

Моделирование и анализ фрактальных кластеров с различными свойствами

Косотухина Татьяна Алексеевна*Студент (бакалавр)*

Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия

E-mail: tkosot2001@gmail.com

Фрактальная геометрия является эффективным инструментом для описания сложных нерегулярных структур, встречающихся в химии, физике и материаловедении — пористых материалов, полимеров, коллоидных агрегатов. Ключевыми количественными характеристиками таких структур выступают фрактальная размерность, описывающая заполнение пространства, и химическая (массовая) размерность, характеризующая связь массы кластера с его линейными размерами [1, 2]. Для анализа фрактальных структур разработана программа на языке Python, которая позволяет моделировать фрактальные кластеры, вычислять их фрактальную размерность и проводить сравнение на основе экспериментальных данных. В основе модели лежит алгоритм диффузионно-лимитированной агрегации (DLA) Виттена–Сандера [3]. Программа реализует адаптивный круговой запуск частиц, что повышает вычислительную эффективность, и визуализирует процесс роста кластера в реальном времени. Фрактальная размерность рассчитывается методом box-counting, основанным на степенной зависимости $N(\varepsilon) \sim \varepsilon^{-d_f}$, где $N(\varepsilon)$ — число ячеек размера ε , покрывающих множество [1]. Проведена серия вычислительных экспериментов для кластеров размером от 500 до 8000 частиц. Для каждого кластера вычислена фрактальная размерность и зафиксирован максимальный радиус. Получены следующие значения фрактальной размерности: для 500 частиц $d_f = 1.197$, для 2000 частиц $d_f = 1.386$, для 4000 частиц $d_f = 1.440$, для 8000 частиц $d_f = 1.525$. Наблюдается монотонный рост размерности с увеличением числа частиц, причём скорость роста замедляется по мере приближения к теоретическому пределу 1.71 [3]. Высокие значения коэффициента детерминации ($R^2 \approx 0.998$) подтверждают фрактальную природу сгенерированных структур. Помимо фрактальной размерности, важную роль играет химическая размерность d_l , определяемая соотношением $M \sim R^{d_l}$, где M — масса кластера, R — характерный линейный размер [2]. Она непосредственно связана с такими практически важными свойствами, как удельная поверхность, пористость и доступность активных центров в катализаторах [4]. В данной работе химическая размерность исследована теоретически на основе литературных данных. Установлено, что для массовых фракталов, к которым относятся DLA-кластеры, химическая размерность совпадает с фрактальной [5]. Дополнительную информацию о структуре даёт минимальная размерность d_{\min} , описывающая связь евклидова расстояния r и длины кратчайшего пути l вдоль кластера: $l \sim r^{d_{\min}}$. С её помощью химическая размерность выражается как $d_l = d_f/d_{\min}$ [1]. Разработанная программа успешно моделирует DLA-кластеры и позволяет исследовать зависимость их фрактальной размерности от размера. В дальнейшем планируется добавить в программу практическое вычисление химической размерности на основе анализа кратчайших путей внутри кластера, что позволит получать более полную характеристику структуры и проводить сравнительный анализ с теоретическими предсказаниями.

Источники и литература

- 1) Иудин Д.И., Копосов Е.В. Фракталы: от простого к сложному / Нижегород. гос. архитектур.-строит. ун-т. — Н. Новгород: ННГАСУ, 2012. — 200 с.

- 2) Смирнов Б.М. Фрактальные кластеры // Успехи физических наук. — 1986. — Т. 149, вып. 2. — С. 177–219.
- 3) Witten T.A., Sander L.M. Diffusion-Limited Aggregation // Physical Review B. — 1983. — Vol. 27. — P. 5686–5697.
- 4) Федер Е. Фракталы: Пер. с англ. — М.: Мир, 1991. — 254 с.
- 5) Смирнов Б.М. Физика фрактальных кластеров. — М.: Наука, 1991. — 136 с.