

Санкт-Петербургский государственный университет

Математическое обеспечение и администрирование информационных
систем

Технология программирования

Коротченко Евгений Владимирович

Компьютерное моделирование
диффузионных процессов в прикладных
задачах

Выпускная квалификационная работа

Научный руководитель:
к.ф.-м.н., доцент кафедры информатики Соловьев И. П.

Рецензент:
к.ф.-м.н., доцент кафедры информатики Ампилова Н. Б.

Санкт-Петербург
2017

SAINT-PETERSBURG STATE UNIVERSITY

Software and Administration of Information Systems
Technology of Programming

Korotchenko Evgeny

Computer modeling of diffusion processes in applications

Graduation Project

Scientific supervisor:
Assoc. professor Soloviev I.P.

Reviewer:
Assoc. professor Ampilova T.B.

Saint-Petersburg
2017

Оглавление

Введение	4
0.1. Цель и задачи	5
1. Обзор предметной области	7
1.1. DLA (Diffusion-limited aggregation)	7
1.1.1. Алгоритм	7
1.2. DLCA (Diffusion-limited cluster-cluster aggregation)	7
1.2.1. Алгоритм	8
1.3. Off-lattice DLA-model	8
1.3.1. Алгоритм	9
1.4. Методы улучшения работы DLA алгоритма	9
1.5. Фрактальные кластеры	10
1.6. Вычисление фрактальных размерностей	11
1.6.1. Емкостная размерность	11
1.6.2. "Размерность массы"	11
1.6.3. Возможности применения	13
2. Реализация	14
2.1. DLA-модель (Виттен-Сандер)	14
2.2. Off-Lattice DLA	15
2.3. DLCA-модель	15
2.4. Параметры среды	17
2.5. Емкостная размерность	18
2.6. "Размерность массы"	18
3. Результаты	19
3.1. Диффузионные модели	19
3.2. Фрактальные размерности	22
3.3. Функциональные характеристики	23
Заключение	26
Список литературы	27

Введение

Одним из определяющих физико-химических принципов взаимодействия веществ является диффузия. Модели, возникшие при исследовании этого принципа взаимодействия, называют диффузионными. Математическая модель диффузионного процесса представляет собой точное описание метода построения определенной структуры посредством соединения (слипания) частиц при условии диффузионного характера их движения. Такая структура называется фрактальным кластером. По характеру процесса модели делятся на типы “кластер-частица” и “кластер-кластер”. К первому типу относится модель Виттена-Сандера (Diffusion-limited aggregation — DLA) — самая известная и одна из самых первых диффузионных моделей. В ней фрактальный кластер получается посредством последовательной агрегации блуждающих частиц к ядру — фиксированной частице. Модель DLCA (Diffusion-limited cluster-cluster aggregation) относится к классу CCA (cluster-cluster aggregation) и описывает рост фрактального агрегата, получаемого при слипании кластеров малых размеров, совершающих броуновское движение. Полученные кластеры обладают фрактальными свойствами, которыми обладают многие процессы и явления в природе, также имеющие фрактальную структуру. Примерами могут служить физические явления — релаксация паров металлов, образование гелей в растворах, коагуляция частиц в дымах, геометрические фрактальные структуры, полученные в результате диэлектрического пробоя [5]; химические — коагуляция аэрозолей и коллоидов [12]; а также процессы в биологии и медицине — рост колоний бактерий [14], образование раковых опухолей [16], структура нейронов мозга [3].

При разной природе этих явлений геометрическая фрактальная структура получаемых образцов позволяет анализировать подобные системы, опираясь на общие для них модели. К фрактальным свойствам относятся дробная размерность, которая содержится в определении фрактальной структуры, самоподобие и способность сохранять структуру при масштабировании. Значительный интерес в исследовании диффу-

зионных процессов представляет возможность математического моделирования важных свойств, которые могут быть подтверждены опытным путём [5]. Диффузионные модели изучают, начиная с 70-х годов XX века. Исследовательский интерес к ним не ослабевает и по сей день, предлагаются различные модификации известных моделей.

Существует множество реализаций DLA-модели, ввиду простоты алгоритма ее построения, ее применимости к широкому классу реальных процессов, красоте получаемых изображений. Приложения, позволяющие моделировать рост DLA-кластеров, реализованы в большинстве своём как апплеты на языке java (java-applets) (например, используемый для создания диффузионных моделей в [3] DLA Java Applet (Anna Umansky, Sergey Buldyrev)). Так как современные браузеры больше не поддерживают выполнение java-апплетов, подобные реализации можно назвать устаревшими. Кроме того в этих приложениях не реализованы методы оценки фрактальных размерностей; вместо этого они реализуются в качестве отдельных функций (например, в пакете Matlab), что не является удобным при моделировании и изучении диффузионных процессов.

0.1. Цель и задачи

Целью выпускной квалификационной работы является создание инструментального программного средства моделирования диффузии на основе математических моделей типа DLA и CCA для анализа реальных процессов различной природы.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

- анализ предметной области посредством изучения литературы по теме исследования;
- реализация базовых моделей диффузионных процессов (Виттена-Сандера, DLCA);

- реализация различных вариаций базовых моделей с параметрами среды;
- получение численных характеристик изображений, рассматриваемых как фазовые портреты изучаемой системы, на основе определения фрактальных размерностей.

1. Обзор предметной области

Существуют несколько основных диффузионных моделей. Одной из них, с которой началось исследование роста агрегатов, является модель агрегации, ограниченной диффузией (diffusion-limited aggregation, DLA). Позже были предложены и другие модели, такие как diffusion-limited cluster-cluster aggregation (DLCA) и её модификации.

1.1. DLA (Diffusion-limited aggregation)

Модель впервые была представлена Т. Виттенем и Л. Сандером в 1981 году [19]. Название Diffusion-limited aggregation следовало из того, что в алгоритме не учитывались взаимодействия между частицами и предполагалось, что диффузия определяется их движением. Модель DLA описывает рост группы частиц, называемой агрегатом, при броуновском блуждании этих частиц по линиям координатной сетки. Предполагается, что частицы присоединяются к агрегату последовательно.

