

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
Чорноморський національний університет імені Петра Могили

**Пронін Валентин Андрійович**

**Комп'ютерне мелювання фрактальної агрегації  
наночастинок**

Галузь знань «Інформаційні технології» за спеціальністю  
122 «Комп'ютерні науки»  
122-БКР.А. – 402.1710225

Автореферат  
бакалаврської кваліфікаційної роботи на здобуття освітньої кваліфікації  
«бакалавр комп'ютерних наук»

Миколаїв – 2021

Дипломною роботою є рукопис.

Робота виконана в Чорноморському національному університеті імені Петра Могили Міністерства освіти і науки України на кафедрі інтелектуальних інформаційних систем

Науковий керівник: д-р техн. наук, доцент, доцент  
кафедри комп'ютерної інженерії  
Лисенкво Едуард Анатолієвич

Рецензент: доцент  
кафедри інженерії програмного  
забезпечення  
Горбань Гліб Валентинович

Захист відбудеться «25» червня 2021 р. о год. на засіданні  
екзаменаційної комісії (ауд. 2-403) у Чорноморському національному університеті  
імені Петра Могили за адресою: 54003, м. Миколаїв, вул. 68 Десантників, 10.

З дипломною роботою можна ознайомитися в бібліотеці Чорноморського  
національного університету імені Петра Могили за адресою: 54003, м. Миколаїв,  
вул. 68 Десантників, 10.

Автореферат представлений «18» червня 2021 р.

Секретар  
екзаменаційної комісії,  
викладач кафедри ІС

А. С. Скакодуб

## **ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ**

*Метою* є створення моделі фрактальної агрегації наночастинок.

*Об'єктом* наночастинок та їх поведінка під час фрактальної агрегації.

*Предметом* моделювання фізичного явища.

*Практичне значення* розробленої моделі, полягає у тому, що сама модель буде імітувати поведінку наночастинок у 3D просторі.

*Дипломна робота* складається зі вступу, 3 розділів, висновків, переліку джерел посилання та додатків. Загальний обсяг роботи складає 73 сторінок (без додатків), 21 рис., та 25 посилання на літературні джерела.

***Ключові слова:*** фрактал, агрегація, модель, 3D простір, фізичні властивості, діагностика, об'єкт, розмірність

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі дипломної роботи обґрунтовано актуальність обраної теми, сформульовано мету і задачі дослідження, визначено предмет та об'єкт дослідження.

У першому розділі проведено аналіз теоретичних відомостей наночастинок, агрегацій та фракталу. Проаналізовано значення нанотехнологій у сучасності.

Протягом століття відомо, що дрібні частинки, розпорошені в рідинах та газах, можуть утворювати агрегати з надзвичайно низькою щільністю та різноманітними дослідженнями в 1960-х та 1970-х роках на основі концептуальних моделей та комп'ютерних моделей, припустили, що "аномальні" відносини масштабування були пов'язані зі структурами ці агрегати. Однак відсутність відповідної теоретичної бази та межі комп'ютерних технологій гальмували розвиток узгодженого розуміння структур цих агрегатів та кінетики їх формування. У 1980-х роках популяризація фрактальної геометрії та стрімкий прогрес комп'ютерних технологій усунули ці бар'єри для прогресу. У цьому огляді обговорюється рання робота над фрактальними заповнювачами та основні описані моделі агрегації частинок-кластерів та кластерів-кластерів, запроваджені у 1980-х роках. Протягом 1990-х рр. інтерес був зосереджений на тонких взаємозв'язках між агрегацією, гелеутворенням та спінодальним розкладанням і про фізичну поведінку систем, що містять фрактальні агрегати.

Найважливішими характеристиками простих моделей агрегації, в яких кластери або агрегати зібрані з великої кількості одиничних частинок, є розподіл за розмірами агрегуючих кластерів, характер відносних траєкторій агрегування скупчення, розмірність простору, в якому знаходиться відбувається процес агрегації і концентрація часток (частка простору  $\phi$ , зайнята частинки). У більшості простих моделей частинки представлені сферами (або гіперсферами) у безперервній частині простору або заповненими ділянками на решітці. У будь-якому випадку, розподілом частинок за розмірами, як правило, нехтують.

