

УДК 535.015

АЛГОРИТМЫ АНАЛИЗА ХАРАКТЕРИСТИК ДЕНДРИТНЫХ СТРУКТУР

© 2018 г. Д. Д. Ружицкая¹, Ю. В. Рыжикова^{1, *}, С. Б. Рыжиков¹

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия

*E-mail: ryzhikovaju@physics.msu.ru

Рассмотрены алгоритмы построения дендритов и анализа их фрактальных характеристик. Предложен способ многопараметрической идентификации, включающий определение скейлинговых параметров. Получены закономерности, определяющие связь между особенностями структуры дендритов и их картинами дифракции.

DOI: 10.1134/S0367676518110194

ВВЕДЕНИЕ

Дендритные структуры (дендритные биосистемы, дендритный тип пространственных распределений наночастиц, кристаллические дендриты и др.) получили широкое распространение в различных приложениях науки и техники [1–4]. Общетеоретические аспекты исследований самоорганизующихся нанокластерных систем дендритного типа имеют отношение к важной фундаментальной проблеме, направленной на установление общих закономерностей, определяющих связь между особенностями структуры фракталоподобных систем и их оптическими характеристиками. Всестороннее ее решение позволит усовершенствовать фрактальные методы оптической диагностики нанокластерных систем различной геометрии [5].

В данной работе указанная выше проблема рассмотрена на основе численного моделирования применительно к 2D-дендритным структурам, сформированным под действием случайных факторов.

Несмотря на то что алгоритмам построения дендритных объектов и изучению их самоподобных свойств посвящен ряд публикаций [см., например, 6–9], недостаточно изученным оказался вопрос о наличии количественной закономерности, определяющей взаимосвязь фрактальных свойств в пространственных спектрах (картины дифракции) с элементами самоподобия в просвечиваемых структурах. Кроме того, в литературе отсутствует однозначная стандартизация методов фрактальной параметризации для определения основных параметров (фрактальная размерность, область и коэффициенты скейлинга) дендритных кластеров и их оптических характеристик. Различные алгоритмы формирования дендритов и оценок их фрактальных размерностей допускают расхождение их предельных значений, получае-

мых при увеличении числа образующих элементов структуры кластера [3, 6, 7, 9]. Рассмотрение указанных вопросов составляет цель данной работы, реализованную на основе модифицированного алгоритма построения 2D-дендритов, и разработке многопараметрического способа идентификации дендритных структур, включающего определение их скейлинговых параметров.

ОСОБЕННОСТИ ПОСТРОЕНИЯ ДЕНДРИТНЫХ СТРУКТУР

Дендритные структуры формировались с учетом свойств ассоциации частиц в 2D-пространстве с использованием агрегационных моделей частица–кластер. Реализованный алгоритм формирования дендритных кластеров представляет собой модификацию классической модели Т. Виттена и Л. Сандера “диффузия, ограниченная агрегацией (ДОВА)” [6].

Нами предложена модификация ДОВА, где частицы передвигаются скачками не по квадратной решетке, как в [6], а в произвольном направлении, задаваемым генератором случайных чисел.

Компьютерное моделирование предложенной модификации ДОВА (рис. 1) проводится по алгоритму, включающему следующие этапы:

- 1) предполагается, что в ограниченном 2D-пространстве задается одна неподвижная затравочная частица;
- 2) на окружности генерации частиц (показана штрихами на рис. 1а), вдали от затравки создается новая частица, которая передвигается случайным образом в произвольном направлении;
- 3) если частица подходит вплотную к неподвижной частице, то она прилипает к ней и больше не двигается, после чего формируется новая частица в произвольной точке окружности генерации частиц;

4) в случае перехода движущейся частицей границы “уничтожения”, отмеченной на рис. 1 черной окружностью, она возвращается на окружность генерации частиц в исходное положение;

5) процесс 2–4 для новых частиц повторяется многократно, в результате возникает последовательно растущий фрактальный кластер.

