

УДК 519.856, 519.854.3

ГЕНЕРАЦИЯ КОМПЬЮТЕРНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ С ПОМОЩЬЮ ТОТАЛИСТИЧЕСКОГО КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА¹

А. Е. Киреева

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
г. Новосибирск, Россия*

Описывается двухслойный тоталистический клеточный автомат, позволяющий генерировать компьютерное представление пористых сред со сложной неоднородной морфологией. Двухслойный клеточный автомат представляет собой композицию двух клеточных автоматов: тоталистического (первого слоя) и асинхронного (второго слоя). Наличие второго слоя даёт возможность формировать сложные неоднородные структуры, похожие на наблюдаемые в природе. Для анализа формируемых структур в процессе моделирования вычисляются численные характеристики: пористость, перколяция, процент единичных (заполненных) клеток, на основании которых может быть выбран пористый материал с нужной морфологией.

Ключевые слова: *тоталистический клеточный автомат, параллельная композиция клеточных автоматов, активатор, ингибитор, устойчивые структуры, пористые среды.*

DOI 10.17223/20710410/27/13

GENERATION OF POROUS MEDIA COMPUTER REPRESENTATION BY TWO-LAYER TOTALISTIC CELLULAR AUTOMATON

A. E. Kireeva

*Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS, Novosibirsk,
Russia*

E-mail: kireeva@ssd.sgcc.ru

In the paper, two-layer totalistic cellular automaton allowing to generate porous materials computer representation is presented. Two-layer cellular automaton is constructed as a parallel composition of a totalistic cellular automaton and an asynchronous cellular automaton. The second layer gives an opportunity to form complex inhomogeneous structures similar to a patterns emerging in natural phenomena. The investigation aims to create a method for porous media morphology synthesis according to a given set of properties such as porosity, percolation, density, etc. Two-layer totalistic cellular automaton allows to obtain a set of patterns representing different porous media morphology. In addition, a porous medium characteristics such as percolation degree, porosity, the number of connected components are calculated and can be used for the analysis and selection of materials with necessary morphology.

Keywords: *totalistic cellular automaton, parallel composition of cellular automata, activator, inhibitor, porous media, stable patterns.*

¹Работа поддержана грантом РФФИ № 14-01-31425 мол-а.

Введение

Пористые материалы — это твердые тела, содержащие в своем объеме свободное пространство в виде полостей, каналов и пор. Исследование пористых материалов представляет интерес для многих областей науки и техники. В промышленности пористые материалы применяются в качестве фильтров, теплоизоляционных материалов, катализаторов и осушителей. По сравнению с плотными материалами пористые структуры являются более изнosoустойчивыми и могут подвергаться воздействию более высоких и низких температур, благодаря чему они эффективно используются в автомобиле- и самолётостроении. Кроме того, пористые материалы являются незаменимыми в медицине и фармацевтике для изготовления имплантов, повязок, протезов и других инновационных биотехнологических продуктов. Эффективность применения материалов зависит от их пористых характеристик: диаметра и объема пор, наименьшего сквозного диаметра, проницаемости, распределения пор, гидрофобности и гидрофильности пор. Важно также знать, как структура вещества может меняться при внешнем воздействии, например при влиянии температуры и давления.

Компьютерное моделирование позволяет конструировать виртуальные пористые материалы с различной морфологией, исследовать их и подбирать образцы с нужными характеристиками. Однако построение неоднородных пористых сред со сложной морфологией сопряжено с определёнными трудностями, так как пористые среды — это сложная нерегулярная система сообщающихся пустот, трещин и каверн, в которой трудно выделить отдельные поровые каналы. В простых случаях для описания пористых сред часто используют идеализированные модели, например представление среды в виде множества шаров и трубок различного диаметра. Для конструирования пористых материалов со сложной морфологией более эффективным является клеточно-автоматный (КА) подход.

