

TDK DOLGOZAT

Kölcsönhatás mentes kemény gömbök ütközési statisztikája

Szerző:

Viczián Anna

Fizikus BSc, II. évf.

Témavezető:

Dr. Török János

Egyetemi docens

BME Elméleti Fizika Tanszék



BME
2021

Kivonat

Manapság a fizika egyik legérdekesebb kihívása olyan komplex rendszerek viselkedésének előrejelzése, amik sok részecskéből állnak, és bár ezek között a kölcsönhatások egyszerűek, a kapott viselkedés igen szerteágazónak bizonyul (pl. esőfelhők, naprendszerek keletkezése, állatok csoportos mozgása, kavicsok kopása, stb.). A legtöbb ilyen tanulmány homogén, azonos tulajdonságú részecskékkel dolgozik, mert a probléma tovább bonyolódik, ha a rendszer részecskéinek tulajdonságai igen változatosak. Ilyen jellegű vizsgálat még a legegyszerűbb esetekben is kevés van.

A dolgozatban ezért egy olyan heterogén rendszer méretfüggő ütközési statisztikáját tanulmányozzuk, amelyben a részecskék között a tökéletesen rugalmas ütközésen kívül nincs kölcsönhatás. Elsőként a rendszert eseményvezérelt szimulációval vizsgáljuk, itt kiderül, hogy az ütközések száma a sugár függvényében nem monoton. A dolgozat hátralévő részében ezen görbe matematikai leírásával foglalkozunk.

Modellünk lényege, hogy egy részecske ütközéseit a hozzá rögzített vonatkoztatási rendszerből vizsgáljuk, és fölteszük, hogy a többi (szabad) gömb bármely irányból, de csak az átlagos sűrűségből származtatott távolságból érkezik. Ahhoz, hogy a tér egy adott irányából érkező szabad gömb ütközhesse a vizsgált gömbbel, sebességvektorának szöge csak egy bizonyos intervallumba eshet. A vizsgált gömb ütközési gyakoriságát az ütközési lehetőségek sebességgel súlyozott integráljaként kapjuk. Az integrál numerikus megoldásával kapott görbe közel tökéletesen megegyezik az eseményvezérelt szimuláció során látott görbével, több különböző sugáreloszlás esetén is.

Tartalomjegyzék

1. Motiváció	4
2. A rendszer vizsgálata eseményvezérelt szimulációval	5
2.1. A vizsgált rendszer	5
2.2. Eseményvezérelt szimuláció	5
3. A modell	7
3.1. A modell szimulálása	10
3.2. Számolás a modellel	11
3.2.1. Az esetek vizsgálata	12
3.2.2. Az integrálok felírása	14
3.2.3. Az integrálok egyszerűsítése	16
4. Eredmények	17
5. Diszkusszió	17
5.1. Egy egyszerűbb modell	17
5.2. A 3 dimenziós eset	18
6. Konklúzió	19
Függelék	19
7. Integrálok	19
8. Két modell összehasonlítása	21

1. Motiváció

Ebben a dolgozatban azt a problémát vizsgáljuk, hogy ha egy tartályban rengeteg különböző részecske szabadon mozog, akkor azok milyen valószínűséggel fognak ütközni egymással a méret függvényében. A problémát több esetben is vizsgálták már [3], hiszen az ütközések gyakoriságának pontos leírása elengedhetetlen pl. a granulációs, az agglomerációs, illetve a reakciós folyamatok vizsgálatakor. Azonban van még egy folyamat, ahol ez a valószínűség alapvető szerepet játszik a mérhető kimenet szempontjából. Ezt az alábbiakban egy kicsit részletesebben is elemezzük.

A természetben leggyakrabban vízpartokon találkozunk különböző alakú és méretű kavicsokkal. A kavicsok kopásának vizsgálata hosszú múltra tekint vissza, már Arisztotelész is foglalkozott a kérdéssel. A témában két, jellegében különböző kérdéskör merülhet fel. Az egyik a kavicsok alakjáról, a másik pedig a méreteloszlásukról szól. Mivel az ütközési gyakoriság a második problémához alapvető jelentőségű, ezért a továbbiakban a második problémával foglalkozunk.

Cikkünkben [1] A. A. Sipos és munkatársai egy modellt mutattak be a kavicsok méreteloszlásának evolúciójára, ahol a rendszer viselkedését két részecske kölcsönhatására vezették vissza. Felhasználták Domokos és Gibbons [2] eredményeit a két részecskés rendszerbeli kopásról, mely szerint a részecskék kopásának mértéke arányos az ütközési energiával, amely a következőképpen adható meg:

$$E_{coll} = \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} u^2, \quad (1)$$

ahol u az ütközési sebesség, amely a részecskék alacsony energiás, laminárisnak tekinthető áramlása esetén közelítőleg állandó. Ha a részecskék anyaga azonos akkor a bináris ütközésből származó térfogatveszteség a következőképpen adható meg:

$$\begin{aligned} \dot{V}_1 &= -C \frac{V_1 V_2}{V_1 + V_2} \\ \dot{V}_2 &= -C \frac{V_2 V_1}{V_2 + V_1}, \end{aligned} \quad (2)$$

ahol C egy anyagjellemzőket és a rendszer átlagos kinetikus energiáját tartalmazó paraméter.

E bináris modell több részecskére való kiterjesztése az r paraméter bevezetésével tehető meg. A motiváció a paraméter bevezetése mögött a statisztikus hatások figyelembevétele (pl. az ütközési gyakoriság függhet a részecskék tömegétől vagy sebességétől), és a következőképpen származtatható:

$$N_1 \sim \left(\frac{V_1}{V_2} \right)^r \quad (3)$$

ahol N_1 az 1-es részecske időegység alatt bekövetkező ütközéseinek száma. Így végül a méreteloszlás evolúciót leíró kernel:

$$\begin{aligned} \dot{V}_1 &= -C \frac{V_1^{r+1} V_2^{r-1}}{V_1 + V_2} \\ \dot{V}_2 &= -C \frac{V_2^{r+1} V_1^{r-1}}{V_2 + V_1} \end{aligned} \quad (4)$$

Látható, hogy a C paraméter szerepe pusztán az időskála meghatározása, a folyamatok dinamikájára nincs hatással.

Tapasztalat szerint a méreteloszlás időbeli változása a részecskék átlagos mozgási energiájától függően kétféle lehet: alacsony energiákon fókuszáló, magas energiákon pedig szóró. A [1] cikkben ismertetett szimulációs eredmények szerint mindkét eset leírható a (4) egyenletekkel. Nagy energiás, kaotikus folyamatok esetén az r értéke kicsi és az eloszlás időben széttartó, alacsony energiás laminárisabb áramlásban r nagy és az eloszlás fókuszáló. Azonban nagy energiákon a kernel megalkotása során felhasznált feltételek nem lesznek igazak. Az ütközési sebesség (u) nem lesz állandó és az ütközési gyakoriság se lesz leírható a (3) összefüggéssel. Ezen problémakör feltárásának érdekében ebben a dolgozatban a kaotikus esetben történő ütközésekkel foglalkozunk.

2. A rendszer vizsgálata eseményvezérelt szimulációval

2.1. A vizsgált rendszer

A dolgozatban vizsgált rendszer n különböző sugarú kemény gömbből áll. Ezek egy zárt, a számolások megkönnyítése kedvéért 2 dimenziós téren szabadon mozognak és a tökéletesen rugalmas ütközésen kívül nincs köztük kölcsönhatás. Mozgásuk során ütköznek egymással és a zárt tér falaival is, mi azonban az ütközési statisztikához csak a gömbgömb ütközéseket számoljuk, mivel az 1. részben ismertetett kopásmodell is csak ezt veszi figyelembe.

Kellő számú ütközés után a golyók kinetikus energiája felveszi a Gamma eloszlást [5], és az ekvipartíció miatt az átlagos energiájuk egyforma lesz, függetlenül a sugártól. Az energia, ami jelen esetben csak kinetikus, a következő alakban írható: $E = \frac{1}{2}mv^2$. Mivel a gömbök tömege egyenesen arányos a sugaruk köbével ($m \sim r^3$), ezért ahhoz, hogy az energia független maradjon r -től, a sebességnek függnie kell a sugártól a következő módon:

$$v = cr^{-3/2} \quad (5)$$

ahol a c konstans a továbbiakban 1-nek választjuk. Fontos észrevenni, hogy (5) értelmében a kisebb golyók gyorsabbak lesznek a nagyoknál.

A következőkben először szimulálni fogjuk az itt leírt rendszer, hogy numerikusan meghatározzuk az eloszlást néhány esetben, majd pedig azokat megkíséreljük analitikusan is kiszámolni.

2.2. Eseményvezérelt szimuláció

Először is diszkrét elem (DEM) szimulációkat végeztünk, hogy numerikusan meghatározzuk az ütközési gyakoriságokat. A legelterjedtebb módszer a molekuláris dinamika [4], amely során a merev testek átlapolásából számoljuk az elasztikus erőket, amik hatására lezajlik az ütközés. Fontos, hogy az ütközés kellően sima legyen, ezért az elemi időlépést igen kicsinek kell választani. Ráadásul mivel nekünk különböző méretű és ezáltal különböző sebességű részecskéink vannak, a paramétereket a legrosszabb esethez, a kicsi és gyors golyókhoz kell igazítanunk. Ez a módszer a mi esetünkben használhatatlanul lassú lenne.

