Моделирование неравновесной агрегации и фрактальных кластеров

Этап 2. Алгоритмы и численные методы

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

Содержание

Список иллюстраций

Список таблиц

1 Цель работы

Цель второго этапа — формализовать задачу моделирования неравновесной агрегации в виде четких алгоритмических схем, определить необходимый математический аппарат для анализа получаемых структур и обосновать выбор вычислительных подходов для дальнейшей программной реализации.

2 Задание

В рамках этапа «Алгоритмы» требуется:

- Описать общий подход к моделированию агрегации, ограниченной диффузией (DLA).
- Привести математические формулы для вычисления фрактальной размерности двумя методами.
- Составить пошаговые алгоритмы для базовой модели DLA.
- Описать модификации алгоритма для случаев с переменной вероятностью прилипания.
- Изложить алгоритмы для бессеточной модели, баллистической агрегации и кластер-кластерной агрегации.

3 Общий подход к моделированию

Моделирование агрегации основано на методе дискретных событий (или клеточных автоматов для сеточной версии). Пространство представляется в виде регулярной сетки (решеточная модель) либо непрерывного поля координат (бессеточная модель). Ключевое предположение модели DLA: скорость роста кластера лимитируется диффузией частиц, а не кинетикой их присоединения к поверхности.

Процесс моделируется пошагово:

- Задается начальное состояние системы (затравочная частица или подложка).
- Генерируется новая блуждающая частица на границе области.
- Частица совершает случайные блуждания.
- При контакте с кластером частица присоединяется к нему с заданной вероятностью.
- Процесс повторяется до достижения нужного размера кластера.

Для ускорения вычислений применяются методы ограничения области блуждания (стартовая окружность и зона уничтожения).

4 Математический аппарат

4.1 Случайные блуждания

Движение частицы описывается дискретным случайным процессом. На каждом шаге t координаты частицы изменяются на вектор (dx, dy), где компоненты выбираются случайно из множества разрешенных направлений.

Для сеточной модели:

Направления выбираются из четырех возможностей: вверх, вниз, влево, вправо. Вероятность каждого направления равна $1/4$:

$$P(\text{вверх}) = P(\text{вниз}) = P(\text{влево}) = P(\text{вправо}) = \frac{1}{4}$$

Для бессеточной модели:

Угол движения α выбирается равномерно из интервала $[0, 2\pi)$. Смещение на шаге h задается как:

$$\Delta x = h \cdot \cos(\alpha), \quad \Delta y = h \cdot \sin(\alpha)$$

4.2 Фрактальная размерность

Для количественной характеристики получаемых разветвленных структур используется понятие фрактальной размерности D.

4.2.1 Метод: зависимость массы от радиуса гирации

Масса кластера (число частиц) N связана с его характерным размером степенным законом:

$$N \sim R_g^D$$

Радиус гирации R_g определяется как среднеквадратичное расстояние от частиц до центра масс кластера:

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

где (x_c, y_c) — координаты центра масс.

В логарифмических координатах эта зависимость становится линейной:

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

Тангенс угла наклона прямой, построенной методом наименьших квадратов, дает значение размерности D.

4.2.2 Метод: подсчет клеток (Box counting)

Пространство, содержащее кластер, покрывается сеткой с квадратными ячейками размера ε. Подсчитывается число ячеек $N(\varepsilon)$, содержащих хотя бы одну точку кластера. При уменьшении размера ячейки число непустых ячеек растет по закону:

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

В логарифмических координатах:

$$\ln N(\varepsilon) = -D \cdot \ln \varepsilon + C$$

По наклону графика $\ln N(\varepsilon)$ от $-\ln \varepsilon$ определяется размерность D.

