

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ФРАКТАЛЬНЫХ КЛАСТЕРОВ С ИЗМЕНЕНИЕМ КОЭФФИЦИЕНТА ДЛИНЫ ПРОБЕГА

**Волков Е.Г.**

*Брестский государственный технический университет, г. Брест*

При чрезвычайно широком спектре объектов и явлений (на настоящий момент обнаружено более 10000), в которых присутствуют фрактальные кластеры, и, соответственно, широком разнообразии физических механизмов агрегации кластерных структур, количество имитационных математических моделей, позволяющих получить кластеры с заранее известной фрактальной размерностью, невелико.

Основных моделей, описанных в литературе и формирующих фрактальные кластеры, всего две:

- *ограниченно-диффузионная агрегация (ОДА)*. Алгоритм образования фрактальной структуры описывается следующим образом. По центру области моделирования помещается частица, которая служит зародышем фрактальной структуры. Затем, случайным образом, на некотором удалении помещается другая частица, которая начинает двигаться также случайным образом – ее путь соответствует броуновскому движению и выбирается методом Монте-Карло. Она продолжает свое движение до тех пор, пока не окажется в соседстве с первой частицей. Тогда она останавливается, ее расположение фиксируется, а в пространство запускается следующая частица. После многократного повторения описанного процесса образуется структура, где каждая частица после соответствующего блуждания нашла своего соседа [1]. Описанная агрегация приводит к структурам, наблюдающимся у аэрозольных агрегатов.

- *кластер-кластерная ассоциация (ККА)*. В начальный момент берется  $2^k$  частиц и образуется из них  $2^{k-1}$  кластеров. На каждом следующем этапе эти кластеры объединяются попарно в результате броуновского движения. На последнем этапе образуется один кластер, состоящий из  $2^k$  частиц. Конечный кластер весьма рыхлый, имеет много петель, его размерность сравнительно мала и в двумерном пространстве может не превышать 1.5 [1]. Описанная агрегация наблюдается при некоторых видах процессов напыления и осаждения пленок на поверхности подложки.

Остальные виды моделей по сути получены модификацией вышеописанных. Например, если в качестве зародыша кластера взять элементарный двумерный объект – прямую, то получим *перколяционный кластер* [2]. Если дополнительно ввести условие вероятности прилипания частиц друг к другу, то получим *вероятностную ОДА* [3] и *химически-ограниченную агрегацию типа кластер-кластер* и т.д.

Широко известной также является *баллистическая модель (БА)*, в которой траектория движения частицы определяется не броуновским движением, а прямолинейной траекторией. Результаты исследования фрактальной размерности монодисперсных и полидисперсных кластеров БА были описаны в [4].

В данной статье предлагается новый подход к моделированию, основанный на комбинации (объединении) двух механизмов агрегации: БА и ОДА, а именно – кластер начинает образовываться по одному механизму, а заканчивает – по другому. Для этого классический алгоритм дополняется коэффициентом длины пробега в части уравнений нахождения очередных координат частицы  $(x_2, y_2)$  при ее броуновском движении:

$$x_2 = K \psi \cos(\alpha) + x_1, \quad (1)$$

$$y_2 = K \psi \sin(\alpha) + y_1, \quad (2)$$

где  $\alpha$  – случайный угол от 0 до  $2\pi$ ,

$(x_1, y_1)$  – координаты предыдущего местоположения частицы,

$K$  – коэффициент длины пробега.

