

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	11
Глава 1. Использование языка программирования Фортран 90 для компьютерного моделирования физических систем	13
1.1. Краткое введение в язык программирования Фортран	14
1.1.1. Первичные понятия	14
1.1.2. Основные типы величин, их представление и описание в программе	17
1.1.3. Программирование арифметических выражений	23
1.1.4. Операции отношения и логические выражения	25
1.1.5. Операторы присваивания и управления	26
1.1.6. Особенности работы с массивами	30
1.1.7. Программные единицы	33
1.1.8. Операторы ввода-вывода и работа с файлами	38
1.1.9. Генерация случайных чисел	44
1.1.10. Использование графики	49
1.2. Примеры	53
1.2.1. Табуляция и построение графика функции	53
1.2.2. Построение спирали Улама	55
1.2.3. Вычисление многомерных интегралов и числа π методом Монте-Карло	59
1.2.4. Построение эквипотенциальных линий для распределения электрических зарядов	61
1.2.5. Аполлониевы упаковки	63
1.3. Задачи для самостоятельной работы	67
1.4. Литература	69
Глава 2. Задача Ферми–Паста–Улама	70
2.1. Колебания в цепочке связанных осцилляторов	70

2.1.1. Линейная цепочка	71
2.1.2. Нелинейная цепочка	72
2.2. Алгоритм и описание работы программы	73
2.2.1. Алгоритм	73
2.2.2. Описание работы программы	74
2.2.3. Пример работы программы	79
2.3. Задачи для самостоятельной работы	80
2.4. Литература	81
Глава 3. Солитоны и уравнение Кортевега—де Вриза	83
3.1. Развитие представлений о солитоне	83
3.1.1. Распространение уединенной волны в узком канале	83
3.1.2. Уравнение Кортевега—де Вриза	84
3.1.3. Роль нелинейного и дисперсионного вкладов	84
3.1.4. Точное солитонное решение	85
3.2. Алгоритм и описание работы программы	86
3.2.1. Алгоритм	86
3.2.2. Описание работы программы	87
3.2.3. Пример работы программы	89
3.3. Задачи для самостоятельной работы	90
3.4. Литература	91
Глава 4. Логистическое отображение и показатель Ляпунова	92
4.1. Хаотическое поведение	92
4.1.1. Логистическое отображение	92
4.1.2. Показатель Ляпунова	95
4.2. Описание работы программ	97
4.2.1. Бифуркационная диаграмма и поведение показателя Ляпунова	97
4.2.2. Пример работы программы	98
4.3. Задачи для самостоятельной работы	98
4.4. Литература	100
Глава 5. Множества Жюлиа и Мандельброта	101
5.1. Нелинейные отображения в комплексных координатах	101
5.1.1. Множество Жюлиа	101
5.1.2. Множество Мандельброта	105
5.2. Алгоритмы и описание работы программ	107
5.2.1. Алгоритм для построения множества Жюлиа	107
5.2.2. Алгоритм построения множества Мандельброта	107
5.2.3. Описание работы программ	107
5.2.4. Примеры работы программ	109
5.3. Задачи для самостоятельной работы	110
5.4. Литература	110

