Моделирование неравновесной агрегации: диффузионно-ограниченная агрегация (DLA)

Этап 1: Модель. Презентация по научной проблеме

Жукова Арина, Садова Диана, Агаев Арсений, Диденко Дмитрий

Содержание

Список иллюстраций

Список таблиц

1 Цель работы

Целью данной работы является изучение процесса неравновесной агрегации и его математическое моделирование. Основное внимание уделяется модели агрегации, ограниченной диффузией (Diffusion Limited Aggregation, DLA), а также методам анализа полученных структур, в частности, определению их фрактальной размерности.

2 Задание

1. Изучить теоретические основы процессов неравновесной агрегации и фрактальных структур.
2. Разработать концептуальное описание модели DLA на квадратной решетке в соответствии с принципами, изложенными в литературе.
3. Подготовить теоретическое введение, описывающее алгоритм модели, методы определения фрактальной размерности и примеры математических фракталов.

3 Теоретическое введение

3.1 Неравновесная агрегация и фракталы

Многие физические процессы в природе характеризуются неравновесной агрегацией — необратимым слипанием частиц с образованием кластера. Примерами являются образование сажи, рост осадков при электроосаждении, формирование «вязких пальцев» при вытеснении нефти водой. В условиях, далеких от равновесия, когда обратный переход частиц в раствор маловероятен, вырастают не компактные, а сильно разветвленные структуры, называемые фракталами.

Термин «фрактал» (от лат. *fractus* — дробный) был введен Бенуа Мандельбротом для обозначения множеств, обладающих свойством самоподобия и имеющих дробную размерность. Фрактальная размерность D является количественной характеристикой, описывающей, как масса объекта заполняет пространство. В отличие от привычных евклидовых размерностей (1 для линии, 2 для плоскости), для фракталов масса m связана с радиусом R степенным образом:

$$m(R) \sim R^D$$

Рисунок 3.1

где D — нецелое число.

Например, размерность кластера DLA на плоскости составляет $D \approx 1.71 \pm 0.02$.

3.2 Модель диффузионно-ограниченной агрегации (DLA)

Простейшей и наиболее изученной моделью неравновесной агрегации является модель DLA. В данной работе рассматривается её решеточная реализация.

Основные принципы модели:

1. **Среда:** Используется регулярная (например, квадратная) сетка на плоскости.
2. **Затравка:** В центре сетки помещается одна неподвижная частица-затравка.
3. **Генерация частиц:** На достаточном удалении от кластера (например, на окружности радиусом немного больше максимального радиуса кластера Rmax) случайным образом генерируется новая частица. Угловая координата выбирается равномерно из интервала [0, 2π]:

$$\alpha = 2\pi \cdot \mathrm{random}$$

Рисунок 3.2

4. **Диффузия:** Частица начинает случайное блуждание по узлам решетки. На каждом шаге она с равной вероятностью перемещается в один из четырех соседних узлов.
5. **Агрегация (прилипание):** Если в результате блуждания частица попадает в узел, соседний с любым уже занятым узлом кластера, она останавливается и «прилипает» к нему, становясь частью кластера.
6. **Удаление:** Если частица уходит далеко от кластера (например, за окружность радиусом *2Rmax*), она уничтожается, и процесс начинается заново с генерации новой частицы.

Процесс повторяется многократно, что приводит к росту древовидного, разветвленного кластера.

3.3 Методы определения фрактальной размерности

Для анализа выращенных кластеров используются различные методы определения их фрактальной размерности D.

3.3.1 Метод сфер (ящиков)

Данный метод применим, если у кластера есть выделенная центральная точка. Строятся концентрические сферы (окружности на плоскости) различных радиусов R с центром в этой точке. Для каждой сферы подсчитывается масса $m(R)$ — количество частиц кластера, попавших внутрь. Затем строится график зависимости $\ln m(R)$ от $\ln R$. Если точки ложатся на прямую линию, то её угловой коэффициент (тангенс угла наклона) и будет фрактальной размерностью D.

3.3.2 Метод подсчета клеток (Box Counting)

Этот метод не требует наличия центра. Вся область, содержащая кластер, покрывается сеткой с размером ячейки $L(i)$. Подсчитывается число ячеек $N(i)$, в которые попала хотя бы одна частица кластера. Процедура повторяется для разных размеров ячеек (например, каждый раз уменьшая размер вдвое). Если выполняется соотношение,

$$N_i \sim L_i^{-D}$$

Рисунок 3.3

то D — искомая размерность. Этот метод хорошо подходит для анализа как искусственных, так и природных объектов, например, береговой линии.

3.3.3 Метод радиуса гирации

В процессе роста кластера от центра удобно использовать радиус гирации *R(g)*, который характеризует средний разброс частиц относительно центра масс. Для кластера из N частиц с координатами r_i радиус гирации определяется, как

$$R_g^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} r_i^2$$

Рисунок 3.4

В этом случае также выполняется соотношение, согласно которому

$$N \sim R_g^D$$

Рисунок 3.5

3.4 Примеры математических фракталов

Для лучшего понимания концепции фракталов полезно рассмотреть классические примеры, размерность которых вычисляется аналитически:

- **Множество Кантора («Канторова пыль»):** Получается путем многократного удаления средней трети из отрезков. Имеет размерность $D = \ln 2/\ln 4 \approx 0.631$.
- **Кривая Коха («Снежинка Коха»):** Строится путем замены средней трети каждого отрезка на два отрезка, образующих угол. Её размерность $D = \ln 4/\ln 3 \approx 1.262$.
- **Треугольник (салфетка) Серпинского:** Строится путем многократного удаления центральных треугольников. Его размерность $D = \ln 3/\ln 2 \approx 1.585$.

Эти примеры демонстрируют, что фрактальная размерность находится между топологической размерностью объекта и размерностью пространства, в котором он находится.

4 Выводы

В ходе выполнения первого этапа проекта была изучена научная проблема, связанная с неравновесной агрегацией и образованием фрактальных структур. Рассмотрена классическая модель диффузионно-ограниченной агрегации (DLA), описаны её ключевые алгоритмические шаги. Также были проанализированы основные методы количественного анализа фрактальных кластеров и приведены примеры идеальных математических фракталов. Полученные теоретические знания служат основой для последующей программной реализации модели и проведения вычислительных экспериментов.

Список литературы