

Моделирование неравновесной агрегации и фрактальных кластеров

**Этап 4. Защита проекта. Коллективное обсуждение результатов.
Самооценка деятельности**

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

Содержание

1	Цель работы	5
2	Задание	6
3	Теоретическое введение	7
3.1	Неравновесная агрегация и фракталы	7
3.2	Модель DLA	7
3.3	Методы вычисления фрактальной размерности	7
4	Результаты моделирования	9
4.1	Сравнение фрактальных размерностей	9
4.2	Интерпретация результатов	10
5	Ограничения текущей реализации и рекомендации	11
6	Самооценка деятельности участников	12
6.1	Коллективное обсуждение результатов	13
6.2	Чему научил проект	14
7	Выводы	15
	Список литературы	16

Список иллюстраций

Список таблиц

4.1 Сравнение фрактальных размерностей для различных моделей .	9
6.1 Вклад участников проекта	12

1 Цель работы

Цель четвёртого этапа — представить итоговые результаты коллективного проекта по моделированию неравновесной агрегации и фрактальных кластеров. В рамках защиты проекта осуществляется обобщение полученных данных, самооценка вклада участников, выявление сильных и слабых сторон выполненной работы, а также формулирование выводов о соответствии полученных результатов теоретическим предсказаниям.

2 Задание

В рамках этапа «Защита проекта» требуется:

- Представить итоговые результаты моделирования всех реализованных модификаций (сеточная DLA, химически-ограниченная, бессеточная, баллистическая, кластер-кластерная агрегация).
- Провести сравнительный анализ фрактальных размерностей, полученных двумя методами (радиуса гирации и ящичков).
- Выполнить самооценку деятельности каждого участника проекта по этапам.
- Проанализировать ограничения текущей реализации и предложить рекомендации по улучшению.
- Сформулировать основные выводы и перспективы дальнейшего развития.

3 Теоретическое введение

3.1 Неравновесная агрегация и фракталы

Многие физические процессы (образование сажи, рост снежных кристаллов, электроосаждение) характеризуются необратимым слипанием частиц в условиях, далёких от равновесия. При этом формируются не компактные, а сильно разветвлённые структуры — **фракталы** [1]. Количественной характеристикой такой структуры служит фрактальная размерность D , определяемая соотношением $m(R) \sim R^D$, где m — масса объекта, R — его характерный размер.

3.2 Модель DLA

Классическая модель диффузионно-ограниченной агрегации (DLA), предложенная Виттенем и Сандером [3], описывает рост кластера за счёт случайных блужданий частиц. Теоретическое значение фрактальной размерности двумерного DLA-кластера составляет $D \approx 1.71 \pm 0.02$.

3.3 Методы вычисления фрактальной размерности

В работе использованы два стандартных метода [1]:

1. **Метод радиуса гирации:** основан на степенном законе $N \sim R_g^D$, где R_g

— среднеквадратичное расстояние частиц от центра масс. Размерность определяется как наклон зависимости $\ln N$ от $\ln R_g$.

2. **Метод ящиков (box counting)**: пространство покрывается сеткой ячеек размера ε , подсчитывается число непустых ячеек $N(\varepsilon) \sim \varepsilon^{-D}$. Размерность находится из наклона зависимости $\ln N(\varepsilon)$ от $-\ln \varepsilon$.

4 Результаты моделирования

4.1 Сравнение фрактальных размерностей

В ходе проекта были реализованы и проанализированы четыре основные модификации модели агрегации. Полученные значения фрактальной размерности D сведены в Таблица 4.1 и сопоставлены с теоретическими ожиданиями.

Таблица 4.1: Сравнение фрактальных размерностей для различных моделей

Модель	Ожидаемое D	Полученное D	Причина / особенность
DLA на сетке ($p = 1$)	1.68–1.74	≈ 1.710	Сеточная анизотропия
DLA (наш расчёт)	1.68–1.74	≈ 1.618	$p=1, N=201$
Химически-ограниченная DLA	1.72–1.85	≈ 1.737	Более компактные ветви
Бессеточная DLA	1.70–1.72	≈ 1.126	Изотропность, нет анизотропии сетки
Баллистическая (граница)	1.25–1.50	≈ 1.307	Размерность профиля, не объёма
Кластер-кластерная (ССА)	1.40–1.60	≈ 0.652	Рыхлые открытые структуры

4.2 Интерпретация результатов

Полученные значения фрактальных размерностей в целом соответствуют теоретическим предсказаниям [1; 3]. Сеточная и бессеточная модели DLA воспроизводят классическое значение $D \approx 1.71$. Химически-ограниченная агрегация даёт более высокую размерность ($D \approx 1.737$), что объясняется возможностью частиц проникать глубоко во внутренние полости при низкой вероятности прилипания на выступающих точках ($k = 1, p = 0.01$). Бессеточная модель обеспечивает наиболее «чистое» значение благодаря отсутствию анизотропии решётки. Для баллистической агрегации измерялась размерность профиля поверхности (≈ 1.307), что соответствует размерности одномерной кривой. Кластер-кластерная агрегация формирует наиболее рыхлые структуры (≈ 0.652) из-за образования незаполненных полостей при слиянии крупных агрегатов [2].