A másik opció az eseményvezérelt szimuláció, ami abban különbözik az előzőtől, hogy most nem lesznek állandóak az időlépések. Minden t időpontban a részecskék sebességének és pozíciójának ismeretében kiszámoljuk azt a Δt_{min} időlépést amely a következő ütközési eseményhez visz. A $t + \Delta t_{min}$ időpontba ugrunk, elvégezzük az ütközést, mint egy pillanatszerű eseményt, emellett a többi részecskét is előreleptetjük a $t + \Delta t_{min}$ időpontig. A módszer előnye, hogy a számítógépes számábrázolás hibáján kívül pontosan leírja a rendszer viselkedését. Gáz jellegű rendszerekre ez a módszer nagyságrendekkel gyorsabb, emiatt a két módszer közül ez utóbbit alkalmazzuk.

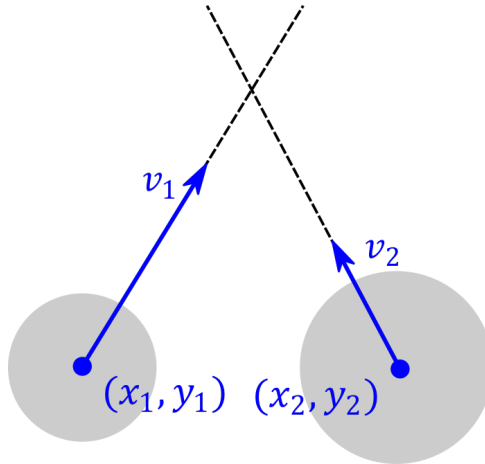
Két gömb ütközéséig eltelt Δt idő az 1. ábra szerint a következőképpen számolható:

$$\begin{aligned}(r_1 + r_2)^2 &= [x_1 + v_{1x}\Delta t - (x_2 + v_{2x}\Delta t)]^2 + [y_1 + v_{1y}\Delta t - (y_2 + v_{2y}\Delta t)]^2 \\ 0 &= a(\Delta t)^2 + b\Delta t + c\end{aligned}\tag{6}$$

ahol:

$$\begin{aligned}a &= (v_{1x} - v_{2x})^2 + (v_{1y} - v_{2y})^2 \\ b &= 2[(x_1 - x_2)(v_{1x} - v_{2x}) + (y_1 - y_2)(v_{1y} - v_{2y})] \\ c &= (x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 - (r_1 + r_2)^2\end{aligned}\tag{7}$$

Itt r_1 és r_2 a gömbök sugarai. A (6) egyenletnek legfeljebb két megoldása van, ezek közül a kisebb lesz az ütközésig eltelt idő (feltéve, hogy ez pozitív). Ennek oka hogy, a pályaegyeneseink metszéspontjára szimmetrikus a folyamat, így a gömbök középpontjainak távolsága kétszer lesz $r_1 + r_2$, egyszer az ütközéskor, egyszer meg a metszésponton való áthaladás után.



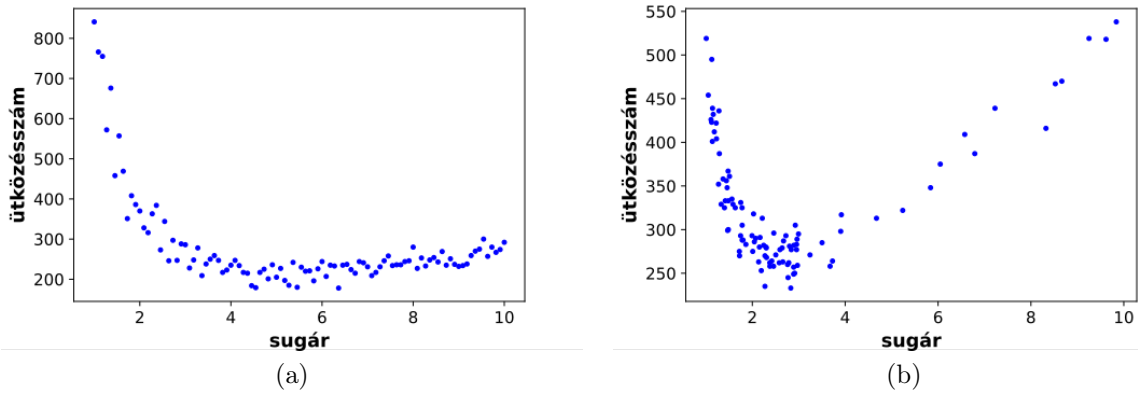
1. ábra. Két golyó következő ütközéséig eltelt idő meghatározása

Miután megtaláltuk a minimális $\Delta t > 0$ -t, az időugrás elvégzése után a tökéletesen rugalmasan ütköző gömbök ütközés utáni sebességei a következők lesznek:

$$\begin{aligned}\mathbf{u}_1 &= \frac{2m_2\mathbf{v}_2 + (m_1 - m_2)\mathbf{v}_1}{m_1 + m_2} \\ \mathbf{u}_2 &= \frac{2m_1\mathbf{v}_1 + (m_2 - m_1)\mathbf{v}_2}{m_1 + m_2}\end{aligned}\tag{8}$$

ahol m_1 és m_2 a golyók tömegei, $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ a sebességek az ütközés előtt, $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ a sebességek az ütközés után. A falakkal való ütközések során pedig a falra merőleges sebességkomponens az ellentettjére változik.

A (6) és (8) egyenletek ismeretében a szimuláció futtatható, és az egyes gömbök ütközéseinek száma meghatározható. A dolgozatban ismertetett esetekben $n = 100$, $r \in [0, 10]$ sugarú gömböt szimuláltunk $A = 1000 \cdot 1000$ területű négyzet alakú zárt téren. Ebben az esetben a tapasztalat szerint $T = 10^5$ elég idő volt ahhoz, hogy az ütközési számok arányai állandósuljanak. A mért ütközési számok aránya csak a golyók sugáreloszlásától és az átlagos térbeli sűrűségüktől függ, a kezdeti energia csak az időskálát változtatja. Ennek oka, hogy a keveredés következtében a kinetikus energia viszonylag hamar felveszi a Gamma eloszlást. A szimulációs eredmények két különböző sugáreloszlás esetén a 2. ábrán láthatók. A baloldali ábrán a sugarakat egyenletesen választottuk az $[1, 10]$ tartományból, a jobb oldali esetben a $r \in [1, 3]$ sugár tartományból választottuk a részecskék 80%-át ($0.8n$), a $r \in [3, 10]$ sugár tartományból, pedig a részecskék 20%-át ($0.2n$).



2. ábra. Az eseményvezérelt szimuláció eredményei

A sugarak eloszlása: (a) egyenletes eloszlás (b) 80%: $r = 1 - 3$, 20%: $r = 3 - 10$ szerinti eloszlás

3. A modell

Modellünk alap gondolata, hogy egy adott gömb ütközéseinek számát a saját vonatkoztatási rendszeréből vizsgáljuk, és egyszerre csak egy adott sugarú másik gömbbel történő ütközésével foglalkozunk. A vizsgált (1.) gömb vonatkoztatási rendszerébe (K_1) áttérve és kiválasztva az ütközésben résztvevő másik gömböt, a 3a. ábrán lévő elrendezést kapjuk. Itt r_1 a vizsgált gömb r_2 pedig a kiválasztott szabad (2.) gömb sugara, $R = \frac{1}{2}\sqrt{A/n}$ pedig a két gömb középpontjának átlagos távolsága a golyók térfogati sűrűségével arányos mennyiség (A a tartály területe), és így bármely két gömb esetén ugyanaz.

A gömbök sebességeit, és ezek irányait a 3b. ábrán illusztráltuk. $\mathbf{v}_1$ és $\mathbf{v}_2$ a vizsgált, illetve szabad gömb a labor vonatkoztatási rendszerében (K_{labor}) mért sebessége, abszolútértékük az (5) értelmében $v_1 = r_1^{-3/2}$ illetve $v_2 = r_2^{-3/2}$. $\mathbf{v}$ pedig a szabad gömb K_1 -beli

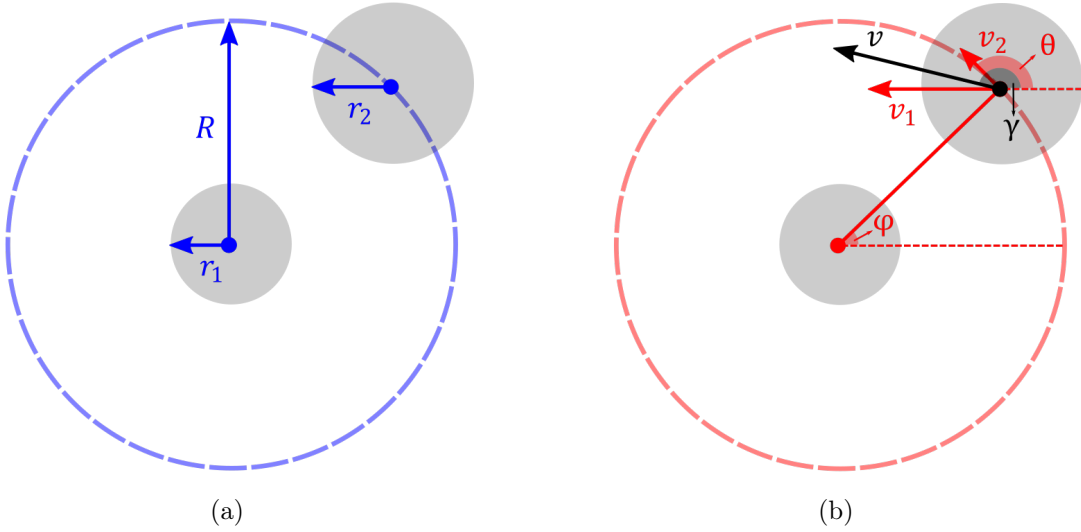
sebessége, ennek mérete v_1 és v_2 ismeretében a cosinus tételt felhasználva a következőképpen számolható:

$$v = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 - 2v_1v_2 \cos \theta} \quad (9)$$

