

КВАЗИФРАКТАЛЫ: НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРИ ОПИСАНИИ САМОПОДОБНЫХ КЛАСТЕРОВ

А. П. Алехин

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Институт физики, Казань, Россия
a.p.alekhin@gmail.com

PACS 05.45.Df, 61.43.Nv, 83.10.Rs

В работе предлагается метод параметризации фрактальных кластеров, который позволяет представить их как квазифракталы [5, 6]. Квазифракталы – это объекты, обладающие более медленным (логарифмическим) скейлингом по сравнению с обычными фракталами. Предложенный метод проверен на плоских кластерах, полученных в рамках модели Виттена-Сандера [7], в которой между частицами дополнительно были введены диполь-дипольный и диполь-кулоновский потенциалы взаимодействия. Полученные результаты позволяют утверждать, что эти кластеры могут быть интерпретированы и как фракталы, и как квазифракталы, однако во втором случае мы получили более явную связь между внешними условиями роста и геометрией кластеров (в терминах новых подгоночных параметров).

Ключевые слова: фракталы, квазифракталы, параметризация, компьютерное моделирование.

1. Введение

Термин фрактал (от лат. Fractus — дробный, дробленный) был введен Бенуа Б. Мандельбротом в 1975 году [1] для обозначения объектов, имеющих фрагментированную (негладкую) форму, но обладающих определенной формой порядка — самоподобием. Более строго, под фракталом понимается множество размерность Хаусдорфа–Безиковича которого строго больше его топологической размерности [4].

Все фракталы можно разбить на две большие группы: математические (кривая Коха, канторовская пыль и т.п.) и физические (береговые линии, горные ландшафты и т.п.) [2]. В отличие от математических, фракталы, встречающиеся в природе, обладают самоподобием в ограниченном диапазоне масштабов, а также существенную роль в их построении играет случайность. Из всего многообразия физических фракталов особое внимание уделяется изучению фрактальных кластеров, так как они встречаются во многих практически важных областях [2, 3].

В работе [8] было показано, что сумма вида

$$S_N(z) = c_0 \sum_{n=-N+1}^{N-1} b^n f(z\xi^n) \quad (1)$$

где b, ξ — масштабные параметры; c_0 — константа; $f(z)$ — функция, которая достаточно быстро стремится к нулю при z , стремящемся к нулю или бесконечности, удовлетворяет функциональному уравнению

$$S_N(z\xi) = \frac{1}{b} S_N(z) + b^{N-1} f(z\xi^N) - b^{-N} f(z\xi^{-N+1})$$

Это уравнение переходит в уравнение скейлинга если выражение $b^{N-1}f(z\xi^N) - b^{-N}f(z\xi^{-N+1}) \rightarrow 0$ при $N \rightarrow \infty$

$$S(\xi z) = \frac{1}{b}S(z) \quad (2)$$

Таким свойством самоподобия обладают многие фракталы, в том числе фрактальные кластеры. Из экспериментов и компьютерного моделирования процессов агрегации частиц [3] установлено, что число частиц выращенного кластера связано с его радиусом степенным законом

$$N(R) \propto \left(\frac{R}{R_0}\right)^D \quad (3)$$

где R — радиус кластера, R_0 — радиус частиц (мономеров), из которых он состоит.

Это соотношение носит название «число частиц — радиус». Радиус кластера (R) понимается как радиус наименьшей сферы, содержащей все его частицы. Действительно, рассмотрим два кластера радиусов R_1 и R_2 ($R_2 = \xi R_1$), полученных в одинаковых внешних условиях. Число частиц во втором кластере

$$N(R_2) = N(\xi R_1) = C \left(\frac{\xi R_1}{R_0}\right)^D = \xi^D C \left(\frac{R_1}{R_0}\right)^D = bN(R_1)$$