4.3 Вероятностные правила прилипания

В базовой модели частица прилипает при первом же касании кластера (вероятность $p = 1$). В более сложных модификациях вводится параметр вероятности прилипания $p < 1$. При проверке контакта генерируется случайное число ξ, равномерно распределенное на $[0, 1]$. Прилипание происходит при выполнении условия:

$$\xi \leq p$$

В химически-ограниченной агрегации вероятность p зависит от локального окружения — числа уже занятых соседних узлов k:

$$p = p(k), \quad k = 1, 2, 3, 4$$

4.4 Диффузия кластеров

В кластер-кластерной агрегации используется модель диффузии целых агрегатов. Коэффициент диффузии кластера зависит от его размера (массы M). Обычно принимается степенная зависимость:

$$D(M) = D_0 \cdot M^{-\gamma}$$

где $\gamma = 1/2$ (для свободно-сочлененных цепочек) или $\gamma = 1/d_f$ (для фрактальных агрегатов).

5 Алгоритмы

5.1 Базовый алгоритм DLA на сетке

Входные данные:

- Размер сетки $L \times L$
- Число частиц N_{total}
- Вероятность прилипания p

Шаг 1. Инициализация. Создать пустую сетку $grid[L][L]$. Поместить затравочную частицу в центр $(L/2, L/2)$. Установить счетчик $N = 1$.

Шаг 2. Основной цикл. Пока $N < N_{total}$:

- Вычислить текущий максимальный радиус кластера R_{max}.
- Сгенерировать стартовую позицию на окружности радиусом $R_{start} = R_{max} + \Delta$: $\alpha = random(0, 2\pi)$, $x = L/2 + R_{start} \cdot \cos(\alpha)$, $y = L/2 + R_{start} \cdot \sin(\alpha)$.
- Установить флаг прилипания $stuck = False$.

Шаг 3. Блуждание. Пока не $stuck$ и расстояние от центра $< R_{kill}$ ($\approx 2 \cdot R_{max} + \delta$):

- Выбрать случайное направление из $\{\uparrow, \downarrow, \leftarrow, \rightarrow\}$.
- Сделать шаг: $(x, y) \rightarrow (x + dx, y + dy)$.
- Если вышли за границы сетки — прервать блуждание.
- Проверить 4 соседние клетки.

- Если хотя бы одна занята и $random() < p$: $grid[x][y] = 1$, $N = N + 1$, $stuck = True$.

Шаг 4. Если частица не прилипла (ушла далеко) — запустить новую (вернуться к шагу 2).

5.2 Алгоритм расчета размерности методом радиуса гирации

Входные данные:

- Массив координат всех точек кластера
- История роста (пары $N_i, R_{g,i}$)

Алгоритм:
Для каждого размера кластера N (с шагом ΔN) вычислить:

- Центр масс: $x_c = \frac{1}{N}\sum x_i$, $y_c = \frac{1}{N}\sum y_i$
- Квадрат радиуса гирации: $R_g^2 = \frac{1}{N}\sum\left[(x_i - x_c)^2 + (y_i - y_c)^2\right]$
- Радиус гирации: $R_g = \sqrt{R_g^2}$
- Сохранить пару (N, R_g)

Построить график в координатах $X = \ln(R_g)$, $Y = \ln(N)$. Выполнить линейную регрессию $Y = D \cdot X + C$. Наклон D — искомая фрактальная размерность.

5.3 Алгоритм расчета размерности методом ящиков

Входные данные: бинарное изображение кластера (матрица занятости).

Алгоритм:

Определить ограничивающий прямоугольник кластера.

Для размера ячейки $\varepsilon = L/2, L/4, L/8, \dots, \varepsilon_{min}$:

- Разбить область на ячейки $\varepsilon \times \varepsilon$
- Подсчитать число непустых ячеек N_{box}
- Сохранить пару (ε, N_{box})

Построить график в координатах $X = -\ln(\varepsilon)$, $Y = \ln(N_{box})$. Выполнить линейную регрессию $Y = D \cdot X + C$. Наклон D — фрактальная размерность.

5.4 Алгоритм с переменной вероятностью прилипания

Модификация шага проверки прилипания в базовом алгоритме:

При обнаружении контакта с кластером подсчитать число занятых соседей k. Определить вероятность p_k по таблице:

k	p_k
1	0.01
2	0.1
3	0.9
4	1.0

Если $random() < p_k$ — прилипание. Иначе — отступить на предыдущую позицию и продолжить блуждание.

