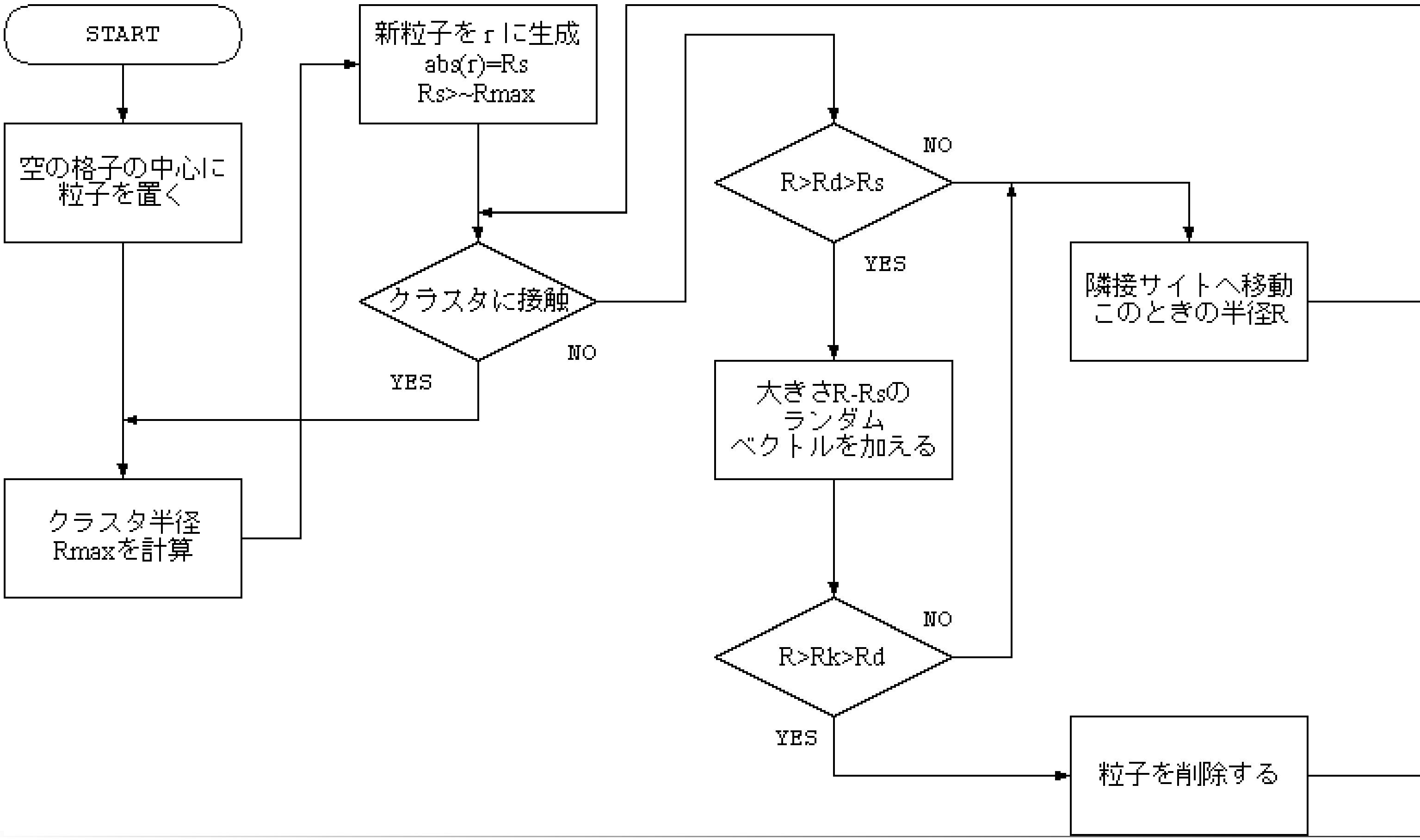