Найважливішим розрізненням є моделі агрегації частинок-кластерів та кластер-кластерні моделі агрегації, в яких процес агрегації відбувається за допомогою комбінації скупчення подібного розміру. У найбільш реалістичних моделях розподіл кластера за розміром дозволено еволюціонувати до “Самозберігаюча” (масштабована) форма, природним шляхом.

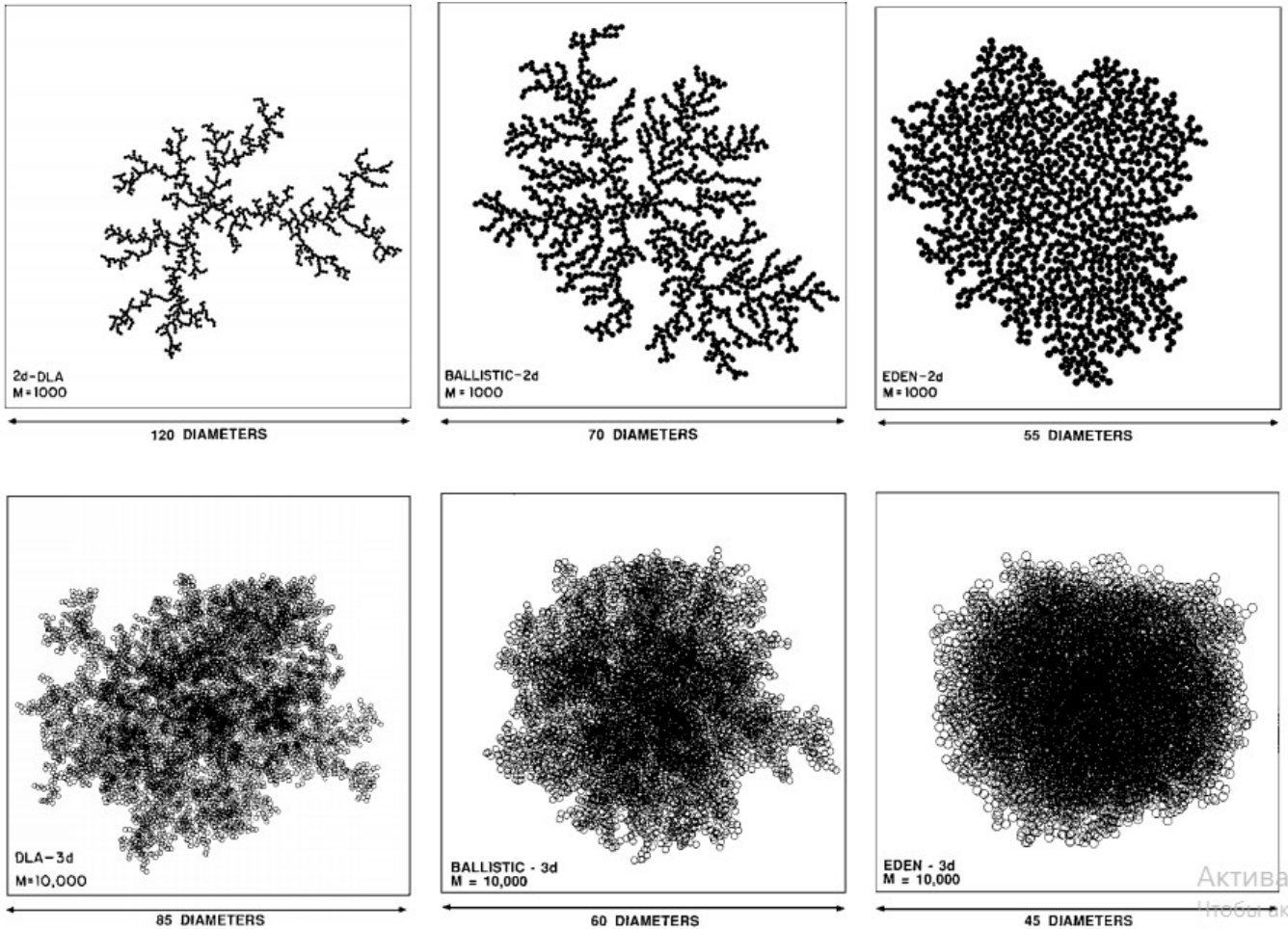


Рисунок 1. Невеликі кластери, створені за допомогою двовимірних (верхній рядок) та тривимірних (нижній ряд) моделей агрегації частинок-кластерів. У цих моделях поза ґратами частинки додаються безповоротно до зростаючого кластера в тому положенні, в якому вони вперше контактують з кластером. кластери в лівій колонці були сформовані за допомогою моделей з обмеженою дифузією, кластери в середній колонці генеровані за допомогою балістичних моделей агрегації, а кластери в правій колонці генеровані за допомогою агрегування з обмеженою реакцією Моделі (Eden).