нами введено переобозначение $b = \xi^D$. Таким образом, $N(\xi R) = bN(R)$

В той же работе была предложена сумма другого вида

$$S_N(z) = c_0 \sum_{j=-N+1}^{N-1} [\varphi(j)]^\beta f([\varphi(j)]^\alpha) \quad (4)$$

где $\varphi(j)$ — некоторая функция, j — индекс ($j = -N + 1, -N + 2, \dots, N - 1$). Можно показать, что эта сумма, как и предыдущая, обладает свойством самоподобия. На качественном уровне отличие от (2) заключается в более «медленном» (логарифмическом) скейлинге. Объекты такого типа были названы квазифракталами [5, 6]

Смысл формулы (2) в том, что множество $S(z)$ представляется суммой подмножеств $[\varphi(j)]^\beta f([\varphi(j)]^\alpha)$, а $\varphi(j)$ — способ разбиения исходного множества. К сожалению, четкий критерий выбора $\varphi(j)$ пока не сформулирован. Разумность выбора определяется достижением желаемого результата.

Применительно к фрактальному кластеру необходимо каким-либо образом разбить его на конечное число слоев, каждый из которых будет содержать некоторое количество частиц. Сумма по всем слоям вновь даст исходный кластер.

В [6] нами было предложено три способа разбиения, основанных на модели «координационных сфер». Координационная сфера представляет собой тонкий сферический слой (j — индекс слоя) некоторого радиуса $r(j)$, содержащий небольшое число частиц кластера $n(j)$. Такой подход позволил отождествить $\varphi(j)$ с $r(j)$, $n(j)$ с $[\varphi(j)]^\beta f([\varphi(j)]^\alpha)$. В [6] мы не рассматривали связь между внешними условиями роста кластеров и их геометрией в терминах новых подгоночных параметров.

Так как четкого критерия выбора параметризации нет, то мы попытались предложить подход, который показался нам наиболее «естественным», основываясь на итерационности алгоритмов построения многих фракталов. Для этого нам требуется выбрать затравочный элемент (предфрактал нулевого поколения $g = 0$) и определить способ построения $g + 1$ поколения, если известно поколение g .

Наша конечная цель состоит в том, чтобы предложить процедуру, позволяющую различать кластеры, выращенные в различных внешних условиях, что является критерием

адекватности выбора метода параметризации. В этом смысле предлагаемый подход оказался более эффективным по сравнению с фрактальной размерностью, определяемой из соотношения «число частиц — радиус» и размерностями мультифрактального спектра.

2. Описание метода параметризации кластеров.

Рассмотрим построение фрактального дерева. В качестве предфрактала нулевого поколения воспользуемся «вилкой» (рис. 1 а), далее при переходе от нулевого поколения к первому (рис. 1 б) на концах появляются свои «вилки», длина звеньев которых уменьшается в $\xi = 0.6$ раз. Отметим, что при построении фрактального дерева переход от предыдущего поколения к последующему сопровождается присоединением к существующей структуре новых элементов. В случае канторовского и подобных ему множеств, предыдущая структура полностью заменяется на новую, подобную исходной.

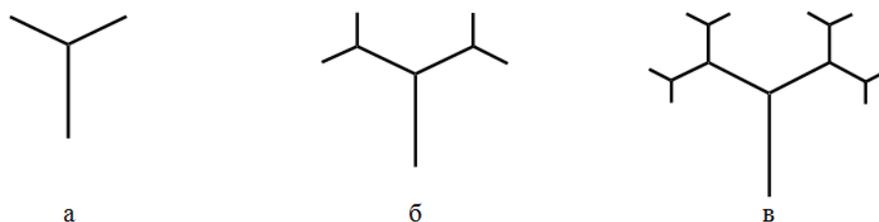


Рис. 1. Построение фрактального дерева. Последовательно представлено три поколения предфрактала, начиная с нулевого (затравочного). При каждом переходе от предыдущего поколения к последующему на концах ветвей дерева появляются новые ветви, длина которых в $\xi = 0.6$ раз меньше предыдущих