При росте кластера дендрита предусматривается возможность автоматического увеличения радиусов окружности генерации частиц и окружности “уничтожения”.

Расчет движения составляющих частиц дендритов производится в виде последовательных перемещений на равные расстояния Δr за каждый шаг цикла согласно формуле

$$\begin{aligned} x_{k+1,j} &= x_{k,j} + \Delta r \cos \varphi, \\ y_{k+1,j} &= y_{k,j} + \Delta r \sin \varphi, \end{aligned} \quad (1)$$

где φ – произвольный угол ($\varphi = 2\pi \cdot \text{rand}$, где rand – генератор случайных чисел от 0 до 0.999...), x, y – координаты частиц кластера, индекс j – номер частицы, индекс k – номер шага.

С целью предотвратить “перекрывание” частиц за счет большой величины скачка, нами предложена модель с переменным шагом частиц. На начальном этапе, когда частица находится на значительном удалении от затравки, она движется дискретными шагами в произвольном направлении (рис. 1а). При приближении к неподвижным частицам на расстояние $R_z \leq 4R_{mol}$ (R_{mol} – радиус частицы) производится переключение на мелкий шаг частицы. После того как расстояние между центрами частиц становится меньше $2R_{mol}$ (частицы столкнулись), вновь присоединившаяся частица отодвигается вдоль линии последнего скачка так, чтобы расстояние между центрами частиц стало ровно $2R_{mol}$.

Проведенные нами расчеты показали, что основное время работы программы уходит на определение расстояний от движущейся частицы до неподвижных частиц. Мы провели оптимизацию расчетного алгоритма. Область движения частиц разбивается на квадраты, составляется журнал, в каких квадратах находятся “прилипшие” частицы, и для каждой новой движущейся частицы проверяется ее соприкосновение с частицами, находящимися вблизи нее. На рис. 1б показан алгоритм проверки соприкосновения частиц. Подвижная частица находится в квадрате 1. Сначала проверяются частицы в квадрате 1. Если подвижная частица находится на расстоянии меньше $2R_{mol}$ от границы с квадратом номер 2, то проверяются расстояния до частиц в квадрате 2. Если подвижная частица находится на расстоянии меньше $2R_{mol}$ от границы с квадратом номер 3, то проверяются расстояния до частиц в квадрате 3. Если частица находится вблизи угла квадрата 1, то про-

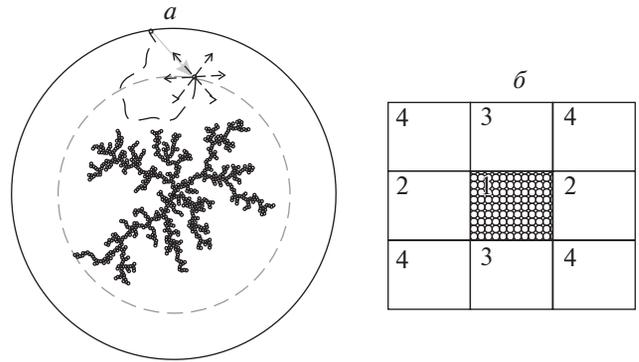


Рис. 1. Схема модифицированного алгоритма роста дендрита. Возможная траектория движения частицы. Окружность возврата частиц показана сплошной черной линией. Окружность генерации частиц отмечена штрихами (а). Области для проверки возможного присоединения частицы, находящейся в квадрате 1 (б).

веряются области и 2 и 3. В этом случае также подлежат проверке расстояния до частиц в смежном квадрате 4. Таким образом, вместо того чтобы проверять всю область дендрита, программа проверяет расстояния до частиц, находящихся в пределах от одного до четырех квадратов.

В настоящей работе также приведены скейлинговые параметры агрегационной модели “баллистическая агрегация–кластер” (БА) с преимущественной направленностью движения стартующих частиц с окружности их генерации к центру области формирования дендрита [8]. В этом случае наблюдается более плотная упаковка частиц дендрита.

