Фрактальные свойства самоорганизующихся дендритных структур

Ю. В. Рыжикова,[1*] С. Б. Рыжиков[2]
Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет
[1]кафедра оптики, спектроскопии и физики наносистем,
[2]кафедра общей физики
Россия,119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2
(Статья поступила 21.05.2018; Подписана в печать 09.07.2018)

Рассмотрены особенности построения моделей фрактальных распределений дендритных структур с использованием характеристик детерминированных и стохастических фракталов. Указана возможность выявления фрактальных свойств оптических характеристик дендритов на основе вейвлет-анализа. Приведены основные алгоритмы расчета фрактальной размерности применительно к дендритным системам.

PACS: 42.25.Fx; 61.43.Hv; 02.70.-c; 42.30.Kq УДК: 535.015
Ключевые слова: фрактальные кластеры, дендритные структуры, ограниченная диффузией агрегация, баллистическая агрегация, вейвлет–анализ.

ВВЕДЕНИЕ

Среди различных перспективных подходов формирования природоподобных наноструктур (в том числе дендритов), все большее значение приобретают нанотехнологии, использующие процессы самоорганизации [1]. Предполагается, что самоорганизация позволит создавать наноструктуры из отдельных атомов как технология «снизу-вверх». В данной работе проводится моделирование процессов самоорганизации на первых этапах объединения частиц.

Целью настоящей работы является расширение представлений об особенностях построения моделей и анализа фрактальных распределений дендритных структур с использованием характеристик детерминированных и стохастических фракталов.

Согласно литературным данным (например, [2, 3]), первичный этап формирования многих природных и природоподобных систем часто связан с возникновением в результате самоорганизации структур дендритного типа различной сложности, именно такие структуры определили предмет изложенных ниже исследований.

Изучение свойств такого рода объектов получило широкое распространение в различных приложениях науки и техники. Особую актуальность имеют биомедицинские приложения в области внедрения новых разработок средств инкапсулирования, доставки лекарственных веществ с использованием дендритоподобных частиц–носителей, при анализе тезиограмм биологических жидкостей, а также в офтальмологии [2–4].

Фрактальные свойства дендритных систем принято оценивать на основе применения аппарата фрактальной параметризации [5]. Его ключевым параметром, является фрактальная размерность. В литературе часто используются разные варианты расчета фрактальной размерности (размерность подобия, клеточная размерность, корреляционная размерность, кластерная (массовая) размерность и др.) [6], как правило, это связано с особенностями самих исследуемых объектов. Использование различных методов определения фрактальной размерности дендритных структур приводит к разночтению в оценке ее предельной величины, к которому она стремится при увеличении числа образующих элементов. Кроме того, в литературе недостаточно проработана задача о нахождении общих физических закономерностей, определяющих устойчивую корреляцию между фрактальными свойствами дендритов и их оптическими характеристиками (картинами дифракции зондирующих пучков). Установление подобных закономерностей может найти применение в разработке новых методов оптической диагностики. В данной работе указанная задача рассматривается с позиций обоснования применения определенного подхода к оценке фрактальных размерностей, как структур дендритов, так и их картин дифракции.

1. СПОСОБЫ ПОСТРОЕНИЯ ДЕНДРИТНЫХ СТРУКТУР И ИХ ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Фрактальные наносистемы допускают классификацию по типу пространственной группировки, составляющих их частиц [7]. При определенных условиях наночастицы формируют образования дендритной формы. Оценивая их геометрические и скейлинговые параметры, можно определить физический механизм взаимодействия частиц [8, 9].

В настоящей работе построение дендритных структур осуществлялось, как на основе применения различных детерминированных способов задания фрактальных множеств, так и стохастическими методами, учитывающими действие различных случайных факторов. На рис. 1 показаны результаты расчетов формирования фрактальных пространственных распределений наночастиц в 2D пространстве.

