

УДК 519.2

**Я. С. СИТКОВЕЦ**

Брест, БрГУ имени А. С. Пушкина

## **О КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

В самом узком смысле компьютерная модель – это отдельная программа либо программный комплекс, которые позволяют при помощи вычислений и графического отображения результатов воспроизводить реальные объекты и процессы при воздействии на них различных факторов. Обычно это модель системы реального мира (хотя рассматриваемая система может быть воображаемой или гипотетической). Такая компьютерная программа представляет собой компьютерную имитационную модель. Алгоритм принимает в качестве входных данных спецификацию состояния системы (значения всех ее переменных) в некоторый момент времени  $t$ . Затем он вычисляет состояние системы в момент времени  $t + 1$ . Из значений, характеризующих это второе состояние, затем вычисляет состояние системы в момент времени  $t + 2$  и т. д. При запуске на компьютере алгоритм, таким образом, создает численную картину эволюции состояния системы, как это концептуализировано в модели.

В более широком смысле мы можем рассматривать компьютерное моделирование как комплексный метод изучения систем. В этом более широком смысле метод относится ко всему процессу. Сам процесс включает в себя: выбор модели; поиск способа реализации этой модели в форме, которую можно запустить на компьютере; вычисление выходных данных алгоритма; визуализацию и изучение результирующих данных. Другими словами, включает в себя весь процесс, используемый для создания выводов о целевой системе, которую пытаются смоделировать, а также процедуры, используемые для санкционирования этих выводов.

Оба вышеприведенных определения предполагают, что компьютерное моделирование в основном связано с использованием компьютера для решения или приближенного решения математических уравнений модели, которая предназначена для представления некоторой системы – реальной или гипотетической [2, с. 8]. Другой подход состоит в том, чтобы попытаться определить «симуляцию» независимо от понятия компьютерного моделирования, а затем определить «компьютерное моделирование» композиционно – как симуляцию, выполняемую запрограммированным компьютером. При таком подходе симуляция – это любая система, которая

обладает динамическим поведением, достаточно похожим на какую-либо другую систему, так что первую можно изучать, чтобы узнать о второй.

Роль информационно-компьютерных технологий в исследовании физических явлений трудно переоценить. Физика – наука экспериментальная. В условиях лаборатории не всегда возможно продемонстрировать физические процессы или провести эксперименты. К примеру, компьютерные технологии могут быть полезны при моделировании процессов молекулярной физики. Одним из таких процессов является броуновское движение, которое мы рассматриваем в своей работе. Броуновское движение является важной формой флуктуации (движение мельчайших частиц в жидкости), обнаруженному в 1827 г. английским ботаником Р. Броуном. Моделирование движения выполняется путем пошаговой итерации после определения начального положения броуновских частиц. Ключевым моментом здесь является получение унитарного случайного вектора  $\mathbf{k}$ , который отличается в одно-, двух- и трехмерных случаях. Взяв MATLAB в качестве примера, мы генерируем случайные числа из его генераторов случайных чисел.

В одномерном случае частицы могут перемещаться только в положительном или отрицательном направлении оси  $x$ . В 2D-случае частица может двигаться под любым углом на плоскости, поэтому для каждого шага мы можем просто сгенерировать случайное число  $\theta$  (согласно его роли в полярных координатах), которое находится между  $0$  и  $2\pi$ , как направление движения частицы. Трехмерный случай более сложен. Общая идея состоит в том, чтобы определить два случайных числа  $\theta$  и  $\phi$  (согласно их роли в сферических координатах) аналогичным образом для 2D-случая. Однако это вызывает проблему, заключающуюся в том, что унитарный вектор случайной вероятности  $\mathbf{k}$  неравномерно распределен на единичной сфере. Решением данной проблемы мы занимаемся. Результаты будут опубликованы в последующих работах.

#### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Stanford Encyclopedia of Philosophy [Electronic resource]. – Mode of access: <https://plato.stanford.edu/entries/simulations-science/>. – Date of access: 05.10.2022.
2. Heermann, D. W. Computer Simulation Methods in Theoretical Physics / D. W. Heermann. – 2nd ed. – Berlin ; Heidelberg : Springer, 1990. – 24 p.