СВОЙСТВА ДЕНДРИТНЫХ СИСТЕМ И ИХ КАРТИН ДИФРАКЦИИ

Полученные распределения амплитуды поля и интенсивности дифрагированных волн на дендритных структурах анализировались в приближении Релея–Зоммерфельда [10]. При этом пространственные распределения частиц представлялись в бинарном виде с функцией пропускания $F^o(x, y) = \{1, 0\}$, что существенно упрощает расчет пространственных спектров просвечиваемых дендритов [8].

Для оценок фрактальных характеристик дендритных структур и их изображений был выбран “массовый” метод [11], поскольку он позволяет определять размерность как бинарных структур, так и их картин дифракции.

Количественная оценка самоподобных свойств полученных дендритных структур и их дифракционных картин основывается на комплексном определении “массовой” (кластерной) размерности [11], а также коэффициентов и областей скей-

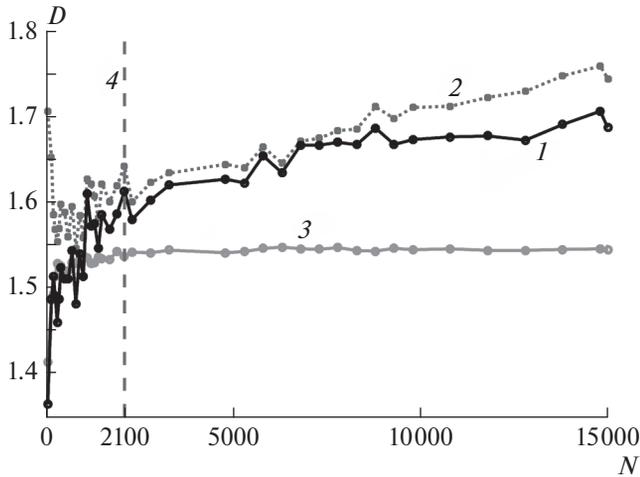


Рис. 2. Зависимость кластерных фрактальных размерностей D -структуры дендрита (1) и его дифракционных картин (2, 3) от числа частиц N ; 2 – соответствует условиям $z = 10d$, $\lambda = d$, где d – расстояние между соседними частицами дендрита; 3 – соответствует приближению Фраунгофера, 4 – граница зоны неустойчивости.

линга [5]. Корректность определения фрактальных размерностей массовым методом проверялась на тестовых объектах. Тестовые объекты представляли собой круг и квадрат с равномерным распределением частиц, а также круг с неравномерным заполнением частицами. При равномерном пространственном распределении частиц по кругу и квадрату, массовая размерность структуры $D \rightarrow 2$ при числе частиц $N \rightarrow 10$ млн. Эти оценки фрактальных размерностей служат ориентиром в случае модели ассоциации частиц “баллистическая агрегация–кластер”.

Неравномерность распределения частиц в круге задавалась детерминированным и случайным способами. При этом пространственные координаты частиц (X, Y) , удовлетворяли следующей формуле:

$$\begin{cases} X(N_{cur}) = R \cos((j_1 - 1)\delta_{angle} + \text{rand} \cdot 2\pi) \\ Y(N_{cur}) = R \sin((j_1 - 1)\delta_{angle} + \text{rand} \cdot 2\pi) \end{cases}, \quad (2)$$

где $j_1 \leq N_{angle}$ и $N_{cur} < N_{max}$, N_{max} – максимальное число частиц, N_{cur} – текущее число частиц, $\delta_{angle} = 2\pi/N_{angle}$, $N_{angle} = \text{fix}(R/2 \cdot R_{mol})^{0.71k}$, R – радиус кластера, k – структурный множитель, fix – оператор округления до целого числа, rand – генератор случайных чисел от 0 до 0.999...

