Отчет по групповому проекту. Этап 2.

Неравновесная агрегация, фракталы

Шалыгин Г. Э.

Низамова А. А.

Голощапова И. Б.

Серегин Д. А.

Пиняева А. А

11 марта 2023

Содержание

# 1 Цель работы

Цель:

* Изучить алгоритмы моделирования неравновесной агрегации.

Задачи:

* Рассмотреть методы используемые в построении алгоритмов неравновесной агрегации.
* Построить алгоритмы модели неравновесной агрегации.
* Построить алгоритм вычисления фрактальной размерности.

# 2 Теоретическое введение

## 2.1 Постановка задачи

Существуют разнообразные физические процессы, основная черта которых — неравновесная агрегация. Примеры: образование частиц сажи, рост осадков при электрическом осаждении и т. п. Во всех случаях происходит необратимое прилипание частиц к растущему кластеру из-за сильного смещения равновесия в сторону твердой фазы, и вырастают разветвленные агрегаты (рост правильных ограненных кристаллов происходит в условиях, близких к равновесным, когда возможно как прилипание частиц, так и их обратный переход в раствор)

## 2.2 Случайные блуждания

### 2.2.1 Одномерные случайные блуждания

Рассмотрим простую модель — пусть частицы могут двигаться только вдоль прямой, делая шаги случайной длины. Примем также, что величина и направление каждого шага определяются независимо от положения частицы и от предыдущих шагов (модель «пьяного моряка»). Будем наблюдать за частицей через равные промежутки времени. Координата частицы вычисляется по рекуррентной формуле , где — очередной шаг блуждания. При отсутствии силового поля смещение влево и вправо равновероятны. В общем случае вероятность того, что длина шага лежит в промежутке от #$ до , равна . Функция w называется плотностью вероятности для величины шага δ, который называют случайной величиной.

Подробнее в [1].

### 2.2.2 Многомерные случайные блуждания

Предоставим теперь нашим частицам возможность двигаться также по координате y — рассмотрим двумерные случайные блуждания (случай трех измерений получается аналогично). Можно независимо задавать смещение по вертикали равномерно распределенным таким же образом, как и смещение по горизонтали .

Функция распределения в двумерном случае представляется в виде произведения двух функций распределения по координатам x и y , так как x и y являются независимыми случайными величинами. Подробнее в [1].

## 2.3 Фрактальная размерность

Фигура на плоскости или тело в пространстве имеют размерность. Определить ее можно разными способами. В случае, когда у фигуры есть выделенная центральная точка, можно построить много сфер различного радиуса с центром в этой точке. Для каждой сферы можно вычислить массу части фигуры, которая оказалась внутри этой сферы. В случае, когда масса пропорциональна радиусу сферы в некоторой степени (), показатель степени D называется размерностью тела. Это так называемый метод сфер или ящиков. Для линий D = 1, у плоских фигур D = 2, у «обычных» тел D = 3. Однако, многие объекты в природе имеют размерность, выражающуюся дробным числом.

Такие тела, следуя Б. Мандельброту [9], называют фракталами (от латинского слова fractus — дробный). Фракталами являются также дендриты, вырастающие при электроосаждении металлов, кластеры, полученные при агрегации коллоидов; фрактальную структуру имеют ветви деревьев, кровеносная система и т. п.

Еще один способ может применяться при наблюдении за процессом роста агрегата от центра. В этом случае число частиц в кластере . В качестве характерного радиуса Rch можно выбирать, например, максимальный радиус кластера ,

Желающим более подробно познакомиться с фракталами рекомендуем книгу [2].

# 3 Математические модели

## 3.1 Агрегация, ограниченная диффузией

### 3.1.1 Сеточная модель.

Возьмем регулярную сетку на плоскости, например, квадратную. В центр поместим затравочную частицу. Затем с достаточно большого расстояния будем выпускать по одной новые частицы. Выпущенная частица совершает случайные блуждания по сетке, делая шаги в одном из четырех доступных направлений с равной вероятностью. Если частица оказывается по соседству с затравкой, она прилипает и остается в этом узле. Затем выпускаем следующую частицу, которая может прилипнуть к одному из занятых узлов. Шаг решетки в этой модели соответствует длине связи между частицами (расстоянию устойчивого равновесия для взаимодействия двух частиц).

*Некоторые указания.* Для ускорения работы программы разумно выпускать частицы с круга радиусом немного больше Rmax — текущего максимального радиуса агрегата.

Если частица уходит далеко, уничтожаем ее и выпускаем новую.