1.1.1. Алгоритм

В простейшей постановке в двумерном пространстве модель может быть описана следующим образом. Процесс построения агрегата начинается с единственной частицы, расположенной в середине прямоугольной сетки. Случайным образом вычисляется первоначальное положение следующей частицы. Эта частица начинает блуждания по линиям сетки, при этом на каждом шаге она с вероятностью $\frac{1}{4}$ может переместиться на клетку вниз, вверх, вправо или влево. Блуждание продолжается до тех пор, пока частица не окажется соседней с какой-либо из частиц, входящих в агрегат. Тогда она останавливается и закрепляется на своей позиции. Затем происходит бросание новой частицы.

1.2. DLCA (Diffusion-limited cluster-cluster aggregation)

В оригинальной модели Виттена-Сандера рост кластера начинался с единственной зафиксированной клетки, и только одной подвижной

(блуждающей) частице разрешалось находиться в окрестности растущего кластера в каждый момент времени. Подобные особенности не соответствовали поведению многих реальных коллоидных систем, таких как дымы и аэрозоли [12, 15], в которых множество диффундирующих частиц, способных слипаться друг с другом, рассеяно в дисперсной среде.

Поэтому было представлено расширение модели Виттена-Сандера, названное моделью агрегации типа кластер-кластер, ограниченной диффузией (diffusion limited cluster-cluster aggregation — DLCA), в которой механизм роста осуществлялся за счет склеивания блуждающих кластеров [13, 15].

1.2.1. Алгоритм

Двумерная модель представляет собой прямоугольную сетку с периодическими условиями на границе (тор), на которую бросается случайным образом некоторое количество частиц. Если частицы находятся на соседних клетках, то они слипаются, образуя кластер. Далее кластеры (кластер может состоять из одной частицы) начинают передвигаться с вероятностью, пропорциональной их “подвижности”, на один шаг на сетке в одном из четырёх возможных направлений. При контакте (нахождении на соседних клетках) кластеры сливаются и образуют один новый кластер, который также продолжает совершать блуждания. В итоге на сетке остается единственный фрактальный кластер. “Подвижность” может быть как одинакова для всех кластеров, так и обратно зависеть от размера кластера (количества занимаемых клеток) [12].

1.3. Off-lattice DLA-model

Нерешеточная (off-lattice) DLA-модель является модификацией DLA-модели Виттена-Сандера. Оригинальная DLA-модель определяется на прямоугольной сетке, что требует меньше компьютерных вычислений для моделирования и позволяет строить кластеры среднего размера за относительно небольшое время. Однако было доказано [6, 9], что для

больших размеров ($N \geq 10^5$) кластер начинает зависеть от сетки — очертания кластера растягиваются вдоль осей координат. В нерешеточной DLA-модели, как видно из названия, происходит отказ от деления пространства на клетки, и каждая частица рассматривается как диск в двумерном пространстве.

1.3.1. Алгоритм

В центре координат фиксируется частица радиуса a (диск в двумерной реализации) — ядро агрегации. Затем бросается следующая частица в случайную точку на некотором расстоянии от центра. Частица совершает случайные блуждания (диффундирует) — передвигается шагами длиной a в случайных направлениях, пока не окажется на расстоянии меньше a от первой частицы. Тогда она останавливается, и приклеивается к ядру. Затем бросается следующая частица и совершает блуждания, пока не окажется на расстоянии a от первой или второй частиц и так далее. DLA-кластер размера N — результат добавления $N - 1$ частицы к зафиксированной в центре [19].

1.4. Методы улучшения работы DLA алгоритма

Алгоритм построения DLA-модели работает довольно медленно, можно его улучшить следующим образом. Можно не ждать, пока частица коснется границ сетки, а задать окружность радиуса R_d , равному нескольким радиусам кластера, попадая за пределы которого частица погибает. Не обязательно запускать каждую новую частицу на большом расстоянии от агрегата. Достаточно делать это на окружности радиусом R_c , которая включает в себя кластер, поскольку частица помещается на окружность случайным образом.

Однако частица может отдалиться от кластера на расстояние большее, чем R_c . В этом случае необходимо разрешить частице совершать свободные блуждания, увеличив длину её "шага". Достаточно проверять после каждого перемещения частицы, покинула ли она круг, включающий в себя кластер, и в этом случае пересчитывать длину шага как

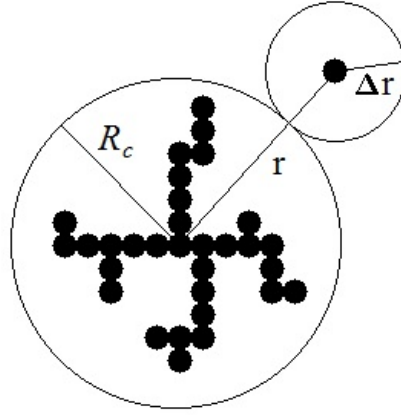


Рис. 1: Схематическое описание метода улучшения работы DLA алгоритма.

$\Delta r = r - R_c$, где r — расстояние от частицы до центра кластера (начальной частицы). Так она сможет делать шаги, соразмерные расстоянию до окружности, включающей кластер, но в случайном направлении [14].

1.5. Фрактальные кластеры

Фрактал — это множество, обладающее свойством самоподобия и сохраняющее структуру при масштабировании [4]. Фрактальные кластеры (или фрактальные агрегаты) составляют один из классов фрактальных объектов, образующихся при слипании движущихся по определенному закону твердых частиц [5]. Фрактальный кластер является статистически самоподобным объектом с фрактальной структурой и обладает фрактальными свойствами. Это даёт возможность получать информацию о процессах и явлениях, также имеющих фрактальную структуру, с помощью математического моделирования соответствующих процессов вычислительными методами. Одним из таких фрактальных свойств, представляющих значительный интерес, является фрактальная размерность.

1.6. Вычисление фрактальных размерностей

1.6.1. Емкостная размерность

Существует много определений фрактальной размерности. Одной из самых распространенных является емкостная размерность. Емкостная размерность — размерность из класса box-counting, так как метод вычисления основан на покрытии множества ячейками (boxes) и подсчет ячеек, содержащих элементы множества.