Теперь построим кластерный аналог предфрактала, приведенного на рис. 1. Выберем предфрактал нулевого поколения (рис. 2 а) в виде группы из трех мономеров. Присоединение к ним четырех приводит к увеличению поколения кластера на единицу (рис. 2 б). Второе поколение получается присоединением еще восьми мономеров (рис. 2 в) и т.д. Получается, что каждая частица как бы принадлежит определенному поколению кластера. Количество частиц поколения g определим как $n(g)$. Таким образом, если новая частица присоединяется к частице кластера относящейся к поколению g , то она попадает в группу частиц поколения $g+1$. Отсюда и следует метод параметризации фрактальных кластеров. Поколение всего кластера определяется частицей с максимально возможным значением g

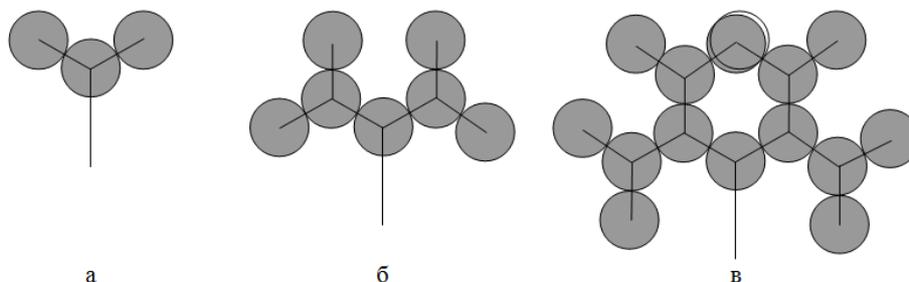


Рис. 2. Построение кластера соответствующего фрактальному дереву, изображенному на рис. 1. Уже во втором поколении появляется самопересечение мономеров

Можно предложить другой способ построения поколения $g + 1$, считая, что начало новому поколению дает ветвление структуры, то есть присоединение сразу двух частиц. Как мы указывали выше, таких способов разбиения можно придумать сколь угодно много, критерием их адекватности является достижение желаемой цели

В процессе построения кластерного аналога фрактального дерева, в определенный момент, круги (мономеры) начинают накладываться друг на друга, и возникают самопересечения. Для выбранного примера это происходит уже во втором поколении. В исходном фрактальном дереве (рис. 1) такого нет, потому что размер ветвей при построении следующего поколения уменьшается в ξ раз по сравнению с предыдущим. Возможно несколько способов, чтобы избежать самопересечений: а) разрешить мономерам присоединяться под любым углом; б) не присоединять частицу, если это приводит к пересечению с уже имеющимися. В результате такой кластер будет в каком-то смысле аналогом математического предфрактала.

С этой точки зрения, кластеры, которые образуются в процессе агрегации частиц в парах металлов, коллоидных растворах и т.п. растут во всех своих поколениях одновременно! Никогда заранее нельзя указать сколько новых частиц и в какой момент присоединятся к определенной выбранной частице. Мы применили наш метод параметризации к плоским кластерам, образующимся в модифицированной модели Виттена—Сандера [7].

С помощью представленного выше метода явным образом получаются зависимости $n(g)$ — количество частиц, которые прибавляются к кластеру при переходе от поколения g к $g + 1$, $r(g)$ — среднее расстояние, на котором расположены частицы $n(g)$ от затравочной частицы кластера, $N(g)$ — полное число частиц кластера поколения g , $R(g)$ — радиус минимальной сферы, заключающей в себе весь кластер.

3. Описание метода моделирования кластеров

Для «выращивания» кластеров использовалась модифицированная модель Виттена—Сандера, описание исходной модели и внесенных в нее изменений приведено ниже.