### 3.1.2 Бессеточная модель.

Структура полученных DLA-кластеров отражает структуру сетки (имеются выделенные направления). Чтобы получить более симметричные кластеры, можно отказаться от сетки. В этом случае рост происходит следующим образом: вначале помещаем в центр поля затравочную частицу, затем с круга некоторого радиуса выпускаем следующую, которая случайно блуждает. Если частицы сближаются на расстояние взаимодействия (например, их удвоенный радиус), они слипаются. После этого выпускаем новую частицу и т. д.

Детальная информация в [3]

### 3.1.3 Химически-ограниченная агрегация

При диффузионно-ограниченной агрегации частица всегда прилипает к кластеру с вероятностью 1. Можно уменьшить вероятность прилипания. Такой процесс роста называется химически-ограниченной агрегацией. Он моделирует ситуацию, когда вероятность зависит от того, каким концом молекула повернута к другой. Это приведет к появлению более плотных агрегатов (увеличению размерности), потому что у частицы увеличится шанс проникать во внутренние области и заполнять пустоты. Размерность, однако, остается меньше размерности пространства, т. е. кластер остается фракталом.

### 3.1.4 Баллистическая агрегация

До сих пор мы рассматривали рост кластеров с точечной затравки. Однако, довольно часто встречаются ситуации, когда агрегаты растут на поверхности, например, при выпадении осадка на дне или стенках сосуда. Если новые частицы доставляются к растущему кластеру за счет диффузии, имеем просто модель DLA с измененными начальными условиями.

Другой случай — *баллистическая агрегация*, при которой частицы свободно падают по прямолинейным траекториям. Частица прилипает, когда оказывается рядом с занятым узлом. В этом процессе получается более плотный агрегат (но не сплошной), однако его граница сильно изрезана и является фракталом.

# 4 Алгоритмы

## 4.1 Используемые методы

### 4.1.1 Теоретическое введение в генерацию псевдослучайных чисел

Джон фон Нейман считал неприемлемым использование физических генераторов случайных чисел в вычислительной технике, так как при возникновении необходимости проверки вычислений повтор предыдущих действий требовал бы воспроизведение случайного числа, в то время как генерация нового случайного числа недопустима. Предварительная запись и хранение сгенерированных случайных чисел предполагало бы возможность их считывания. Механизм считывания данных являлся одним из самых слабых звеньев вычислительных машин 1940-х годов. Джон фон Нейман привёл следующий метод «середины квадрата» получения десятизначных псевдослучайных чисел:

*Десятизначное число возводится в квадрат, затем из середины квадрата числа берётся десятизначное число, которое снова возводится в квадрат, и так далее.*

В 1951 году Д. Г. Лемерпредложил линейный конгруэнтный метод:

* Алгоритм, порождающий последовательность чисел, элементы которой почти независимы друг от друга и подчиняются заданному распределению (обычно дискретному равномерному).
* Линейный когруэнтный метод:
  1. Начальные условия: – достаточно большое натуральное число, – множитель, – приращение, – начальное значение.
  2. Возвращаемые значения: последовательность
  3. Последовательность описывается формулой:

Линейная конгруэнтная последовательность, определенная числами периодична с периодом, не превышающим . При этом длина периода равна тогда и только тогда, когда:

1. Числа взаимно простые

Подробнее в [4].

## 4.2 Алгоритмы для DLA

### 4.2.1 Генерация псевдослучайных чисел

Глобальные переменные: a, m, c, xcur.

### 4.2.2 Генерация координат следующей частицы

### 4.2.3 Блуждание частицы

### 4.2.4 Псевдокод модели DLA

### 4.2.5 Фрактальная размерность

## 4.3 Другие модели

* **Бессеточная**: добавляется выбор случайной длины шага.
* **Химически-ограниченная**: вводится условие прилипания.
* **Баллистическая**: метод случаного блуждания изменяется на прямолинейную траекторию

# 5 Выводы

* Рассмотренные алгоритмы позволяют построить комплексы программ для вычислительных экспериментов.

# Список литературы

1. Н.Ширяев А. СЛУЧАЙНЫЕ БЛУЖДАНИЯ и БРОУНОВСКОЕ ДВИЖЕНИЕ. Математический институт им. В. А. Стеклова РАН, МГУ им. М. В. Ломоносова, 2003. 103 с.

2. К. Б.В. Основы фрактальной геометрии и фрактального исчисления. Улан-Удэ: ИЗДАТЕЛЬСТВО БГУ, 2013. 224 с.

3. Д. А. Медведев Э.Р.П. А. Л. Куперштох. Моделирование физических процессов и явлений на ПК: Учеб. пособие. СПб.: Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т., 2010. 101 с.

4. Кнут Д.Э. Глава 3. Случайные числа // Искусство программирования. М.: Вильямс, 2000. 832 с.