Глава 6. Детерминистические фракталы	112
6.1. Примеры детерминистических фракталов	112
6.1.1. Кривые Коха и Мандельброта–Гивена	113
6.1.2. Треугольник и ковер Серпинского	114
6.1.3. Пирамида Серпинского и губка Менгера	115
6.1.4. Канторовская пыль	116
6.2. Алгоритмы и описание программ	116
6.2.1. Рекурсивный алгоритм	117
6.2.2. Алгоритм на основе систем итерируемых функций (IFS)	119
6.2.3. Описание работы программ	121
6.2.4. Примеры работы программ	125
6.3. Задачи для самостоятельной работы	125
6.4. Литература	126
Глава 7. Рост бактериальных колоний: Модель Идена	128
7.1. Типы моделей стохастического роста	128
7.1.1. Базисная модель Идена	128
7.1.2. Модель с подавлением шума	129
7.1.3. Нерешеточные модели Идена	130
7.1.4. Структура кластеров Идена	130
7.1.5. Перколяционная модель	131
7.1.6. Модель экранированного роста	132
7.1.7. Модель случайного последовательного роста	132
7.1.8. Модель «летающей бабочки»	132
7.2. Алгоритм для базисной модели Идена и описание работы программы	133
7.2.1. Алгоритм	133
7.2.2. Описание работы программы	133
7.2.3. Пример работы программы	135
7.3. Задачи для самостоятельной работы	136
7.4. Литература	136
Глава 8. Агрегация, контролируемая диффузией	138
8.1. Варианты модели агрегации, контролируемой диффузией	138
8.1.1. Базисный вариант модели DLA	138
8.1.2. Модель DLA с подавлением шума	141
8.1.3. Рост на множественных центрах	142
8.1.4. Фрактальная размерность	142
8.2. Алгоритмы и описание работы программ	144
8.2.1. Алгоритм для базисного варианта	144
8.2.2. Алгоритм для ускоренного варианта	145
8.2.3. Описание работы программы для базисного варианта	147

8.2.4. Описание работы программы для ускоренного варианта . . .	149
8.2.5. Примеры работы программ	157
8.3. Задачи для самостоятельной работы	157
8.4. Литература	159
Глава 9. Имитация роста шероховатых поверхностей	160
9.1. Структура и свойства шероховатых поверхностей	160
9.1.1. Характеристики фронта роста поверхности	161
9.1.2. Концепция пространственно-временного скейлинга	162
9.1.3. Основные типы компьютерных моделей	164
9.1.3.1. Случайное осаждение (RD)	164
9.1.3.2. Осаждение с поверхностной релаксацией (RDR)	166
9.1.3.3. Баллистическое осаждение (BD)	166
9.1.3.4. Смешанные модели	168
9.2. Алгоритмы и описание работы программ	169
9.2.1. Описание алгоритмов для моделей осаждения RD, RDR и BD	169
9.2.2. Описание работы программ для моделей осаждения RD, RDR и BD	170
9.2.2.1. Модель RD	172
9.2.2.2. Модель RDR	172
9.2.2.3. Модель BD	173
9.2.3. Примеры работы программ	173
9.3. Задачи для самостоятельной работы	174
9.4. Литература	176
Глава 10. Случайная последовательная адсорбция	178
10.1. Необратимая адсорбция и джамминг	178
10.1.1. Определение базисной модели RSA	178
10.1.2. Концентрация джамминга для разных вариантов модели RSA	180
10.1.3. Модель RSA для объектов анизотропной формы	181
10.1.4. Влияние формы частиц и полидисперсности	183
10.1.5. Кинетика осаждения для решеточных и непрерывных моделей	185
10.2. Алгоритм и описание работы программы	186
10.2.1. Алгоритм RSA для одномерной модели	186
10.2.2. Быстрый алгоритм RSA для двумерной квадратной решетки	186
10.2.3. Описание работы программы для определения порога насыщения	187
10.2.4. Описание работы программы для моделирования кинетики насыщения	189
10.2.4.1. Одномерная модель RSA	189
10.2.4.2. Двумерная модель RSA	191
10.2.5. Примеры работы программ	193
10.3. Задачи для самостоятельной работы	195
10.4. Литература	195