Пусть F — непустое ограниченное подмножество R^n . Ω — некоторое конечное ϵ -покрытие F и $N(F) = |\Omega|$. Нижнюю и верхнюю границу емкостной размерности определим, соответственно, следующим образом:

$$\underline{dim}_B F = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\log_2 N_\epsilon(F)}{-\log_2 \epsilon},$$

$$\overline{dim}_B F = \overline{\lim}_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\log_2 N_\epsilon(F)}{-\log_2 \epsilon}.$$

Если нижняя и верхняя границы равны, то их общее значение называют емкостной размерностью F [8], то есть

$$dim_B F = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\log_2 N_\epsilon(F)}{-\log_2 \epsilon}.$$

В случае фрактального кластера оценка емкостной размерности возможна как вычисление наклона log-log графика зависимости количества ячеек, необходимых для покрытия кластера, от размера ячейки.

1.6.2. ”Размерность массы”

Зависимость объёма V фрактального кластера, заключенного в окружность радиуса R , от этого радиуса может быть выражена соотношением

$$V(R) \sim R^D$$

Здесь $D < d$ — искомая фрактальная размерность, обычно не целое число. А d — обычная Евклидова размерность пространства, в которое помещен кластер [17]. Очевидно, что объем $V(l)$ кластера может быть

измерен посредством покрытия его d -мерными шарами радиуса l . Тогда выражение

$$V(l) = N(l)l^D$$

даёт оценку объема, где $N(l)$ — количество шаров, требуемых для покрытия фрактального кластера, и l намного меньше, чем линейный размер L всей структуры [17]. Если мы возьмём значение l равное единице (единичной длине ячейки решетки, на которой строится модель), то объем V можно выразить просто как

$$V = N.$$

В таком случае первое соотношение переписется в виде

$$N(R) \sim R^D.$$

Для решетки с ячейками единичной длины $N(R)$ — количество шаров единичного объема для покрытия фрактального кластера, заключенных в окружность радиуса R . Другими словами, $N(R)$ будет равно числу частиц кластера, заключенных в эту окружность. В данном случае — так называемая ”размерность массы” [10]. Исходя из этого соотношения можно составить log-log график для вычисления D [17]. Оценить размерность можно с помощью метода линейной регрессии.

В качестве центра окружности можно взять центр масс кластера, который вычисляется по формуле [2]

$$\bar{r}_c = \frac{\sum_i m_i \bar{r}_i}{\sum_i m_i},$$

Где r_c — радиус-вектор центра масс, r_i — радиус-вектор i -й частицы, m_i — масса i -й частицы. Но так как мы предполагаем, что все частицы в кластере одинакового размера и массы, то формула сводится к

$$\bar{r}_c = \frac{\sum_i m_i \bar{r}_i}{\sum_i m_i} = \frac{m_i \sum_i \bar{r}_i}{m_i N} = \frac{1}{N} \sum_i \bar{r}_i,$$

где N — количество частиц в кластере.

1.6.3. Возможности применения

Процесс роста фрактального кластера при агрегации твердых частиц имеет аналогии с целым рядом физических и физико-химических процессов и явлений. Из-за наличия фрактальной структуры в данных процессах, и во фрактальном кластере, построенном по диффузионной модели, изучение модели с помощью вычислительных методов может дать информацию о данном процессе, подтверждаемую экспериментально.

DLA-модели находят применение в физике, химии, биологии, медицине при моделировании таких процессов, как:

- образование кристаллов [5, 14, 19];
- процессы просачивания (“вязкие пальцы”) [5, 14];
- рост колоний бактерий [3, 14];
- моделирование роста раковых опухолей [16];

ССА-модели успешно используются для моделирования коагуляции гелей и коллоидов [12, 11, 13, 15].

2. Реализация

Все вышеописанные модели были реализованы на языке Java. Каждая модель реализуется как отдельный класс/набор классов. Для графического представления моделей была использована библиотека `java.awt`. Для создания графиков была использована библиотека `JFreeChart`. Для создания графического интерфейса была использована библиотека `javax.swing`.

2.1. DLA-модель (Виттен-Сандер)

Сетка, на которой строится кластер, представляет собой двумерный массив из нулей. Фиксированным частицам кластера сопоставляется значение 1.

Создаем массив $N \times N$, заполненный 0. Центральному элементу присваиваем значение 1 — это ядро кластера. Максимальному радиусу кластера, радиусам R_c и R_d присваиваем значения по умолчанию. Все операции с блуждающими частицами (проверка состояний, движение) реализованы как работа с элементами массива.

Жизненный цикл частицы заключается в следующем: случайным образом бросаем частицу на круг инициации. Она начинает совершать блуждания (случайным образом меняем $x \pm$ или $y \pm$), пока не выполнится одно из следующих условий:

`linDCircle` — частица слишком удалилась от кластера. Она уничтожается, запускаем новую частицу;

`wanderAway` — частица удалилась от кластера не более, чем на R_c , тогда пересчитывается длина шага, согласно формуле

$$1 + \sqrt{x^2 + y^2} - R_c,$$

где x и y — координаты частицы. Тогда при дальнейшем движении частица будет случайным образом передвигаться на расстояние длины шага, а не на соседнюю клетку, пока вновь не окажется вблизи кластера.

`isOccupied` — частица коснулась кластера. Занята хотя бы одна из

4-х соседних клеток окрестности частицы. В таком случае частица прикрепляется к кластеру (элементу массива с координатами частицы присваивается 1), пересчитываются значения радиусов. Бросается новая частица.

Все условия на проверку принимают координаты частицы.

2.2. Off-Lattice DLA

Вышеописанные методы модифицированы с учетом особенностей алгоритма. В классе модели вводим поле r радиуса частицы. Новые координаты при движении частицы вычисляются случайным образом как позиция на окружности радиуса r вокруг частицы. Для проверки ячейки на касание кластера проверяем окрестность ячейки — круг радиуса $2r$.

