

# КОРРЕКТНОСТЬ ВЫЧИСЛЕНИЯ ФРАКТАЛЬНОЙ РАЗМЕРНОСТИ ТРАЕКТОРИИ КОЛЛОИДНОЙ ЧАСТИЦЫ В ДИСПЕРСИОННОЙ СРЕДЕ

*Косс К.Г.*,<sup>\*1,2</sup> *Лисина И.И.*,<sup>1,2</sup> *Петров О.Ф.*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*ОИВТ РАН, Москва, Россия,* <sup>2</sup>*МФТИ, Долгопрудный, Россия*

*\*xeniya.koss@gmail.com*

В последнее время все большее значение приобретают задачи, рассматривающие динамику так называемых активных броуновских, или самодвижущихся, частиц. Эти частицы обладают уникальным свойством преобразовывать внешнюю энергию в кинетическую энергию своего движения [1]. Природа этих частиц может быть различной: коллоидные частицы в дисперсионных средах, простейшие организмы и бактерии, химически активированные частицы и даже механические объекты [1]. Активные броуновские частицы и структуры из них, благодаря своей способности к трансформации энергии, обладают рядом исключительных свойств и особенностей, представляющих интерес как для фундаментальной науки, так и для практических задач - в биологии, медицине, технике [1].

Энтропия и другие инструменты, используемые в рамках физики диссипативных систем, являются универсальными, и их можно успешно применять для изучения эволюции активных броуновских систем. Данная работа посвящена исследованию подхода, предложенного в [2], - вычисление средней динамической энтропии первого пересечения (mean first-passage time, MFPT). При таком подходе можно описать движение каждой отдельной (активной или пассивной) броуновской частицы с помощью нескольких параметров (таких, как фрактальная размерность ее траектории и размер области локализации), сравнить различные режимы движения между собой.

Показано [3, 4], что изменение фрактальной размерности траектории активной частицы и области её локализации хорошо коррелирует с изменением фазового состояния системы. Однако остаётся открытым вопрос чувствительности этих величин к параметрам экспериментальной системы и регистрирующего оборудования. В частности, энтропия Колмогорова-Синая, простым приближением которой является динамическая энтропия первого пересечения, отображает внутреннюю скорость производства информации исследуемым объектом (среднее удельное количество информации, передаваемое данным стационарным случайным процессом - динамической системой, источником). Однако, если частота фиксации этой информации (например, частота съёмки положения коллоидной частицы видеокамерой) будет слишком низкой, полученные значения энтропии (а, следовательно, и

все её производные параметры) будут некорректными.

Было проведено численное моделирование динамики одиночной коллоидной частицы в рамках различных моделей движения. Рассмотрено броуновское, ланжевеновское, активное движение коллоидной частицы. Варьировались собственная скорость частицы, коэффициент вращательной диффузии, соотношение коэффициента трения и шага по времени (“частоты съёмки”); моделирование проводилось для частицы на неограниченной плоскости и в параболической ловушке. Для каждого исследованного случая получены зависимости среднеквадратичного смещения от времени, динамической энтропии первого пересечения от параметра огрубления. Исследованы статистические распределения фрактальной размерности траекторий частицы и её области локализации в зависимости от длины траектории частицы. Полученные результаты позволят сформулировать критерии корректного выбора параметров экспериментальной регистрации траектории активной частицы.

- 
1. Bechinger, C., Di Leonardo, D., Löwen, H., Reichhardt, C., Volpe, G., Volpe, G. Active particles in complex and crowded environments. // *Rev. Mod. Phys.* 2016, V. 88. P. 045006.
  2. Allegrini, P., Douglas, J.F., Glotzer, S.C. Dynamic entropy as a measure of caging and persistent particle motion in supercooled liquids. // *PRE* 1999. V. 60. P. 5714.
  3. Koss, X.G., Lisina, I.I, Statsenko, K.B, Petrov, O.F. Localization area, fractal dimension and phase transitions in dissipative two-dimensional Yukawa systems: Numerical simulation. // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2018, V. 946, P. 012145.
  4. Koss X.G., Kononov E.A., Lisina I.I., Vasiliev M.M., Petrov O.F. // *Molecules.* 2022. V. 27. P. 1614.