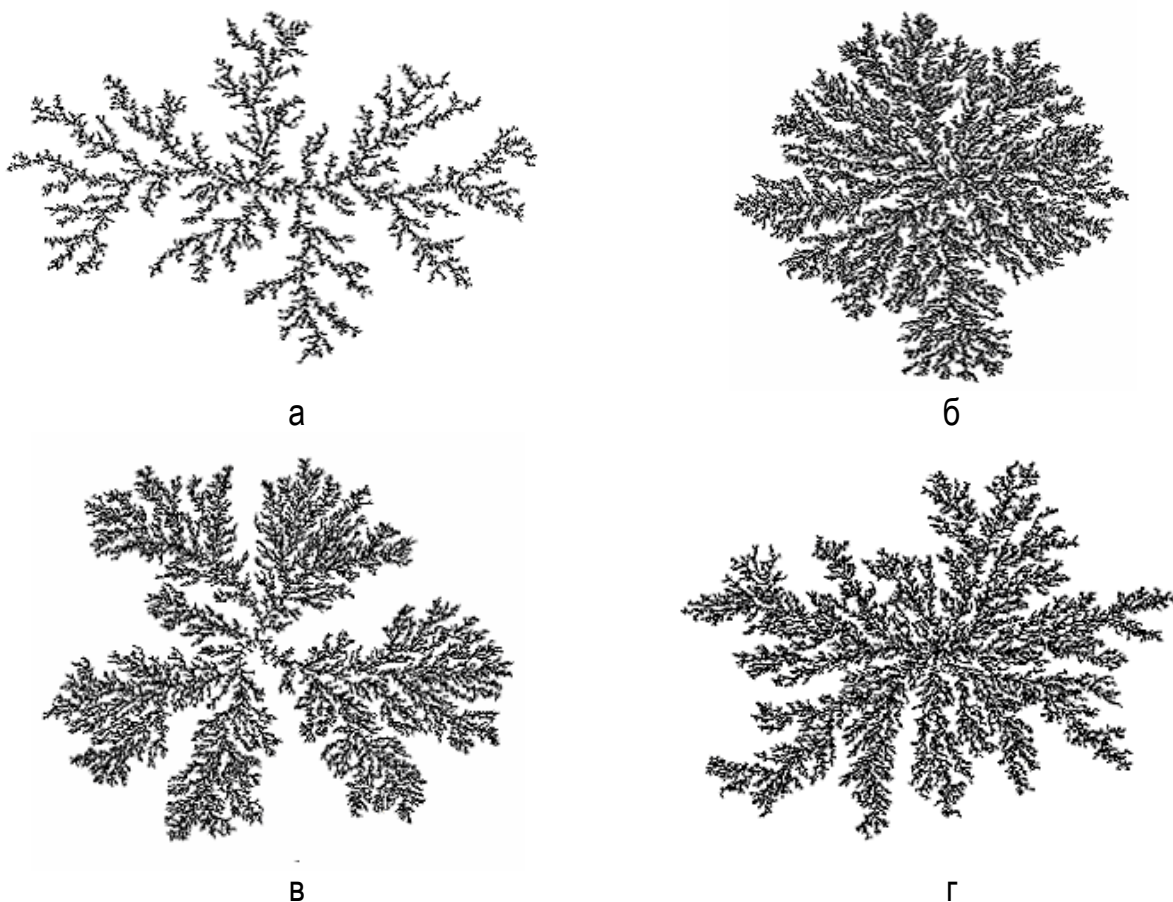
Для ограниченно-диффузионной агрегации коэффициент пробега должен быть равен значению одного-двух радиусов частиц  $r$ , для баллистической агрегации – должен превышать размер кластера. Данный коэффициент можно, например, представить линейной функцией номера  $N$  очередной присоединяемой частицы:

$$K = a\sqrt{N} + b\sqrt{r}, \quad (3)$$

где  $a, b$  – выбираемые параметры.

Примеры кластеров, полученных комбинированием механизмов агрегации при различных выбираемых параметрах уравнения (3), изображены на рисунке 1.

Функциональная зависимость коэффициента длины пробега может быть более сложной, либо задаваться внешними условиями моделируемого физического процесса. Так, она может соответствовать, например, изменению температуры в процессе осаждения тонкой поликристаллической пленки.



**Рис.1. Фрактальные кластеры из 20000 частиц с различным функциональным представлением коэффициентов длины пробега:**

- а)  $b = 2.0, a = 0.0$  - соответствует модели ОДА;  
 б)  $b = 1000.0, a = 0.0$  - соответствует модели БА;  
 в)  $b = 2.0, a = 0.01$ ; г)  $b = 1000.0, a = - 0.002$

### Литература

1. Смирнов Б.М. Физика фрактальных кластеров. – М.: Наука, 1991. – 134 с.
2. Кулак М.И. Фрактальная механика материалов. – Мн.: Выш. шк., 2002. – 304с.
3. Дереченник С.С., Раткевич А.В., Разумейчик В.С., Баранов В.В. Моделирование многослойной агрегации и вертикального роста кластеров при физическом осаждении металлической пленки // Вестник Полоцкого государственного университета. – Сер. Фундаментальные науки. – 2004. - №11. – С. 79-85.
4. Волков Е.Г. Фрактальная размерность бидисперсных кластеров // Сборник конкурсных и научных работ студентов и магистрантов. – Брест:УО “БрГТУ”, – 2006. – С. 97 – 99.