Отчет по групповому проекту. Этап 1.

Неравновесная агрегация, фракталы

Шалыгин Г. Э. Низамова А. А. Голощапова И. Б.
Серегин Д. А. Пиняева А. А

25 февраля 2023

Содержание

Список иллюстраций

Список таблиц

1 Цель работы

Цель:

- Изучить математические модели неравновесной агрегации.

Задачи:

- Рассмотреть формальную постановку задачи неравновесной агрегации.
- Изучить используемые модели.
- Познакомиться с фрактальной размерностью, вычисляемой с помощью моделей.

2 Теоретическое введение

2.1 Постановка задачи

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 (рост правильных ограненных кристаллов происходит в условиях, близких к равновесным, когда возможно как прилипание частиц, так и их обратный переход в раствор)

2.2 Случайные блуждания

2.2.1 Одномерные случайные блуждания

Рассмотрим простую модель — пусть частицы могут двигаться только вдоль прямой, делая шаги случайной длины. Примем также, что величина и направление каждого шага определяются независимо от положения частицы и от предыдущих шагов (модель «пьяного моряка»). Будем наблюдать за частицей через равные промежутки времени. Координата частицы вычисляется по рекуррентной формуле $x_k = x_{k-1} + \delta_k$, где δ_k — очередной шаг блуждания. При отсутствии силового поля смещение влево и вправо равновероятны. В общем случае вероятность того, что длина шага лежит в промежутке от #⊠\$ до $\delta + d\delta$, равна $dp = w(\delta) d\delta$.

Функция w называется плотностью вероятности для величины шага ⊠, который называют случайной величиной.

Подробнее в [1].

2.2.2 Многомерные случайные блуждания

Предоставим теперь нашим частицам возможность двигаться также по координате y — рассмотрим двумерные случайные блуждания (случай трех измерений получается аналогично). Можно независимо задавать смещение по вертикали δ_y равномерно распределенным таким же образом, как и смещение по горизонтали δ_x .

Функция распределения в двумерном случае представляется в виде произведения двух функций распределения по координатам x и y , так как x и y являются независимыми случайными величинами. Подробнее в [1].

2.3 Фрактальная размерность

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 ($m \sim R^D$), показатель степени D называется размерностью тела. Это так называемый метод сфер или ящиков. Для линий D = 1, у плоских фигур D = 2, у «обычных» тел D = 3. Однако, многие объекты в природе имеют размерность, выражающуюся дробным числом.

Такие тела, следуя Б. Мандельброту [9], называют фракталами (от латинского слова fractus — дробный). Фракталами являются также дендриты, вырастающие при электроосаждении металлов, кластеры, полученные при агрегации коллоидов; фрактальную структуру имеют ветви деревьев, кровеносная система и т.

п.

Еще один способ может применяться при наблюдении за процессом роста агрегата от центра. В этом случае число частиц в кластере $N \sim R_{ch}^{D}$. В качестве характерного радиуса Rch можно выбирать, например, максимальный радиус кластера R_{max},

Желающим более подробно познакомиться с фракталами рекомендуем книгу [2].

3 Математические модели

3.1 Агрегация, ограниченная диффузией

3.1.1 Сеточная модель.

Возьмем регулярную сетку на плоскости, например, квадратную. В центр поместим затравочную частицу. Затем с достаточно большого расстояния будем выпускать по одной новые частицы. Выпущенная частица совершает случайные блуждания по сетке, делая шаги в одном из четырех доступных направлений с равной вероятностью. Если частица оказывается по соседству с затравкой, она прилипает и остается в этом узле. Затем выпускаем следующую частицу, которая может прилипнуть к одному из занятых узлов. Шаг решетки в этой модели соответствует длине связи между частицами (расстоянию устойчивого равновесия для взаимодействия двух частиц).

Некоторые указания. Для ускорения работы программы разумно выпускать частицы с круга радиусом немного больше Rmax — текущего максимального радиуса агрегата.

Если частица уходит далеко, уничтожаем ее и выпускаем новую.

3.1.2 Бессеточная модель.

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.

Детальная информация в [3]

3.1.3 Химически-ограниченная агрегация

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.

3.1.4 Баллистическая агрегация

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, 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. В этом процессе получается более плотный агрегат (но не сплошной), однако его граница сильно изрезана и является фракталом.

3.1.5 Кластер–кластерная агрегация

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).

Подробнее с другими моделями можно познакомиться в [3].

4 Выводы

- Неравновесная агрегация наблюдается в физических, химических, биологических явлениях.
- Рассмотренные математические модели позволяют изучить эти явления.
- Выбор из нескольких моделей позволяет учесть особенности явлений.

Список литературы

1. Н.Ширяев А. Случайные блуждания и броуновское движение. Математический институт им. В. А. Стеклова РАН, 2007.
2. Е. Ф. Фракталы. 1-е изд. Мир, 1991. 524 с.
3. Witten T. A. Jr. S.L.M. Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon . Physical Review Letters, 1981.