

Проект. Этап № 2. Алгоритмы.

Неравновесная агрегация, фрактальные кластеры

Ощепков Дмитрий, Алади Принц, Хамдамова Айжана, Козлов Всеволод

11 апреля 2025

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия

Информация

- Ощепков Дмитрий
- Хамдамова Айжана
- Козлов Всеволод
- Алади Принц
- НФИбд-01-22

Цель работы

Определить алгоритм построения модели неравновесной агрегации и фрактальной кластеризации. Описать основные принципы алгоритма.

DLA (Диффузионно-ограниченная агрегация)

Сеточная модель: Частицы случайно блуждают по сетке и прилипают к кластеру, если оказываются рядом с ним.

Бессеточная модель: Частицы движутся в пространстве без сетки, прилипая к кластеру при сближении на расстояние взаимодействия. Результат: кластеры имеют фрактальную структуру с размерностью $D \sim 1.71$ на плоскости и $D \sim 2.50$ в трёхмерном пространстве.

Фрактальная размерность D описывает, как масса кластера растёт с увеличением его размера.

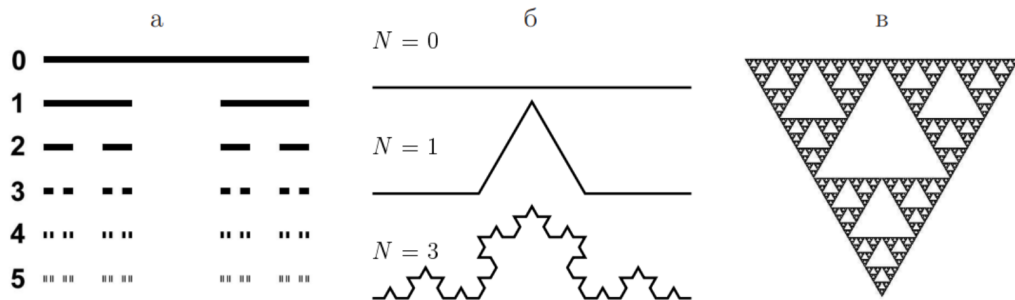


Рис. 2.1. Множество Кантора (а), кривая Коха (б), треугольник Серпинского (в)

1. Изначально частицы свободно блуждают по пространству (Броуновское движение)
2. Пока не столкнутся с уже существующим кластером частиц (агрегатом)
3. После чего присоединяются к нему, и структура начинает расти.

$$\Delta r(t) = \sqrt{2D\Delta t} \cdot \xi(t)$$

$\Delta r(t)$ — случайное смещение частицы за малый промежуток времени Δt ,

D — коэффициент диффузии, определяющий скорость распространения частицы,

Δt — шаг по времени (мелкий интервал времени),

$\xi(t)$ — случайная величина с нормальным распределением $N(0, 1)$ (белый шум)

Формула описывает условие прилипания частицы к кластеру.

$$\min (\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{\text{cluster}}\|) \leq a$$

\mathbf{r}_i — положение движущейся частицы,

$\mathbf{r}_{\text{cluster}}$ — положение частиц в кластере,

a — радиус частицы,

$\min(\dots)$ — минимальное расстояние между частицей и всеми точками кластера

Масса растущего кластера увеличивается с радиусом по степенному закону с фрактальной размерностью D .

$$M(R) \propto R^D$$

$M(R)$ — масса (или количество частиц) внутри круга (или сферы) радиуса R ,

R — расстояние от центра (или радиус исследуемой области),

D — фрактальная размерность (характеризует, насколько “плотно” заполняется пространство кластером)

Формула описывает, как быстро растёт кластер DLA во времени.

$$\frac{dR}{dt} \propto D \cdot n_0 \cdot R^{D-d}$$

$\frac{dR}{dt}$ — скорость роста радиуса кластера со временем,

D — коэффициент диффузии (определяет, насколько быстро частицы распространяются),

n_0 — плотность частиц в окружающей среде (например, концентрация свободных диффундирующих частиц),

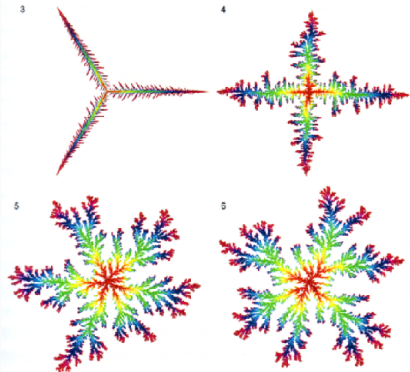
R — текущий радиус кластера,

D (в степени) — фрактальная размерность кластера,

CLA (Химически-ограниченная агрегация)

В этой модели вероятность прилипания частицы к кластеру меньше 1. То есть частица может “отскочить” от кластера, даже если она находится рядом с ним.

Примеры аннизотропных агрегатов для 3, 4, 5 и 6 осей симметрии:



Формула описывает, как температура и энергия активации влияют на вероятность прилипания частицы к кластеру. Если температура T высокая или энергия активации E низкая, вероятность прилипания будет выше. И наоборот.

$$P_{\text{stick}} = p \cdot \exp\left(-\frac{E_b}{kT}\right)$$

P_{stick} — вероятность прилипания частицы к кластеру,

p — префактор (константа, которая учитывает общие вероятностные факторы),

E_b — энергия активации для прилипания,

k — постоянная Больцмана,

T — температура системы.