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

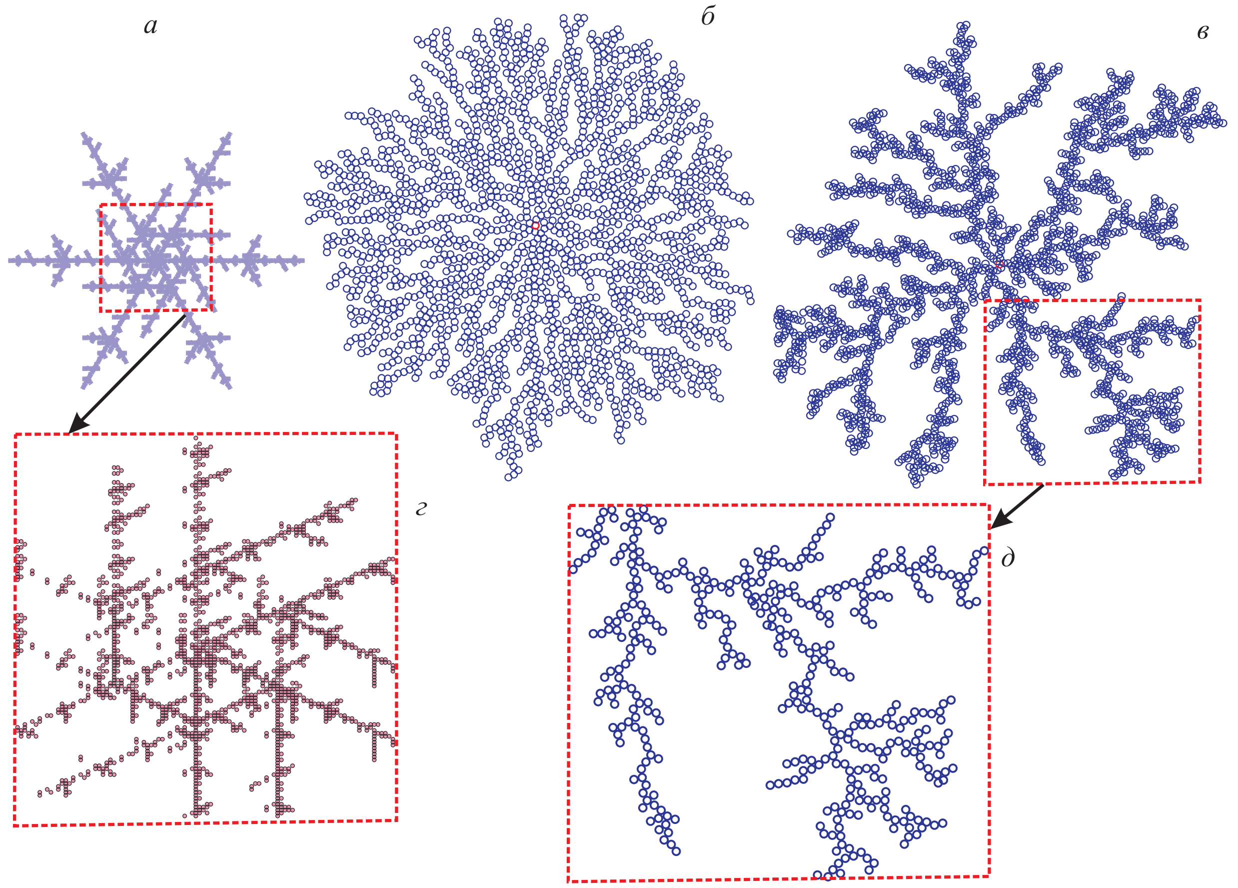

Рис. 1: Детерминированное и случайное пространственное распределение наночастиц. L–система дендрита с геометрией «снежинка» (*а*), *г* — фрагмент (*а*), дендриты в приближении ассоциации «баллистическая агрегация–кластер» (*б*) и «ограниченная диффузией агрегация» (*в*), *д* — фрагмент (*в*)

Так, на рис. 1,*а* показано детерминированное задание дендрита с геометрией «снежинка». Его построение осуществляется с использованием стандартной процедуры формирования L–систем [6]. Использование L-систем, а также известных фрактальных множеств, например, множества Жюлиа, существенно ускоряет моделирование детерминированных природоподобных структур. Детерминированное задание фрактальных объектов может применяться к развитым нанокластерным образованиям дендритоподобной формы с фиксированным числом частиц, определяемым итерационной процедурой [6, 9]. Это сильно ограничивает применение детерминированных методов для анализа скейлинговых свойств дендритов произвольной формы с переменным количеством образующих частиц.