КА-метод получения компьютерного представления пористых сред [1] основан на формировании устойчивых структур в результате эволюции КА. В основе КА-моделей структурообразования [2–4] лежит активаторно-ингибиторный механизм, описанный в [5–7]. Суть этого механизма заключается в том, что новые состояния клеток вычисляются в зависимости от взвешенной суммы состояний соседних клеток. Такие КА называются тоталистическими (ТКА). Для создания компьютерного представления пористых сред со сложной неоднородной морфологией в работе предлагается использовать двухслойный ТКА, который позволяет формировать устойчивые структуры, сходные с реальными паттернами, возникающими в природе.

Целью работы является разработка двухслойной ТКА-модели процессов структурообразования, позволяющей генерировать компьютерное представление пористой среды, а также исследование зависимости морфологии генерируемой среды от значений активаторов и ингибиторов.

В п. 1 приводятся определения ТКА и двухслойного ТКА. В п. 2 представлены устойчивые структуры, формирующиеся в результате эволюции ТКА в двумерном и трёхмерном случае, приведены примеры компьютерного представления пористых сред для различных значений активаторов и ингибиторов, а также описаны характеристики пористых сред, вычисляющиеся в течение эволюции КА.

1. Двухслойный тоталистический клеточный автомат

1.1. Определение тоталистического клеточного автомата ТКА, согласно [2, 8], определяется следующими понятиями:

$$\aleph_{\text{TCA}} = \langle A_{\text{TCA}}, X_{\text{TCA}}^d, \Theta_{\text{TCA}}, \nu \rangle, \quad (1)$$

где A_{TCA} — алфавит состояний клеток; X_{TCA}^d — конечное множество имён клеток, определяющих координаты клеток в дискретном пространстве; Θ_{TCA} — локальный оператор, задающий правила изменения состояний клеток; ν — режим функционирования клеточного автомата.

Каждая *клетка* КА определяется парой $(a, \mathbf{x})$, где $a \in A_{\text{TCA}}$ — состояние клетки; $\mathbf{x} \in X_{\text{TCA}}^d$ — имя клетки. Множество клеток, не содержащее клеток с одинаковыми именами, называется *клеточным массивом* Ω . Алфавит состояний ТКА булев: $A_{\text{TCA}} = \{0, 1\}$. Множество имён X_{TCA}^d в двумерном случае ($d = 2$) представимо в виде решётки $X_{\text{TCA}}^2 = \{(i, j) : i = 1, \dots, M_i, j = 1, \dots, M_j\}$, а в трёхмерном ($d = 3$) — в виде куба $X_{\text{TCA}}^3 = \{(i, j, k) : i = 1, \dots, M_i, j = 1, \dots, M_j, k = 1, \dots, M_k\}$. На множестве имён X_{TCA}^d задаются именуемые функции $\varphi_k : X_{\text{TCA}}^d \rightarrow X_{\text{TCA}}^d$, определяющие для клетки $\mathbf{x} \in X_{\text{TCA}}^d$ одного из её соседей. Конечное множество именуемых функций называется *шаблоном соседства* $T_{\text{TCA}}(\mathbf{x})$. Далее в качестве шаблона соседства используется квадрат $K \times K$ клеток в двумерном случае и куб $K \times K \times K$ в трёхмерном случае:

$$T_{\text{TCA}}(\mathbf{x}) = \{\mathbf{x}\} \cup \{\mathbf{x} + \mathbf{a} : \mathbf{a} \in \{-\lfloor K/2 \rfloor, \dots, 0, \dots, \lfloor K/2 \rfloor\}^d\}.$$

Локальный оператор $\Theta_{\text{TCA}}(\mathbf{x})$ определяется на основании активаторно-ингибиторного механизма формирования структур; он вычисляет новое состояния клетки $\mathbf{x}$ в зависимости от взвешенной суммы состояний соседних клеток $(u_k, \varphi_k(\mathbf{x}))$, $k = 1, \dots, |T_{\text{TCA}}(\mathbf{x})|$, по следующей формуле:

$$\Theta_{\text{TCA}}(\mathbf{x}) : (u, \mathbf{x}) \rightarrow (u', \mathbf{x}), \text{ где } u' = \begin{cases} 0, & \text{если } s(\mathbf{x}) = \sum_{k=0}^{|T_{\text{TCA}}(\mathbf{x})|} w_k u_k \leq B, \\ 1 & \text{иначе.} \end{cases}$$

