Проект. Этап № 1

Неравновесная агрегация, фрактальные кластеры

Ощепков Дмитрий, Алади Принц, Хамдамова Айжана, Козлов Всеволод 21 марта 2025

Российский университет дружбы народов, Москва, Россия



Докладчики

- Ощепков Дмитрий
- Хамдамова Айжана
- Козлов Всеволод
- Алади Принц
- НФИбд-01-22

Цели и задачи

Цель работы

Построить модели неравновесной агрегации и выявить их особенности.

Фрактальная размерность

 $N(\epsilon)$ - количество квадратов, необходимое для покрытия фрактала, ϵ - сторона квадрата, d - переменная.

$$N(\epsilon) \sim \frac{1}{\epsilon^d}$$

$$\ln N(\epsilon) \sim \ln \frac{1}{\epsilon^d} = \ln \frac{1}{\epsilon}^d = d \ln \frac{1}{\epsilon}$$

Фрактальная размерность

$$d = \lim_{\epsilon \to 0} \left(\frac{\ln(N(\epsilon))}{\ln(\frac{1}{\epsilon})} \right)$$

$$ln(N(\epsilon)) = Dln(R) + b,$$

где D – фрактальная размерность, $N(\epsilon)$ – число частиц на расстоянии меньшем чем R, R – радиус

Неравновесная агрегация и фракталы

Неравновесная агрегация — это процесс, при котором частицы необратимо прилипают к растущему кластеру, образуя разветвленные структуры. *Примеры*: Образование сажи. Рост осадков при электрическом осаждении. "Вязкие пальцы" при вытеснении жидкостей в пористой среде. Эти процессы дают фрактальные структуры — объекты с дробной размерностью, которые самоподобны на разных масштабах.

Модель агрегации, ограниченной диффузией (DLA)

Сеточная модель: Частицы случайно блуждают по сетке и прилипают к кластеру, если оказываются рядом с ним. Бессеточная модель: Частицы движутся в пространстве без сетки, прилипая к кластеру при сближении на расстояние взаимодействия. Результат: Кластеры имеют фрактальную структуру с размерностью D \sim 1.71 на плоскости и D \sim 2.50 в трёхмерном пространстве.

Фрактальная размерность

Фрактальная размерность D описывает, как масса кластера растёт с увеличением его размера.

Методы определения: Метод сфер: Масса т \sim R $^{\circ}$, где R — радиус сферы. Метод подсчёта клеток: Число непустых клеток N \sim L-D , где L — размер клетки.

Примеры фракталов: Множество Кантора: D ~ 0.631. Кривая Коха: D ~ 1.262. Треугольник Серпинского: D ~ 1.585.

Множество Кантора, кривая Коха, треугольник Серпинского

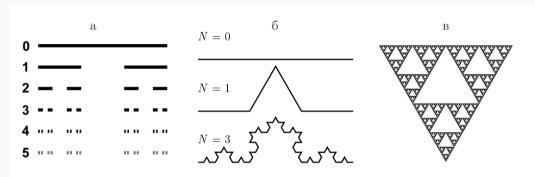


Рис. 2.1. Множество Кантора (а), кривая Коха (б), треугольник Серпинского (в)

Описание моделей

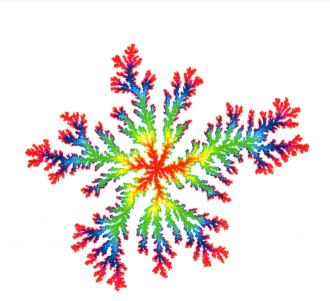
Химически-ограниченная агрегация, баллистическая агрегация и кластер-кластерная агрегация — это модификации или обобщения модели DLA (Diffusion-Limited Aggregation). Они расширяют базовую модель DLA, добавляя новые физические механизмы или условия. Давайте разберём каждую из них.

1. Химически-ограниченная агрегация (Chemically Limited Aggregation, CLA) Что это? В этой модели вероятность прилипания частицы к кластеру меньше 1. То есть частица может "отскочить" от кластера, даже если она находится рядом с ним.

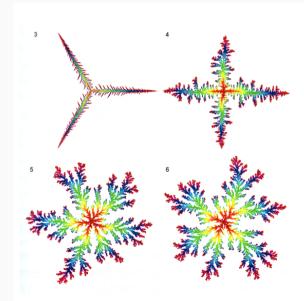
Чем отличается от DLA? В DLA частица всегда прилипает к кластеру, если оказывается рядом с ним. В CLA вероятность прилипания зависит от условий (например, химических свойств частиц).

Результат: Кластеры становятся более плотными, чем в DLA, но всё ещё остаются фракталами. Фрактальная размерность D увеличивается, но остаётся меньше размерности пространства. $_{10/18}$

Фрактальный агрегат



Примеры анизотропных агрегатов для 3, 4, 5, и 6 осей симметрии



Ballistic Aggregation

2. Баллистическая агрегация (Ballistic Aggregation) Что это? В этой модели частицы движутся по прямым траекториям (а не случайно блуждают, как в DLA). Они прилипают к кластеру при первом контакте.

Чем отличается от DLA? В DLA частицы движутся случайно (диффузия), а в баллистической агрегации— по прямым линиям.

Результат: Кластеры получаются более плотными, чем в DLA, но их границы остаются фрактальными. Фрактальная размерность D выше, чем в DLA, но всё ещё меньше размерности пространства.

Cluster-Cluster Aggregation

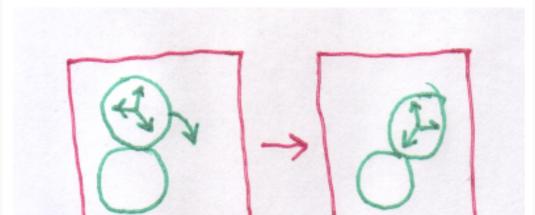
3. Кластер-кластерная агрегация (Cluster-Cluster Aggregation, CCA) Что это? В этой модели несколько кластеров растут одновременно и могут слипаться друг с другом. Это отличается от DLA, где растёт только один кластер, а частицы прилипают к нему по одной.

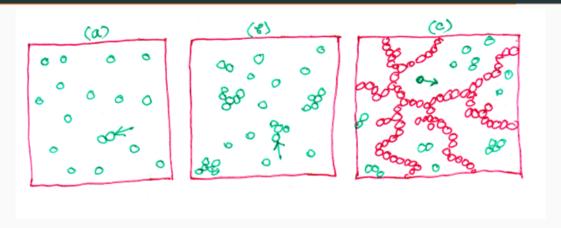
Чем отличается от DLA? В DLA частицы прилипают к одному кластеру, а в ССА кластеры могут слипаться между собой.

Результат: Кластеры получаются более разреженными, чем в DLA. Фрактальная размерность D меньше, чем в DLA, так как большие кластеры не могут проникать внутрь пустот.

ССА Образование гелей (Gelation transition)

Модель образования анизотропного агрегата: частица сначала подошла к затравке с неудачной стороны, а потом повернулась так, чтобы одна из ее осей симметрии смотрела на центр затравки.





(a) – исходный раствор, начальная стадия образования кластеров; (b) – развитая стадия образования кластеров: среди них уже встречаются большие, но бесконечного еще нет; (c) – гель: имеется бесконечный кластер из слипшихся частиц.

16/18

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.