Глава 11. Аномальная диффузия и диффузия в неупорядоченных средах	198
11.1. Модели диффузии в различных конденсированных средах	198
11.1.1. Случайные блуждания и движение броуновской частицы	198
11.1.2. Классификация типов диффузионного движения	199
11.1.3. Модель «прыжков Леви»	199
11.1.4. Модель диффузии с памятью	200
11.1.5. Модель Эдвардса	201
11.1.6. Модель решеточного газа	201
11.1.7. Диффузия при наличии дрейфа частицы	201
11.1.8. Диффузия в неупорядоченных средах и модель де Жена	202
11.1.9. Диффузия на фрактальных объектах	203
11.2. Алгоритм и описание работы программы для изучения диффузии на перколяционном кластере	206
11.2.1. Алгоритм	206
11.2.2. Описание работы программы	206
11.2.3. Пример работы программы	214
11.3. Задачи для самостоятельной работы	215
11.4. Литература	217
Глава 12. Алгоритмы кластерного анализа	219
12.1. Постановка задачи	219
12.2. Кластерный анализ методом прожига	221
12.2.1. Алгоритм	221
12.2.2. Программа кластерного анализа методом прожига	222
12.2.3. Пример работы программы кластерного анализа методом прожига	225
12.3. Кластерный анализ с использованием метода Хошена–Копельмана	226
12.3.1. Решеточный вариант	226
12.3.1.1. Алгоритм	226
12.3.1.2. Описание программы	227
12.3.2. Нерешеточный вариант	229
12.3.2.1. Формирования списка связности	229
12.3.2.2. Алгоритм Хошена–Копельмана с использованием списка связности	230
12.3.2.3. Описание программы, основанной на использовании списка связности	231
12.4. Вспомогательные программы	235
12.4.1. Случайное заполнение плоскости	235
12.4.1.1. Узлы квадратной решетки	235
12.4.1.2. Перекрывающиеся диски	235

12.4.2. Формирование списка связности	236
12.4.2.1. Узлы квадратной решетки	236
12.4.2.2. Перекрывающиеся диски	238
12.4.3. Визуализация кластеров	240
12.5. Примеры работы программ для кластерного анализа с использованием метода Хошена–Копельмана	240
12.6. Задачи для самостоятельной работы	242
12.7. Литература	242

Глава 13. Метод Монте-Карло для анализа модели Изинга: Алгоритм Метрополиса и кластерные алгоритмы 244

13.1. Фазовые переходы в магнитных материалах и модель Изинга	244
13.1.1. Определение Модели Изинга на квадратной решетке	245
13.1.2. Точное решения Модели Изинга на квадратной решетке	246
13.1.3. Простейшее обобщение модели Изинга: модель Поттса	247
13.1.4. Конечномерный анализ для модели Изинга и метод кумулянт Биндера	248
13.1.5. Алгоритм Метрополиса для решения модели Изинга	248
13.1.6. Замедление процедуры Метрополиса вблизи критической точки	251
13.1.7. Преодоление проблемы критического замедления с помощью кластерных алгоритмов	251
13.2. Алгоритмы и описание работы программы	253
13.2.1. Алгоритм Метрополиса	253
13.2.2. Алгоритм Свендсена–Ванга	253
13.2.3. Алгоритм Вольфа	254
13.2.4. Описание работы программы	255
13.2.4.1. Процедура Метрополиса	263
13.2.4.2. Процедура Свендсена–Ванга	264
13.2.4.3. Процедура Вольфа	266
13.2.5. Пример работы программы	267
13.3. Задачи для самостоятельной работы	268
13.4. Литература	269

Глава 14. Задача коммивояжера 272

14.1. Метод модельного отжига и задача коммивояжера	272
14.1.1. Метод модельного отжига	273
14.1.1.1. Вероятность перехода	273
14.1.1.2. Уменьшение температуры со временем	274
14.1.2. Задача коммивояжера	275

14.2. Алгоритм для решения задачи коммивояжера и описание работы программы	277
14.2.1. Алгоритм	277
14.2.2. Описание работы программы	278
14.2.3. Примеры работы программы	282
14.3. Задачи для самостоятельной работы	283
14.4. Литература	285