A K_1 rendszer koordinátatengelyeit úgy választjuk meg, hogy $\mathbf{v}_1$ párhuzamos legyen az x_1 tengellyel, így ennek iránya állandó ebben a vonatkoztatási rendszerben. $\mathbf{v}_2$ irányát a $\theta \in [0, 2\pi[$ szög jellemzi, melynek egyenletes az eloszlása, mivel K_{labor} -ban a gömbök sebessége tetszőleges irányú lehet, és minden iránynak ugyanakkora a valószínűsége. $\mathbf{v}$ irányát a $\gamma \in [0, 2\pi[$ szög adja meg, amely a 3b. ábrának megfelelően a következőképpen számolható:

$$\gamma = \arctan \left(\frac{v_2 \sin \theta}{v_2 \cos \theta - v_1} \right) + k\pi \quad (10)$$

ahol azért szerepel a $+k\pi$ ($k \in \mathbb{N}$), mert az arctan függvény értékkészlete a $] -\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}[$, γ pedig $[0, 2\pi[$ -beli szög. A (10) egyenletből látszik, hogy γ eloszlása nem lesz egyenletes, sőt később látni fogjuk, hogy ha $v_1 > v_2$ akkor nem is vesz fel minden értéket a $[0, 2\pi[$ intervallumból. A 2. gömb helyzetét $\varphi \in [-\pi, \pi[$ jellemzi, melynek θ -hoz hasonlóan egyenletes az eloszlása, mert a gömbök minden irányból ugyanakkora valószínűséggel érkezhettek.



3. ábra. (a) A modellben használt távolságok (b) A modellben használt sebességek iránya és származtatása, valamint a golyók pozíciójának jellemzése

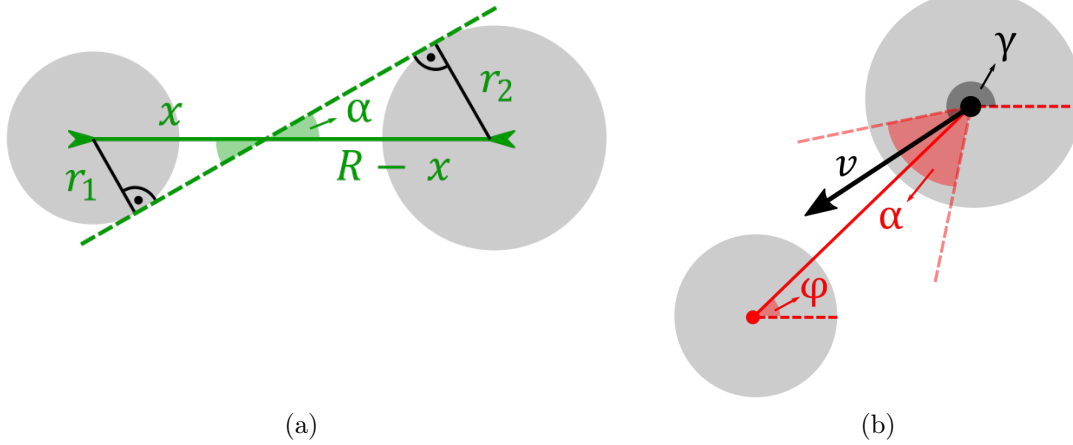
Két gömb ütközésének feltételét a 4b. ábra szemlélteti. Látszik, hogy ha $\mathbf{v}$ párhuzamos a szélső szaggatott vonalak valamelyikével akkor a 2. golyót ebben az irányban elmozdítva az még éppen ütközik az 1. golyóval. Tehát mivel $\mathbf{v}$ irányát γ adja meg, az ütközés feltétele az, hogy γ a két szaggatott vonal közti szögtartományba essen. Ezen intervallum hosszát jelölje 2α . Az α szöget a 4a. ábrán látható módon adhatjuk meg:

$$\alpha = \arcsin \left(\frac{r_1 + r_2}{R} \right) \quad (11)$$

Így a 4b. ábrának megfelelően az ütközés feltétele egy adott φ szögből érkező gömb esetén:

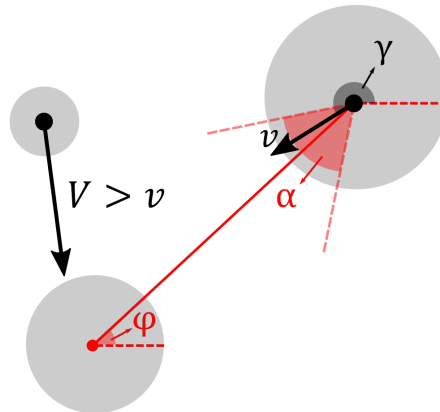
$$\pi + \varphi - \alpha \leq \gamma \leq \pi + \varphi + \alpha \quad (12)$$

Fontos megjegyezni, hogy ebben az egyenlőtlenségben a rendszer összes paramétere szerepel, az α és γ szögön keresztül.



4. ábra. (a) Az α szög meghatározása (b) Két golyó ütközésének feltétele

Azonban az előbbieken ismertetett, a (12) által megadott feltétel csak szükséges, de nem elégséges feltétele két golyó ütközésének. Ez abból is látszik, hogy a 2α intervallumhossz arányos az ütközésben résztvevő két gömb sugarának összegével, aminek az az eredménye, hogy minél nagyobb a két golyó, annál nagyobb a megengedett szögtartomány és így annál nagyobb eséllyel kéne ütközniük. Ez viszont a 2a. ábrán látható szimulációs eredmény alapján nem lehet igaz. Az ellentmondás oka az, hogy az ütközés idejét még nem vettük figyelembe.



5. ábra. Az ütközési idő fontosságának szemléltetése

Tekintsük az 5. ábrán látható esetet. A modell jelenlegi állása szerint a 2. golyó megfelel az ütközési feltételnek, így ütköznie kéne az 1. golyóval. Azonban látszik, hogy

mielőtt ez bekövetkezhetne az 1. golyó egy, a 2. golyónál gyorsabb golyóval fog ütközni. Ezen megfontolások alapján az ütközési feltétel a következőképpen módosul:

$$\pi + \varphi - \alpha \leq \gamma \leq \pi + \varphi + \alpha$$

és

$$\mathbb{P}(\text{ütközés}) = \frac{v}{v_{max}} \quad (13)$$

ahol v_{max} a legnagyobb lehetséges ütközési sebesség, esetünkben 2, de a továbbiakban ezt el fogjuk hagyni, mivel a végeredményben csak egy konstans szoros különbséget jelent.

Az előzőek alapján az 1. gömb ütközési gyakoriságát 2. gömbbel a következő integrál adja meg:

$$N_1 = \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \int_{\theta_1(\varphi)}^{\theta_2(\varphi)} v \, d\theta d\varphi \quad (14)$$

ahol a $[\varphi_1, \varphi_2]$ intervallum azon φ szögeket tartalmazza amelyeknél létezik olyan θ , hogy γ megfeleljen a (12) egyenlőtlenségnek, $\theta_1(\varphi)$ és $\theta_2(\varphi)$ pedig adott φ esetén rendre a legkisebb illetve legnagyobb θ értékek, amelyekből származtatott γ megfelel a (12)-nek. A v szorzót úgy is tekinthetjük, mintha a különböző sebességű gömbök szabad úthosszát vennénk figyelembe. Ahhoz, hogy az 1. gömb teljes ütközési gyakoriságát megkapjuk, minden másik gömb esetén is ki kell számolnunk a (14)-nek megfelelő N mennyiséget, majd ezeket össze kell adni.

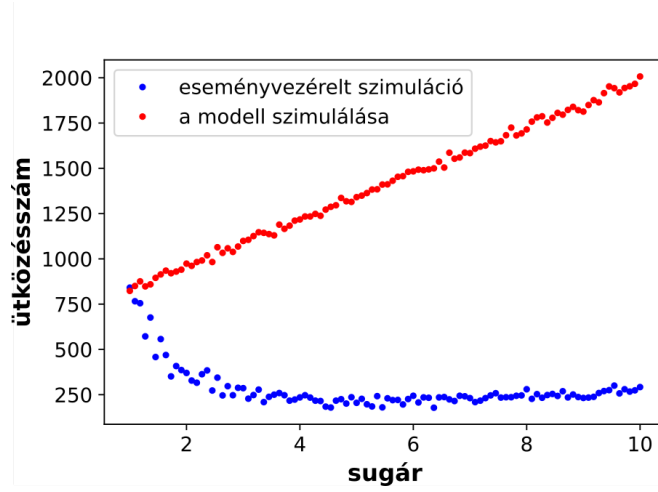
3.1. A modell szimulálása

A modell megalkotása során fontos ellenőrzési lehetőséget nyújtott a szimulálása. Fő célja az ütközési feltétel pontosítása volt, mielőtt nekifogtunk volna ténylegesen kiszámolni a (14) szerinti integrált (vagy annak egy korábbi verzióját).

