

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ**

**БЕЛАРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ**

**Кафедра компьютерного моделирования**

**ФИЛИППОВ**

**Иван Николаевич**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСЛЯЦИОННО-ВРАЩАТЕЛЬНОЙ  
ДИФФУЗИИ СИЛЬНОВЫТЯНУТЫХ МОЛЕКУЛ В ЖИДКОСТИ**

**Дипломная работа**

**Научный руководитель:**

**кандидат физико-математических наук,**

**доцент Г.Г. Крылов**

**Допущена к защите**

**«2» июне 2016 г.**

**Зав. кафедрой компьютерного моделирования**

**кандидат физико-математических наук**

**доцент О.Г. Романов**

**Минск, 2016**

## РЕФЕРАТ

Дипломная работа 44 с., 16 рис., 16 источников.

ДИФФУЗИЯ, СЛУЧАЙНЫЕ БЛУЖДАНИЯ, СИЛЬНОВЫТАНУТЫЕ МОЛЕКУЛЫ, МНОЖЕСТВО ПОСЕЩЕНИЯ, КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ.

Объект исследования: сильновытянутая молекула в вязкой жидкости.

Цель: исследование особенностей диффузии сильновытянутых молекул в вязкой жидкости.

Методы исследования: компьютерное моделирование, метод Рунге-Кутта, метод Монте-Карло.

В результате проведенного исследования рассмотрены модели применимые для описания диффузии сильно вытянутых молекул в вязкой жидкости. Построена модель, применимая для компьютерного моделирования данного процесса. Написана программа, производящая расчеты на основе построенной модели. Построены множества посещения исследуемой молекулы. Установлено, что множество посещения имеет фрактальный характер, получено значение массовой фрактальной размерности множества посещения  $d=1.76$ . Вычислены корреляционные функции ориентации молекулы. Определён вид зависимости их времени затухания от отношения полуосей молекулы