

# **Проект Этап № 1**

**Неравновесная агрегация, фрактальные кластеры**

Хамдамова Айжана      Козлов Всеволод  
Алади Принц      Ощепков Дмитрий

# Содержание

<b>1</b>	<b>Цели и задачи</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Фрактальная размерность</b>	<b>6</b>
<b>3</b>	<b>Фрактальная размерность</b>	<b>7</b>
<b>4</b>	<b>Неравновесная агрегация и фракталы</b>	<b>8</b>
<b>5</b>	<b>Модель агрегации, ограниченной диффузией (DLA)</b>	<b>9</b>
<b>6</b>	<b>Фрактальная размерность</b>	<b>10</b>
<b>7</b>	<b>Описание моделей</b>	<b>11</b>
7.1	DLA . . . . .	11
7.2	Ballistic Aggregation . . . . .	13
7.3	Cluster-Cluster Aggregation . . . . .	14
<b>8</b>	<b>Выводы</b>	<b>16</b>
<b>9</b>	<b>Список литературы</b>	<b>17</b>

# Список иллюстраций

6.1	Множество Кантора, кривая Коха, треугольник Серпинского . . . .	10
7.1	Фрактальный агрегат . . . . .	12
7.2	Примеры анизотропных агрегатов для 3, 4, 5, и 6 осей симметрии	13
7.3	Образование гелей (Gelation transition) . . . . .	14
7.4	Стадии образования кластеров . . . . .	15

## **Список таблиц**

# 1 Цели и задачи

## **Цель работы**

Построить модели неравновесной агрегации и выявить их особенности.

## 2 Фрактальная размерность

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

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

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

### 3 Фрактальная размерность

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

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

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

## 4 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.



## 5 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.

## 6 Фрактальная размерность

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

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

Примеры фракталов:(рис. [6.1]). Множество Кантора:  $D \sim 0.631$ . Кривая Коха:  $D \sim 1.262$ . Треугольник Серпинского:  $D \sim 1.585$ .

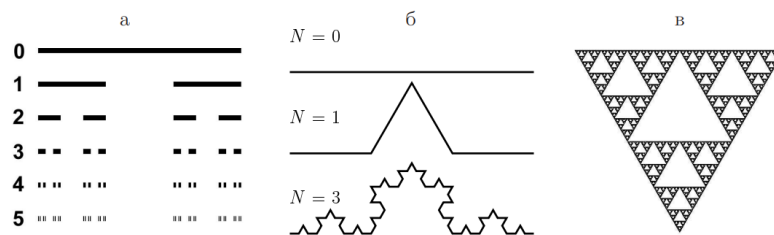


Рис. 2.1. Множество Кантора (а), кривая Коха (б), треугольник Серпинского (в)

Рис. 6.1: Множество Кантора, кривая Коха, треугольник Серпинского

## 7 Описание моделей

### 7.1 DLA

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. (рис. [7.1]).