A szimuláció során minden ütközésben résztvevő gömböt egyesével kiválasztunk és a modellnek megfelelően (3a. ábra) az R sugarú kör közepére helyezzük. A következőekben leírtakat minden középső gömb esetén sokszor ($10^5 - 10^6$ -szor) megismétlünk. Véletlenszerűen kiválasztunk egy φ szöget, ami kijelöli a kör egy pontját. Ebbe a pontba helyezzünk egy másik gömböt, mely sebességének irányát szintén véletlenszerűen választjuk ki, ez a θ szög. Ismerve a kör közepén lévő gömb r_1 sugarát és v_1 sebesség nagyságát, valamint a kör kerületén lévő gömb r_2 sugarát és v_2 sebesség nagyságát, az összes többi paraméter (v , α , γ) számolható. Ezt követően az ütközési feltételt felhasználva döntjük el, hogy a kör kerületén lévő gömb ütközik-e a kör közepén lévő gömbbel, ha igen akkor növeljük a középső gömb ütközéseinek számát a modellben szereplő mennyiséggel.

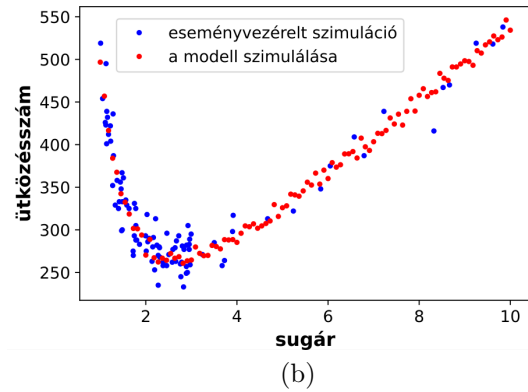
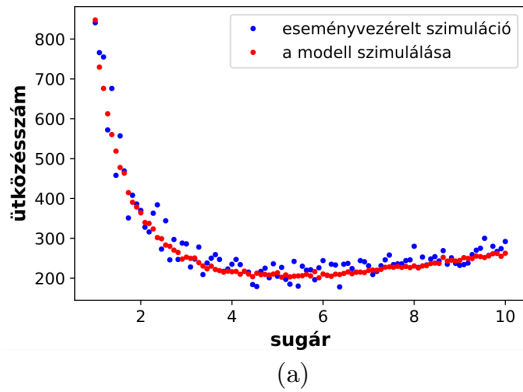
Ezen szimuláció során derült ki először, hogy a (12) önmagában nem elég, ezt a feltételt használva a 6. ábrán látható eredményt kapjuk.

Miután korrigáltuk a modellt az ütközési idő figyelembevételével a modell szimulálása során kapott eredmények sokkal jobban egyeztek az eseményvezérelt szimuláció eredményeivel.



6. ábra. A modell szimulálása során kapott eredmények, ha nem vesszük figyelembe az ütközési időt

A sugarak eloszlása: egyenletes eloszlás



7. ábra. A modell szimulálása során kapott eredmények az ütközési idő figyelembevételével
A sugarak eloszlása: (a) egyenletes eloszlás (b) 80%: $r = 1 - 3$, 20%: $r = 3 - 10$ szerinti eloszlás

3.2. Számolás a modellel

A (14) integrál meghatározásának fő nehézsége az, hogy az ütközési feltétel a γ szögnek szab határt az integrálban pedig a θ szög szerepel. Emiatt meg kell adnunk a $\theta(\gamma)$ függvényt, ami nem triviális feladat.

Mivel már ismerünk egy összefüggést θ és γ között, a (10) szerinti $\gamma(\theta)$ függvényt, ebből indulunk ki. Az összefüggésben megjelenik a két ütközésben résztvevő gömb sebessége, v_1 és v_2 , így ezek méretviszonyától függően három esetet különböztetünk meg; A: $v_1 < v_2$, B: $v_1 = v_2$, C: $v_1 > v_2$. Azonban mielőtt rátérnénk az esetek vizsgálatára, bevezetünk néhány

a későbbiekben hasznos függvényt. Az első a következő:

$$\lambda(\theta) := \arctan \left(\frac{v_2 \sin \theta}{v_2 \cos \theta - v_1} \right) \quad (15)$$

melynek értelmében a (10) egyenlet a $\gamma(\theta) = \lambda(\theta) + k\pi$ alakban írható. Mivel végső soron a $\gamma(\theta)$ inverz függvényére a $\theta(\gamma)$ függvényre van szükségünk érdemes előállítani a $\lambda(\theta)$ inverz függvényét:

$$\lambda^{-1}(\gamma) = 2n\pi - 2 \arctan \left(\frac{v_2 \pm \sqrt{v_2^2(\tan^2 \gamma + 1) - v_1^2 \tan^2 \gamma}}{(v_1 + v_2) \tan \gamma} \right) \quad (16)$$

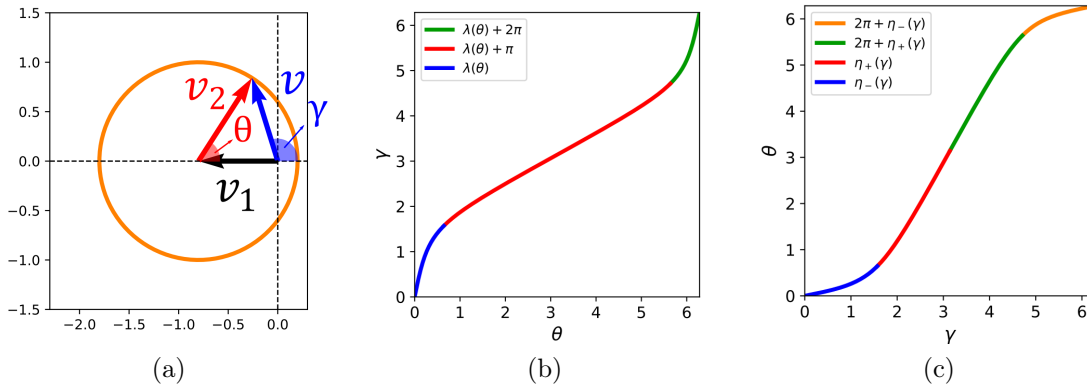
A kifejezések rövidítése végett itt is érdemes segédfüggvényt bevezetni, csak most az előzőekkel ellentétben kettő lesz nem egy:

$$\eta_-(\gamma) := -2 \arctan \left(\frac{v_2 - \sqrt{v_2^2(\tan^2 \gamma + 1) - v_1^2 \tan^2 \gamma}}{(v_1 + v_2) \tan \gamma} \right) \quad (17)$$

$$\eta_+(\gamma) := -2 \arctan \left(\frac{v_2 + \sqrt{v_2^2(\tan^2 \gamma + 1) - v_1^2 \tan^2 \gamma}}{(v_1 + v_2) \tan \gamma} \right) \quad (18)$$

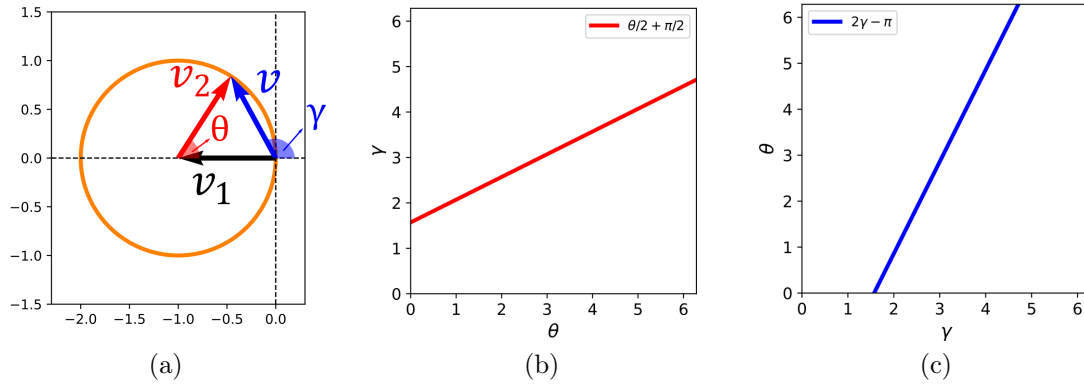
3.2.1. Az esetek vizsgálata

Az **A esetet** a 8a. ábra szemlélteti. Ebben az esetben $v_1 < v_2$, azaz a kör közepén nagyobb sugarú gömb áll, mint a kerületén. Azt váránk, hogy minden irányból lehetséges legyen az ütközése, mert a "kicsi és gyors" golyó mindig utolérheti a "nagy és lassút". Látszik, hogy ez teljesül is, mivel $\gamma(\theta = 0) = 0$, és $\gamma(\theta = 2\pi) = 2\pi$, a kettő között pedig a γ szög θ szigorúan monoton növekvő függvénye. Ez azt jelenti, hogy alkalmas θ választása esetén minden γ előállítható, így minden φ esetén fogunk találni olyan γ -t amely eleget tesz a (12) egyenlőtlenségnek. A $\gamma(\theta)$ kvalitatív ábrája a 8b. ábrán, a $\theta(\gamma)$ függvényé pedig a 8c. ábrán látható.



