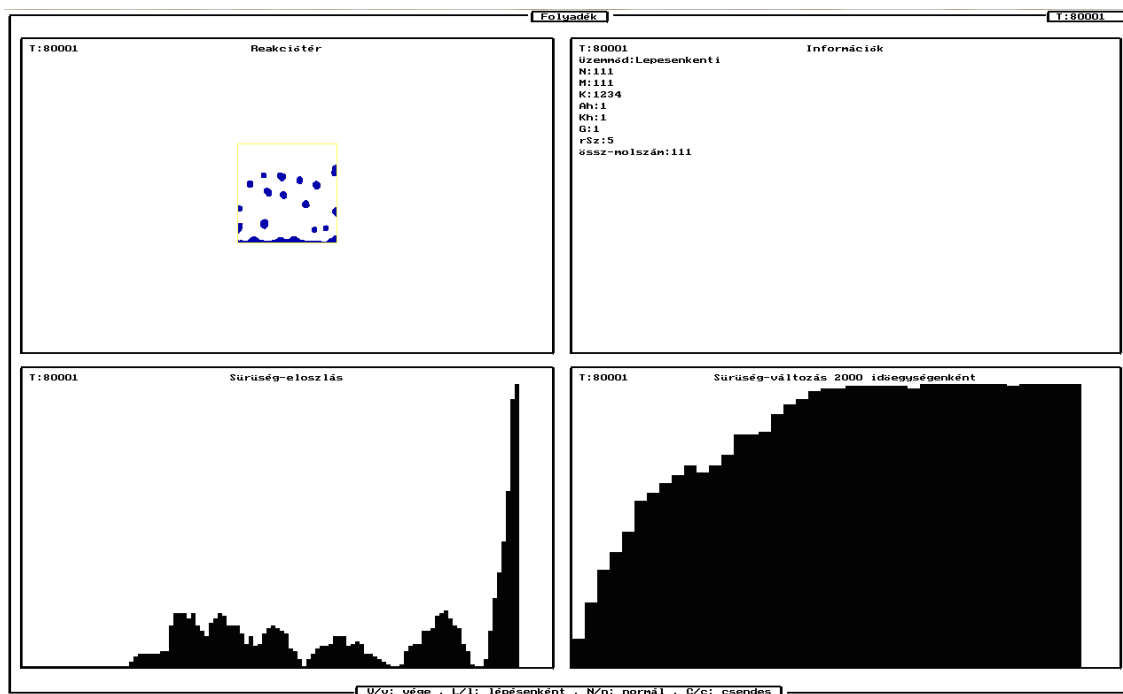


2. ábra. Egy futási kép – Paraméterezés

Folyadék-modell



3. ábra. Egy futási kép – Szimuláció közben (T=4784)



4. ábra. Egy futási kép – Közel a végállapothoz (T=70668)

valamint egy próba: [FolyMo.exe](#).

2. A problémák

Induljunk ki a Gáz-modellből a folyadék-modell, és programja megalkotásához! Így számos reprezentációs és implementációs kérdést megoldottnak vehetünk. (L. [Gáz-modell!](#))
Algoritmikusan csak maga a szimuláció tisztázandó.

2.1. Szimulációs keret

A modellezés alapadatai:

- T – idő
- N, M – reakciótér-méret
- K – a kezdetben elhelyezendő részecskék száma (ami most a modell működése során nem fog változni)
- A_h, K_h – adhéziós és kohéziós együttható (mekkora a fal-molekula, ill. molekula-molekula között ható „erő”)
- G – gravitációs együttható (-1..+1)
- r_{Sz} – szomszédsági sugár

A nagyvonalú algoritmus (nem változik a korábbihoz képest):

```

üzemMod:=Lépesenkénti
Tájékoztató
Inicializálás; T:=0
KezdőKépernyő
EredményMegjelenítés
Ciklus amíg nem VégeE
    T:+1
    SzimulációsLépés
    EredményMegjelenítés
Ciklus vége
ÖsszefoglalóMegjelenítés
    
```

2.2. Szimulációs lépés – a lényeg

A szimuláció során figyeljük a molekulák mozgását. A mozgást befolyásolja a közvetlen szomszédság, a molekulák vonzása (kohézió), a molekulák és a fal vonzása (adhézió), és a gravitáció. Oda nem léphet molekula, ahol már van molekula. A gravitációt sztochasztikusan vesszük számításba: nagyobb gravitáció esetén nagyobb eséllyel lép lefelé. A gravitációt számszerűsítjük: -1..+1. -1 esetén maximális „sebességgel” (1 valószínűséggel) lépjen felfelé. +1 esetén maximális „sebességgel” (1 valószínűséggel) lépjen lefelé, 0 esetén azonos a fel és lefelé mozgás esélye. Eddig a gáz-modell logikáját követtük. A folyadékságot úgy vesszük be a modellbe, hogy az odébb lépésnek az lesz a feltétele, hogy az új helyen nagyobb lesz a „szomszédsági” érték, azaz több „barátságos” (vonzó), mint „ellenséges” (taszító) molekula esetleg fal-elem van. Itt vesszük figyelembe a kohéziót és az adhéziót, amelyek szintén -1..+1 intervallumbeli értékkel rendelkeznek. A negatívság a taszítást, a pozitívság a vonzást jelentse.

