Проект. Этап № 2. Алгоритмы.

Неравновесная агрегация, фрактальные кластеры

Хамдамова Айжана

Козлов Всеволод

Алади Принц

Ощепков Дмитрий

НФИбд-01-22

Содержание

# 1 Цель работы

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

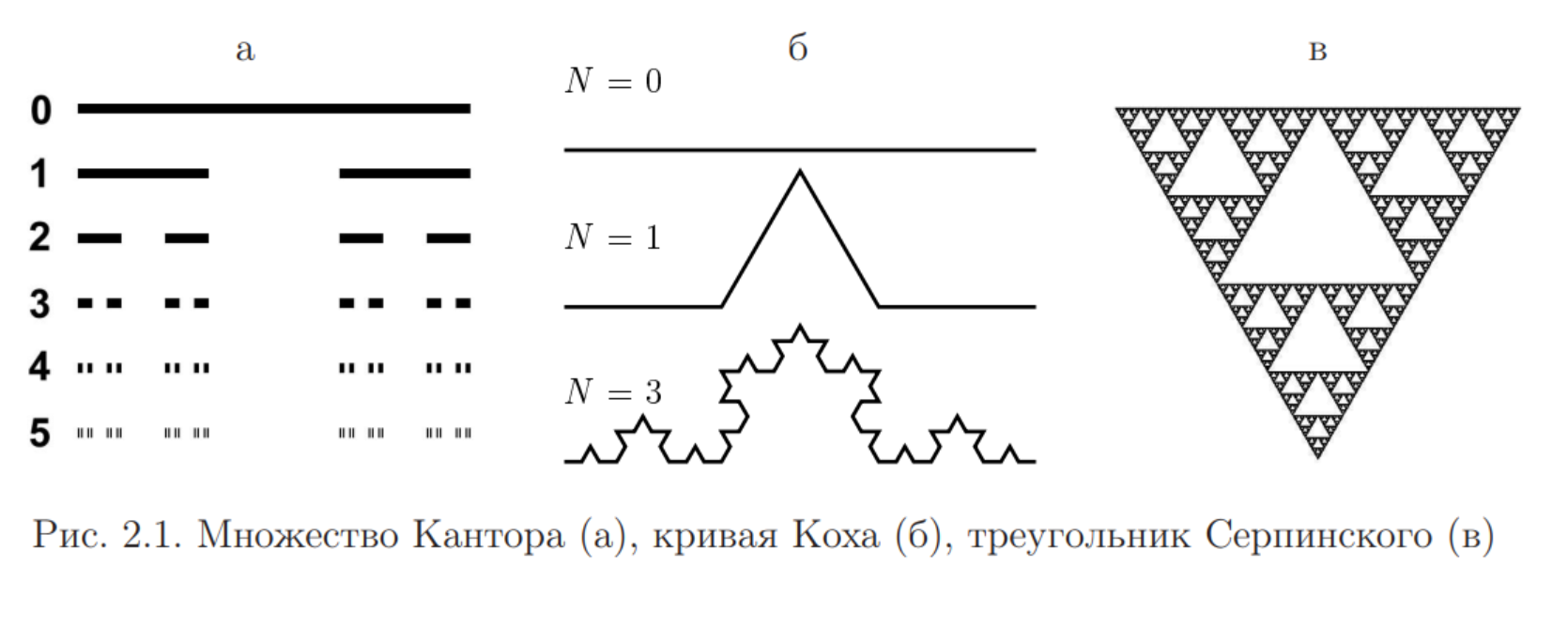
## 1.1 DLA (Диффузионно-ограниченная агрегация)

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 ~ 1.71 на плоскости и D ~ 2.50 в трёхмерном пространстве.

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

## 1.2 DLA (Диффузионно-ограниченная агрегация)



## 1.3 DLA. Диффузия частицы

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.

— случайное смещение частицы за малый промежуток времени ,

— коэффициент диффузии, определяющий скорость распространения частицы,

— шаг по времени (мелкий интервал времени),

— случайная величина с нормальным распределением (белый шум)

## 1.4 DLA. Условие прилипания

Формула описывает условие прилипания частицы к кластеру.

— положение движущейся частицы,

— положение частиц в кластере,

— радиус частицы,

— минимальное расстояние между частицей и всеми точками кластера

## 1.5 DLA. Фрактальная размерность

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

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

— расстояние от центра (или радиус исследуемой области),

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

## 1.6 DLA. Уравнение роста кластера

Формула описывает, как быстро растёт кластер DLA во времени.