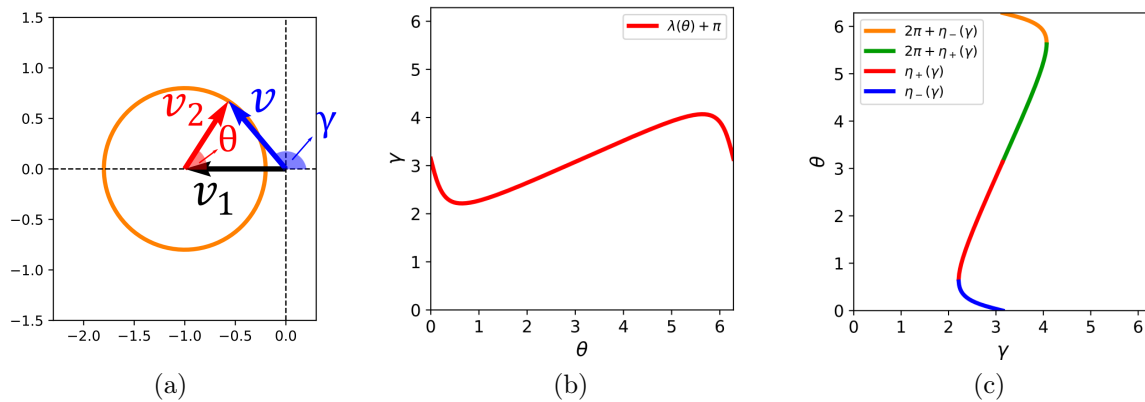
8. ábra. Az A ($v_1 < v_2$) esetben (a) A sebességvektorok összegének szemléltetése (b) A $\gamma(\theta)$ függvény kvalitatív ábrája (c) A $\theta(\gamma)$ függvény kvalitatív ábrája

A **B** esetet a 9a. ábra szemlélteti. Ez az az eset amikor a kör közepén lévő golyó ugyanakkora, mint ami kör kerületén van. Most azt várjuk, hogy ha a külső golyó a belső "előtt" van akkor bekövetkezhet ütközés, különben a kerületen lévő golyó nem éri utol a középsőt. Látszik, hogy ez teljesül, mert csak a $\gamma \in [\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}]$ szögeket tudjuk megkapni alkalmas θ választással, tehát tudunk olyan φ szöget megadni, hogy ne létezzen a (12)-nek megfelelő γ . A $\gamma(\theta)$ a 9b. ábrán, a $\theta(\gamma)$ függvény pedig a 9c. ábrán látható.



9. ábra. A B ($v_1 = v_2$) esetben (a) A sebességvektorok összegének szemléltetése (b) A $\gamma(\theta)$ függvény kvalitatív ábrája (c) A $\theta(\gamma)$ függvény kvalitatív ábrája

A **C** esetet a 10. ábra szemlélteti. Ekkor $v_1 > v_2$, azaz a kör közepén egy "kicsi és gyors" golyó van, a kerületén pedig egy "nagy és lassú". Ebben az esetben tehát, azt várjuk hogy legyenek olyan φ irányok, ahol a "lassú" gömb nem tudja utolérni a "gyorsat". Ez teljesül, mivel a γ most nem monoton függvénye a θ -nak és nem futja be a teljes $[0, 2\pi]$ intervallumot, tehát lesznek olyan γ szögek amelyek semmilyen θ választással nem állíthatók elő. A $\gamma(\theta)$ és a $\theta(\gamma)$ függvények kvalitatív ábrája rendre a 10b. és a 10c. ábrán láthatók.



10. ábra. A C ($v_1 > v_2$) esetben (a) A sebességvektorok összegének szemléltetése (b) A $\gamma(\theta)$ függvény kvalitatív ábrája (c) A $\theta(\gamma)$ függvény kvalitatív ábrája

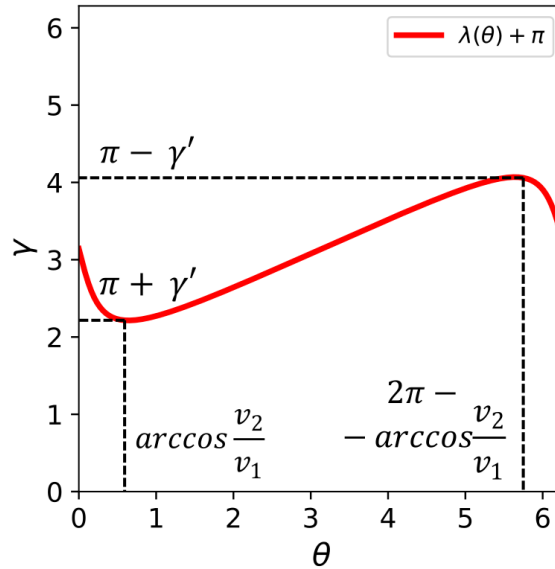
3.2.2. Az integrálok felírása

Ebben a részben két példán keresztül megmutatjuk, hogy az integrálok hogyan írhatók fel. A többi integrál a 7. függelékben található. Érdemes megjegyezni, hogy az A és C esetek az integrálás szempontjából újabb két esetre bonthatók. A C esetben ennek fizikai jelentése is van, mégpedig az, hogy α lehet olyan nagy, hogy lesznek olyan φ szögek ahol minden θ esetén γ megfelel a (12) feltételnek. Az A esetben csak az integrál változik. Az integrál felírását a C esetben végezzük el részletesen.

A számolás során hasznos lesz, ha bevezetjük a γ' szöget. Mint ahogy korábban is említettük a C esetben γ nem monoton függvénye θ -nak, minimum illetve maximum értékeit a 11. ábrán látható helyeken veszi fel. Az ábráról γ' is leolvasható, értéke:

$$\begin{aligned}\gamma' + \pi &= \lambda \left(\arccos \frac{v_2}{v_1} \right) + \pi \\ \gamma' &= \arctan \left(\frac{v_1 v_2 \sin(\arccos \frac{v_2}{v_1})}{v_2^2 - v_1^2} \right)\end{aligned}\tag{19}$$

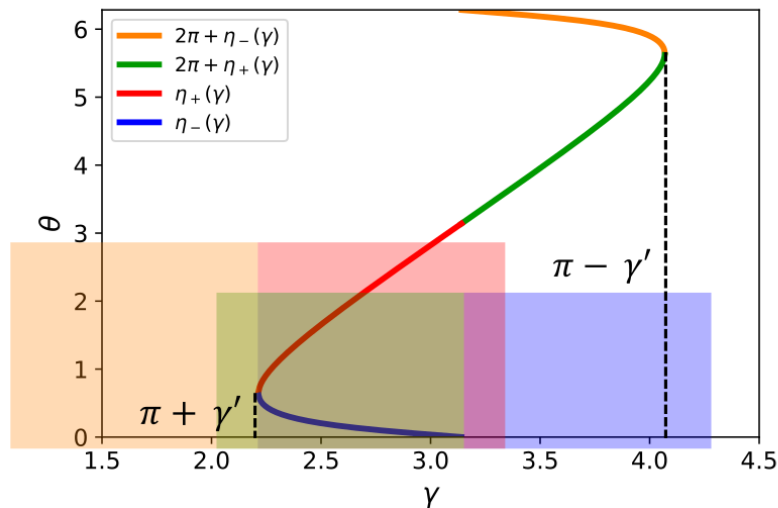
Fontos megjegyezni, hogy $\gamma' < 0$, mivel a C esetben $v_1 > v_2$.



11. ábra. A γ' szög származtatása

A 12. és a 13. ábrákon a színes sávok az egyes nevezetes $[\varphi + \pi - \alpha, \varphi + \pi + \alpha]$ intervallumokat reprezentálják. Például a narancssárga sáv mindkét esetben azt az intervallumot reprezentálja, ahol **még** épp nem létezik a (12)-nek megfelelő γ szög, a kék pedig azt, ahol **már** épp nem létezik ilyen. Az integrálás során egy ilyen sávot "tolunk" végig a görbén, ez a φ szerinti integrálásnak felel meg, és az összes helyen végigintegrálunk a sávon, ez pedig a θ szerinti integrálás. A sáv közepe mindig az adott $\varphi + \pi$ érték, szélessége pedig 2α . Abban az esetben amikor $|\gamma'| \leq 2\alpha$ akkor létezhet olyan φ szög, melynél minden θ esetén γ megfelel a (12) feltételnek, ez a 12. sávos ábrán annak felel meg, hogy a sávok szélesebbek, mint a görbe "kilengései". Ellentétes esetben, amikor $|\gamma'| > 2\alpha$ a 13. ábrán

a sávok keskenyebbek, mint a görbe "kilengései", ekkor nem létezik olyan φ szög, hogy a hozzátartozó intervallumban γ minden θ esetén benne legyen.