#### 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). (рис. [7.2]).

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

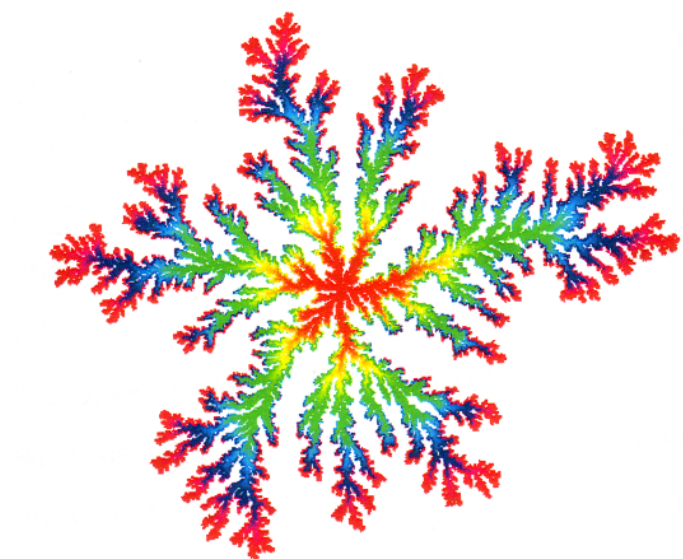


Рис. 7.1: Фрактальный агрегат

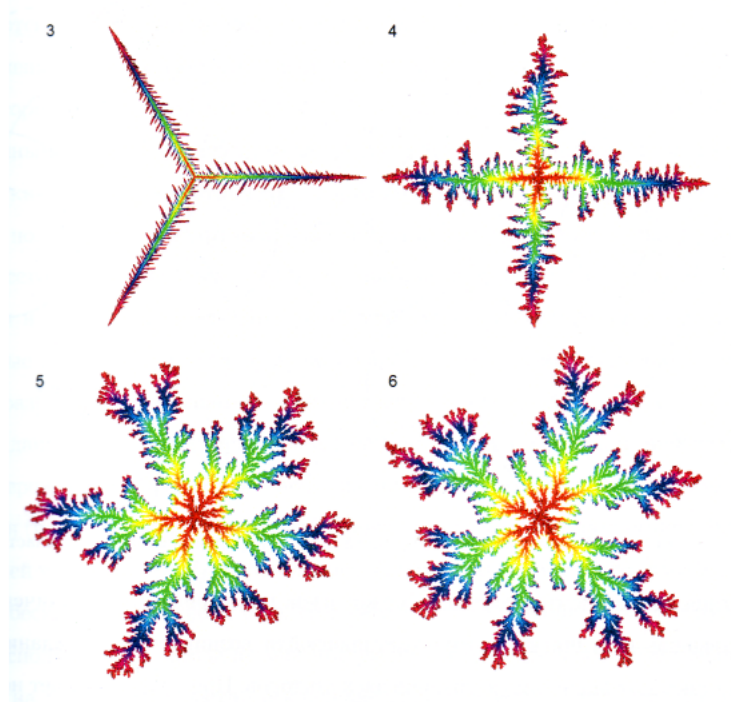


Рис. 7.2: Примеры анизотропных агрегатов для 3, 4, 5, и 6 осей симметрии

## 7.2 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.

## 7.3 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 CCA 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.

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.(рис. [7.3]).

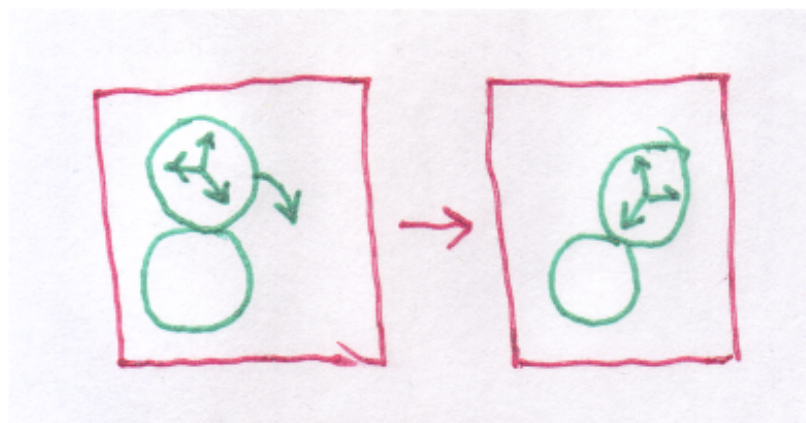


Рис. 7.3: Образование гелей (Gelation transition)

- (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.(рис. [7.4])

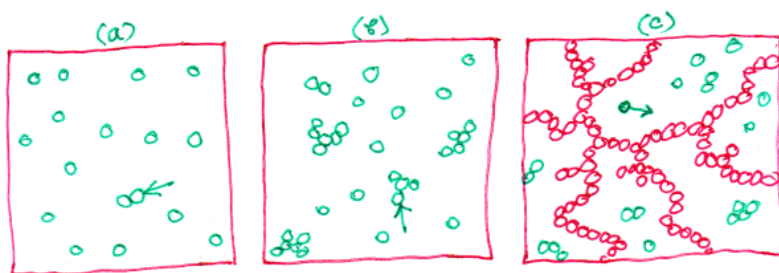


Рис. 7.4: Стадии образования кластеров

## **8 Выводы**

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



## 9 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.