2.3. DLCA-модель

При реализации модели кластер-кластерной агрегации главной проблемой являлось осуществление удобного объединения частиц (и кластеров) в кластеры, перемещения кластеров по сетке и их проверки на контакт друг с другом. Поэтому было решено реализовать DLCA-модель с помощью системы непересекающихся множеств.

Система непересекающихся множеств (англ. disjoint-set) — набор непересекающихся непустых множеств, каждое из которых определяется “представителем” — элементом этого множества [7]. Базовый интерфейс данной структуры данных состоит из трёх операций:

- `make_set(x)` — создаёт новое множество, единственным элементом которого (и представителем) является x ;
- `union_sets(x, y)` — объединяет два множества, содержащие x и y , в новое, состоящее из этих двух множеств. Представитель полученного множества — любой элемент объединенных множеств;

- `find_set(x)` — возвращает указатель на представителя (единственного) множества, в котором содержится x .

Набор частиц представим как систему непересекающихся множеств. Множества будем хранить как деревья с представителем в качестве корня (фактически, используем лес непересекающихся множеств). Каждый элемент указывает только на своего родителя (корень указывает сам на себя). То есть при реализации будем иметь массив p (`parent`) с ссылками на предка в дереве для каждого элемента.

В этом случае:

- `make_set(x)` — создаёт дерево с единственным узлом x (который и будет корнем);
- `find_set(x)` — поднимаемся по ссылкам на предков до вершины x ;
- `union_sets(x, y)` — находим представителей каждого множества, делаем одного предком другого (если представители совпали, значит элементы и так лежат в одном множестве, ничего не происходит).

Для операций поиска и объединения были применены эвристики сжатия пути (`path compression`) и объединения по рангу (`union by rank`). Суть эвристики сжатия пути заключается в том, что во время операции `find_set(x)` предком каждого узла на пути сделаем непосредственно корень дерева. Эвристика объединения по рангу подразумевает, что для деревьев будем хранить их ранг (массив `rank` в реализации) — верхнюю границу глубины дерева. При операции `union` будем присоединять дерево с меньшим рангом к дереву с большим.

При совместном применении этих эвристик время работы на один запрос `union_sets` или `find_set` получается $O(\alpha(n))$ (где n — операции `make_set`) в среднем, где $\alpha(n)$ — обратная функция Аккермана, которая растёт очень медленно, настолько медленно, что для всех разумных ограничений n она не превосходит 4 (примерно для $n \leq 10^6$) [7]. Именно поэтому про асимптотику работы системы непересекающихся множеств уместно говорить "почти константное время работы".

Каждая частица объявляется как объект класса `Cell` с полями координат и `id`. При инициализации для каждой частицы создается отдельное множество с ее `id` в качестве представителя. При слипании частиц в кластер (кластеров в кластер) применяем операцию объединения по `id` частиц. При перемещении кластера мы задаём для кластера направление и изменяем координаты всех частиц, принадлежащих классу этого кластера (используем команду `find_set`). Так как в нашей модели частицы хранятся как коллекция (`set`), то для проверки кластеров на соседство мы создаём двумерный массив типа `Cell` (по умолчанию все значения равны `null`), заполняем его частицами из коллекции (согласно их координатам) и проверяем окрестности каждой частицы (каждого непустого элемента массива).

2.4. Параметры среды

Для дальнейшего моделирования более широкого класса процессов, в DLA-модель был введен коэффициент приклеивания частицы. Таким образом можно имитировать эффект поверхностного натяжения (*surface tension*). Действие поверхностного натяжения сглаживает края фрактального агрегата, заставляя молекулы формировать столько связей с другими частицами, сколько возможно. Самый простой способ смоделировать это — разрешить коэффициенту приклеивания (*sticking probability*) p_i в точке сетки i зависеть от количества занятых соседних клеток n для этой точки. В базовой DLA-модели Виттена-Сандера, с 4 соседними клетками, это может быть сделано следующим образом

$$p_i = p_0^{4-n},$$

где $p_0 < 1$ [14, 18].

У класса DLA-модели вводится новое вещественное поле $p_0 \leq 1$ (если $p_0 = 1$, имеем дело с классической DLA). Каждый раз, когда для ячейки выполнено условие `isOccupied`, вычисляется n для этой ячейки, и если случайное значение от 0 до 1 меньше p_i , то частица прикрепляется к кластеру. В противном случае, она продолжает совершать блуждания

вдоль веток кластера.

2.5. Емкостная размерность

В методах оценки фрактальных размерностей кластер подаётся в качестве двумерного массива, где значение 0 соответствует пустой клетке решётки, отличное от нуля — занятой.

В качестве параметров выбираются начальное и конечное значения размера элемента покрытия и шаг, с которым мы увеличиваем размер покрытия. В цикле ”покрываем” фрактальный кластер ячейками соответствующего размера и считаем количество ячеек, содержащих хотя бы один элемент кластера. Сохраняем значение $\{\log(\frac{1}{\epsilon}), \log(N)\}$. Строим log-log график зависимости N от $\frac{1}{\epsilon}$, где ϵ — размер ячейки, N — количество ячеек, необходимое, чтобы покрыть кластер. С помощью линейной регрессии вычисляем наклон графика, что и будет значением емкостной размерности.

2.6. ”Размерность массы”

В качестве параметров выбираются начальное и конечное значения радиуса и шаг. Координаты центра масс считаем по формулам [1]

$$x_c = \frac{\sum_i m_i x_i}{M} = \frac{1}{N} \sum_i x_i,$$

$$y_c = \frac{\sum_i m_i y_i}{M} = \frac{1}{N} \sum_i y_i,$$

где (x_i, y_i) — координаты частицы, N — число всех частиц кластера.

В цикле по значению радиуса R считаем количество частиц N кластера, содержащихся в окружности этого радиуса. Сохраняем значение $\{\log(R), \log(N)\}$. Строим log-log график. С помощью метода линейной регрессии вычисляем наклон графика, что и будет являться искомой фрактальной размерностью.

3. Результаты

3.1. Диффузионные модели

Изображения фрактальных кластеров, приведённые ниже, получены с помощью созданного в ходе выпускной работы инструментального программного средства моделирования.