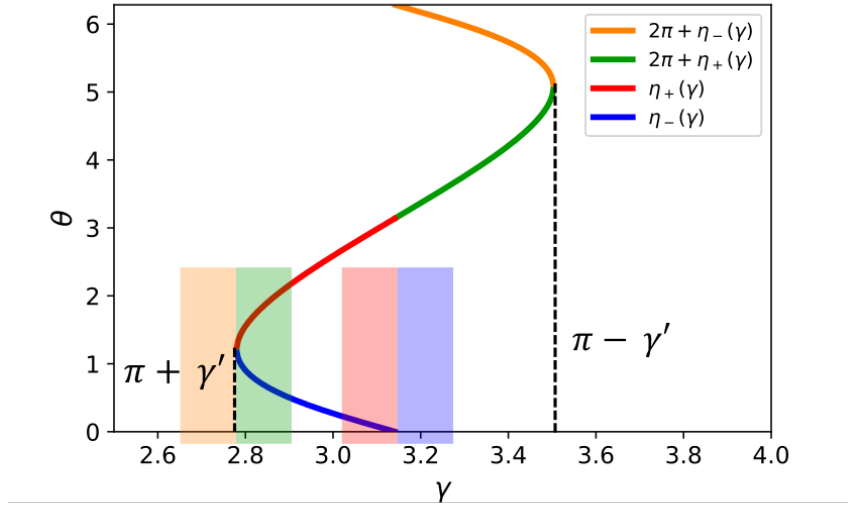


12. ábra. A C eset $|\gamma'| \leq 2\alpha$ esetében az integrál felírásának szemléltetése

Az $|\gamma'| \leq 2\alpha$ (12. ábra) esetben az integrál a következő lesz:

$$\begin{aligned}
 & \int_{\gamma'+\alpha}^{\alpha} \int_{\eta_-(\varphi+\pi-\alpha)}^{\eta_-(\varphi+\pi-\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{-\alpha}^{\gamma'+\alpha} \int_{\eta_-(\pi+\gamma')}^{\eta_-(\pi+\gamma')} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\gamma'-\alpha}^{-\alpha} \int_{\eta_-(\pi+\varphi+\alpha)}^{\eta_-(\pi+\varphi+\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \\
 & + \int_{\gamma'-\alpha}^{-\alpha} \int_{\eta_+(\pi+\gamma')}^{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{-\alpha}^{\gamma'+\alpha} \int_{\eta_+(\pi+\gamma')}^{\eta_+(\pi+\gamma')} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\gamma'+\alpha}^{\alpha} \int_{\eta_+(\varphi+\pi-\alpha)}^{\eta_+(\varphi+\pi-\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \\
 & + \int_{-\alpha}^{-\gamma'-\alpha} \int_{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)+2\pi}^{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{-\gamma'-\alpha}^{\alpha} \int_{\eta_+(\pi-\gamma')+2\pi}^{\eta_+(\pi-\gamma')+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\alpha}^{\alpha-\gamma'} \int_{\eta_+(\pi-\gamma')+2\pi}^{\eta_+(\varphi+\pi-\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \\
 & + \int_{\alpha}^{\alpha-\gamma'} \int_{\eta_-(\pi-\gamma')+2\pi}^{\eta_-(\varphi+\pi-\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{-\gamma'-\alpha}^{\alpha} \int_{\eta_-(\pi-\gamma')+2\pi}^{\eta_-(\pi-\gamma')+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{-\alpha}^{-\gamma'-\alpha} \int_{\eta_-(\varphi+\pi+\alpha)+2\pi}^{\eta_-(\varphi+\pi+\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi
 \end{aligned}$$

A $|\gamma'| > 2\alpha$ (13) esetben pedig a következő:



13. ábra. A C eset $|\gamma'| > 2\alpha$ alesetében az integrál felírásának szemléltetése

$$\begin{aligned}
& \int_{-\alpha}^{\alpha} \int_0^{\eta_-(\varphi+\pi-\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\gamma'+\alpha}^{-\alpha} \int_{\eta_-(\varphi+\pi+\alpha)}^{\eta_-(\varphi+\pi-\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\gamma'-\alpha}^{\gamma'+\alpha} \int_{\eta_-(\pi+\varphi+\alpha)}^{\eta_-(\pi+\gamma')} v(\theta) d\theta d\varphi + \\
& + \int_{\gamma'-\alpha}^{\gamma'+\alpha} \int_{\eta_+(\pi+\gamma')}^{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\gamma'+\alpha}^{-\alpha} \int_{\eta_+(\varphi+\pi-\alpha)}^{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{-\alpha}^{\alpha} \int_{-\alpha}^{\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \\
& + \int_{-\alpha}^{\alpha} \int_{\pi}^{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\alpha}^{-\gamma'} \int_{\eta_+(\varphi+\pi-\alpha)+2\pi}^{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{-\gamma'-\alpha}^{\alpha-\gamma'} \int_{-\gamma'-\alpha}^{\eta_+(\pi-\gamma')+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \\
& + \int_{-\gamma'-\alpha}^{\alpha-\gamma'} \int_{\eta_-(\pi-\gamma')+2\pi}^{\eta_-(\varphi+\pi-\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\alpha}^{-\gamma'} \int_{\eta_-(\varphi+\pi+\alpha)+2\pi}^{\eta_-(\varphi+\pi-\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{-\alpha}^{\alpha} \int_{-\alpha}^{2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi
\end{aligned}$$

Fontos megjegyezni, hogy az η_+ illetve az η_- függvények nincsenek értelmezve a $\gamma' + \pi$ és a $\pi - \gamma'$ helyeken, így ott az integrál numerikus kiszámításakor közelítőértéket kell használni.

3.2.3. Az integrálok egyszerűsítése

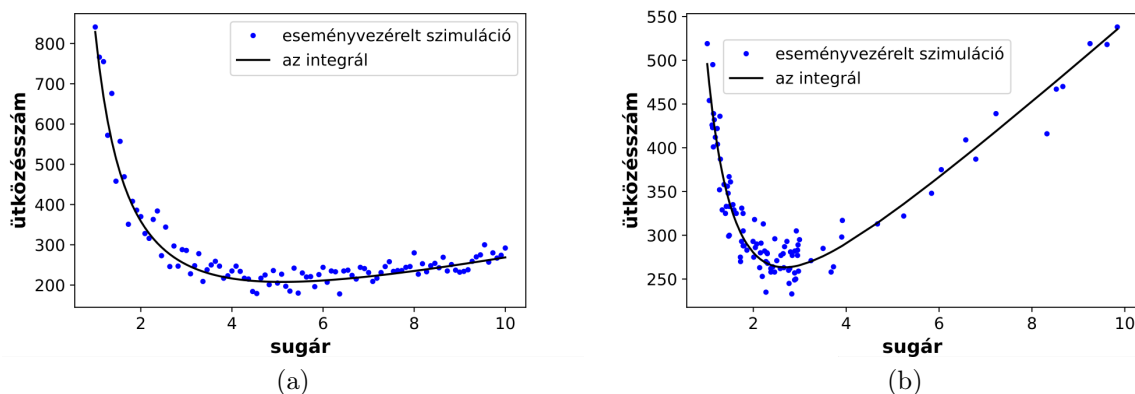
Az előzőekben láttuk, hogy az ütközési gyakoriságot megadó integrálok elég hosszúak, és ráadásul 5 esetet különböztettünk meg, ami szintén nem kevés. Szerencsére a rendszer két szimmetriáját kihasználva lecsökkenthetjük az integrálok számát kettő darab hat integrálból álló összegre.

Az első szimmetria amit kihasználunk az, hogy ha az x golyó ütközési gyakoriságát vizsgáljuk az y golyóval, akkor ennek meg kell egyeznie az y golyó x -el vett ütközési gyakoriságával. Mivel az A esetben egy "nagy" gömb van a kör közepén és egy "kicsi" a kerületén, a C esetben meg fordítva, ezen esetek közül elég az egyikkel számolnunk. További könnyebbség, hogy a B eset megkapható akár az A, akár a C eset speciális eseteként.

A második szimmetria az, hogy a $\varphi \in [-\pi, 0]$ szögeknél ugyanannyi ütközés történik, mint a $\varphi \in [0, \pi]$ szögek esetén. Ez onnan látszik, hogy a modell szimmetrikus a K_1 rendszer x_1 tengelyére. Az integrálás szempontjából ez azt jelenti, hogy elég a φ -t a $[-\pi, 0]$ intervallumon futtatni, azaz a színes integrálokból elég csak a pirosat és a kéket elvégezni. (Ahhoz, hogy visszkapjuk az eredeti integrál értékét az eredményt meg is kéne szorozni 2-vel, de minket úgyis csak az ütközési gyakoriságok aránya érdekel.)

4. Eredmények

Az előző részben felírt integrálok analitikusan nem határozhatók meg, így numerikusan számoltuk ki őket. A kapott görbék gyakorlatilag tökéletes egyezést mutattak az eseményvezérelt szimuláció során kapott görbékkel, ahogy ez a 14. ábrán is látható. Az integrál által meghatározott görbét csak konstanssal kellett szorozni, hogy ezt a nagymértékű egyezést elérjük.



14. ábra. Az eseményvezérelt szimuláció eredményei és a numerikusan kiszámított integrálok görbéinek összehasonlítása

A sugarak eloszlása: (a) egyenletes eloszlás (b) 80%: $r = 1 - 3$, 20%: $r = 3 - 10$ szerinti eloszlás

5. Diszkusszió

5.1. Egy egyszerűbb modell

A modellünk által adott görbék nagyon jó egyezést mutatnak a kísérleti eredményekkel viszont az integrálok meghatározása nehézkes. Felmerül tehát a kérdés: nem lehet-e

valami egyszerűbb, kicsit pontatlanabb közelítést alkalmazni.