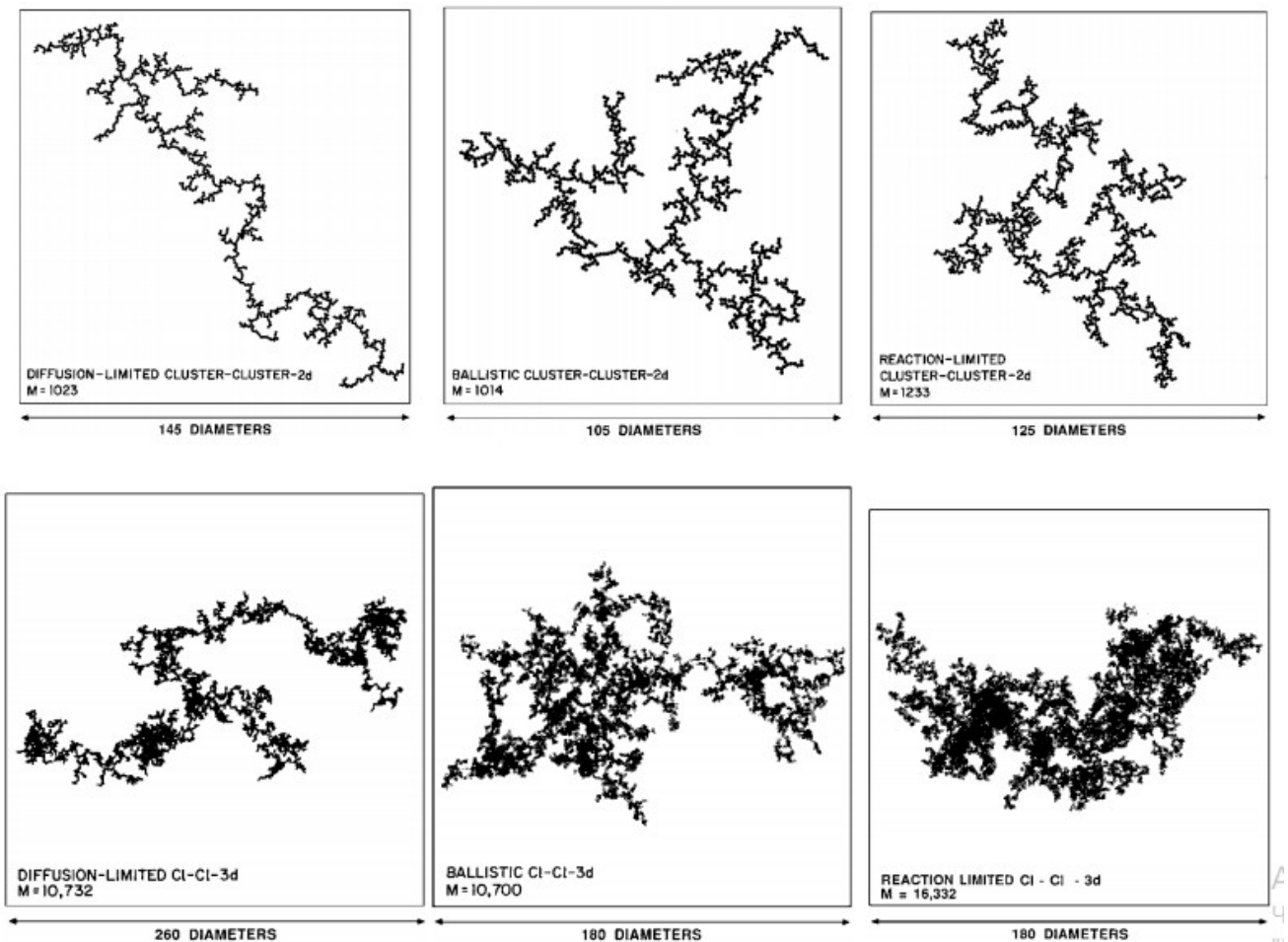


Рисунок 2. Невеликі кластери, сформовані за допомогою двовимірних (верхній рядок) та тривимірних (нижній ряд) кластерно-кластерних моделей агрегації. У

*цих позарешіткових моделях розподіл кластерів за розмірами дозволено еволюціонувати природним чином. Пари скупчень вибираються випадковим чином розвивається кластерний ансамбль з імовірностями, які визначаються відповідним ядром реакції (константи швидкості агрегації). Один з кластери з обраної пари потім додаються до інших, у тому положенні, в якому вони стикаються спочатку, пройшовши шлях із фракталом розмірності. Кластери в лівій колонці були сформовані з використанням обмежених дифузійю моделей агрегації кластер-кластер, кластери в середньому стовпці були сформовані за допомогою балістичних моделей агрегації кластер-кластер та кластерів у правому стовпці були сформовані за допомогою моделей агрегації кластер-кластер з обмеженою реакцією.*

Важливість досліджень наночастинок постійно зростає із збільшенням різноманітності застосувань наночастинок. Унікальні характерні особливості наночастинок, такі як, наприклад, велике відношення поверхні до об'єму, використовуються в різних нанотехнологічних варіантах. Особливості наночастинок є суттєвими для їх багатогранність, але також ускладнюють розслідування процесів, в яких вони беруть участь. Очевидно, що наночастинки не можна розглядати як макроскопічні об'єкти або передбачати, що вони поведуться згідно з правилами, виведеними з об'ємної поведінки відповідного матеріалу. Проте застосування квантово-хімічного аналізу для опису поведінки наномасштабу вимагає обчислювальних ресурсів, які на даний момент відсутні. У цій главі розглядаються класичні моделі агрегації наночастинок, які використовують спостереження за макроскопічними властивостями матеріалу, щоб зробити висновок про поведінку систем у наномасштабі.

У математиці фрактал - це підмножина евклідового простору з фрактальною розмірністю, яка суворо перевищує його топологічну розмірність. Фрактали виглядають однаково в різних масштабах, як показано на послідовних збільшеннях набору Мандельброта. Фрактали демонструють подібні візерунки у дедалі менших масштабах, властивість, зване самоподібністю, також відоме як розширення симетрії або розгортання симетрії; якщо ця реплікація абсолютно однаково в кожному