Неравномерное распределение частиц допускает получение разных вариантов значений фрактальных размерностей $D < 2$, соответствующих заданному структурному параметру k , отвечаю-

щему за степень разреженности круга. Так, при $k = 6$ распределение частиц в круге характеризуется $D \rightarrow 1.71$ для числа частиц $N \rightarrow 1$ млн. В этом случае полученные оценки фрактальных размерностей служат ориентиром для модели ассоциации частиц ДОО. Рассмотренные объекты (2) просты и удобны для тестирования программ определения фрактальных размерностей.

На рис. 2 представлена зависимость кластерной фрактальной размерности D структуры дендрита (модификация модели ДОО) и его дифракционных картин от числа частиц N .

Данные на рис. 2 усреднены по 10 реализациям кластеров в каждой точке. При числе частиц дендрита $N < 2100$ наблюдается неустойчивая область изменения значений кластерной фрактальной размерности D (отмечена штрихами). Ее наличие указывает на значительное влияние случайных факторов при построении дендритных структур. При расчете массовой фрактальной размерности структуры дендритов характеризовались широкой областью скейлинга $\Delta: 1 < \Delta < N$, где N – число частиц в кластере.

Расчет массовой фрактальной размерности в дальней зоне показан на рис. 2 (кривая 3). В этом случае картины пространственных фурье-спектров распределений образующих частиц дендрита не являются фрактальными и представляют собой совокупность концентрических колец разной интенсивности. Поэтому самоподобные свойства дендритов и их характеристик целесообразно оценивать в ближней зоне, используя оценки фрактальных размерностей [11, 12] в сочетании с параметрами скейлинга [5].

В настоящей работе предложен возможный вариант оценки скейлинга дендритных структур. Скейлинговые параметры дендритов, сформированных в рамках модифицированных алгоритмов ДОО и БА [8], определялись с использованием полученных значений границ областей неустойчивости для закономерностей вида $D(N)$: 2100 частиц для модификации модели ДОО (рис. 2) и 1500 частиц для модели БА. Структура дендрита, соответствующая модификации модели ДОО, показана на рис. 3 с указанием выделенных штрихами областей для расчета скейлинга. Деление на области структуры дендрита (рис. 3) проведено по числу частиц, превышающих зону неустойчивости. Область OA содержит 2100 частиц, зона OB – 4200 частиц, OC – 6300 частиц и т.д. Для расчета модели БА аналогичные области содержали 1500, 3000 и 4500 частиц, соответственно.

Параметры скейлинга определялись по формуле (рис. 3):

$$\begin{aligned} \zeta_1 &= BO/OA; \zeta_2 = CO/OA; \\ \zeta_3 &= DO/OA; \zeta_4 = EO/OA. \end{aligned} \quad (3)$$

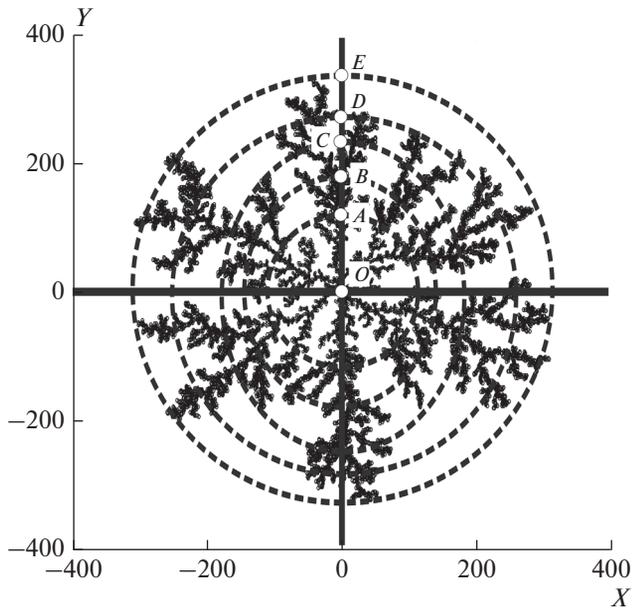


Рис. 3. Структура дендрита, сформированного для модификации модели ДОА. Число частиц дендрита $N = 10000$. Штриховые линии и буквенные обозначения соответствуют границам областей скейлинга.