Egy ilyen közelítési lehetőséget találunk a [6] cikkben, ahol diffúzió kontrollált reakciót vizsgáltak. Itt az r_1 sugarú részecske az r_2 sugarú részecskével vett ütközési gyakorisága (N_{12}) a következőnek adódott:

$$N_{12} = \frac{1}{2}(D_1 + D_2)(r_1 + r_2) \quad (20)$$

ahol a D a diffúziós konstans, r a sugár, ami lamináris áramlásnál megegyezik a hatáskeresztmetszettel. A diffúziós konstans a Stokes–Einstein-egyenlet szerint:

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta r} \quad (21)$$

Ezt az összefüggést kihasználva:

$$N_{12} = (r_1 + r_2) \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (22)$$

Érdemes megjegyezni, hogy mivel $D \sim 1/r$ ezért $v \sim 1/r$ is igaz. Az r_1 sugarú részecske ütközési gyakoriságát a következőképpen kapjuk:

$$N_1 = \sum_{i=1}^n N_{1i}$$

ahol n a részecskék száma. A mi esetünkben a 2 dimenzió miatt a hatáskeresztmetszet szintén r , de a sebesség nem $1/r$, hanem $1/r^{3/2}$, így az r_1 sugarú gömb az r_2 sugarú gömbbel vett ütközési gyakorisága:

$$N_{12} = (r_1 + r_2) \left(\frac{1}{r_1^{3/2}} + \frac{1}{r_2^{3/2}} \right) \quad (23)$$

amit szummázva/integrálva kapjuk az átlagtér görbéket. Ez azért lesznek rosszabb közelítés a mi modellünkénél mert a fenti számolások nem veszik figyelembe pl. a részecskék térbeli sűrűségét és a sebességük irányát, melyeket a modellünk figyelembe vesz.

A 8. függelékben található néhány ábrán látható a modellünk és a másik, egyszerűbb modell összehasonlítása. A szimuláció területe $A = 1000 \cdot 1000$ volt minden esetben. Az összehasonlítás alapján azt mondhatjuk, hogy az egyszerűbb modell az egyenletes eloszlás és az ahhoz közeli esetekben jó közelítés.

5.2. A 3 dimenziós eset

Modellünk, néhány változtatással a 3 dimenziós esetben is használható. Továbbra is elég egy olyan körön vizsgálódnunk melynek közepén a vizsgált gömb van a kerületén pedig a többi gömb. Ennek oka, hogy a középső gömb sebességvektora és a kerületi gömb mindig kijelöl egy síkot amelyen mindkét gömb is rajta lesz. A középső gömb vonatkoztatási rendszerébe (K_1) való transzformáció a 2 dimenziós esethez hasonlóan végezhető. Az ütközés feltétele viszont más lesz, most a külső gömb K_1 -beli sebesség vektorának egy 2α nyílásszögű kúpban kell lennie. A számolást tovább bonyolítja az, hogy ha a külső gömb laborbeli sebességét levetítjük a kör síkjára akkor a kapott vektor szögeloszlása nem egyenletes. Az ütközési idő figyelembevételének érdekében az integrandus ebben az esetben is a sebesség abszolút értéke lesz.

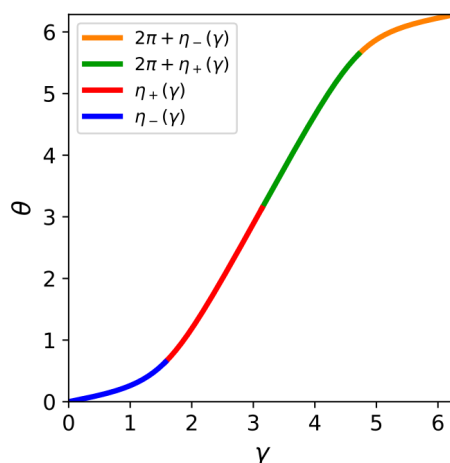
6. Konklúzió

Dolgozatomban különböző sugarú kemény gömbök ütközései statisztikáját vizsgáltam. Először megalkottam egy eseményvezérelt dinamika modellt, amelyben a kívánt eloszlásokat le tudtam mérni, és amivel a későbbiekben végzett számításokat le tudtam ellenőrizni, valamint hibájukat meghatározni. Ezt követően megmutattam, hogy az ütközési gyakoriságok kiszámolása során a legfontosabb a szabad úthossz és a különböző méretű részecskék sebességének, valamint ezek lehetséges ütközési szögeinek pontos figyelembe vétele. A dolgozat hátralévő részében analitikusan meghatároztam az ütközési statisztikák kiszámolásához szükséges integrálokat, amelyeket numerikusan végeztem el. Az eredmények tökéletes egyezést mutattak a diszkrét elem szimulációs eredményekkel. Végül, megvizsgáltam az ütközési modellnek egy egyszerűbb, a lehetséges ütközési irányokat figyelmen kívül hagyó, úgynevezett átlagtér modelljét és megállapítottam, hogy kvalitatíve hasonló eredményt ad, de különösen egyenetlen eloszlások esetén a hiba jelentős lesz.

Függelék

7. Integrálok

A eset



15. ábra. A $\theta(\gamma)$ függvény kvalitatív ábrája az A esetben

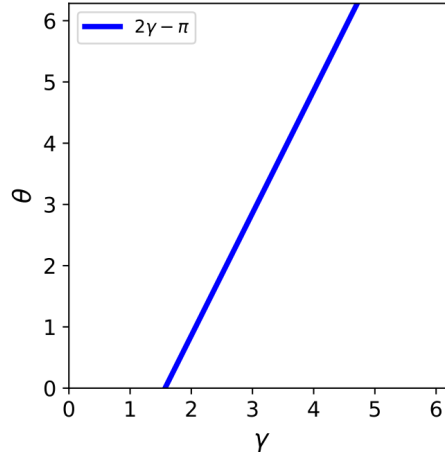
Az integrál, ha $\frac{\pi}{2} \leq 2\alpha$ (a sáv szélesebb, mint egy színes szakasz):

$$\begin{aligned}
& \int_{-\alpha-\pi}^{-\alpha-\pi/2} \int_0^{\eta_-(\varphi+\pi+\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{-\alpha-\pi/2}^{\alpha-\pi} \int_0^{\eta_-(\pi/2)} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\alpha-\pi}^{\alpha-\pi/2} \int_{\eta_-(\pi+\varphi-\alpha)}^{\eta_-(\pi/2)} v(\theta) d\theta d\varphi + \\
& + \int_{-\alpha-\pi/2}^{-\alpha} \int_{\eta_+(\pi/2)}^{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{-\alpha}^{\alpha-\pi/2} \int_{\eta_+(\pi/2)}^{\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\alpha-\pi/2}^{\alpha} \int_{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)}^{\eta_+(\pi)} v(\theta) d\theta d\varphi + \\
& + \int_{-\alpha}^{\pi/2-\alpha} \int_{\eta_+(\pi)+2\pi}^{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\pi/2-\alpha}^{\alpha} \int_{\eta_+(\pi)+2\pi}^{\eta_+(3\pi/2)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\alpha}^{\alpha+\pi/2} \int_{\eta_+(\pi+\varphi+\alpha)+2\pi}^{\eta_+(3\pi/2)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \\
& + \int_{\pi/2-\alpha}^{\pi-\alpha} \int_{\eta_-(3\pi/2)+2\pi}^{\eta_-(\varphi+\pi+\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\pi-\alpha}^{\pi/2+\alpha} \int_{\eta_-(3\pi/2)+2\pi}^{2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\pi/2+\alpha}^{\pi+\alpha} \int_{\eta_-(\varphi+\pi-\alpha)+2\pi}^{2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi
\end{aligned}$$

Az integrál, ha $\frac{\pi}{2} > 2\alpha$ (a sáv keskenyebb, mint egy színes szakasz):

$$\begin{aligned}
& \int_{-\alpha-\pi}^{\alpha-\pi/2} \int_0^{\eta_-(\varphi+\pi+\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\alpha-\pi}^{-\alpha-\pi/2} \int_{\eta_-(\varphi+\pi-\alpha)}^{\eta_-(\varphi+\pi+\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{-\alpha-\pi/2}^{\alpha-\pi/2} \int_{\eta_-(\pi+\varphi-\alpha)}^{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \\
& + \int_{\alpha-\pi/2}^{-\alpha} \int_{\eta_+(\varphi+\pi-\alpha)}^{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{-\alpha}^{\alpha} \int_{\eta_+(\varphi+\pi-\alpha)}^{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\alpha}^{\pi/2-\alpha} \int_{\eta_+(\varphi+\pi-\alpha)+2\pi}^{\eta_+(\varphi+\pi+\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \\
& + \int_{\pi/2-\alpha}^{\pi/2+\alpha} \int_{\eta_+(\varphi+\pi-\alpha)+2\pi}^{\eta_-(\varphi+\pi+\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\pi/2+\alpha}^{\pi-\alpha} \int_{\eta_-(\varphi+\pi-\alpha)+2\pi}^{\eta_-(\varphi+\pi+\alpha)+2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\pi-\alpha}^{\alpha+\pi} \int_{\eta_-(\pi+\varphi-\alpha)+2\pi}^{2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi
\end{aligned}$$