На горизонтальной плоскости выбирается квадрат со стороной $L = 50$ (в единицах размера частиц). В центр этого квадрата помещается затравочная частица, жестко связанная с подложкой. С ней совмещается начало координат. В этот момент кластер состоит всего из одной связанной частицы — затравочной. Очередная свободная частица начинает свое движение из точки, находящейся на расстоянии r_{in} от затравки. В процессе случайного блуждания она либо уходит за границы области и выбывает из системы, либо сталкивается с какой-нибудь частицей кластера и прилипает к ней. В результате прилипания свободная частица превращается в связанную, и кластер вырастает на один мономер. Затем свое движение начинает новая свободная частица и т.д. При каждом присоединении частицы к кластеру происходит переопределение r_c — радиуса кластера (это радиус минимальной окружности, содержащей в себе все частицы кластера) и $r_{in} = r_c + \sqrt{r_c} + 10$. Размер всех частиц $\sigma = 2R_0$ одинаковый и равен 1 (4 нм.), то есть все длины в системе заданы в единицах размера мономеров. Движение частиц моделируется методом Монте-Карло. На каждом шаге случайным образом выбирается направление движения частицы, и выполняется перемещение на $h = 0.03$. Движение частицы продолжается до тех пор, пока она не столкнется с какой-либо частицей, принадлежащей кластеру, или не выйдет за границы области. Так выглядит реализация исходной модели Виттена—Сандера.

Использованная в работе модель имеет ряд отличий от исходной, которые состоят в следующем: а) граничные условия устанавливаются периодическими; б) новые частицы появляются за пределами окружности r_{in} ; в) между частицами вводятся потенциалы взаимодействия. Затравочная частица теперь обладает фиксированным электрическим зарядом

$q = 1$ (в единицах заряда электрона), а свободные – фиксированным дипольным моментом p . При переходе частицы из свободного состояния в связанное ее дипольный момент сохраняется.

Таким образом, вводятся дополнительные потенциалы взаимодействия: диполь-кулоновское (5) и диполь-дипольное (6), а у частиц появляется дополнительная степень свободы – направление в плоскости.

$$U_{qp} = q_1 \frac{\mathbf{r}_{12} \mathbf{p}_2}{r_{12}^3} \quad (5)$$

$$U_{pp} = \frac{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2}{r_{12}^3} - 3 \frac{(\mathbf{r}_{12} \mathbf{p}_1)(\mathbf{r}_{12} \mathbf{p}_2)}{r_{12}^5} \quad (6)$$

Как и ранее, на каждом шаге случайным образом выбирается направление движения, но вероятность перемещения в этом направлении определяется разностью энергий в них. Если перемещение в заданном направлении сопровождается уменьшением потенциальной энергии взаимодействия частицы со всеми остальными частицами системы, то оно принимается, иначе оно принимается с вероятностью $P = \exp \{-(W_2 - W_1)/kT\}$, где W_1, W_2 – энергии в старом и новом положениях, k – постоянная Больцмана (в выбранной нами системе единиц $k = 1$), T – температура системы (в единицах энергии), которая фиксирована во время роста кластера. В рамках этой модели были выращены кластеры с числом частиц равным 100 при различных значениях дипольного момента свободных частиц и температуры системы, по 20 кластеров для трех температур $T = (2^6, 2^{-6}, 2^{-18}) \times 10^{-22}$ Дж при 5 значениях дипольного момента $p = (2^{-2}, 2^{-4}, 2^{-6}, 2^{-8}, 2^{-10})$ Д. Значения дипольного момента свободных частиц выбраны так, чтобы радиус круга, в котором потенциалы взаимодействия данного диполя с ближайшим и с центральным зарядом были примерно равны, менялся от 1 (размер частицы) до 16 (порядка размера кластера). Температуры соответствуют энергии взаимодействия частиц при величинах дипольного момента $p = (2^0, 2^{-6}, 2^{-12})$.

4. Результаты и их обсуждение.

В результате моделирования были получены кластеры, подобные тем, которые приведены ниже на рис. 3. Анализ полученных структур проводился тремя методами: а) вычисление фрактальной размерности с помощью соотношения (3), б) получение спектра фрактальных размерностей, в) параметризация (3) и анализ полученных соотношений.