масштабі, як у губки Менгера, її називають афінною самоподібною. Фрактальна геометрія лежить в межах математичної галузі теорії міри. Один із способів відрізнити фрактали від кінцевих геометричних фігур - це їх масштаб. Подвоєння довжин ребер багатокутника помножує його площу на чотири, що становить два (відношення нової до старої довжини сторони), підняте в ступінь двох (розмірність простору, в якому знаходиться багатокутник). Подібним чином, якщо радіус кулі подвоїти, її обсяг масштабується на вісім, що дорівнює двом (відношення нового до старого радіуса) до степеня трьох (розмірність, в якій знаходиться сфера). Однак, якщо всі одновимірні довжини фракталу подвоїти, просторовий вміст фрактальної шкали має ступінь, яка не обов'язково є цілим числом. Ця сила називається фрактальною розмірністю фракталу, і вона зазвичай перевищує топологічну розмірність фракталу. Аналітично, більшість фракталів ніде не можна диференціювати. Нескінченну фрактальну криву можна уявити як звивисту через простір інакше, ніж звичайна лінія - хоча вона все ще топологічно одновимірна, її фрактальна розмірність вказує на те, що вона також нагадує поверхню. Килим Серпінського, фрактал з топологічним розміром 1 і розміром Хаусдорфа 1,893 Починаючи з 17 століття з уявленнями про рекурсію, фрактали перейшли через все більш сувору математичну обробку до вивчення безперервних, але не диференційованих функцій у 19 столітті, завдяки фундаментальним роботам Бернарда Больцано, Бернарда Рімана та Карла Ваєрштрасса, і про введення слова фрактал у 20 столітті з подальшим зростанням інтересу до фракталів та комп'ютерним моделюванням у 20 столітті. Термін "фрактал" був вперше використаний математиком Бенуа Мандельбротом в 1975 році. Мандельброт базував його на латинській *fractus*, що означає "зламаний" або "розбитий", і використовував його для поширення концепції теоретичних дробових розмірів на геометричні візерунки в природі. Серед математиків існують певні розбіжності щодо того, як формально визначити поняття фракталу. Сам Мандельброт резюмував це як "красивий, чортово твердий, все корисніший. Це фрактали". [12] Більш формально, в 1982 році Мандельброт визначив фрактал наступним чином: "Фрактал - це за визначенням сукупність, для якої розмірність Хаусдорфа-Бесіковича суворо



перевищує. Пізніше, вважаючи це занадто обмежувальним, він спростив і розширив визначення до цього: "Фрактал - це форма, складена з частин, подібних до цілого певним чином". Ще пізніше Мандельброт запропонував "використовувати фрактал без педантичного визначення, використовувати фрактальний вимір як загальний термін, застосовний до всіх варіантів". Консенсус серед математиків полягає в тому, що теоретичні фрактали є нескінченно самоподібними, повторюваними та детальними математичними конструкціями, що мають фрактальні розміри, з яких було сформульовано та вивчено багато прикладів. Фрактали не обмежуються геометричними візерунками, але також можуть описувати процеси в часі. Фрактальні візерунки з різним ступенем самоподібності були передані або вивчені в зображеннях, структурах та звуках і знайдені в природі, технологія, мистецтво, архітектура і право. Фрактали мають особливе значення в галузі теорії хаосу, оскільки графіки більшості хаотичних процесів є фракталами. Встановлено, що багато реальних та модельних мереж мають такі фрактальні особливості, як самоподібність.

Слово "фрактал" часто має різні конотації для простої громадськості, на відміну від математиків, де громадськість, швидше за все, знайома з фрактальним мистецтвом, ніж математична концепція. Математичне поняття важко визначити формально, навіть для математиків, але ключові особливості можна зрозуміти з невеликим математичним досвідом. Наприклад, особливість "самоподібності" легко зрозуміти за аналогією з масштабуванням об'єктивом чи іншим пристроєм, що збільшує цифрові зображення, щоб виявити більш тонку, раніше невидиму, нову структуру. Однак якщо це зроблено на фракталах, ніяких нових деталей не з'являється; нічого не змінюється, і один і той же шаблон повторюється знову і знову, або для деяких фракталів майже однаковий шаблон повторюється знову і знову. Самоподібність сама по собі не обов'язково є протиінтуїтивною. Відмінність фракталів полягає в тому, що відтворений зразок повинен бути деталізованим. Ця ідея деталізації стосується ще однієї особливості, яку можна зрозуміти без особливих математичних передумов. Наприклад, наявність фрактальної розмірності, більшої за її топологічну розмірність, стосується того, як фрактальна шкала