— скорость роста радиуса кластера со временем,

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

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

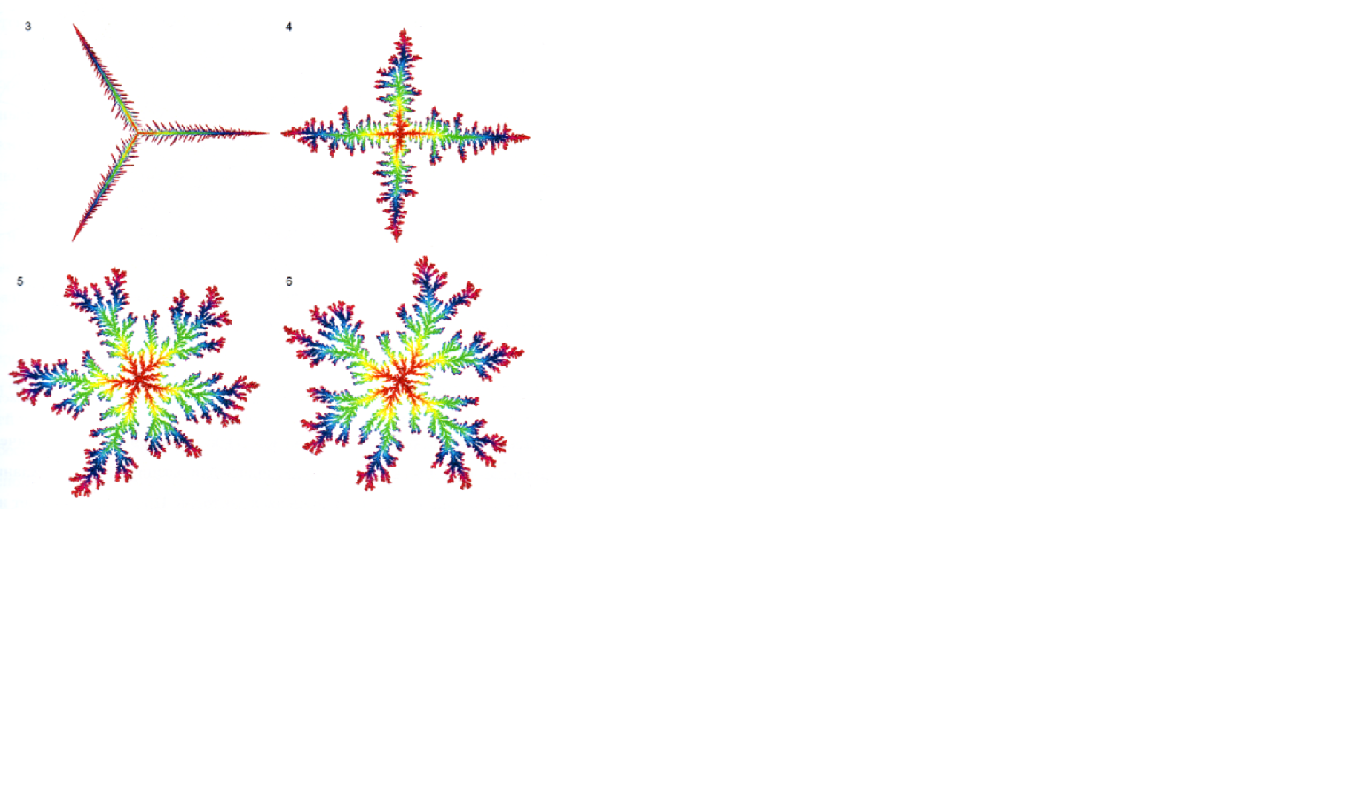
— текущий радиус кластера,

(в степени) — фрактальная размерность кластера,

## 1.7 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 антизотропных агрегатов для 3, 4, 5 и 6 осей симметрии:



## 1.8 CLA. Вероятность прилипания

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.

— вероятность прилипания частицы к кластеру,

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

— энергия активации для прилипания,

— постоянная Больцмана,

— температура системы.

## 1.9 CLA. Динамика отскоков

Формула описывает движение частицы с учётом случайных колебаний.

— положение частицы в момент времени ,

— коэффициент диффузии (характеризует скорость распространения частицы),

— шаг времени,

— случайная величина, которая моделирует случайное движение (обычно с нормальным распределением ).

## 1.10 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

— фрактальная размерность кластера в зависимости от параметра ,

— пространственная размерность (например, для двумерного пространства, — для трёхмерного),

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

— параметр, связанный с плотностью частиц или вероятностью прикрепления,

— параметр, который определяет, как размерность меняется с параметром

## 1.11 BA (Баллистическая агрегация)

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

## 1.12 BA. Траектория частицы

Частица начинает движение с начальной позиции r0 с постоянной скоростью v и её положение в любой момент времени t можно вычислить по этой формуле. Таким образом, движение частицы линейное и прямолинейное с постоянной скоростью.

— положение частицы в момент времени ,

— начальное положение частицы (при ),

— скорость частицы (вектор скорости),

— время.

## 1.13 BA. Условие прилипания

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

— положение движущейся частицы в момент времени ,

— положение всех частиц, входящих в кластер,

— радиус частицы,

— евклидово расстояние между двумя точками в пространстве,

— минимальное расстояние от текущей частицы до всех частиц кластера.

## 1.14 BA. Фрактальная размерность

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

— фрактальная размерность кластера при баллистической агрегации,

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

## 1.15 CCA (Кластер-кластерная агрегация)

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.

## 1.16 CCA. Динамика кластеров

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

) — радиус инерции ( i )-го кластера (gyration radius),

— число частиц (или мономеров) в кластере,

— позиционный вектор ( j )-й частицы в кластере,

— вектор центра масс кластера.

## 1.17 CCA. Правило слипания

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

— вероятность слипания двух кластеров,

$R\_{g,i} \), \( R\_{g,j}$ — радиусы инерции соответствующих кластеров,

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

## 1.18 CCA. Фрактальная размерность

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

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

— фрактальная размерность для модели DLA (Diffusion-Limited Aggregation).

# 2 Выводы

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

# 3 Список литературы

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.