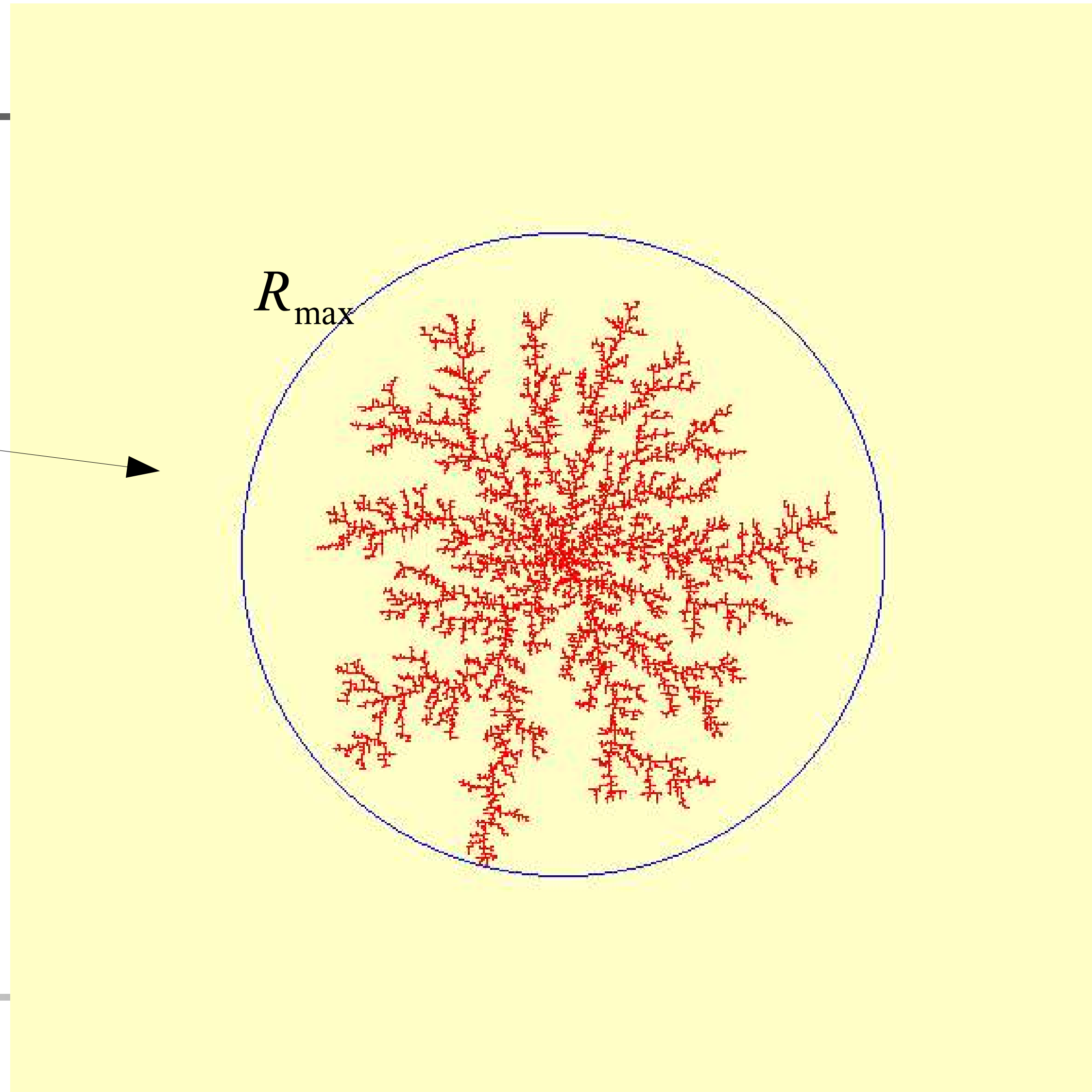
拡散律速凝集モデルのシミュレーション