5.5 Алгоритм бессеточной модели DLA

Координаты частиц — вещественные числа ($x, y \in \mathbb{R}$).

Начальная позиция: $R_{start} = R_{max} + 5 \cdot r$, $\alpha = random(0, 2\pi)$, $x = R_{start} \cdot \cos(\alpha)$, $y = R_{start} \cdot \sin(\alpha)$, где r — радиус частицы.

Шаг блуждания: $\alpha = random(0, 2\pi)$, $x = x + h \cdot \cos(\alpha)$, $y = y + h \cdot \sin(\alpha)$, где h — длина шага.

Проверка прилипания: для каждой точки кластера (x_c, y_c) вычислить расстояние $d = \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}$. Если $d \leq d_{stick}$ ($\approx 2 \cdot r$) — прилипание.

Уничтожение: если расстояние от центра $> \ 2 \cdot R_{max} + 20 \cdot r$ — частица уничтожается.

5.6 Алгоритм баллистической агрегации

Инициализация: создать подложку — линию занятых узлов при $y = 0$.

Для каждой новой частицы:

- $x = random(0, W)$ (W — ширина области), $y = H_{start}$ (запуск с высоты)
- Пока $y > 0$:
  - Если узел $(x, y - 1)$ занят: занять узел (x, y), выход из цикла
  - $y = y - 1$ (падение вниз)
  - С вероятностью p_{walk} (≈ 0.2): $x = x \pm 1$
- Если $y = 0$ (достигнута подложка): занять узел $(x, 0)$

Граница кластера определяется как множество точек с максимальной y-координатой для каждого x.

5.7 Алгоритм кластер-кластерной агрегации

Инициализация: создать N одиночных частиц в случайных позициях. Каждая частица — отдельный кластер размера 1.

Эволюция (пока число кластеров > 1):

- Выбрать случайный кластер i

- Вычислить коэффициент диффузии: $D_i = D_0/\sqrt{size_i}$
- Сгенерировать смещение: $dx = Gauss(0, D_i)$, $dy = Gauss(0, D_i)$
- Сместить все точки кластера на (dx, dy)
- Проверить пересечение с другими кластерами. Если расстояние между точками разных кластеров $< 2 \cdot r$:
  - Слить кластеры i и j в один
  - Удалить i и j из списка
  - Добавить объединенный кластер
- Если пересечений нет — обновить позицию кластера i

Результат — один большой фрактальный агрегат.

6 Обоснование выбора подходов

Выбор сеточной модели как базовой обусловлен простотой реализации, наглядностью, естественным параллелизмом (клеточный автомат) и возможностью точного подсчета соседей.

Метод стартовой окружности позволяет сократить время расчета в десятки раз, исключая бесполезное блуждание частиц на периферии.

Два метода расчета размерности используются для взаимной верификации результатов: метод радиуса гирации удобен при анализе процесса роста «на лету», метод ящиков дает более точную оценку для уже сформированного кластера.

Расширение до бессеточной и кластер-кластерной моделей необходимо для исследования влияния дискретизации пространства на структуру агрегатов и сравнения с реальными физическими экспериментами (коллоидные системы, аэрозоли).

7 Выводы

В рамках второго этапа проекта:

- Определен математический аппарат для описания случайных блужданий, вероятностных правил прилипания и вычисления фрактальной размерности.
- Разработаны детальные пошаговые алгоритмы для шести различных конфигураций процесса агрегации (от базовой DLA до кластер-кластерной).
- Обоснован выбор вычислительных подходов, направленных на оптимизацию времени моделирования при сохранении физической адекватности.

Полученные алгоритмические схемы служат основой для непосредственного написания программного кода на следующем этапе работы.

8 Список литературы

1. Witten T. A., Sander L. M. Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon // Physical Review Letters. — 1981. — Vol. 47, № 19. — P. 1400–1403.

2. Медведев Д. А. Моделирование физических процессов и явлений на ПК. — Учебное пособие.

3. Федер Е. Фракталы. — М.: Мир, 1991. — 254 с.