Здесь w_k — это элементы матрицы весов W , $|W| = |T_{\text{TCA}}(\mathbf{x})|$. Константа $B \in \mathbb{R}$ — порог функции $s(\mathbf{x})$, далее в экспериментах используется $B = 0$. Весовые коэффициенты $w_k \in W$ принимают положительные и отрицательные значения. Положительные коэффициенты играют роль *активаторов* (p), а отрицательные — *ингибиторов* (n). Активаторы отвечают за распространение и рост устойчивых структур, а ингибиторы являются фактором, сдерживающим их рост.

Применение локального оператора $\Theta_{\text{TCA}}(\mathbf{x})$ ко всем клеткам $\mathbf{x} \in X_{\text{TCA}}$ называется *итерацией*. Далее используются синхронный (σ) и асинхронный (α) режимы применения локального оператора $\Theta_{\text{TCA}}(\mathbf{x})$ к клеткам массива. При *синхронном* режиме для вычисления новых состояний клеток используются состояния, полученные на предыдущей итерации, и только после применения $\Theta_{\text{TCA}}(\mathbf{x})$ ко всем клеткам массива $\mathbf{x} \in X_{\text{TCA}}$ их состояния одновременно изменяются. При *асинхронном* режиме локальный оператор применяется к случайно выбранным клеткам массива, сразу же изменяя их состояния, таким образом, новые состояния клеток вычисляются от состояний, полученных на предыдущей и на текущей итерациях.

Множество состояний всех клеток $\mathbf{x} \in X_{\text{TCA}}$ на t -й итерации называется *глобальной конфигурацией* клеточного массива $\Omega(t)$. Последовательность глобальных состояний

$\Sigma(\Omega) = \Omega(0), \dots, \Omega(t), \dots, \Omega(t_{\text{fin}})$, полученная в результате итеративного функционирования КА, называется *эволюцией*, $\Omega(0)$ — это исходное состояние клеточного массива, $\Omega(t)$ — состояние массива на t -й итерации, t_{fin} — число итераций.

1.2. Определение двухслойного тоталистического клеточного автомата

Двухслойный тоталистический КА является однонаправленной параллельной композицией двух КА [9]: тоталистического $\aleph_{\text{TCA}}$ и асинхронного КА второго слоя $\aleph_{2L}$:

$$\aleph_S = \Upsilon(\aleph_{\text{TCA}}, \aleph_{2L}).$$

Между множествами имён X_{2L} и X_{TCA} определяется взаимно-однозначное соответствие: $X_{\text{TCA}}^d = \gamma(X_{2L}^d)$, $|X_{\text{TCA}}^d| = |X_{2L}^d|$. Состояния клеток $\aleph_{\text{TCA}}$ зависят не только от состояний их соседних клеток, но и от состояний клеток второго слоя $\aleph_{2L}$.

В результате исследования эволюции двухслойного ТКА при различных $\aleph_{2L}$ в качестве второго слоя выбран КА «Лесной пожар» (Forest fire) [10], так как в общем случае эволюция этого КА имитирует пространственно-неоднородное динамически изменяющееся распределение трёх произвольных веществ: химических реагентов, молекул либо атомов.

КА-модель распространения огня в лесу, описанная в [10], определяется следующими понятиями:

$$\aleph_{2L} = \langle A_{2L}, X_{2L}^d, \Theta_{2L}, \alpha \rangle.$$

Алфавит состояний клеток $A_{2L} = \{0, 1, 2\}$, где 0 — это свободный участок поверхности, 1 — дерево, 2 — горящее дерево. Режим функционирования — асинхронный. Шаблон соседства $T_{2L}(\mathbf{y}) = \{\mathbf{y} + \mathbf{a}\}$, где $\mathbf{a}$ — вектор сдвига: $\mathbf{a} \in \{(-1, 0), (0, 1), (1, 0), (0, -1)\}$ для $d = 2$ и $\mathbf{a} \in \{(-1, 0, 0), (1, 0, 0), (0, -1, 0), (0, 1, 0), (0, 0, -1), (0, 0, 1)\}$ для $d = 3$. Локальный оператор $\Theta_{2L}(\mathbf{y})$ вычисляет новое состояние клетки $\mathbf{y}$ по формуле