Формула описывает движение частицы с учётом случайных колебаний.

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \sqrt{2D\Delta t} \cdot \xi(t)$$

$\mathbf{r}(t)$ — положение частицы в момент времени t ,

D — коэффициент диффузии (характеризует скорость распространения частицы),

Δt — шаг времени,

$\xi(t)$ — случайная величина, которая моделирует случайное движение (обычно с нормальным распределением $N(0, 1)$).

CLA. Фрактальная размерность

Формула описывает, как фрактальная размерность $D(p)$ изменяется в зависимости от параметра p , который может быть связан с плотностью частиц или вероятностью прилипания в модели CCA

$$D(p) \approx d - (d - D_{\text{DLA}}) \cdot p^\alpha$$

$D(p)$ — фрактальная размерность кластера в зависимости от параметра p ,

d — пространственная размерность (например, $d = 2$ для двумерного пространства, $d = 3$ — для трёхмерного),

D_{DLA} — фрактальная размерность кластера в модели диффузионной ограниченной агрегации (DLA),

p — параметр, связанный с плотностью частиц или вероятностью прикрепления,

α — параметр, который определяет, как размерность меняется с параметром p

В этой модели частицы движутся по прямым траекториям (а не случайно блуждают, как в DLA). Они прилипают к кластеру при первом контакте.

Частица начинает движение с начальной позиции \mathbf{r}_0 с постоянной скоростью \mathbf{v} и её положение в любой момент времени t можно вычислить по этой формуле. Таким образом, движение частицы линейное и прямолинейное с постоянной скоростью.

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v} \cdot t$$

$\mathbf{r}(t)$ — положение частицы в момент времени t ,

\mathbf{r}_0 — начальное положение частицы (при $t = 0$),

\mathbf{v} — скорость частицы (вектор скорости),

t — время.

Когда движущаяся частица приближается к кластеру на расстояние не больше $2a$ (то есть когда их границы соприкасаются), она останавливается и становится частью кластера.

$$\min (\|\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}_{\text{cluster}}\|) \leq 2a$$

$\mathbf{r}(t)$ — положение движущейся частицы в момент времени t ,

$\mathbf{r}_{\text{cluster}}$ — положение всех частиц, входящих в кластер,

a — радиус частицы,

$\|\cdot\|$ — евклидово расстояние между двумя точками в пространстве,

$\min(\dots)$ — минимальное расстояние от текущей частицы до всех частиц кластера.

В модели баллистической агрегации (ВА) частицы движутся по прямой и прилипают при столкновении, что приводит к более плотной структуре. Поэтому фрактальная размерность D_{BA} выше, чем у кластера в модели DLA.

$$D_{\text{BA}} \approx 1.9\text{--}2.2 \quad (\text{для ВА}), \quad D_{\text{DLA}} \approx 1.7 \quad (\text{для DLA})$$

D_{BA} — фрактальная размерность кластера при баллистической агрегации,

D_{DLA} — фрактальная размерность кластера при диффузионной ограниченной агрегации (DLA).

В этой модели несколько кластеров растут одновременно и могут слипаться друг с другом. Это отличается от DLA, где растёт только один кластер, а частицы прилипают к нему по одной.

Формула описывает радиус инерции кластера — важную характеристику, которая показывает, насколько “растянут” кластер в пространстве относительно его центра масс.

$$R_{g,i} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{\text{cm}})^2}$$

$R_{g,i}$ — радиус инерции (i)-го кластера (gyration radius),

N — число частиц (или мономеров) в кластере,

\mathbf{r}_j — позиционный вектор (j)-й частицы в кластере,

\mathbf{r}_{cm} — вектор центра масс кластера.

Чем больше размеры кластеров (сумма радиусов инерции), тем выше вероятность их слипания

$$P_{ij} \propto (R_{g,i} + R_{g,j})^\gamma$$

P_{ij} — вероятность слипания двух кластеров,

$R_{g,i}, R_{g,j}$ — радиусы инерции соответствующих кластеров,

γ — параметр, задающий, насколько сильно вероятность слипания зависит от размеров кластеров

Фрактальная размерность D характеризует, насколько плотно заполняется пространство частицами в кластере. В модели ССА агрегаты, как правило, менее плотные, чем в DLA, поскольку они формируются из слияния целых кластеров, а не по одной частице.

$$D \approx 1.4-1.8, \quad \text{где } D < D_{\text{DLA}}$$

D — фрактальная размерность кластера в модели ССА (Cluster-Cluster Aggregation),

$D_{\text{DLA}} \approx 1.71-1.75$ — фрактальная размерность для модели DLA (Diffusion-Limited Aggregation).

Во время выполнения второго этапа группового проекта мы определили алгоритм построения модели неравновесной агрегации и фрактальной кластеризации. Описали основные принципы алгоритма.

1. Медведев Д.А. и др. Моделирование физических процессов и явлений на ПК: Учеб. пособие. Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 2010. 101 с.
2. Sander L.M. Diffusion-limited aggregation: A kinetic critical phenomenon? Contemporary Physics, 2000.
3. Тыртышников А.Ю. и др. Сравнение алгоритмов DLA и RLA при моделировании пористых структур. НИИ «Центрпрограммсистем», 2017. 244 с.