2.2.1. A szimulációhoz tartozó reprezentáció

```

Változó
[Ablakok:]
TérAblak: TAblak           [Reakciótér]
KarAblak: TKarAblak       [Karakteres információk]
Graf1,
Graf2 : THisztAblak [Hisztogramok]
[Szimulációs adatok, paraméterek:]
T      : Egész [Kellően nagy, mert hosszú futásra kell számítani]
N,M,K  : Egész
    
```

Folyadék-modell

```

ReaTér : TReaTér
Ah,Kh,G: Valós
rSz    : Egész
  [Megjelenítési globális változók:]
innenY,
ideY   : Egész  [Innen ide lép át a molekula - megjelenítés miatt kell!]
figyY  : Egész  [Ezen az Y szinten figyeljük a sűrűség-alakulást]
sűrY   : Tömb(0..MaxN:Egész)  [Sűrűség az egyes Y szinteken]

```

Megjegyzés: a „sűrűség” kifejezés valójában az adott Y szinten lévő részecskék számát jelenti!

2.2.2. A szimulációhoz tartozó implementáció

Eljárás SzimulációsLépés:

Változó

```

i,j,
ii,jj:Egész

```

Ciklus

```

[mozgó részecske: (i,j)]

```

Ciklus

```

i:=Random(N)+1; j:=Random(M)+1

```

amíg ReaTér(i,j)≠Részecske

Ciklus vége

```

[potenciális véletlen szomszéd: (ii,jj)]

```

```

ii:=i+Random(3)-1; jj:=j+Random(3)-1

```

Ha SzomszédSzám(i,j)≥SzomszédSzám(ii,jj)+
(ii-i)*G [nem akar odébbmenni] **akkor**

```

ii:=i; jj:=j [helyben marad]

```

Elágazás vége

amíg ReaTér(ii,jj)≠Üres [valódi mozgás legyen!]

Ciklus vége

```

ReaTér(i,j):=Üres; ReaTér(ii,jj):=Részecske

```

```

RészecskeRajzolás(TérAblak,N,M,i,j,ReaTér(i,j))

```

```

RészecskeRajzolás(TérAblak,N,M,ii,jj,ReaTér(ii,jj))

```

```

[sűrűség-kezelés:]

```

```

innenY:=i; ideY:=ii; [Megjeleníthetőség kedvéért]

```

```

sűrY(i):-1; sűrY(ii):+1

```

```

összMol:=sűrY(figyY)

```

Elágazás vége.

Függvény SzomszédSzám(Konstans i,j:Egész):Valós

Változó

```

k,l:Egész
ss :Valós

```

```

ss:=0

```

Ciklus k=Max(0,i-rSz)-tól Min(N,i+rSz)-ig

Ciklus l=Max(0,j-rSz)-tól Min(M,j+rSz)-ig

Ha i≠k **vagy** j≠l **akkor**

Elágazás

```

ReaTér(k,l)=Fal          esetén ss:=ss+Ah/Táv(i,k,j,l)

```

```

ReaTér(k,l)=Részecske  esetén ss:=ss+Kh/Táv(i,k,j,l);

```

```

{Üres                    esetén ss:=ss+0}

```

Elágazás vége

```
Ciklus vége  
Ciklus vége  
SzomszédSzám:=ss  
Függvény vége.
```

```
Függvény Táv(Konstans y1,y2,x1,x2:Egész):Valós  
Táv:=[√] ((y1-y2)2+(x1-x2)2)  
Függvény vége.
```

3. A keretprogram

L. [FolyKe.pas](#). [Ablakok.pas](#).

4. Feladatok

4.1. Alapfeladat

A keretprogram hiányzó részeit pótolni, azaz '*(*ide kell a kód*)*' megjegyzéssel megjelölt részek kitöltése:

- SzimulaciosLepes-ben
- OsszefoglaloMegjelenites bővítése a KonkluzioFajl-lal összefüggésben

4.2. Modellezési feladatok

Az alábbi két problémát gondolja meg! Miben változik a szimulációs lépés?

Tételezzük föl, hogy a reakciótér egy a) vízszintesen (egyenletesen) gyorsuló, b) függőleges tengelye körül, állandó sebességgel „forgó” rendszer, amelyben nemcsak a gravitáció hat, hanem a mozgásból adódó vízszintes (kényszer) erő is.

4.3. Szorgalmi feladat

Valósítsa meg a 4.2.-ben felvetett problémát programmal, kiindulva a meglévő megoldásból!

5. A teljes anyag

Ez a kézirat, források, lefordított kódok, súgófájl....: [FolyKe.zip](#).