$$\Theta_{2L}(\mathbf{y}) : (v, \mathbf{y}) \rightarrow (v', \mathbf{y}),$$

$$\text{где } v' = \begin{cases} 0, & \text{если } v = 2, \\ 1, & \text{если } v = 0 \text{ \& } \text{rand}_1 < P_t, \\ 2, & \text{если } v = 1 \text{ \& } \exists(v_k, \varphi_k(\mathbf{y})) (v_k = 2, \varphi_k(\mathbf{y}) \in X_{2L}) \text{ \& } \text{rand}_2 < P_f. \end{cases}$$

Здесь $\varphi_k(\mathbf{y}) \in T_{2L}(\mathbf{y})$ определяет для клетки $\mathbf{y}$ одну из соседних клеток, выбираемых равновероятно по шаблону $T_{2L}(\mathbf{y})$; $\text{rand}_1, \text{rand}_2 \in \mathbb{R}$ — случайные числа в интервале $(0, 1)$; P_f и P_t — вероятности самовозгорания и появления дерева соответственно.

Тоталистический КА $\aleph_{\text{TCA}} = \langle A_{\text{TCA}}, X_{\text{TCA}}^d, \Theta'_{\text{TCA}}, \nu \rangle$ определяется аналогично (1), за исключением локального оператора $\Theta'_{\text{TCA}}(\mathbf{x})$, который вычисляет новые состояния клеток в зависимости от коэффициентов, являющихся функцией $f(v_k)$ от состояний клеток $\aleph_{2L}$:

$$\Theta'_{\text{TCA}}(\mathbf{x}) : (u, \mathbf{x}) \rightarrow (u', \mathbf{x}), \text{ где } u' = \begin{cases} 0, & \text{если } \sum_{k=0}^{|T_{\text{TCA}}(\mathbf{x})|} f(v_k) u_k \leq B, \\ 1 & \text{иначе.} \end{cases}$$

Здесь v_k — состояние k -й клетки с именем $\mathbf{y} = \gamma(\mathbf{x})$ для $\mathbf{x} \in T_{\text{TCA}}(\mathbf{x}) \subset X_{\text{TCA}}$.

Функция $f(v_k)$ используется следующая:

$$f(v_k) = \begin{cases} \frac{N(1) - N(2)}{|T_{\text{TCA}}|}, & \text{если } w_k > 0 \text{ (активатор)}, \\ w_k, & \text{если } w_k \leq 0 \text{ (ингибитор)}, \end{cases} \quad (2)$$

где $N(1)$ и $N(2)$ — количества клеток $\mathbf{y} = \gamma(\mathbf{x})$ с состояниями $v = 1$ и $v = 2$ соответственно, $\mathbf{x} \in T_{\text{TCA}}(\mathbf{x})$.

2. Генерация компьютерного представления пористой среды с помощью двухслойного тоталистического клеточного автомата $\aleph_S$

2.1. Устойчивые структуры, формируемые с помощью тоталистического клеточного автомата $\aleph_{\text{TCA}}$

Основными параметрами, влияющими на эволюцию $\aleph_{\text{TCA}}$, являются начальное состояние клеточного массива $\Omega(0)$, значения весовых коэффициентов $w_k \in W$ и размер шаблона соседства K .

В качестве начального состояния $\Omega(0)$ в вычислительных экспериментах используются следующие глобальные конфигурации:

- Ω_1 : одна клетка с состоянием $u = 1$ в центре клеточного массива, состояния остальных клеток — нулевые;
- Ω_2 : случайное равномерное распределение клеток с состоянием $u = 1$ с вероятностью P_{Ω_1} ;
- Ω_3 : случайное неравномерное распределение клеток с состоянием $u = 1$. Клеточный массив делится на $m \in \mathbb{N}$ частей, в каждой из которых задаётся своя вероятность распределения единичных клеток $P_{\Omega_3}^l, l \in m$.