©S. Tadaki Computer and Network Center, Saga University

アルゴリズム


START
空の格子の中心に
粒子を置く
クラスタ半径
Rmaxを計算
新粒子をｒに生成
abs(r)=Rs
Rs>~Rmax
クラスタに接触
YES
NO
R>Rd>Rs
NO
YES
隣接サイトへ移動
このときの半径R
大きさR-Rsの
ランダム
ベクトルを加える
R>Rk>Rd
NO
YES
粒子を削除する

ここから出発

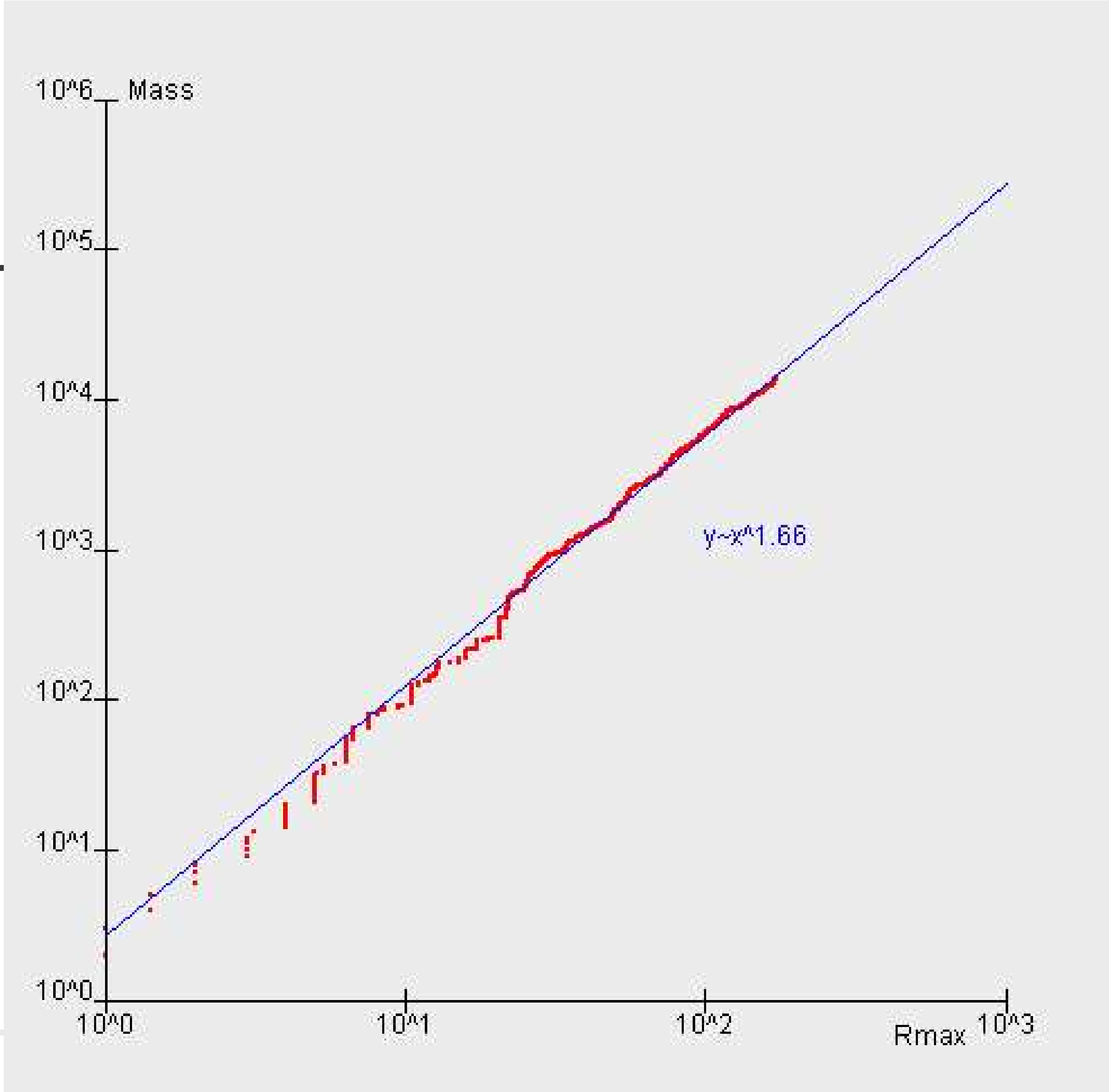


フラクタル次元の計算

- $M = A R_{\max}^{D}$ の両辺の対数をとる

$$\ln M = D \ln R_{\max} + \ln A$$

- 両対数グラフにプロット
  - 横軸 $R_{\max}$
  - 縦軸 M
- 最小二乗法(対数で)で傾きを求める


10^6
Mass
10^5
10^4
10^3
10^2
10^1
10^0
y~x^1.66
10^0
10^1
10^2
Rmax
10^3

最小二乗法：線形な場合

- データ集合　$\{(x_i, y_i)\}\quad i=0,\ldots N-1$
- このデータを1次関数でフィットする

$$y=ax+b$$

- 二乗誤差を最小化するようなa とb を求める

$$E=\sum_{i=0}^{N-1}\left[a\,x_i+b-y_i\right]^2$$

$$0=\frac{\partial E}{\partial a}=2\sum_{i=0}^{N-1} x_i\left[ax_i+b-y_i\right]=2N\left[a\left\langle x^2\right\rangle+b\left\langle x\right\rangle-\left\langle xy\right\rangle\right]$$

$$0=\frac{\partial E}{\partial b}=2\sum_{i=0}^{N-1}\left[ax_i+b-y_i\right]=2N\left[a\left\langle x\right\rangle+b-\left\langle y\right\rangle\right]$$

$$\left\langle f(x,y)\right\rangle\equiv\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} f\left(x_i,y_i\right)$$

- 連立方程式を解く

$$a\langle x^2\rangle + b\langle x\rangle - \langle xy\rangle = 0$$
$$a\langle x\rangle + b - \langle y\rangle = 0$$

- 係数を求める

$$a = \frac{\langle xy\rangle - \langle x\rangle\langle y\rangle}{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$$
$$b = \frac{\langle x^2\rangle\langle y\rangle - \langle x\rangle\langle xy\rangle}{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}$$

両対数グラフの最小二乗法フィット

- 両対数で直線とは $\ln y = a \ln x + b$

$$y = e^b x^a$$

- 両対数をとったデータ $\{(\ln x_i, \ln y_i)\}$
- これに対する最小二乗法で指数をa を求める

- 演習：データを2次式

$$y=ax^2+bx+c$$

で最小二乗フィットする方法を構成しなさい

最小二乗法：一般多項式

- データ列　$\left\{\left(X_i, Y_i\right)\right\},\ \ i=0,\ldots,N-1$
- フィットする多項式
$$y=\sum_{k=0}^{n} c_k x^k$$
- 二乗誤差
$$S=\sum_{i=0}^{N-1}\left(\sum_{k=0}^{n} c_k X_i^k - Y_i\right)^2$$

- 最小化の条件

$$0=\frac{\partial S}{\partial x_j}=2\sum_{i=0}^{N-1} X_i^j\left(\sum_{k=0}^{n} c_k X_i^k - Y_i\right)$$

- 解くべき連立方程式

$$\sum_{k=0}^{n} c_k A_{k+j,0}=A_{j,1},\quad i=0,\ldots,n$$

$$A_{k,j}=\sum_{i=0}^{N-1} X_i^k Y_i^l$$