Модель Виттена-Сандера была построена с помощью соответствующего алгоритма, представленного выше. Кластеры различного размера имеют схожую структуру. Ветки кластера направлены в разные стороны. Для кластеров больших размеров ($N = 10^6$) наблюдается расплывание ветвей кластера вдоль осей координат.

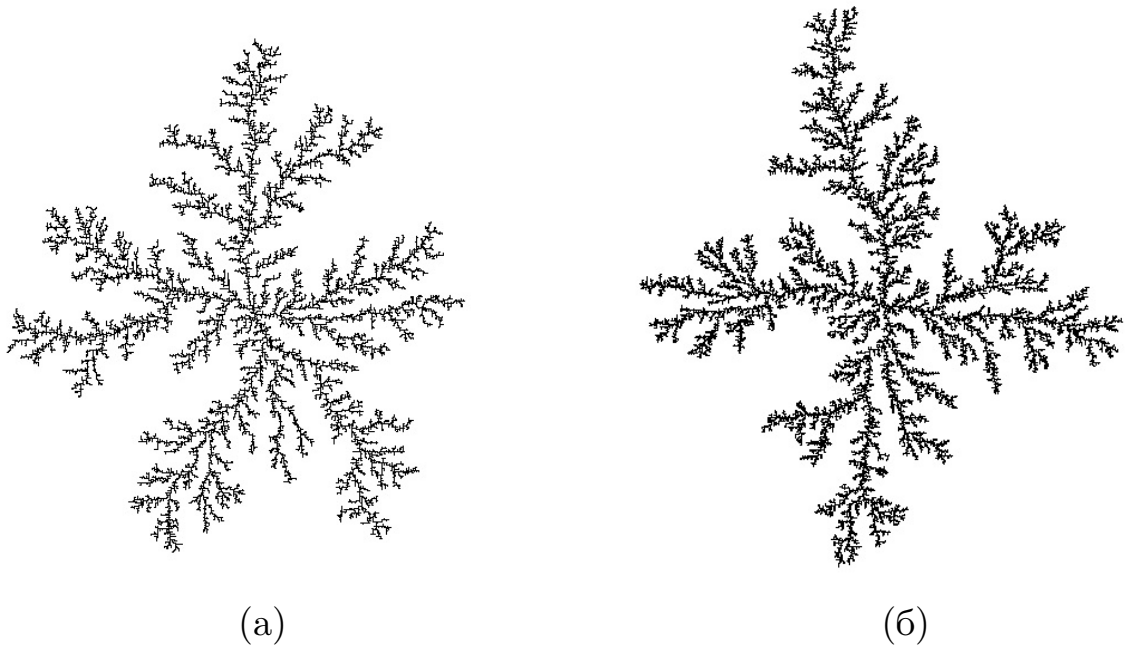


Рис. 2: DLA-модель Виттена-Сандера из (а) 30000 частиц; (б) 100000 частиц.

Нерешеточная DLA-кластер строится существенно дольше, чем оригинальная модель. Результаты времени построения решеточной и нерешеточной DLA-моделей на процессоре Intel Core i5-2450M CPU 2.50GHz представлены в Таблице 1.

Результатом реализации модели с коэффициентом приклеивания является утолщение ветвей кластера с уменьшением p_0 , что видно на

Таблица 1: Сравнение алгоритмов построения фрактального кластера. Время вычислений.

	Решеточная модель (Виттен-Сандер)	Нерешеточная модель
5000 частиц	2-3 сек.	21-25 сек.
10000 частиц	7-9 сек.	58 сек. - 1 мин. 10 сек.

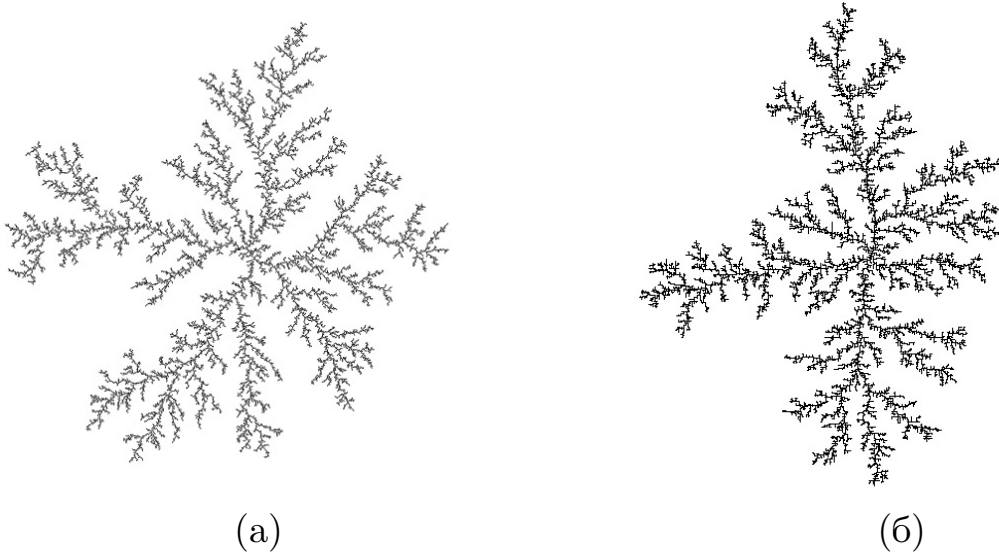


Рис. 3: Нерешеточная (а) и решеточная (б) (Виттена-Сандера) DLA-модели из 40000 частиц

Рис. 4. Для $p_0 \approx 0.3$ форма кластера напоминает реальные структуры, полученные при ”неустойчивости вязкого пальца” [5].