Вычисление спектра фрактальных размерностей производилось следующим образом. Вся область разбивалась на $m^2 = 40 \times 40$ секторов. Для каждого из них вычислялась доля содержащегося в нем множества $p_i = n_i/N$, где n_i – число частиц, содержащихся в секторе, N – полное число частиц кластера, $i = 1, 2, \dots, m^2$. После чего находится мера множества $M_q = \sum_i p_i^q$, пользуясь которой, мы получаем обобщенные размерности Реньи [9].

$$D_q = \frac{\tau(q)}{q - 1},$$

где функция $\tau(q)$ имеет вид

$$\tau(q) = - \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\ln M_d(q, m)}{\ln m}.$$

Функция мультифрактального спектра получается с помощью преобразования Лежандра [9]

$$\alpha = \frac{d\tau}{dq}, \quad f(\alpha) = q \frac{d\tau}{dq} - \tau.$$

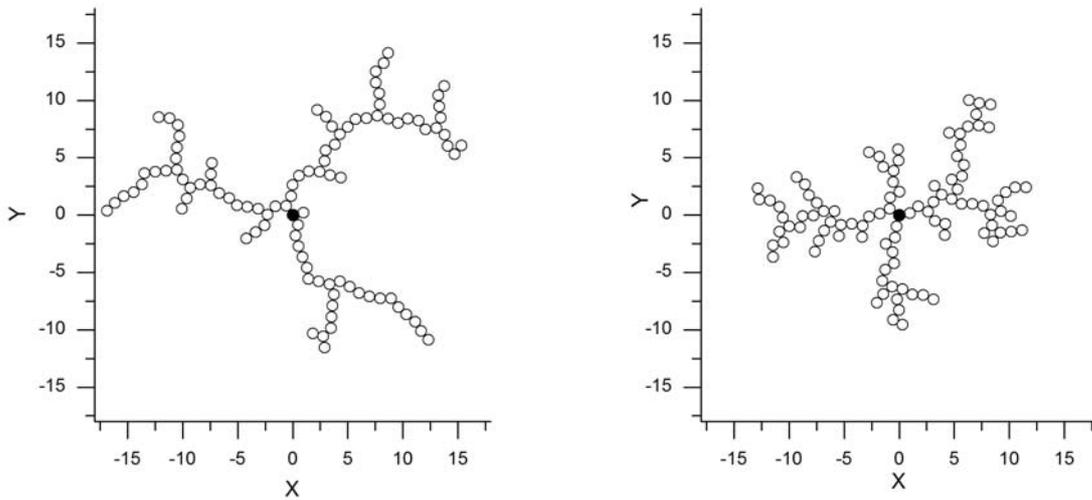


Рис. 3. Кластеры, полученные в результате моделирования при одинаковой температуре $T=2^{-10}$, но различной величине дипольного момента частиц а) $p = 2^{-2}$; б) $p = 2^{-10}$. Уменьшение величины дипольного момента приводит к росту ветвистости кластера и уменьшению его размера. Затравочная частица имеет координаты $(0; 0)$ и выделена темным цветом

Максимальное значение функции $f(\alpha_0) = D_0$. Фактически, величина $f(\alpha(q))$ равна фрактальной размерности некоего однородного фрактального подмножества из исходного множества, которое дает основной вклад в меру при заданной величине q .

Значения размерности D_0 , полученные из спектров, хорошо согласуются с теми, которые получены с помощью соотношения (3). Небольшое отклонение, вероятно, связано с тем, что анализировались одиночные, а не система связанных кластеров (рис. 4). После параметризации соотношения (3) анализ полученных зависимостей дал следующие выражения $n(g) = A_1 g^\lambda$, $r(g) = B_0 + B_1 g$. Для фрактального самоподобия характерно очень быстрое изменение размеров объекта при росте величины его поколения. В свою очередь, для квазифракталов свойственно гораздо более медленный (степенной) рост размеров объекта с ростом номера его поколения. Мы полагаем, что второй сценарий более правдоподобен для самоподобных кластеров. На примере проанализированных в работе кластеров мы видим, что в модифицированной модели Виттена—Сандера получаются кластеры, которые могут быть интерпретированы и как фракталы и как квазифракталы, однако, во втором случае информации о внешних условиях роста удается получить больше.