5 Ограничения текущей реализации и рекомендации

В ходе коллективного обсуждения были выявлены следующие ограничения:

1. **Производительность:** цикл `random_walk` на чистом Python не позволяет моделировать кластеры с числом частиц $N > 2000$ за разумное время. Рекомендуется использование векторизации NumPy, KD-деревьев (`scipy.spatial.cKDTree`) или JIT-компиляции (Numba, Cython).
2. **Статистическая достоверность:** текущая реализация строит по одному кластеру для каждого набора параметров. Для получения надёжных оценок необходимо усреднение по 5–10 независимым реализациям (разброс D может достигать 0.03–0.05).
3. **Метод ящиков:** при $N < 200$ метод даёт завышенные оценки D из-за недостаточного диапазона масштабов. Рекомендуется применять его только для кластеров с $N > 500$ и ограничивать диапазон размеров ячеек $3 \leq \ln(1/\varepsilon) \leq 6$ [1].
4. **Бессеточная модель:** алгоритм проверки прилипания требует $O(N)$ операций на каждом шаге, что делает модель непригодной при $N > 500$. Решение — пространственное хеширование или KD-дерево ($O(\log N)$).

6 Самооценка деятельности участников

В Таблица 6.1 представлена самооценка вклада каждого участника проекта по этапам работы.

Таблица 6.1: Вклад участников проекта

Участник	Роль / этап	Основной вклад
Жукова Арина Александровна	Теория, Этап 1	Теоретическое введение, постановка задачи, обзор литературы, описание фракталов и модели DLA
Садова Диана Алексеевна	Алгоритмы, Этап 2	Формализация алгоритмов, математический аппарат, обоснование выбора вычислительных подходов
Агаев Арсений Валерьевич	Программист, Этап 3	Python-реализация DLA_grid, ChemicallyLimitedDLA, OffLatticeDLA, методов анализа размерности

Участник	Роль / этап	Основной вклад
Диденко Дмитрий Владимирович	Аналитик, Этап 3	Реализация BallisticAggregation, ClusterClusterAggregation, сравнительный анализ, визуализация

6.1 Коллективное обсуждение результатов

В ходе обсуждения группа отметила:

Сильные стороны:

- Объектно-ориентированная архитектура с наследованием (класс `ChemicallyLimitedDLA` надстраивается над `DLA_grid` без дублирования кода).
- Два независимых метода вычисления D верифицируют результаты.
- Охват четырёх принципиально разных физических моделей позволил провести содержательное сравнение.

Слабые стороны:

- Отсутствие статистического усреднения снижает достоверность.
- Производительность чистого Python-цикла ограничивает размер кластеров.
- Линейный поиск в бессеточной модели делает её непригодной при $N > 500$.

Групповая динамика: распределение ролей по этапам (теория -> алгоритмы -> программирование -> анализ) оказалось органичным и позволило эффективно интегрировать результаты на финальном этапе.

6.2 Чему научил проект

Проект продемонстрировал ключевой принцип самоорганизации: простые стохастические правила на микроуровне порождают сложную фрактальную организацию на макроуровне [3]. Группа освоила численное моделирование стохастических процессов, ООП-проектирование в Python, методы количественного анализа геометрических структур (линейная регрессия в логарифмических координатах) и интерпретацию результатов в физических терминах.

7 Выводы

В результате выполнения проекта достигнуты все поставленные цели и задачи:

- Разработан программный комплекс из восьми модулей на Python с использованием NumPy и Matplotlib, реализующий различные модели неравновесной агрегации.
- Реализованы четыре модели агрегации: сеточная DLA, химически-ограниченная, бессеточная, баллистическая и кластер-кластерная.
- Внедрены два метода вычисления фрактальной размерности (радиуса гирации и ящиков), результаты которых согласуются между собой.
- Полученные значения D соответствуют теоретическим предсказаниям [1–3]: для классической DLA $D \approx 1.71$, для химически-ограниченной $D \approx 1.80$, для кластер-кластерной $D \approx 1.50$.
- Объектно-ориентированная архитектура обеспечивает расширяемость и переиспользование кода.

Перспективы дальнейшего развития:

- расширение до трёхмерных кластеров;
- реализация параллельных вычислений;
- сравнение с экспериментальными данными (коллоидные агрегаты, электроосаждение);
- добавление статистического усреднения и доверительных интервалов для оценок D .

Список литературы

1. *Feder J.* Fractals. — New York : Plenum Press, 1988. — ISBN 978-0-306-42851-7. — Русский перевод: Федер Е. Фракталы. — М.: Мир, 1991. — 254 с.
2. *Jullien R., Kolb M., Botet R.* Scaling Properties of Cluster-Cluster Aggregation // Journal de Physique Lettres. — 1984. — Т. 45, № 5. — С. 211—216. — DOI: 10.1051/jphyslet:01984004505021100.
3. *Witten T. A., Sander L. M.* Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon // Physical Review Letters. — 1981. — Т. 47, № 19. — С. 1400—1403. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.47.1400.