

УДК 535.015

МЕТАМОРФОЗЫ СТРУКТУРЫ ДЕНДРИТНЫХ ОБРАЗОВАНИЙ

© 2021 г. А. В. Косырев¹, П. В. Короленко^{1,2}, Ю. В. Рыжикова¹, *

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова”, физический факультет, Москва, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва, Россия

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

Поступила в редакцию 20.07.2020 г.

После доработки 28.08.2020 г.

Принята к публикации 28.09.2020 г.

Предложен новый метод моделирования самоорганизации двумерных дендритов со стохастически образующимися центрами роста. Получены дендритные образования разной симметрии. Разработанный комплекс новых оригинальных алгоритмов и программ позволяет проводить обобщенный анализ структуры дендритов и их фрактальных особенностей.

DOI: 10.31857/S036767652101021X

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время актуальным является си-нергетическое моделирование различных биофизических процессов, в том числе включающих этапы формирования природоподобных наноструктур дендритной геометрии [1, 2]. Такие дендритные структуры нашли применение в биомедицине для лечения и диагностики различных заболеваний. Их свойства могут быть использованы при изучении проблемы возникновения жизни на Земле, при создании новых фрактальных антенн, сенсорных датчиков, природоподобных систем и устройств, а также в других приложениях науки и техники [3–6].

Несмотря на большое количество работ [2–7], выполненных в указанном направлении, недостаточно изученными оказались динамические особенности формирования дендритных структур со стохастически образующимися центрами роста, в том числе их предельные фрактальные характеристики.

Существует необходимость разработки нового комплекса алгоритмов и программ построения дендритов со спонтанно образующимися центрами роста в процессе их самоорганизации, позволяющего проводить расширенный анализ фрактальных особенностей.

Цель данной работы состоит в анализе возможностей разработанных моделей для описания качественных изменений в распределении частиц, образующих дендритные кластеры на первых этапах их формирования.

ДИНАМИКА ОБРАЗОВАНИЯ ДЕНДРИТНЫХ СТРУКТУР

Удобным инструментом моделирования роста дендритов могут служить программы определения пространственных распределений частиц с использованием свойств агрегационных моделей частица-кластер. Недостатком, ограничивающим возможные применения известных алгоритмов “ограниченная диффузией агрегация (ДОА)”, “баллистическая агрегация (БА)” и их различных модификаций [1, 2, 5, 7–10], являются трудности описания стохастического автономного образования центров роста фракталов. Предлагаемый нами новый метод построения дендритных кластеров произвольной симметрии со спонтанно образующимися центрами роста основан на комплексном использовании свойств классических агрегационных моделей ДОА и БА с учетом взаимодействия между составляющими дендрит частицами и одновременного движения нескольких частиц. Схема расчета включает также задание количественного критерия образования центров роста кластера. В программной реализации, в частности, предусмотрена возможность перехода к классическим моделям ДОА и БА с заданным центром роста [5, 9].

На первом этапе нового алгоритма задается случайное движение частиц в рабочем поле. Задача траекторий их движения осуществлялось аналогично моделям ДОА и БА [9, 10]. На рис. 1а показаны участки траектории движущейся частицы до присоединения к формируемому дендриту. Движущиеся по случайным траекториям частицы

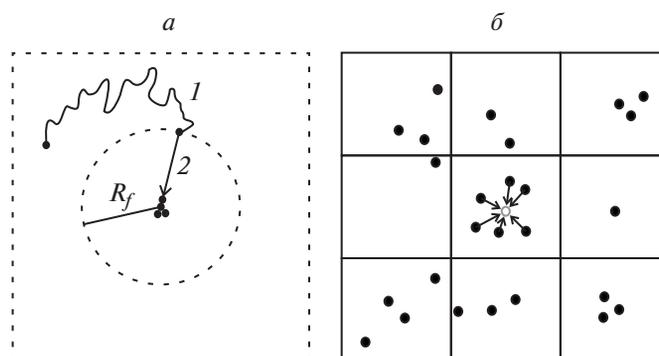


Рис. 1. Ключевые фрагменты схемы алгоритма роста дендритных систем: *a* – участки возможной траектории движения частицы: 1 – модель “ограниченная диффузией агрегация”, 2 – модель “баллистическая агрегация”. Пунктир – граница рабочего поля; *б* – расчетная сетка с частицами. Стрелками показано рождение нового центра.

(модель ДОА) на расстоянии R_f от новообразованного дендрита, начинают прямолинейное движение (модель БА) в его сторону и, соприкасаясь с ним, становятся неподвижными.

На втором этапе для оптимизации скорости роста дендритных образований осуществляется сеточное представление данных с разбиением рабочей области на сектора, в которых хранится информация о присутствующих в них частицах (рис. 1б). Для увеличения быстродействия алгоритма вводится эффективный радиус взаимодействия частиц R_{int} , при превышении которого этим взаимодействием можно пренебречь: $R_{int} < L$. Здесь L – размер сетки, который задается таким образом, что каждая частица будет взаимодействовать только с частицами из своей же клетки и восьми соседними. Взаимодействие частиц считается обратно пропорциональным квадрату расстояния между ними.