Согласно (3) были вычислены параметры скейлинга структур дендритов для модели ДОА — $\zeta_1 = 1.4 \pm 0.1$; $\zeta_2 = 1.8 \pm 0.1$; $\zeta_3 = 2.1 \pm 0.1$; $\zeta_4 = 2.4 \pm 0.1$ (рис. 3) и БА — $\zeta_1 = 1.3 \pm 0.1$; $\zeta_2 = 1.6 \pm 0.07$; $\zeta_3 = 1.85 \pm 0.1$; $\zeta_4 = 2.1 \pm 0.1$. Усреднение проводилось по 30 реализациям дендритов. Указанные коэффициенты, характеризующие масштабную инвариантность, в сочетании с определением массовой размерности и областью скейлинга могут использоваться для идентификации фрактальных свойств дендритных систем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты моделирования показывают наличие широкой области скейлинга и множественность коэффициентов скейлинга дендритов. Причем массовые фрактальные размерности D структуры дендрита и картины его дифракции в ближней зоне имеют близкие значения. Кластер-

ная фрактальная размерность дендритов (при увеличении N), стремится к значению 1.7 (в рамках предложенной модификации модели ДОА) и к 1.9 (не сеточная модель БА), что не противоречит литературным данным [6, 7, 9].

Выполненный анализ фрактальных свойств дендритов, различающихся геометрией, указывает на возможность установления взаимно однозначной связи между их структурными особенностями и картинами дифракции на основе определения массовых фрактальных размерностей, области и параметров скейлинга.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 18-01-00723 а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самсонов В.М., Кузнецова Ю.В., Дьякова Е.В. // Журн. техн. физики. 2016. Т. 86. № 2. С. 71. Samsonov V.M., Kuznetsova Y.V., D'yakova E.V. // Techn. Phys. The Russ. J. Appl. Phys. 2016. V. 61. № 2. P. 227.
2. Ковальчук М.В., Короленко П.В., Рыжикова Ю.В. // Ученые записки физ. факультета МГУ. 2015. № 1. С. 151401.
3. Исаева В.В. // Вестник ДВО РАН. 2015. №1. С. 5.
4. Антонов Д.Н., Бурцев А.А., Бутковский О.Я. // Журн. техн. физики. 2016. Т. 86. № 1. С. 110. Antonov D.N., Burtsev A.A., Butkovskii O.Y. // Techn. Phys. Russ. J. Appl. Phys. 2016. Т. 61. № 1. С. 108.
5. Гридчина В.В., Короленко П.В., Рыжикова Ю.В. // Изв. РАН. Сер. физ. 2015. Т. 79. № 12. С. 1691; Gridchina V.V., Korolenko P.V., Ryzhikova Yu.V. // Bull. Russ. Acad. Sci.: Physics. 2015. V. 79. № 12. P. 1480.
6. Witten T.A., Sander L.M. // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 47. P. 1400.
7. Nicolás-Carlock J.R., Carrillo-Estrada J.L., Dossetti V. // Scientific reports. 2016. V. 6. P. 19505.
8. Ружицкая Д.Д., Рыжиков С.Б., Рыжикова Ю.В. // Вестник Моск. ун-та. Сер. 3. Физика, астрон. 2018. № 3. С. 54; Ruzhitskaya D.D., Ryzhikova Yu.V., Ryzhikov S.B. // Moscow Univ. Phys. Bull. 2018. V. 73. № 3. P. 306.
9. Menshutina A.Yu., Shchur L.N. // Phys. Rev. E. 2006. V. 73. P. 011407.
10. Гудмен Дж. "Введение в фурье-оптику". М.: Мир, 1970. 364 с.
11. Федер Е. "Фракталы". М.: Мир, 1991. 254 с.
12. Korolenko P.V., Ryzhikov S.B., Ryzhikova Yu.V. // Phys. Wave Phenom. 2013. V. 21(4). P. 256.