

Моделирование неравновесной агрегации

Этап 2. Алгоритмы и численные методы

Жукова Арина Александровна Садова Диана Алексеевна Агаев Арсений
Валерьевич Диденко Дмитрий Владимирович

2026-04-11

Содержание I

1. Информация
2. Вводная часть
3. Математический аппарат
4. Базовый алгоритм DLA
5. Модификации алгоритма
6. Другие модели агрегации
7. Результаты
8. Итоги

Раздел 1

1. Информация

1.1 Докладчики

Жукова Арина Александровна

студент 3 курса, 1132239120@rudn.ru

Садова Диана Алексеевна

студент 3 курса, 1132239118@rudn.ru

Агаев Арсений Валерьевич

студент 3 курса, 1032221668@rudn.ru

Диденко Дмитрий Владимирович

студент 3 курса, 1032230532@rudn.ru

Российский университет дружбы народов

Раздел 2

2. Вводная часть

2.1 Актуальность

- Процессы неравновесной агрегации встречаются повсеместно: образование сажи, рост кристаллов, электрический пробой
- Модель DLA (Diffusion Limited Aggregation) — классический пример формирования фрактальных структур
- Для компьютерного моделирования необходимы эффективные алгоритмы
- Правильный выбор алгоритма определяет скорость и точность расчетов

2.2 Цели и задачи этапа

Цель: разработать алгоритмическую базу для моделирования DLA и расчета фрактальной размерности

Задачи:

- Описать базовый алгоритм DLA на сетке
- Разработать методы расчета фрактальной размерности
- Предложить модификации для различных физических условий
- Обосновать вычислительные оптимизации

Раздел 3

3. Математический аппарат

3.1 Случайные блуждания

На сетке (четыре направления):

Вероятность каждого направления равна $1/4$.

В непрерывном пространстве:

Смещение на шаге h :

$$x_{new} = x + h \cos \alpha, \quad y_{new} = y + h \sin \alpha$$

где α — случайный угол от 0 до 2π .

3.2 Фрактальная размерность

Метод радиуса гирации:

$$N \sim R_g^D$$

$$R_g = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [(x_i - x_c)^2 + (y_i - y_c)^2]}$$

Метод ящиков (box counting):

$$N(\varepsilon) \sim \varepsilon^{-D}$$

Логарифмическая зависимость:

$$\ln N = D \cdot \ln R_g + C$$

Раздел 4

4. Базовый алгоритм DLA

4.1 Алгоритм роста кластера

Шаг 1. Инициализация:

- Создать пустую сетку размера $L \times L$
- Поместить затравочную частицу в центр
- Счетчик частиц $N = 1$

Шаг 2. Запуск частицы:

- Вычислить R_{max} — максимальный радиус кластера
- Запустить с окружности: $R_{start} = R_{max} + \Delta$
- Случайный угол $\alpha \in [0, 2\pi)$

Шаг 3. Случайное блуждание:

- Выбрать случайное направление (4 варианта)
- Сделать шаг, проверить границы сетки

Шаг 4. Проверка:

- Контакт с кластером — прилипание
- Уход дальше $2R_{max}$ — уничтожение частицы

4.2 Оптимизация вычислений

- **Стартовая окружность:** запуск частиц рядом с кластером
- **Зона уничтожения:** отсеб частиц, ушедших слишком далеко
- **Результат:** ускорение в десятки раз

Раздел 5

5. Модификации алгоритма

5.1 Вероятность прилипания

Химически-ограниченная агрегация:

Число соседей k	Вероятность p_k
1	0.01
2	0.10
3	0.90
4	1.00

При отказе — частица отступает и продолжает блуждание

5.2 Бессеточная модель

- Координаты — вещественные числа $x, y \in \mathbb{R}$
- Шаг блуждания: случайный угол α , фиксированная длина h
- Прилипание: расстояние до кластера $\leq 2r$
- Дает более изотропные кластеры

Раздел 6

6. Другие модели агрегации

6.1 Баллистическая агрегация

- Частицы падают сверху по прямой
- Случайные боковые смещения с вероятностью около 0.2
- Формируется плотный агрегат
- Граница кластера — фрактал

6.2 Кластер-кластерная агрегация

- Изначально много одиночных частиц
- Все кластеры движутся и слипаются
- Коэффициент диффузии: $D(M) = D_0 M^{-\gamma}$
- Самые рыхлые структуры ($D \approx 1.4$)

Раздел 7

7. Результаты

7.1 Сравнение размерностей

Модель	Фрактальная размерность D
DLA классическая	≈ 1.71
Химически-ограниченная	$1.75 - 1.85$
Бессеточная DLA	$\approx 1.68 - 1.72$
Кластер-кластерная	$\approx 1.40 - 1.50$

7.2 Выводы по этапу

- Разработаны алгоритмы для 6 моделей агрегации
- Реализованы два метода расчета фрактальной размерности
- Применены оптимизации для ускорения вычислений
- Алгоритмическая база готова к программной реализации

Раздел 8

8. Итоги

8.1 Заключение

Что сделано:

- Формализован математический аппарат
- Разработаны пошаговые алгоритмы для всех моделей
- Обоснован выбор вычислительных подходов

Что дальше:

- Программная реализация на Python
- Визуализация кластеров
- Сравнительный анализ результатов

Главный результат: эффективные алгоритмы, готовые к кодированию