Удобным инструментом управления ростом дендритов могут служить программы моделирования пространственных распределений наночастиц разработанные с учетом свойств ассоциации частиц в 2D пространстве с использованием агрегационных моделей частица-кластер (рис. 1,*б*-*в*). На рис. 2 приведены схемы реализаций используемых в настоящей работе алгоритмов роста дендритов, которые можно рассматривать как модификации классической модели Т. Виттена и Л. Сандера «диффузия, ограниченная агрегацией» (ДОА) [10].

В предложенной нами модификации ДОА, частицы передвигаются скачками не по квадратной решетке, как в [10], а в произвольном направлении, задаваемым генератором случайных чисел.

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

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

где φ — произвольный угол ($\varphi = 2\pi \cdot \mathrm{rand}$, где rand — генератор случайных чисел от 0 до 0.999...), x, y — координаты частиц кластера, индекс j — номер частицы, индекс k — номер шага. Кластер формируется из частицы-затравки, расположенной в центре области его формирования (рис. 2,*а*).

Случайность процесса достигается тем, что частица совершает случайное движение (1) из произвольной

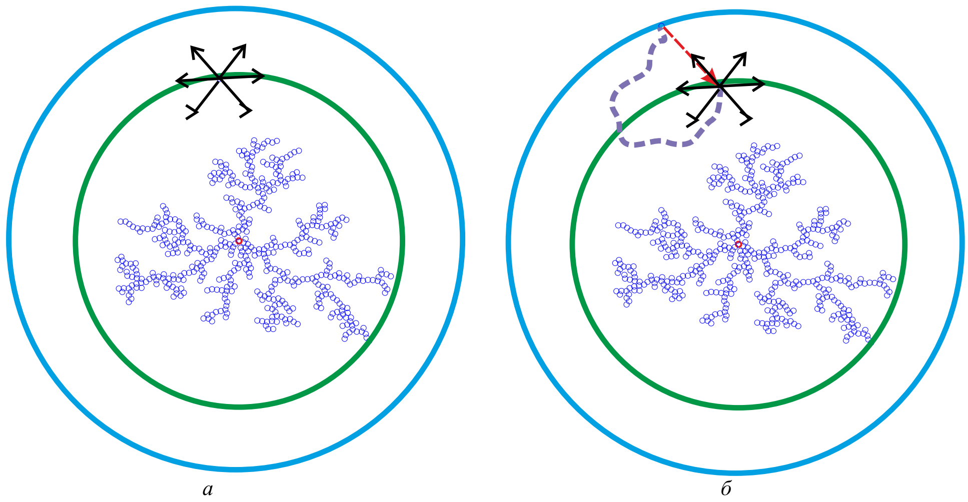

Рис. 2: Схематическое представление модифицированных алгоритмов роста дендрита. Красным отмечена затравочная частица. Зеленая окружность — радиус генерации частиц. Синяя — окружность уничтожения (*а*) или возврата частиц (*б*)

точки окружности с фиксированным радиусом R_{gen}, проведенной вокруг затравки (зеленая окружность на рис. 2).

При соприкосновении с кластером частица присоединяется к нему, после чего формируется новая частица в произвольной точке окружности с радиусом R_{gen}. Для увеличения скорости формирования кластера задается дополнительная окружность с радиусом $R_{del} > R_{gen}$, ограничивающая область блуждания частиц (синяя окружность на рис. 2). При выходе за пределы этой окружности частица либо уничтожается и выпускается новая с окружности генерации частиц R_{gen} (рис. 2,*а*), либо частица возвращается на окружность генерации частиц в исходное положение (рис. 2,*б*).