DLA-кластеры, построенные по классическому алгоритму ($p_0 = 1$), имеют разреженную, рыхлую структуру. Пустоты между ветвями не заполняются, так как блуждающие частицы, сбрасываемые на удалении от кластера, касаются ветвей кластера и прикрепляются к ним, не успевая проникнуть глубже [14]. При уменьшении вероятности приклеивания частицы, блуждая вдоль ветвей кластера, проникают глубже к его центру, заполняя пустоты. Зависимость вероятности приклеивания p_i от коэффициента приклеивания p_0 выражается формулой

$$p_i = p_0^{4-n}.$$

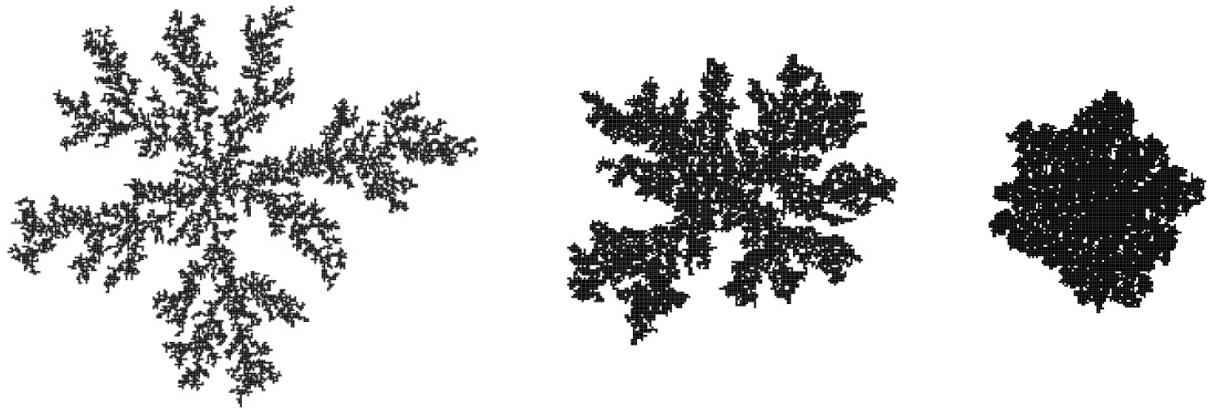


Рис. 4: DLA-модели из 20000 частиц с $p_0 = 0.5$; 0.3 ; 0.2 соответственно

То есть чем больше занято клеток в окрестности частицы, тем выше у неё вероятность стать частью кластера при касании. Чем меньше p_0 , тем более вероятными для приклеивания становятся позиции с большим количеством занятых клеток (с тремя и двумя). Поэтому при уменьшении p_0 кластеры получаются более плотными и компактными.

DLCA-кластер, полученный с помощью соответствующего алгоритма строится за относительно небольшое время, что было достигнуто благодаря реализации, описанной выше. Результаты времени построения DLCA-модели с 20% заполнением частиц на процессоре Intel Core i5-2450M CPU 2.50GHz представлены в Таблице 2.

Таблица 2: Алгоритм построения DLCA-модели с 20% заполнением частиц. Время вычислений.

Размер сетки DLCA-модели	Время построения
200 × 200	3-6 сек.
400 × 400	31-34 сек.

Кластер имеет пористую структуру. Изображение кластера имеет сходство с агрегатами, полученными в результате коагуляции аэрозолей и коллоидов.

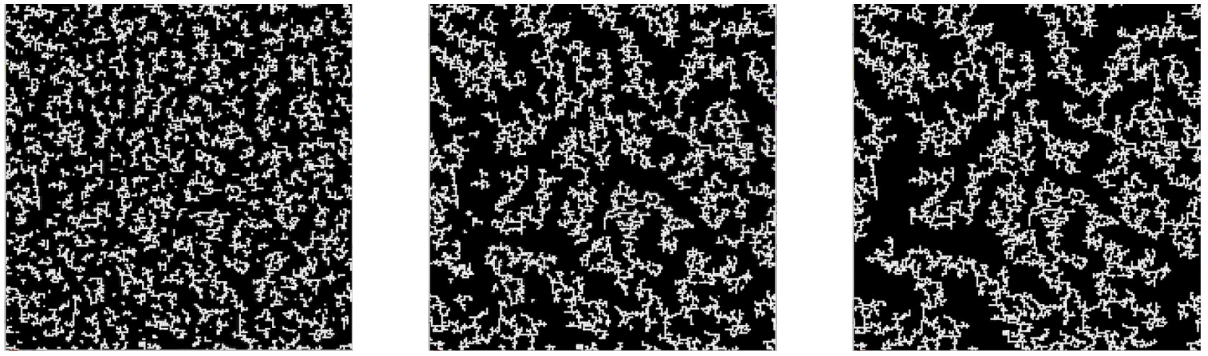
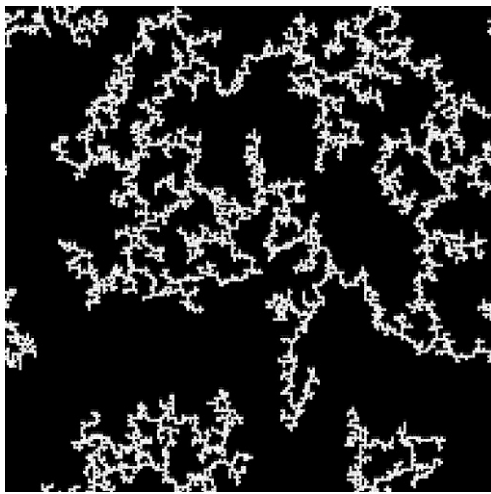
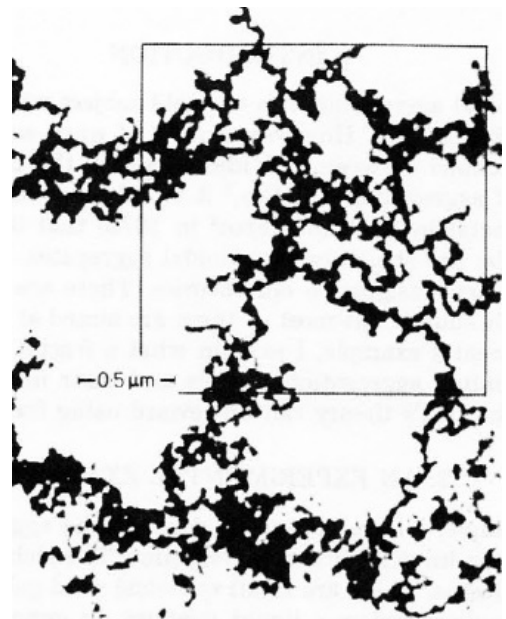


Рис. 5: 3 стадии симуляции роста DLCA-кластера на сетке 200×200 с заполнением частицами в 25%.