Глава 15. Вычисление электропроводности композиционных систем 287

15.1. Методы расчета электропроводности композиционных систем	287
15.2. Алгоритм Франка–Лобба для расчета электропроводности и описание работы программы	289
15.2.1. Алгоритм Франка–Лобба	289
15.2.1.1. Элементарные преобразования	289
15.2.1.2. Преобразование звезда-треугольник и их обобщение	290
15.2.1.3. «Сворачивание» квадратной сетки сопротивлений	291
15.2.1.4. Применение метода Франка–Лобба для более сложных плоских решеток	293
15.2.2. Описание работы программы	295
15.2.3. Примеры работы программы	301
15.3. Задачи для самостоятельной работы	302
15.4. Литература	304

Глава 16. Электрический пробой 306

16.1. Простейшие модели электрического пробоя	306
16.1.1. Модели типа резистор-изолятор (модель RI) и резистор-сверхпроводник (модель RS)	307
16.1.2. Стохастические и детерминистические модели	308
16.1.2.1. Стохастическая модель (модель NPW)	309
16.1.2.2. Детерминистическая модель (модель Такаясу)	310
16.1.3. Термоактивационная модель	311
16.2. Алгоритмы и описание работы программ	312
16.2.1. Стохастическая модель NPW	312
16.2.2. Обобщенная модель Такаясу	313
16.2.3. Термоактивационная модель	314
16.2.4. Описание работы программ	314
16.2.4.1. Стохастическая модель NPW	314
16.2.4.2. Обобщенная модель Такаясу	320
16.2.5. Примеры работы программ	324
16.3. Задачи для самостоятельной работы	325
16.4. Литература	326

Глава 17. Самоорганизованная критичность	328
17.1. Модели самоорганизованной критичности	328
17.1.1. Обвал кучи с песком	329
17.1.2. Землетрясения	333
17.1.3. Горение лесных массивов	335
17.1.4. Игра «Жизнь»	339
17.2. Алгоритмы и описание работы программ	340
17.2.1. Обвал кучи с песком	340
17.2.2. Лесной пожар	341
17.2.3. Описание работы программ	341
17.2.3.1. Обвал кучи с песком	341
17.2.3.2. Лесной пожар	343
17.2.4. Примеры работы программ	345
17.3. Задачи для самостоятельной работы	347
17.4. Литература	347

ПРЕДИСЛОВИЕ

Компьютерное моделирование является неотъемлемой частью современной физики. Моделирование физической природы или «численный эксперимент» в настоящее время широко используется как теоретиками, так и экспериментаторами. Компьютерные методы находят все более широкое применение при моделировании свойств сложных физических систем, а их внедрение позволило получить совершенно новые результаты и рассмотреть классы задач ранее традиционно относимых к «нерешаемым». Значительные успехи получены в таких фундаментальных областях как статистическая физика и физика конденсированных систем, физика твердого тела и квантовая механика, физика фракталов и хаотических явлений, финансовая физика. Для решения таких задач были развиты специфические рецепты, алгоритмы, модели клеточных автоматов, что позволило значительно ускорить получение конечных результатов. Однако, по нашему мнению, в традиционных изданиях, посвященных применению вычислительных и компьютерных методов, многие из таких алгоритмов анализируются не достаточно детально.

Предлагаемая вниманию читателя книга является фактически учебником для студентов-физиков, который основан на многолетнем опыте преподавания курса «Моделирование физических систем» в ряде ведущих украинских вузов. Книга состоит из 17 глав и посвящена анализу некоторых компьютерных рецептов, используемых при моделировании физических систем. В качестве основного языка программирования выбран язык Фортран 90, который, как известно, хорошо адаптирован для решения физических задач, имеет хорошую библиотечную поддержку в физических приложениях и широко используется в настоящее время.

Каждая глава книги представляет собой отдельную сформулированную вычислительную задачу и организована по сходному принципу: введение, теоретическое изложение материала на уровне справочного пособия, алгоритм решения, описания рабочей программы и примеры