На рис. 1б стрелками показан возможный вариант образования нового центра роста дендрита. В качестве количественного параметра вводится число частиц в одной ячейке сетки N_{cr} , при достижении, которого частицы внутри данной ячейки заменяются новым центром роста дендрита. Так, на рис. 1б в центральной ячейке $N_{cr} = 6$. Отметим, что погрешность расчетного метода, обусловленная исчезновением из рассмотрения части частиц пренебрежимо мала для фрактальных дендритов с числом частиц $N > 1000$.

При движении частицы, взаимодействуя друг с другом, скапливаются случайным образом в определенном объеме пространства и образуют новый фрактальный кластер. На рис. 2 приведены результаты использования разработанной модели для получения различных 2D дендритных образований со стохастическим образованием их центров роста. На рис. 2а показан вариант моде-

ли, близкой к классическим вариантам центрально-симметричных дендритных образований [2, 5, 7–10]. Число частиц, составляющих дендритное образование $N = 12000$. Разработанная программа позволяла отказаться от задания фиксированного центра роста и от расчета случайного угла, характеризующего направление движения частицы [10, 11]. В ходе расчета при каждой итерации в каждой периферийной клетке, если в ней нет неподвижных частиц, с заданной вероятностью рождается новая частица. Если частица выходит за границы рабочего поля, она исключается из рассмотрения. Для быстроты работы алгоритма моделирование начинается с сетки небольшого размера. Это приводило к образованию первого фрактального кластера примерно в центре моделируемой области. В момент, когда все периферийные клетки содержат хотя бы одну неподвижную частицу, размер сетки увеличивается и происходит перерасчет по отношению к множеству периферийных клеток.

В начальный момент времени в каждой клетке сетки с некоторой вероятностью P_b рождаются N_b частиц. В дальнейшем при взаимодействии они могут образовать дендритоподобные кластеры, которые растут, используя только первоначальный материал. На рис. 2б показана сформированная дендритная структура в рамках реализованной модели “первичного бульона”, предложенной в свое время академиком А.И. Опариным для описания возникновения жизни на Земле. В процессе образования кластеров формируются разветвленная и расходящиеся по всей расчетной области дендритная система полимерного типа. Такая структура может использоваться в материаловедении для синтеза и анализа новых свойств полимерных дендритов [12].

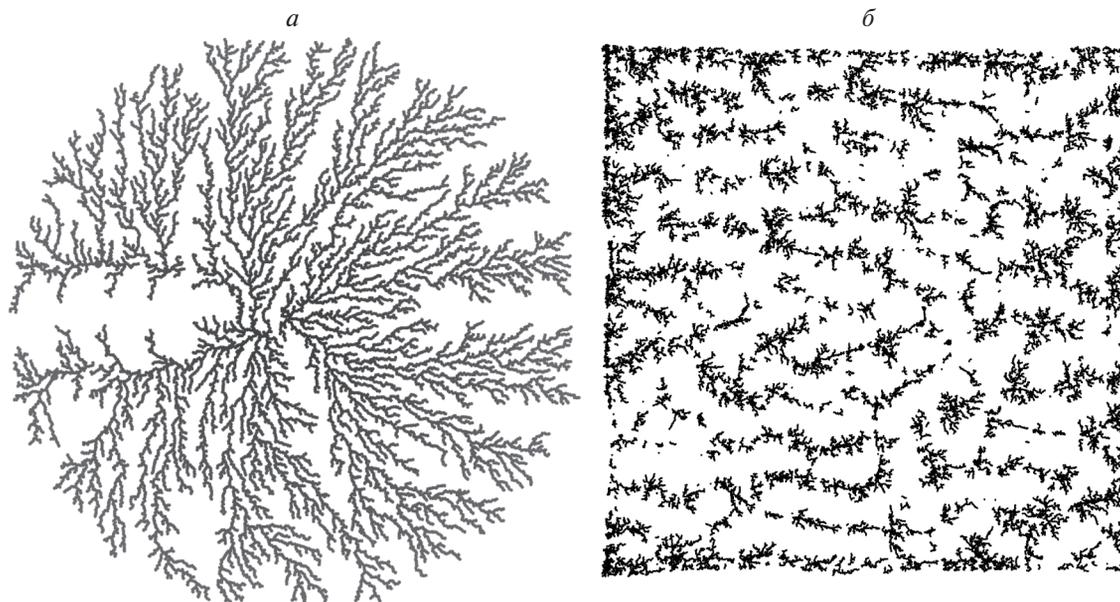


Рис. 2. Примеры моделирования дендритных структур: *а* – модификация модели “ограниченная диффузией агрегация”, *б* – модель “первичного бульона”.

ФРАКТАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ДЕНДРИТНЫХ ОБЪЕКТОВ

Фрактальные свойства дендритных образований принято оценивать с помощью применения аппарата фрактальной параметризации [8, 13]. Его ключевым параметром является фрактальная размерность. В литературе часто используются разные варианты расчета фрактальной размерности (размерность подобия, клеточная размерность (размерность Минковского), корреляционная размерность, кластерная (массовая) размерность и др.) [8, 14], как правило, это связано с особенностями исследуемых объектов.