Для всех приведенных кластеров зависимость $R(g_{\max})$ линейная, следовательно, возможен обратный переход к соотношению (3). В этом случае должно быть совпадение между показателем степени зависимости $N(g_{\max})$ и фрактальной размерностью, которое в пределах погрешности, действительно имеет место. Изменение подгоночных параметров при изменении температуры системы и дипольного момента свободных частиц приведено на рис. 5. Показатель степени в выражении для $n(g)$ уменьшается с ростом дипольного момента, что обусловлено увеличением градиента энергии взаимодействия свободной частицы и кластера. Действительно, при увеличении дипольного момента свободной частицы растет сила взаимодействия частицы с кластером. Это приводит к уменьшению вероятности движения частиц от кластера, их траектории становятся менее извилистыми.

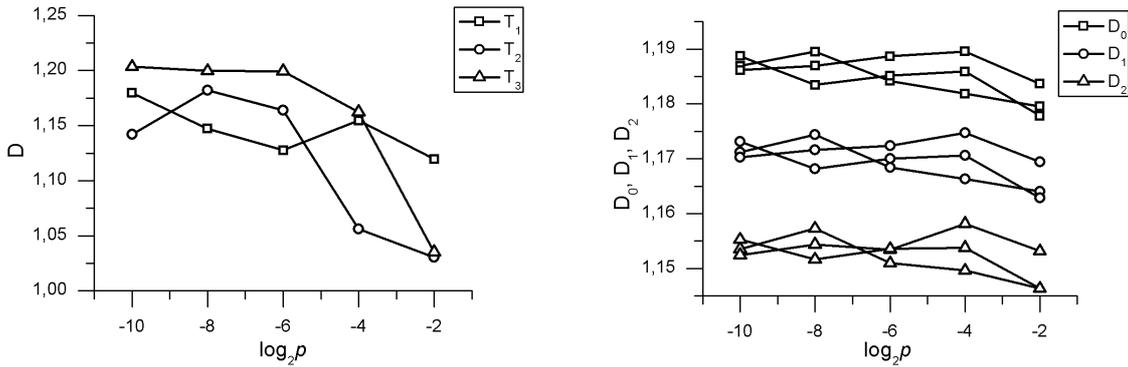


РИС. 4. На рисунке приведены значения размерностей кластеров, полученные с помощью соотношения «число частиц-радиус» (слева) и из спектров фрактальной размерности (справа). Тенденция изменения фрактальной размерности при изменении дипольного момента свободных частиц нечеткая из-за погрешности определения самой размерности, поэтому ничего конкретного о том, что происходит в системе сказать нельзя

Частицам легче присоединиться к периферии, чем проникнуть вглубь кластера. Это приводит к уменьшению количества частиц, присоединяемых к конкретной выбранной частице кластера.