При росте кластера дендрита предусматривается возможность автоматического увеличения радиусов R_{gen} и R_{del}. При этом остаются фиксированными расстояния между радиусами R_{gen} и R_{del}, а также расстояние между радиусом дендрита и R_{gen}.

С целью предотвратить «перекрытие» частиц за счет большой величины скачка, нами реализована модель с переменным шагом частиц. На начальном этапе, частица стартует с окружности радиуса R_{gen} и движется дискретными шагами в произвольном направлении. При приближении к неподвижным частицам на расстояние $R_z \leq 4R_{mol}$ (R_{mol} — радиус частицы) производится переключение на мелкий шаг передвижения частицы. После того, как расстояние между центрами частиц становится меньше $2R_{mol}$ (частицы столкнулись), то вновь присоединившаяся частица отодвигается вдоль линии последнего скачка, так, чтобы расстояние между центрами частиц стало ровно $2R_{mol}$.

Кроме этого, в работе рассматривается агрегационная модель «баллистическая агрегация — кластер» с преимущественной направленностью движения стартующих частиц с окружности R_{gen} к центру области формирования дендрита [11]. В этом случае наблюдается более плотная упаковка частиц в дендрите (рис. 1,*б*).

Анализ оптических характеристик (картин дифракции) анализируемых структур дендритного типа (распределения амплитуды поля и интенсивности дифрагированных волн) проводился на основе использования формулы Релея–Зоммерфельда [12].

Для удобства анализа скейлинга оптических характеристик дендритных систем была проведена процедура их бинаризации с функцией пропускания F:

$$F(x,y) = \begin{cases} 1, & x,y \in C \\ 0 & x,y \notin C \end{cases}, \qquad (2)$$

где C — заданная контурная граница объекта.

Такое бинаризированное представление анализируемых систем существенно упрощает расчет дифракционных картин нанокластерных образований дендритной формы. В случае использования детерминированного представления дендрита (рис. 1,*а*), непрерывные линии преобразовывались в точечное распределение (рис. 1,*г*) с функцией пропускания (2).

Существенно дополнить характеристики анализируемых распределений позволяет применение вейвлет-преобразований [13, 14]. Результаты расчетов приведены на рис. 3. На нем показаны картины вейвлет-коэффициентов $|W(a,b)|$ распределений интенсивности I в поле дифракции фрактального объекта с фрактальным распределением интенсивности $I(q)$ (решетка Кантора [15]) и дендрита (рис. 1,*б*). Здесь q — нормированная пространственная частота.

Профиль распределения интенсивности $I(y_i)_{x_i=x_c}$ дендрита, состоящего из 5000 частиц, приведен на рис. 3,*в*. Здесь x_c — координата центра дифракционной картины, соответствующей условиям: $z = 1000d$,