(а)



(б)

Рис. 6: (а) DLCA-кластер на сетке 200×200 ; (б) агрегат аэрозоля (частицы железного дыма) [12].

3.2. Фрактальные размерности

Полученные в ходе эксперимента значения фрактальных размерностей для различных моделей приведены в Таблице 3. Вычисления емкостной размерности проводились для элементов покрытия размером 4, 8, 16, 32. Наклон log-log графика вычислялся с помощью линейной регрессии для 4 точек.

Вычисления "размерности массы" проводились для значений радиусов в интервале от 10 до трети максимального радиуса кластера с шагом 10 (для DLA-моделей). Результаты, приведенные в Таблице 3 для данной размерности, сопоставимы с результатами, полученными в работах других авторов: для DLA-модели а) классической, б) с коэффициентом приклеивания $p_0 = 0.25$ значения размерности лежат в интервалах а) $\approx 1.68 - 1.7$, б) $\approx 1.73 - 1.78$ [5][3].

Результаты приведены в среднем для 5 построенных кластеров.

Таблица 3: Значения фрактальных размерностей для различных моделей.

Модель	Емкостная размерность	"Размерность массы"
Классическая DLA-модель (Витген-Сандер) 5000 частиц 10000 частиц	1.592 1.5981	1.609 1.662
DLA-модель с параметром приклеивания p_0 15000 частиц $p_0 = 0.5$ $p_0 = 0.3$	1.6982 1.732	1.676 1.776
DLSA модель на сетке 200×200 20% частиц от общей площади 25% частиц от общей площади	1.4374 1.5054	

3.3. Функциональные характеристики

Графический интерфейс для инструментального программного средства моделирования был создан при помощи библиотеки `javax.swing`. Приложение представляет собой окно с рабочей областью (справа) и панелью управления (слева).

Приложение предоставляет возможность построить одну из следующих моделей:

- DLA с настраиваемыми параметрами среды;
- Off-lattice DLA;
- DLCA.

Выбор реализуемой модели осуществляется элементами панели управления RadioButton. Параметры моделирования настраиваются в соответствующих текстовых полях. Построение может быть выполнено как целиком, так и поэтапно (выбор осуществляется с помощью соответствующего элемента CheckBox). Также возможно пошаговое выполнение с помощью соответствующей кнопки (кнопка со значком '>|'). Изображение с построенной моделью выводится в рабочую область. Имеется возможность сохранить полученное изображение с помощью кнопки Save.

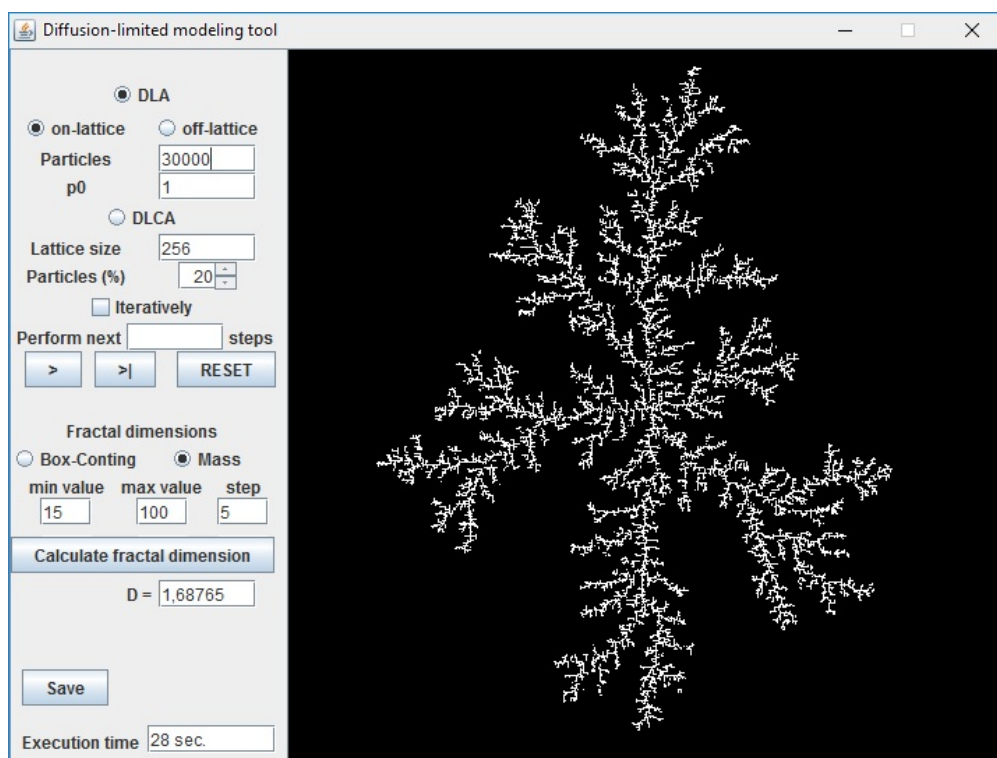


Рис. 7: Пример работы приложения. Построение классической DLA-модели на 30000 частиц. Вычисление "размерности массы".

Также приложение позволяет оценить фрактальную размерность полученного изображения. Для всех классов моделей можно вычислить емкостную размерность. Для моделей агрегации типа "частица-кластер" (DLA) можно вычислить "размерность массы". Выбор нужной размерности осуществляется с помощью элементов RadioButton. Все необходимые параметры для вычисления размерности вносятся в соответствующие текстовые поля.

Программа показывает время построения фрактального агрегата после его выполнения.