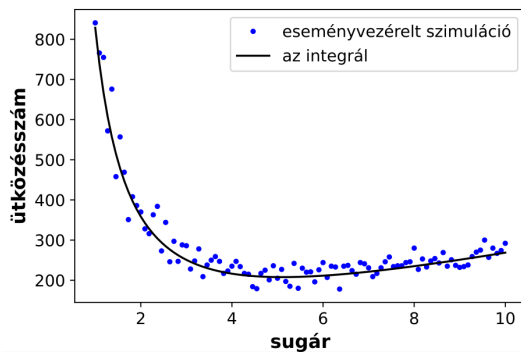
B eset



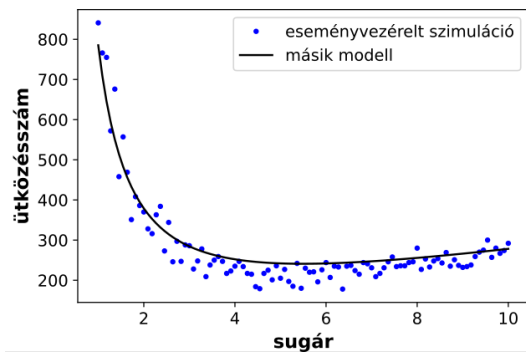
16. ábra. A $\theta(\gamma)$ függvény kvalitatív ábrája a B esetben

$$\int_{\alpha-\pi/2}^{\pi/2-\alpha} \int_{\pi+2\varphi-2\alpha}^{\pi+2\varphi+2\alpha} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{\pi/2-\alpha}^{\alpha+\pi/2} \int_{\pi+2\varphi-2\alpha}^{2\pi} v(\theta) d\theta d\varphi + \int_{-\alpha-\pi/2}^{\alpha-\pi/2} \int_0^{\pi+2\varphi+2\alpha} v(\theta) d\theta d\varphi$$

8. Két modell összehasonlítása



(a)

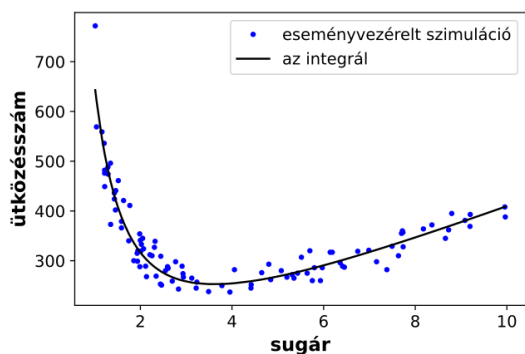


(b)

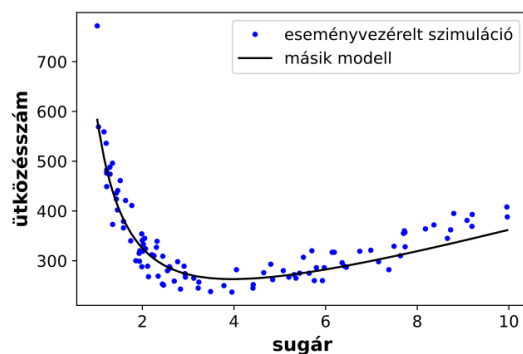
17. ábra. A modellünk és az egyszerűbb modell összehasonlítása

A sugarak eloszlása: egyenletes, Gömbök száma: 100

(a) a mi modellünk, $R^2 = 0.94$ (b) az egyszerűbb modell, $R^2 = 0.91$



(a)

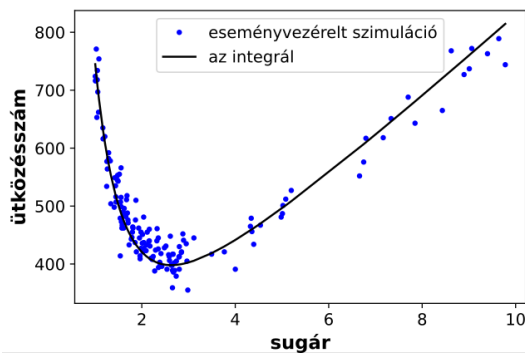


(b)

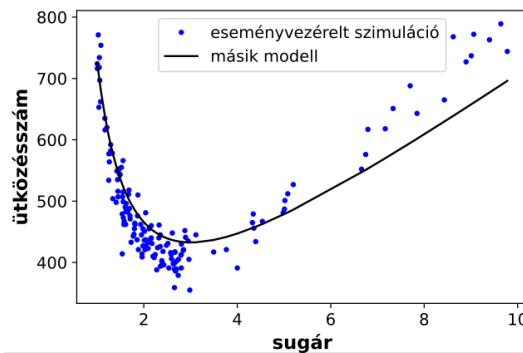
18. ábra. A modellünk és az egyszerűbb modell összehasonlítása

A sugarak eloszlása: 50%: $r = 1 - 3$, 50%: $r = 3 - 10$ szerinti eloszlás, Gömbök száma: 100

(a) a mi modellünk, $R^2 = 0.89$ (b) az egyszerűbb modell, $R^2 = 0.84$



(a)

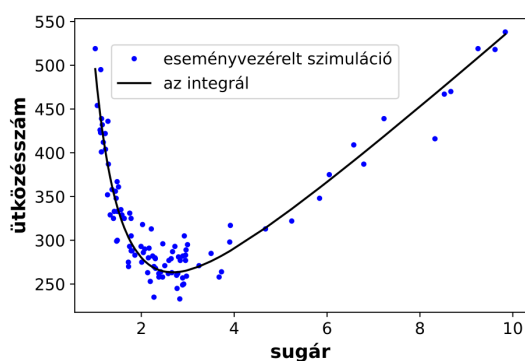


(b)

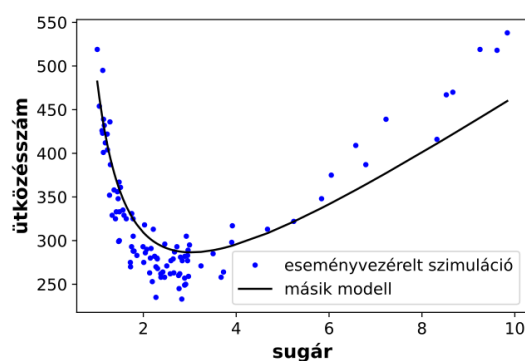
19. ábra. A modellünk és az egyszerűbb modell összehasonlítása

A sugarak eloszlása: 80%: $r = 1 - 3$, 20%: $r = 3 - 10$ szerinti eloszlás, Gömbök száma: 150

(a) a mi modellünk, $R^2 = 0.92$ (b) az egyszerűbb modell, $R^2 = 0.85$



(a)

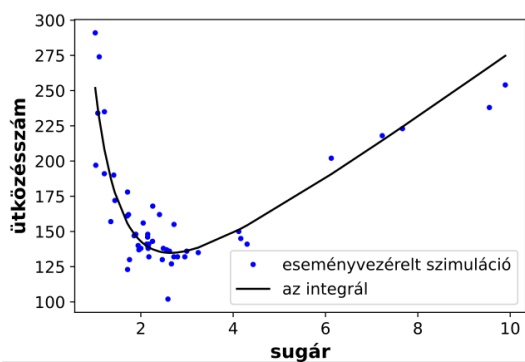


(b)

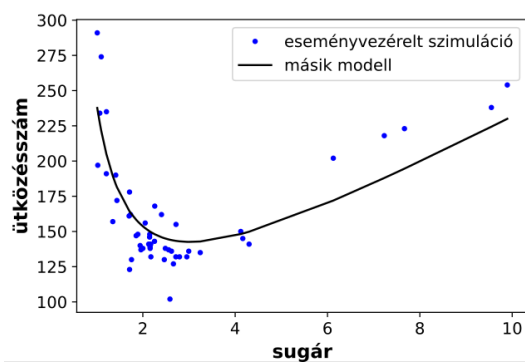
20. ábra. A modellünk és az egyszerűbb modell összehasonlítása

A sugarak eloszlása: 80%: $r = 1 - 3$, 20%: $r = 3 - 10$ szerinti eloszlás, Gömbök száma: 100

(a) a mi modellünk, $R^2 = 0.92$ (b) az egyszerűbb modell, $R^2 = 0.81$



(a)



(b)

21. ábra. A modellünk és az egyszerűbb modell összehasonlítása

A sugarak eloszlása: 80%: $r = 1 - 3$, 20%: $r = 3 - 10$ szerinti eloszlás, Gömbök száma: 50

(a) a mi modellünk, $R^2 = 0.82$ (b) az egyszerűbb modell, $R^2 = 0.75$

Hivatkozások

- [1] Sipos, A. A., Domokos, G., and Török, J.: Particle size dynamics in abrading pebble populations, *Earth Surf. Dynam.*, 9, 235–251, <https://doi.org/10.5194/esurf-9-235-2021>, 2021.
- [2] Domokos, G., and Gibbons, G. W. (2012). The evolution of pebble size and shape in space and time. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 468(2146), 3059-3079.
- [3] Meyer, C. J., and Deglon, D. A. (2011). Particle collision modeling—a review. *Minerals Engineering*, 24(8), 719-730.
- [4] Rapaport, D. C., and Rapaport, D. C. R. (2004). *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge university press.
- [5] Kertész J., Zaránd G., Deák A. (2015). *Statisztikus fizika*. BME, Budapest
- [6] Smoluchowski, M. V. (1918). Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen. *Zeitschrift für physikalische Chemie*, 92(1), 129-168.