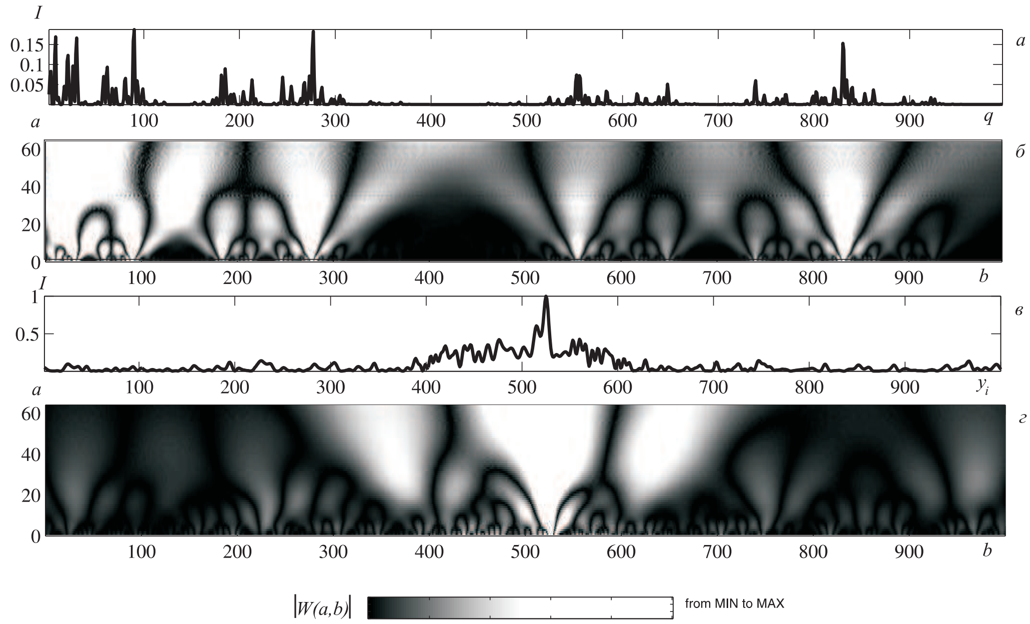

Рис. 3: Распределение интенсивности I в поле дифракции для *а* — фрагмента апериодической решетки Кантора (число элементов $J = 255$) и *в* — структуры дендрита (рис. 1, *б*); *б*, *г* — картины вейвлет-коэффициентов $|W(a, b)|$ распределений *а* и *в*, соответственно

$\lambda = d$, где d — расстояние между соседними частицами дендрита.

Картины вейвлет–коэффициентов $|W(a, b)|$ распределений интенсивности I содержат комбинированную информацию как об использованном вейвлете, так и об анализируемом распределении. Параметр b — величина смещения по оси абсцисс, a — коэффициент масштабирования. Для вейвлет–анализа использовалась базисная вейвлетообразующая функция ψ — «мексиканская шляпа» [13].

Картина вейвлет–коэффициентов $|W(a, b)|$ на рис. 3,*б* хорошо демонстрирует наличие иерархической структуры анализируемого распределения интенсивности. Каждое дробление масштаба отмечено появлением в картине распределения $|W(a, b)|$ «вилообразных» образований, что соответствует раздвоению локальных максимумов. Отмеченная особенность в картинах $|W(a, b)|$ обусловлена проявлением фрактальных свойств, присущих структуре Кантора. Картина вейвлет–коэффициентов $|W(a, b)|$ распределения $I(y_i)_{x_i=x_c}$ рассматриваемого дендрита представлена на рис. 3, *г*. Приведенное распределение $|W(a, b)|$ характеризуется наличием иерархической структуры распределения интенсивности (рис. 3, *в*) для малых значений коэффициента $a < 20$.

Результаты моделирования картин $|W(a, b)|$ различных сечений распределений интенсивности дендритных структур, выполненные для разных значений параметра z, показывают наличие определенного структурного сходства с картиной вейвлет–коэффициентов для распределения интенсивности фрактальной структуры решетки Кантора (рис. 3,*б*). Это указывает на наличие фрактальных свойств в картинах дифракции дендритных объектов. Исключение составила только дальняя зона картин дифракции случайных дендритных структур, сформированных по формуле (1). В этом случае формируется совокупность концентрических колец разной интенсивности и визуальные признаки фрактальности картин дифракции отсутствуют.

2. ФРАКТАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ДЕНДРИТНЫХ СТРУКТУР

Для дендритоподобных структур количественная оценка самоподобных свойств, проявляющихся как в самих анализируемых объектах, так и в их дифракционных картинах проводилась на основе определения фрактальной размерности D [6, 16, 17].

Согласно литературным данным фрактальную размерность применительно к дендритным структурам часто оценивают с позиций клеточного и массового (кластерного) подходов [18–20].

Клеточная размерность D_b фрактального объекта определяется в соответствии с формулой [16, 17]:

$$D_b = -\lim_{\delta \to 0} \frac{\ln N(\delta)}{\ln \delta}, \tag{3}$$

где $N(\delta)$ — количество элементов размера δ, покрывающих объект.