порівнюється із сприйняттям геометричних фігур. Наприклад, пряма лінія прийнято розуміти як одновимірною; якщо таку фігуру перекласти на шматочки, кожна  $1/3$  довжини оригіналу, то завжди є три рівні шматки. Суцільний квадрат розуміється як двовимірний; якщо така цифра перекладена на шматки, кожна з яких зменшена в  $1/3$  в обох вимірах, загалом є  $3^2 = 9$  штук. Ми бачимо, що для звичайних самоподібних об'єктів, будучи  $n$ -вимірним, означає, що коли його тиражують на частини, кожен з яких зменшується на масштабний коефіцієнт  $1/r$ , загалом є  $r^n$  штук.

Тепер розглянемо криву Коха. Його можна перекласти на чотири підкопії, кожна з яких зменшена на масштабний коефіцієнт  $1/3$ . Отже, строго за аналогією, ми можемо розглядати "розмірність" кривої Коха як унікальне дійсне число  $D$ , що задовольняє  $3^D = 4$ . Це число математики називають фрактальною розмірністю кривої Коха; це, звичайно, не те, що прийнято сприймати як розмірність кривої (це число навіть не ціле число!). Той факт, що крива Коха має фрактальну розмірність, що відрізняється від загальноновизнаної розмірності, робить її фрактальною.  $3D$  комп'ютерний фрактал Це також призводить до розуміння третьої особливості, що фрактали як математичні рівняння "ніде не диференціюються". У конкретному сенсі це означає, що фрактали не можна вимірювати традиційними способами. Для детального вивчення, намагаючись знайти довжину хвилястої нефрактальної кривої, можна було знайти прямі відрізки якогось вимірювального інструменту, достатньо малі, щоб накласти кінець до кінця над хвилями, де шматки могли отримати досить малі, щоб вважатись відповідними крива звичайним способом вимірювання рулеткою. Але, вимірюючи нескінченно «хитку» фрактальну криву, таку як сніжинка Коха, ніколи не можна було б знайти досить малий прямий відрізок, щоб відповідати кривій, оскільки нерівний малюнок завжди знову з'являвся б у довільно малих масштабах, по суті трохи тягнувши більша частина рулетки у загальній довжині, що вимірюється кожного разу, коли намагалися припасувати її все щільніше і щільніше до кривої. Результат полягає в тому, що для ідеального покриття всієї кривої потрібно мати нескінченну стрічку, тобто сніжинка має нескінченний периметр

**У другому розділі** бакалаврської роботи було проаналізовано технології 3 та 2D моделювання, на було обрано середовище розробки.

Наприкінці розділу було описано різницю між класичним та модифікованим методами кластеризації.

Комп'ютерне моделювання сьогодні, стало значною частиною та методом розв'язування задач різного технічного характеру. Використання КМ стало можливим завдяки значному технічному прогресу, та бажанню людства механізувати та полегшити усі складові свого життя . Сама система ґрунтується на використанні її комп'ютерної моделі яка приблизно дорівнює описаному об'єкту.

Моделювання допомагає відобразити різні фізичні явища та продукти досліджень під іншим боком. Створити їх модель, та вивчити її для подальших досліджень. Зменшити шанси на невдачу та позбавити користувача необґрунтованого ризику

Комп'ютерна графічна модель об'єкта створюється і досліджується з використанням програм, у яких можна будувати і змінювати графічне зображення об'єкта. Такими, наприклад є: побудова діаграм у табличному процесорі; плоских і об'ємних графічних зображень у графічних редакторах та інше.

Термін «модель» широко використовується в різних сферах людської діяльності і має безліч смислових значень. Ми під «моделлю» будемо розуміти певний матеріальний чи подумки представляється об'єкт, який в процесі дослідження заміщає об'єкт-оригінал так, що його безпосереднє вивчення дає нові знання про об'єкт-оригіналі.