Весовые коэффициенты w_k задаются с помощью матрицы весов W , имеющей следующий вид:

$$W = \begin{pmatrix} n & n & n & \cdots & n & n & n \\ n & n_1 & n_1 & \cdots & n_1 & n_1 & n \\ n & n_1 & p & \cdots & p & n_1 & n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ n & n_1 & p & \cdots & p & n_1 & n \\ n & n_1 & n_1 & \cdots & n_1 & n_1 & n \\ n & n & n & \cdots & n & n & n \end{pmatrix},$$

где $n \leq 0$; $n_1 \leq 0$; $p > 0$.

Таким образом, в двумерном случае ($d = 2$) матрица весов определяется выражением

$$w_{kl} = \begin{cases} p, & \text{если } |k| < (\lfloor K/2 \rfloor - 1) \quad \& \quad |l| < (\lfloor K/2 \rfloor - 1), \\ n_1, & \text{если } |k| = (\lfloor K/2 \rfloor - 1) \quad \& \quad |l| = (\lfloor K/2 \rfloor - 1), \\ n & \text{иначе,} \end{cases}$$

а в трёхмерном случае ($d = 3$) — выражением

$$w_{klm} = \begin{cases} p, & \text{если } |k| < (\lfloor K/2 \rfloor - 1) \quad \& \quad |l| < (\lfloor K/2 \rfloor - 1) \quad \& \quad |m| < (\lfloor K/2 \rfloor - 1), \\ n_1, & \text{если } |k| = (\lfloor K/2 \rfloor - 1) \quad \& \quad |l| = (\lfloor K/2 \rfloor - 1) \quad \& \quad |m| = (\lfloor K/2 \rfloor - 1), \\ n & \text{иначе.} \end{cases}$$

Здесь $k, l, m = -\lfloor K/2 \rfloor, \dots, 0, \dots, \lfloor K/2 \rfloor$.

Размер шаблона соседства K выбран равным 7, так как экспериментально установлено, что такой размер шаблона является оптимальным для получения большого многообразия устойчивых структур. При моделировании используются периодические (B_p) и нулевые (B_0) граничные условия.

Эволюция тоталистического КА $\aleph_{\text{TCA}}$ (1) моделирует процессы структурообразования. С помощью проведения вычислительных экспериментов при различных начальных состояниях, матрицах весов и режимах функционирования в результате эволюции $\aleph_{\text{TCA}}$ получено большое многообразие различных устойчивых структур (рис. 1).

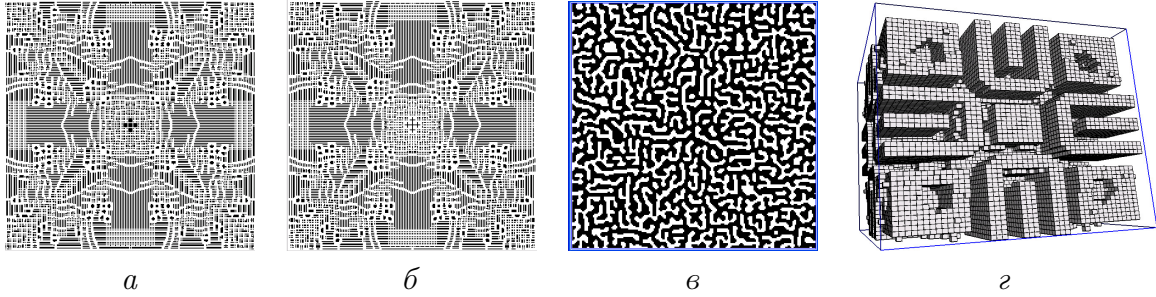


Рис. 1. Устойчивые состояния $\aleph_{\text{TCA}}$ при B_p : a, b — чередование двух структур при $\mu = \sigma$ для $|X_{\text{TCA}}^2| = 500 \times 500$ клеток, $\Omega(0) = \Omega_1$, $n = n_1 = -1$, $p = 0,54$; c — структура, формирующаяся при $\mu = \alpha$ для $|X_{\text{TCA}}^2| = 200 \times 200$ клеток, $\Omega(0) = \Omega_1$, $n = -0,27$, $n_1 = -0,07$, $p = 1$; d — структура, формирующаяся при $\mu = \sigma$ для $|X_{\text{TCA}}^3| = 50 \times 50 \times 50$ клеток, $\Omega(0) = \Omega_1$, $n = n_1 = -1$, $p = 1,6$