В общем случае, элементы, которыми покрывают объект, могут иметь произвольную форму [21], а результат полученного значения фрактальной размерно-

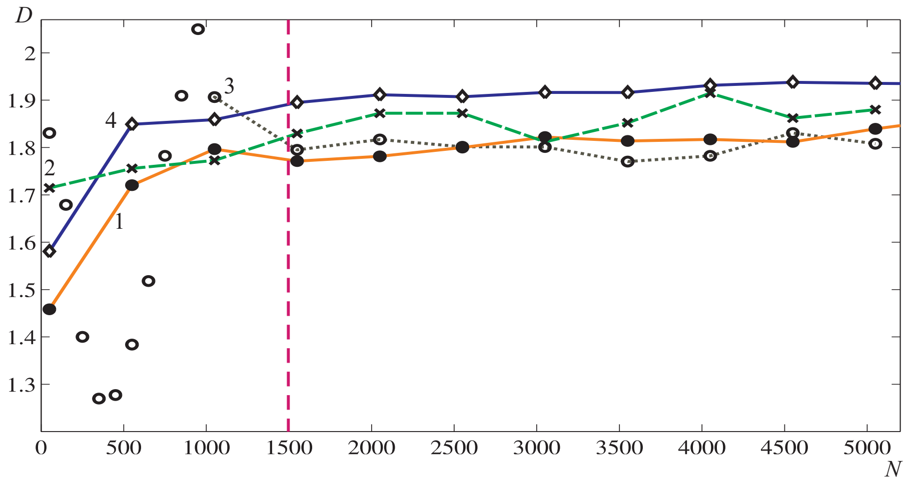

Рис. 4: Динамика изменения в процессе самоорганизации кластерных фрактальных размерностей D структуры дендрита (1) и его дифракционных картин (2-4). 2 — соответствует условиям $z = 10d$, $\lambda = d$, где d — расстояние между соседними частицами дендрита; 3 — соответствует условиям $z = 1000d$, $\lambda = d$; 4 — соответствует приближению Фраунгофера

сти зависит от минимального размера элемента покрытия и числа сеток, составленных из таких элементов.

При расчете фрактальной размерности картин дифракции, клеточный способ представляется не точным. Это связано с тем, что требуется бинаризация анализируемых картин дифракции, т.е. необходим критерий определения порогового уровня интенсивности (или амплитуды), начиная с которого клетка считается «занятой». Это вносит неоднозначность в вычисление клеточной фрактальной размерности картин дифракции дендритов.

Массовая (кластерная) фрактальная размерность оценивается с помощью формулы [16]:

$$N = \rho(R/R_0)^D,\ N \to \infty, \tag{4}$$

где D — размерность кластера, N — число частиц с радиусом R_0, ρ — коэффициент пропорциональности (учитывает форму кластера), R — радиус наименьшей окружности (или сферы), содержащий кластер. Для упрощения расчетов в (4) было задано $\rho = 1$.

Корректность реализованных алгоритмов определения фрактальных размерностей массовым и клеточным методом проверялась на простых тестовых объектах. Тестовые объекты представляли собой круг с равномерным распределением частиц и круг с неравномерным заполнением частицами, заданный разными способами. При равномерном пространственном распределений частиц по кругу, клеточная и массовая размерность структуры $D_b \approx D \to 2$ при числе частиц $N \to$10 млн. Эти оценки фрактальных размерностей служат ориентиром в случае модели ассоциации частиц «баллистическая агрегация — кластер». Неравномерное распределение частиц допускает получение разных вариантов значений фрактальных размерностей согласно формулам (3)–(4): $D_b, D < 2$, соответствующим заданному структурному параметру, отвечающему за степень разреженности круга.

Для оценок фрактальных характеристик дендритных структур и их изображений был выбран массовый метод. Такой способ определения фрактальной размерности дендритных структур и их картин дифракции, не требует проведения дополнительной бинаризации для области изображения. Формула (4) позволяет получить числовой результат для фрактальной размерности, как дендритных структур, так и их картин дифракции в разных зонах (рис. 4). Оценка значений D картин дифракции дендритов в дальней зоне, не обладающих фрактальными признаками, является некорректной. Поэтому целесообразно дополнить указанный известный подход (4) визуальным контролем наличия признаков фрактальности, как самих анализируемых структур, так и их картин дифракции.