Разработанный комплекс новых оригинальных программ позволяет проводить обобщенный анализ геометрии дендритов и их фрактальных особенностей. Преимущественно он опирается на использование массового и клеточного способов определения фрактальной размерности [8, 11].

Достоверность определения фрактальных размерностей такими способами проверялась на простых тестовых объектах. Тестовые объекты представляли собой круги с равномерным и с неравномерным распределением частиц. В случае равномерного пространственного распределения частиц по кругу, клеточная D_b и массовая D фрактальная размерность структурных образований $D_b \approx D \rightarrow 2$ при числе частиц $N \rightarrow 10^6$. Эти оценки фрактальных размерностей служат ориентиром в случае использования модели ассоциации частиц БА [1]. Неравномерное распределение частиц допускает получение различных вариантов

значений фрактальных размерностей при изменении “рыхлости” сформированного круга: $D_b, D < 2$. Такие тестовые оценки фрактальных размерностей соответствуют двумерной модели ДОО.

Результаты моделирования формирования двумерных фрактальных дендритных структур (рис. 2) разными способами показали, что предельное значение средних фрактальных размерностей дендритных кластеров с центральной симметрией принимает значение близкое к $D \approx D_b = 1.71$ (число частиц $N \rightarrow 10^6$).

Таким образом, выполненная работа позволила вскрыть особенности динамики изменения фрактальной размерности отдельных кластеров с разной симметрией в зависимости от числа составляющих их частиц.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенная расчетная схема формирования дендритных образований со спонтанно образующимися центрами роста является ценной альтернативой ранее использованным агрегационным моделям частица-кластер. Она позволяет создавать простым заданием входных параметров фрактальные дендритные кластеры с разной геометрией, разной степенью разреженности и разным расположением. Разработанная модель дает новые возможности целенаправленного влияния на рост дендритов со стохастическими центрами роста, что может использоваться в качестве имитации морфогенеза различных биологических объектов.

Данная работа поддержана РФФИ (проект № 19-02-00540).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Каретин Ю.А. Самоорганизация живых систем. Краткий курс синергетики для биологов. Владивосток: Мор. гос. ун-т, 2017. 530 с.
2. Ружицкая Д.Д., Рыжикова Ю.В., Рыжиков С.Б. // Изв. РАН. Сер. физ. 2018. Т. 82. № 11. С. 1512; Ruzhitskaya D.D., Ryzhikova Yu.V., Ryzhikov S.B. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2018. V. 82. No 11. P. 1375.
3. Canabal J.A., Otaduy M.A., Kim B., Echevarria J. // Eurographics. 2020. V. 39. No 2. P. 1.
4. Ryzhikova Yu., Mukhartova Iu., Ryzhikov S. // J. Phys. Conf. Ser. 2018. Art. No 012059.
5. Nicolás-Carlock J.R., Carrillo-Estrada J.L., Dossetti V. // Sci. Rep. 2016. V. 6. Art. No 19505.
6. Самсонов В.М., Кузнецова Ю.В., Дьякова Е.В. // ЖТФ. 2016. Т. 86. № 2. С. 71; Samsonov V.M., Kuznetsova Y.V., D'yakova E.V. // Tech. Phys. Russ. J. Appl. Phys. 2016. V. 61. No 2. P. 227.
7. Menshutina A. Yu., Shchur L.N. // Comp. Phys. Commun. 2011. V. 182. P. 1819.
8. Федер Е. Фракталы. М.: Мир, 1991. 254 с.
9. Witten T.A., Sander L.M. // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 47. P. 1400.
10. Ружицкая Д.Д., Рыжиков С.Б., Рыжикова Ю.В. // Вестн. МГУ. Физ. астрон. 2018. № 3. С. 69; Ruzhitskaya D.D., Ryzhikov S.B., Ryzhikova Yu.V. // Moscow Univ. Phys. Bull. 2018. V. 73. No 3. P. 306.
11. Рыжикова Ю.В., Рыжиков С.Б. // Уч. зап. физ. фак-та. МГУ. 2018. № 5. Ст. № 1850401.
12. Adeli M., Soleymann R. // Polym. Chem. 2015. V. 6. P. 10.
13. Korolenko P.V., Ryzhikov S.B., Ryzhikova Yu.V. // Phys. Wave Phenom. 2013. V. 21. No 4. P. 256.
14. Jungblut S., Joswig J.-O., Eychmuller A. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2019. V. 21. P. 5723.

Metamorphoses of dendritic structures

A. V. Kosyrev^a, P. V. Korolenko^{a, b}, Yu. V. Ryzhikova^{a, *}

^aLomonosov Moscow State University, Faculty of Physics, Moscow, 119991 Russia

^bLebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991 Russia

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

Received July 20, 2020; revised August 28, 2020; accepted September 28, 2020

New method for modeling the self-organization of two-dimensional dendrites with randomly formed growth centers is proposed. Dendritic formations of different symmetries are obtained. The developed complex of new original programs allows a generalized analysis of the structure of dendrites and their fractal features.