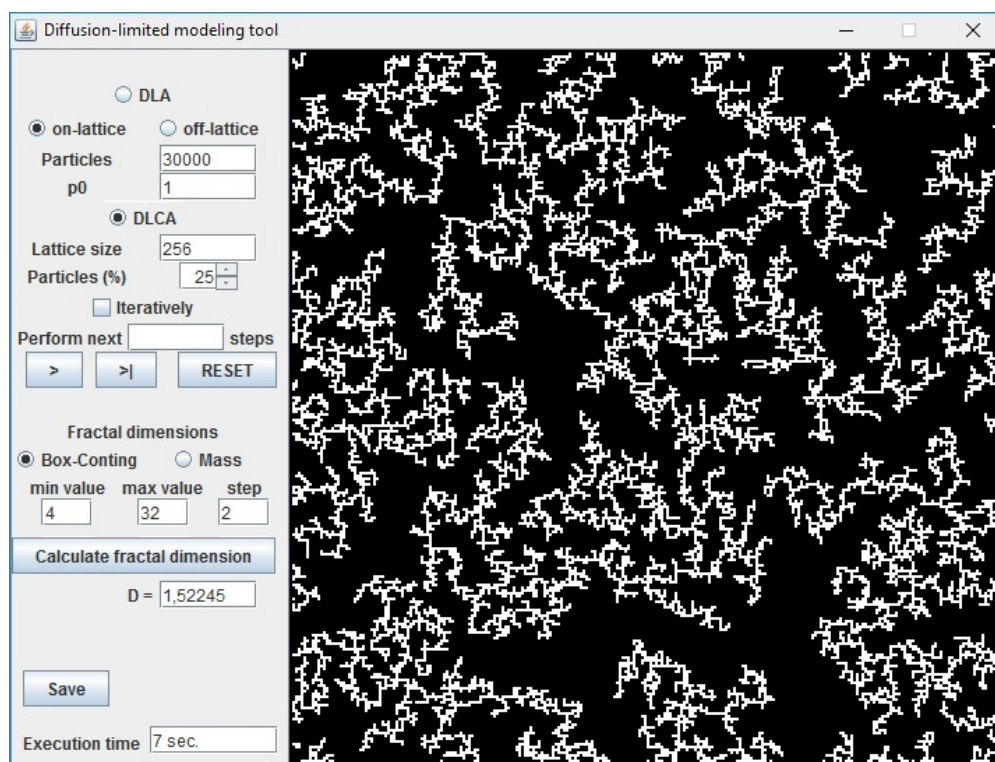


Рис. 8: Пример работы приложения. Построение DLCA-модели с 25% заполнением поля частицами. Вычисление емкостной размерности изображения.

Заключение

В ходе выпускной квалификационной работы было создано инструментальное программное средство моделирования диффузионных процессов.

Реализована классическая DLA-модель Виттена-Сандера построения фрактального агрегата с определенными для неё параметрами среды.

Реализована нерешеточная модель DLA.

Реализована модель кластер-кластерной агрегации DLCA.

Реализованы методы оценки двух типов фрактальных размерностей.

Создан графический интерфейс с помощью библиотеки Java.swing.

Список литературы

- [1] Бобылёв Д. К. Центр, в физике. — СПб. : Энциклопедический словарь Брокгауза и Ефрона : в 86 т. (82 т. и 4 доп.), 1890—1907.
- [2] Журавлёв В.Ф. Основы теоретической механики. — М. : Физматлит, 2001.
- [3] Исаева В.В. Каретин Ю.А. Чернышев А.В. Шкуратов Д.Ю. Фракталы и Хаос в биологическом морфогенезе. — Владивосток : Институт биологии моря ДВО РАН, 2004.
- [4] Мандельброт Б. Фрактальная геометрия природы. — Москва : Институт компьютерных исследований, 2002. — 656 р.
- [5] Смирнов Б.М. Физика фрактальных кластеров. Современ. пробл. физики. — М. : Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1991. — 136 р.
- [6] Ball R.C. Brady R.M. Rossi G., Thompson B.R. // Phys.Rev.Lett. — 1985. — Vol. 55. — P. 1406.
- [7] Cormen T.H. Leiserson C.E. Rivest R.L., Stein C. Introduction to Algorithms. — 2nd edition. — The Massachusetts Institute of Technology, 2001.
- [8] Falconer K.J. Fractal Geometry. Mathematical Foundations and Applications. — John Wiley Sons, 1990.
- [9] Family F., Hentschel G. // Faraday Discuss.chem.Soc. — 1987. — Vol. 83. — P. 139.
- [10] Gould H. Tobochnik J. Christian W. An introduction to computer simulation methods. — 3rd edition. — Addison-Wesley, 2006.
- [11] Jullien R. Transparency effects in cluster-cluster aggregation with linear trajectories // J.Phys.A: Math.Gen. — 1984. — Vol. 17.
- [12] Jullien R. The Applications of Fractals to Colloidal Aggregation // Croatica Chemica Acta. — 1992. — Vol. 65. — P. 215.

- [13] Kolb M. Botet B., R. Jullien. Scaling of Kinetically Growing Clusters // Phys.Rev.Lett. — 1983. — Vol. 51. — P. 1123.
- [14] Leonard M. Sander. Diffusion-limited aggregation: A kinetic critical phenomenon? // Cont. Phys. — 2000. — Vol. 41. — P. 203.
- [15] Meakin P. Formation of Fractal Clusters and Networks by Irreversible Diffusion-Limited Aggregation // Phys.Rev.Lett. — 1983. — Vol. 51. — P. 1119.
- [16] Rashidnasab A. Elangovan P. Yip M. Diaz O. Dance D.R. Young K.C., Wells K. Simulation and assessment of realistic breast lesions using fractal growth models // Phys.Med.Biol. — 2013. — Vol. 58. — P. 5613.
- [17] Vicsek T. Fractal Growth Phenomena. — 2nd edition. — Singapore : World Scientific Publishing Co Pte Ltd, 1992.
- [18] Witten T.A., Sander L.M. // Phys.Rev.B. — 1983. — Vol. 27. — P. 2586.
- [19] Witten T.A. Sander L.M. Diffusion-Limited Aggregation, a Kinetic Critical Phenomenon // Phys.Rev.Lett. — 1981. — Vol. 47. — P. 1440.