Этап 1

Научная проблема проекта Неравновестная агрегация, фракталы

Беличева Д. М.,

Демидова Е. А.,

Смирнов-Мальцев Е. Д.,

Сунгурова М. М.

Содержание

# 1 Введение

**Актуальность**

Существуют разнообразные физические процессы, основная черта которых — неравновесная агрегация. Примеры: образование частиц сажи, рост осадков при электрическом осаждении и распространение воды в нефти. Один из важных примеров фракталов появляется при добыче нефти. Нефтяники через одну из скважин заливают в месторождение нефти воду. Из других скважин начинает выходить нефть. Однако вода распространяется внутри месторождения неравномерно, образуя т.н. “фьорды”. Нефть, находящаяся в этих фьордах не выходит наружу и остается не добытой. Поэтому вместо воды необходимо найти жидкость, для которой эти фьорды будут минимальны.

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)[1].

**Объект и предмет исследования**

* Модели неравновесной агрегации
* Фрактальная размерность
* График зависимости числа частиц в кластере от радиуса гирации

**Цель работы**

Построить модели неравновесной агрегации и выявить их особенности.

**Задачи**

* Построить модель агрегации, ограниченной диффузией
* Построить модель баллистической агрегации
* Найти размерность, получившихся кластеров
* Построить график зависимости числа частиц в кластере от радиуса гирации

# 2 Теоретическое описание задачи

**Фрактальная размерность**

Если замкнутую ограниченную область на плоскости покрыть квадратной сеткой со стороной , то минимальное число квадратов со стороной , покрывающих область, будет равно:

Определим фрактальную размерность исходя из выше изложенного в общем случае следующим образом:

Возьмем логарифм от левой и правой частей

Переходя к пределу при , стремящемся к нулю (, стремящемся к бесконечности), получим

Это равенство является определением размерности, которая обозначается . Для построения зависимости между оценкой радиуса и массы кластера (линейна) на логарифмической диаграмме, функция имеет вид:

где – фрактальная размерность, – число частиц на расстоянии меньшем чем , – радиус

**Агрегация, ограниченная диффузией**

Агрегация, ограниченная диффузией (diffusion-limited aggregation, DLA) — первая модель агрегации, разработанная Виттеном и Сандером в 1981 году. Она представляет шумный рост, ограниченный диффузией. Этот процесс довольно распространен в природе, и простой алгоритм дает хорошее представление о крупномасштабной структуре многих природных объектов.

Алгоритм следующий: предположим, что мы начинаем с центра зарождения, единственной «частицы» радиуса , которую мы располагаем в начале координат. Затем выпускаем еще одну подобную частицу в случайной точке на некотором расстоянии. Новой частице разрешается диффундировать, т. е. делать шаги длиной в случайных направлениях, пока она не окажется в пределах от первой. Эту частицу фиксируем на данном месте и далее запускаем второго ходока. Она диффундирует до тех пор, пока не окажется в пределах от любой из первых частиц, и так далее. Кластер DLA размера является результатом добавления частиц к исходному центру[2].

У получающегося кластера может быть много различных форм, преимущественно зависящих от трёх факторов:

* положение центра агрегации;
* начальное положение движущейся частицы;
* алгоритм моделирования движения.

По алгоритму движения частицы существует два подхода к базовому моделированию DLA. Один работает с фиксированной сеткой, а другой — без сетки и использует частицы. Эта разница отражена во многих методах моделирования. Сетки обеспечивают жесткую структуру, которая упрощает модель. В этом случае частица может двигаться по сетке только к одному из четырех соседей. Работа без сетки дает больше свободы, но обычно создает дополнительную сложность, что может означать, что ее сложнее программировать или требуется больше вычислений.

**Агрегация, ограниченная химический реакцией**

Если необходимо проанализировать процессы, кинетика которых определяется химическим взаимодействием, то обычно рассматривают не равную единице вероятность прилипания частицы к кластеру при столкновении. Эта группа моделей получила название reaction limited aggregation (RLA) — «ограниченная реакцией агрегация».

Поскольку частицы слипаются лишь после нескольких столкновений, мономер имеет возможность проникнуть глубже внутрь кластера, поэтому формирующиеся агрегаты должны быть более плотными, чем в случае модели DLA. Вероятность прилипания к единственному соседу должна быть меньше, чем к двум, так как в последнем случае могут образоваться две связи. Очевидно, что связь тем прочнее, чем больше соседей у данной частицы. Поэтому вероятность прилипания должна увеличиваться при росте числа занятых соседних узлов. Повышение вероятности прилипания частицы к точкам кластера, характеризующимся более высокой локальной плотностью, также способствует его более компактному росту. Действительно, введение в модель указанных изменений в совокупности с постепенным уменьшением вероятности реакции приводит к непрерывному увеличению фрактальной размерности кластеров вплоть до размерности пространства.

**Баллистическая агрегация**

Баллистическая модель (Ballistic particle-cluster aggregation, BPCA) похожа на модель агрегации, ограниченной диффузией. Отличие состоит в том, что зародившееся частица, двигается по прямой в случайно выбранном направлении до столкновения с частицей и последующей агрегацией. Особенностью данной модели является высокая скорость вычислений, так как направление выбирается один раз и частица агрегируется или выходит за границы радиуса уничтожения намного быстрее. Итоговая структура, сгенерированная при помощи данного метода, получается более плотной, чем при использовании DLA, поскольку в алгоритме частица движется прямолинейно, а не моделирует броуновское движение, которое вносит большую разветвленность в структуру[3].

**Кластер-кластерная агрегация**

Дальнейшим развитием модели DLA являлась модель кластер-кластерной агрегации, ограниченной диффузией (diffusion-limited cluster aggregation, DLCA), которая относится к классу моделей “кластер-кластер”. В модели DLCA на поле располагаются подвижные частицы в соответствии с пористостью образца. Частицы совершают хаотичное движение, агрегируя друг с другом при столкновении, пока не образуют единую структуру - кластер, который также движется и может агрегироваться с другими кластерами[3].

# 3 Выводы

Во время выполнения первого этапа группового проекта мы сделали теоретическое описание моделей неравновесной агрегации и определили задачи дальнейшего исследования.

# Список литературы

1. Медведев Д.А. и др. Моделирование физических процессов и явлений на ПК: Учеб. пособие. Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 2010. 101 с.

2. Sander L.M. Diffusion-limited aggregation: A kinetic critical phenomenon? Contemporary Physics, 2000.

3. Тыртышников А.Ю. и др. Сравнение алгоритмов DLA и RLA при моделировании пористых структур. НИИ «Центрпрограммсистем», 2017. 244 с.