*Рис. 3. приклад моделювання космічних об'єктів*

Найкраще програмне забезпечення для 3D-моделювання для спеціальних галузей програмне забезпечення для тривимірного моделювання - це потужний інструмент, який більш-менш усі галузі застосовують для створення своєї продукції. Хоча кожен сектор має свої потреби та проблеми. Різне програмне забезпечення для 3D-моделювання дозволяє пристосувати Ара до унікальних випадків, дозволяючи вирішувати особливі проблеми. Отже, щоб знати, яке програмне забезпечення для 3D-моделювання потрібно вибрати, потрібно знати, яка сфера Вашої діяльності та які конкретні потреби в 3D-моделюванні. Наприклад, у галузі медицини програмне забезпечення для тривимірного моделювання може бути використано як засіб моделювання та взаємодії з поданнями анатомії. Він також служить як лікарям, так і пацієнтам як інструмент для візуалізації медичної проблеми.

Приклади різноманітних програм для 3D моделювання:

- 3Ds MAX.
- 123D.
- AutoCAD.
- Cinema 4D.
- ARCHICAD.
- SketchUP. Blender. Wings 3D

Серед інших цілей програмне забезпечення для 3D-моделювання використовується як інструмент для створення цифрового файлу для 3D-друку або для лазерного різання. Іноді проектування для тривимірного друку або лазерного різання є непростим завданням. З цієї причини вам може стати в нагоді наведена нижче збірка наших посібників з підготовки вашої 3D-моделі до 3D-друку. Це підручники з програмного забезпечення для моделювання для початківців, які допоможуть вам розпочати тривимірне створення простих цифрових конструкцій, які виявляться чудовими моделями для друку. Таким програмним забезпеченням для 3D-друку є Blender, Autodesk Inventor, Rhinoceros, 3DS Studio Max, Alias, Wings 3D та багато інших. Більше того, вам може бути корисним цей допис у блозі про те, як розробляти 3D-моделі за допомогою інструменту онлайн-дизайну Tinkercad.

Редактор Unity має простий Drag & Drop інтерфейс, який легко налаштовувати, що складається з різних вікон, завдяки чому можна проводити налагодження гри прямо в редакторі. Движок підтримує два скриптових мови: C #, JavaScript (модифікація). Раніше була підтримка Boo (діалект Python), але його прибрати в 5-й версії. Розрахунки фізики виробляє фізичний движок PhysX від NVIDIA.

Проект в Unity ділиться на сцени (рівні) - окремі файли, що містять свої ігрові світи зі своїм набором об'єктів, сценаріїв, і налаштувань. Сцени можуть містити в собі як, власне, об'єкти (моделі), так і порожні ігрові об'єкти - об'єкти, які не мають моделі ( «пустушки»). Об'єкти, в свою чергу містять набори компонентів, з якими і взаємодіють скрипти.

**В третьому розділі** було виконано опис програмної моделі.

Програмна модель була створена на двигні Unity v.2.3.2 без допомоги сторонніх утилітів. Модель представляю собою систему частиць яка поступово буде утворювати кластер фрактальної агрегації.. Двигун Unity до зволяє імітувати цей процес за допомогою набору Objectiv вбудованих у основну бібліотеку.