На рис. 4 представлен пример полученных зависимостей средней кластерной фрактальной размерности при изменении числа составляющих частиц кластера N (рис. 1, *б*) в случае линейной траектории частиц, реализующиеся при $\varphi = 0$. Кривая *1* — соответствует изменению кластерной фрактальной размерности дендрита от числа составляющих его частиц. Следует отметить, что при $N > 5000$ вид кривой *1* не претерпевает существенных изменений, при этом кластерная фрактальная размерность медленно возрастает $D \to 2$, что согласуется с литературными данными [20]. Так, при изменении N от 5000 до 15000 средняя фрактальная размерность D изменялась в интервале от 1.83 до 1.87. Усреднение проводилось по 5-ти реализациям фрактального роста дендрита. Кривые *2–4* на рис. 4 характеризуют изменение D в картинах дифракции при разных начальных условиях.

Полученные результаты указывают на то, что массовые фрактальные размерности дендрита имеют близкие значения, как в области задания структуры кластера, так и в его картинах дифракции. Причем наибольшее соответствие значений D может достигаться в переходной области (кривая 3) при следующих условиях: $z = 1000d$, $\lambda = d$, λ — длина волны излучения. При числе частиц дендрита $N < 1500$ наблюдается неустойчивая область изменения значений кластерной фрактальной размерности D (граница области отмечена пунктиром на рис. 4). Ее наличие указывает на значительное влияние случайных факторов при формировании таких структур на начальном этапе (при малых N). Зависимости 2 и 4 соответствуют приближениям ближней и дальней зоны, соответственно. Им свойственен слабый осциллирующий характер и близость значений D к соответствующим значениям кластерной фрактальной размерности формирующегося дендрита.

Результаты моделирования показали, что значения массовых фрактальных размерностей полученных картин дифракции оказались близкими к их значениям для формируемых кластеров в широкой области изменения числа частиц, независимо от вида модели формирования дендрита.

Так, для реализованной модификации модели ДОА среднее значение массовой фрактальной размерности достигает значения $D = 1.71$ ($N = 1$ млн. частиц), что не противоречит литературным данным [19, 20]. Сформированные дендриты по формуле (1) характеризуются широкой областью скейлинга во всем занимаемом пространстве: $1 < \Delta < N$, где N — число частиц дендрита. Граничное значение области неустойчивости предложенной модификации модели ДОА составило величину $N = 2100$. Полученные зависимости массовых фрактальных размерностей от числа частиц, как для дендритоподобных систем, так и для их картин дифракции могут использоваться для идентификации систем кластеров нанодендритов, образованных в процессе самоорганизации наночастиц в рамках различных 2D стохастических моделей.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Установление закономерностей, определяющих корреляцию между фрактальными свойствами дендритов и их картинами дифракции, находится в русле решения фундаментальной проблемы фрактальной оптики, направленной на установление общих закономерностей, определяющих связь между особенностями структуры фракталоподобных объектов и их спектральными характеристиками. Ее решение применительно к дендритам позволит выработать единые критерии для идентификации широкого класса апериодических дендритоподобных объектов.

Рассмотренные модели построения случайных дендритных структур можно использовать для описания первичного этапа формирования процессов структурирования материи, применительно к некоторым биологическим объектам. Кроме того, найденные границы неустойчивости изменения значений кластерной фрактальной размерности для различных моделей частица-кластер можно положить в основу выделения локальных областей скейлинга структур дендритов разной геометрии. Это позволит выработать более общий подход идентификации дендритных структур и их картин дифракции, включающий, как определение фрактальной размерности, так и локальные параметры скейлинга (коэффициенты и области скейлинга).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-01-00723 а.

[1] *Марголин В. И., Жабрев В. А., Лукьянов Г. Н., Тупик В. А.* Введение в нанотехнологию: Учебное пособие. 1-е изд. Санкт-Петербург: Издательский дом «Лань», 2012.

[2] *Краевой С. А., Колтовой Н. А.* Диагностика по капле крови. Кристаллизация биожидкостей. Книга 3. Тезиография. Кристаллизация тестовых растворов. Москва — Смоленск. // Электронный математический и медико-биологический журнал «Математическая морфология», 2016.