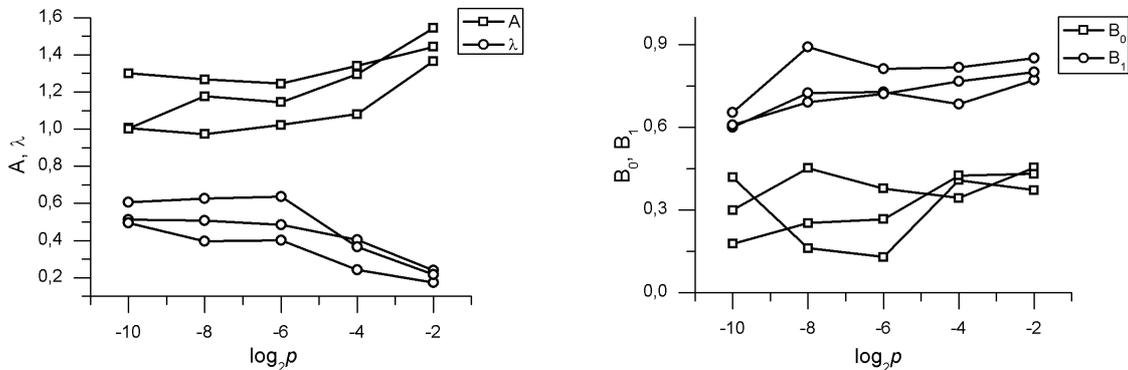


РИС. 5. Динамика изменения подгоночных параметров для выражений, полученных в результате параметризации соотношения (1). В результате получились следующие выражения $n(g) = A_1 g^\lambda$ $r(g) = B_0 + B_1 g$. а) показатель степени λ и коэффициент при степенной функции A , б) коэффициент B_1 и свободный член B_0 . Кривые даны для трех температур. По оси Ох отложен логарифм по основанию 2 обезразмеренного дипольного момента свободных частиц

Размерности, полученные двумя различными методами: с помощью соотношения «число частиц — радиус» и спектра фрактальных размерностей близки друг к другу (относительное отклонение составляет около 10 %). Динамика изменения в обоих случаях довольно слабая, поэтому, глядя на эти кривые, нельзя точно сказать, что происходит в исследуемой системе.

5. Заключение

Основные выводы, которые можно сделать по результатам работы:

1. Предложенный метод параметризации хотя и является произвольным, однако выбор оказался оправданным. Представление кластера в виде квазифрактального объекта позволило явственно представить влияние внешних условий роста на геометрию полученного кластера.

2. Новое представление оказалось более чувствительным к изменениям внешних условий роста кластеров. По динамике изменения фрактальной размерности сложно сказать что-то определенное об изменениях в системе, напротив, наше представление четко указывает на изменения и их характер.

Автор надеется, что в ближайшем будущем ему удастся применить предложенный метод для большего числа фрактальных кластеров различной природы и более четко установить преимущества и слабые стороны метода по отношению к существующим подходам.

Благодарности

Автор выражает благодарность профессору Р.Р. Нигматуллину за обсуждение результатов и критические замечания. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства Образования и Науки Российской Федерации в рамках гранта №2.1.1/2474.

Литература

- [1] Мандельброт Б.Б. Фрактальная геометрия природы. — М.: Институт компьютерных исследований, 2002. — 656 с.
- [2] Потапов А.А. Фракталы в радиофизике и радиолокации. Топология выборки. — М.: Университетская книга, 2005. — 847 с.
- [3] Смирнов Б.М. Физика фрактальных кластеров. — М.: Наука, 1991. — 136 с.
- [4] Федер Е. Фракталы. — М.: Мир, 1991. — 254 с.
- [5] Nigmatullin R.R., Alekhin A.P. Realization of the Riemann-Liouville integral on new self-similar objects// In Books of abstracts "Fifth EUROMECH Nonlinear Dynamics Conference", Eindhoven University of Technology, Netherlands, 2005. — P. 175-176.
- [6] Nigmatullin R.R., Alekhin A.P. Quasi-Fractals: new possibilities in description of disordered media // Advances in Fractional Calculus. — 2007. — P. 377-388.
- [7] Witten T.A. Sander L.M. Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon // Phys. Rev. Lett. — 1981. — V.47. — P. 1400-1403.
- [8] Nigmatullin R.R., Le Mehaute A. Is there a geometrical/physical meaning of the fractional integral with complex exponent? // J. Non-Cryst. Sol. — 2005. — V.351. — P. 2888-2899.
- [9] Божокин С.В. Паршин Д.А. Фракталы и мультифракталы. — Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. — 128 с.