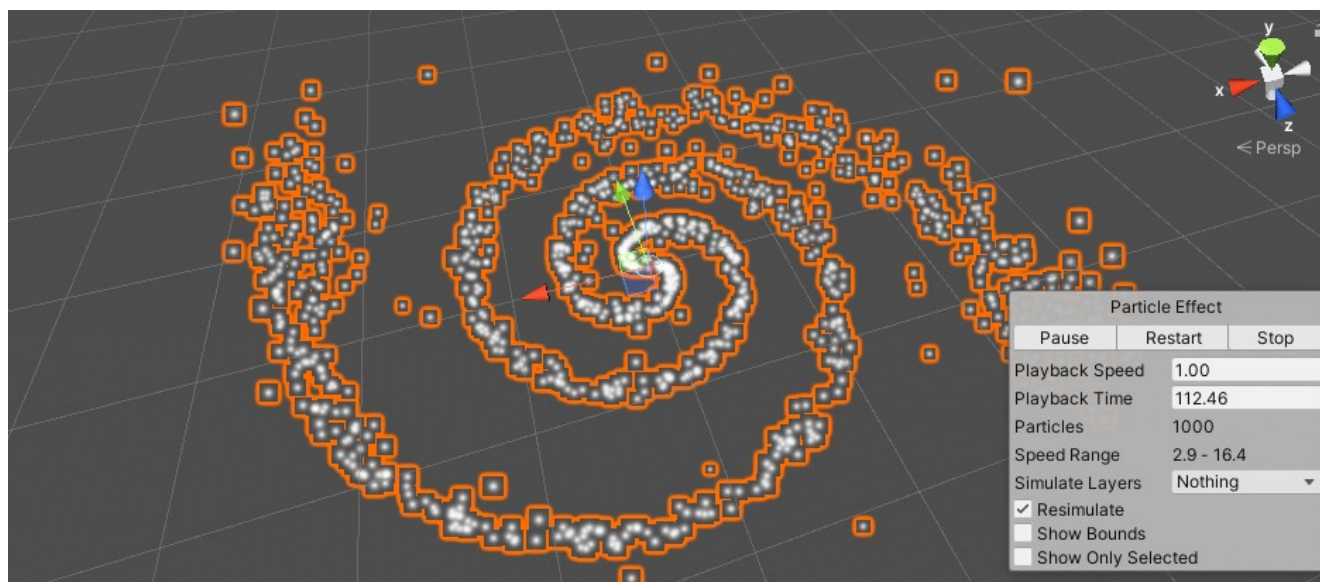


Рис. 4. Приклад кластеру фрактальної агрегації наночастинок на двигуні Unity

У спеціальній частині роботи було виконано аналіз умов праці в комп'ютерній лабораторії вищого навчального закладу. Перевірено забезпечення вимог охорони праці. Виявлено, що оцінка умов праці на робочому місці відноситься до IV категорії, коли спостерігається робота у несприятливих умовах праці. Підібрано вентилятор з необхідною витратно-напірною характеристикою.

## АНОТАЦІЯ

Бакалаврської кваліфікаційної роботи студента 402 групи ЧНУ Ім. Петра Могили Проніна Валентина Андрійовича.

Назва роботи: Комп'ютерне моделювання фрактальної агрегації наночастинок

Мета та основні результати роботи: Створення Комп'ютерної моделі фрактальної агрегації наночастинок з урахуванням її фізичних властивостей. Робота представлятиме з себе модель системи частиць, яке буде імітувати поведінку фрактальної агрегації у 3D просторі. Регулювання потоку частиць, їх кількості та швидкості дадуть змогу маніпулювати результатом моделі.

Бакалаврська кваліфікаційна робота містить 73 сторінки, 22 рисунків, 1 таблиць, 25 посилань.

Ключові слова: фрактал, агрегація, модель, 3D простір, фізичні властивості, діагностика, об'єкт, розмірність

## ABSTRACT

Bachelor's qualification work of the student of 402 group of ChNU. Peter's Tomb  
Pronin Valentin Andreevich.

Title: Computer simulation of fractal nanoparticle aggregation

Purpose and main results of work: Creation of a Computer model of fractal aggregation of nanoparticles taking into account its physical properties. The work will be a model of a particle system that will simulate the behavior of fractal aggregation in 3D space. Adjusting the flow of particles, their number and velocity will allow you to manipulate the result of the model.

Total volume of work: 73 pages, 22 illustrations, 1 tables, 25 links

Keywords: fractal, aggregation, model, 3D space, physical flexibility, diagnostics, object, dimension