[3] *Карпов С.* Фотоника. 2012. **33**, №3. С. 52.

[4] *Banerjee P., Soni J., Purwar H., Grosh N., Sengupta T. K.* Journal of Biomedical Optics. 2013. **18**, N 3. P. 035003.

[5] *Рыжикова Ю. В., Рыжиков С. Б.* Сборник тезисов докладов научной конференции «Ломоносовские чтения». Секция физики. С. 7. М.: Физический факультет МГУ, 2018.

[6] *Кроновер Р. М.* Фракталы и хаос в динамических системах. М.: «Техносфера», 2006.

[7] *Ковальчук М. В., Короленко П. В., Рыжикова Ю. В.* Ученые записки физического ф-та Московского ун-та. 2015. № 1. 151401.

[8] *Chiganova G. A.* Journal of Siberian Federal University. Engineering & Technologies. 2008. **1**(2). P. 155.

[9] *Гридчина В. В., Короленко П. В., Рыжикова Ю. В.* Изв. РАН. Сер. физ. 2015. **79**, № 12. С. 1691.

[10] *Witten T. A, Sander L. M.* Phys. Rev. Lett. 1981. **47**. P. 1400.

[11] *Ruzhitskaya D. D., Ryzhikov S. B., Ryzhikova Yu. V.* Moscow University Physics Bulletin. 2018. **73**, N. 3. P. 306.

[12] *Гудмен Дж.* Введение в фурье-оптику. М.: Мир, 1970.

[13] *Вохник О. М., Зотов А. М., Короленко П. В., Рыжикова Ю. В.* Моделирование и обработка стохастических сигналов и структур. Учебное пособие. М.: МГУ, 2013.

[14] *Астафьева Н. М.* УФН. 1996. **166**, № 11. С. 1135.

[15] *Korolenko P. V., Ryzhikov S. B., Ryzhikova Yu. V.* Phys.Wave Phenom. 2013. **21**, N 4. P. 256.

[16] *Федер Е.* Фракталы. М.: Мир, 1991.

[17] *Аракчеев А. С.* Фракталы. Математические основы и проблема физических применений. 2011. С. 1. http: wwwold.inp.nsk.su/students/theor/postgraduate_courses-3/Arakcheev.pdf

[18] *Исаева В.В.* Вестник ДВО РАН. 2015. № 1. С. 5.

[19] *Меньшутин А.Ю.* Вестник Нижегородского университета имени Н.И. Лобачевского. 2013. №2(2). С. 46.

[20] *Nicolas-Carlock J.R., Carrillo-Estrada J.L., Dossetti V.* Scientific reports. 2016. **6**. P. 19505.

[21] *Jiang M., Ko J.Y., Liu W.K., Chiang J.C.* Chinese journal of physics.1994. **32**, N 5-1. P. 451.

Fractal properties of self-organizing dendrites

Yu.V. Ryzhikova[1], **S.B. Ryzhikov**[2]

[1]*Department of optics, spectroscopy and nanosystems physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University Moscow 119991, Russia*

[2]*Department of general physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University Moscow 119991, Russia.*

E-mail: ryzhikovaju@physics.msu.ru

The features of constructing models of fractal distributions of dendritic structures using the characteristics of deterministic and stochastic fractals are considered. The possibility of revealing fractal properties of the optical characteristics of dendrites based on wavelet analysis is indicated. The main algorithms for calculating the fractal dimension are applied to dendritic systems.

PACS: 42.25.Fx; 61.43.Hv; 02.70.-c; 42.30.Kq.

Keywords: fractal clusters, dendritic structure, diffusion-limited aggregation, wavelet analysis.

Received 21 May 2018.

Сведения об авторах

1. Рыжикова Юлия Владимировна — канд. физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-57-40, e-mail:. ryzhikovaju@physics.msu.ru.
2. Рыжиков Сергей Борисович — доктор пед. наук, доцент, доцент; тел.: (495) 939-57-40, e-mail:. ryzhikovaju@physics.msu.ru.