Текст к презентации на тему «Неравновесная агрегация, фракталы»

Слайд 2:

Существуют разнообразные физические процессы, основная черта которых — неравновесная агрегация. Примеры: образование частиц сажи, рост осадков при электрическом осаждении и т. п.  
Во всех случаях происходит необратимое прилипание частиц к растущему кластеру из-за сильного смещения равновесия в сторону твердой фазы, и вырастают разветвленные агрегаты - фрактальные кластеры.

Слайд 3:

Перед вами фрактальный кластер, образованный из частиц льда.  
  
Три фактора, от которого будет зависеть форма модели:  
 1) положение центра агрегации;  
 2) начальное положение движущейся частицы;  
 3) алгоритм моделирования броуновского движения;

Слайд 4:

Фигура на плоскости или тело в пространстве имеют размерность. Определить ее можно разными способами. В случае, когда у фигуры есть выделенная центральная точка, можно построить много сфер различного радиуса с центром в этой точке. Для каждой сферы можно вычислить массу части фигуры, которая оказалась внутри этой сферы. В случае, когда масса пропорциональна радиусу сферы в некоторой степени (), показатель степени D называется размерностью тела. Это так называемый метод сфер или ящиков.

Другой способ определения размерности — метод подсчета клеток (box counting). Возьмем куб (шар) со стороной , который целиком заключает в себе объект. Разобьем куб на меньшие, со стороной (к примеру, хотя и не обязательно, = ). Пусть число непустых таких кубов (в которые попадает часть объекта) будет . Продолжим процедуру для и . Если оказывается, что , то размерность объекта равна D.

Слайд 5:

Структура полученных DLA-кластеров отражает структуру сетки (имеются выделенные направления). Чтобы получить более симметричные кластеры, можно отказаться от сетки. В этом случае рост происходит следующим образом: вначале помещаем в центр поля затравочную частицу, затем с круга некоторого радиуса выпускаем следующую, которая случайно блуждает. Если частицы сближаются на расстояние взаимодействия (например, их удвоенный радиус), они слипаются. После этого выпускаем новую частицу и т. д.

Слайд 6:

При диффузионно-ограниченной агрегации частица всегда прилипает к кластеру с вероятностью 1. Можно уменьшить вероятность прилипания. Такой процесс роста называется химически-ограниченной агрегацией. Он моделирует ситуацию, когда вероятность зависит от того, каким концом молекула повернута к другой. Это приведет к появлению более плотных агрегатов (увеличению размерности), потому что у частицы увеличится шанс проникать во внутренние области и заполнять пустоты. Размерность, однако, остается меньше размерности пространства, т. е. кластер остается фракталом. Физически прилипание частицы к агрегату — это возникновение химической связи. Очевидно, что связь тем прочнее, чем больше соседей у данной частицы. Поэтому вероятность прилипания должна увеличиваться при росте числа занятых соседних узлов. В этом случае процесс роста приводит к образованию более плотных кластеров (размерность увеличивается). Тем не менее, агрегат остается фрактальным, это следствие необратимости — возможно только прилипание частиц к растущему кластеру, но не их обратный переход в свободное состояние.

Слайд 7:

До сих пор мы рассматривали рост кластеров с точечной затравки. Однако, довольно часто встречаются ситуации, когда агрегаты растут на поверхности, например, при выпадении осадка на дне или стенках сосуда. Если новые частицы доставляются к растущему кластеру за счет диффузии, то имеем просто модель DLA с измененными начальными условиями. Другой случай — баллистическая агрегация, при которой частицы свободно падают по прямолинейным траекториям. Частица прилипает, когда оказывается рядом с занятым узлом.

Преимуществом данной модели является высокая скорость вычислений, так как направление выбирается один раз и частица агрегируется или выходит за границы радиуса уничтожения намного быстрее. В этом процессе получается более плотный агрегат (но не сплошной), однако его граница сильно изрезана и является фракталом. На рисунке 3 представлена структура, полученная с помощью модели Баллистической агрегации.

Слайд 8:

В случае роста агрегатов из первоначально однородной системы маловероятно, что возникнет только одна затравка. Скорее следует ожидать одновременного возникновения нескольких кластеров и их роста за счет поглощения мелких частиц, а также слипания друг с другом. Такой рост описывается моделью кластер–кластерной агрегации.

При этом коэффициент диффузии (величина случайного смещения) может зависеть от размера агрегата. Ясно, что в этом случае размерность образовавшегося кластера будет меньше, чем в модели DLA (большие кластеры не могут проникать внутрь пустот, поэтому агрегат получается более разреженным).

На рисунке 4 представлена структура, полученная с помощью модели Кластер–кластерной агрегации.