Для графического представления глобального состояния клеточного массива клетки с состоянием $u = 1$ отображаются чёрным цветом, а клетки с состоянием $u = 0$ — белым цветом.

В результате вычислительных экспериментов обнаружено, что при синхронном режиме функционирования $\aleph_{\text{TCA}}$ сходится преимущественно к чередованию двух устойчивых структур, т.е. через определённое число итераций t' происходит чередование двух глобальных состояний: $\Omega(t' + 2k) = \Omega(t')$ и $\Omega(t' + 2k + 1) = \Omega(t' + 1)$, $k \in \mathbb{N}$. При асинхронном режиме $\aleph_{\text{TCA}}$ сходится к одному устойчивому состоянию, т.е. через определённое число итераций t' глобальное состояние клеточного массива не изменяется: $\Omega(t) = \Omega(t')$ для всех $t > t'$.

Устойчивые структуры, формирующиеся в результате эволюции $\aleph_{\text{TCA}}$, даже при неоднородном начальном распределении единичных клеток являются довольно простыми (рис. 2). Использование двухслойного ТКА $\aleph_S$ позволяет получать более сложные пространственно-неоднородные мотивы, похожие на наблюдаемые в природе.

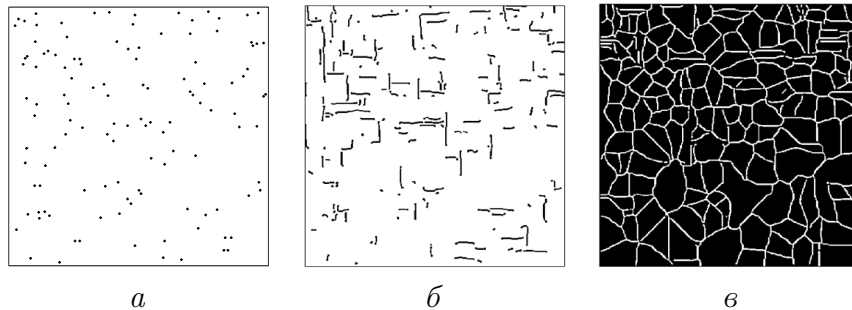


Рис. 2. Структуры, формирующиеся с помощью $\aleph_{\text{TCA}}$ при $|X_{\text{TCA}}^2| = 500 \times 500$ клеток и B_0 : a — начальное состояние клеточного массива $\Omega(0) = \Omega_3$, $P_{\Omega_3}^1 = 0,0005$, $P_{\Omega_3}^2 = 0,0001$; b — устойчивое состояние $\aleph_{\text{TCA}}$ при $\mu = \alpha$, $n = -0,5$, $n_1 = -0,1$, $p = 1$; c — устойчивое состояние $\aleph_{\text{TCA}}$ при $\mu = \sigma$, $n = -0,5$, $n_1 = -0,1$, $p = 2$

2.2. Устойчивые структуры, формируемые с помощью двухслойного тоталистического КА $\aleph_S$

Двухслойный ТКА $\aleph_S$ при различных значениях весовых коэффициентов позволяет генерировать компьютерное представление пористых материалов с различной морфологией. Например, в результате эволюции $\aleph_S$ при начальном состоянии $\Omega(0) = \Omega_2$, $P_{\Omega_2} = 0,01$, значениях весовых коэффициентов $n = -0,5$, $n_1 = -0,1$, $p = 3$ и $P_f = 0,01$, $P_t = 0,7$ возникают структуры, похожие на изображение бетона (рис. 3, а, б). Аналогично в трёхмерном случае при значениях весовых коэффициентов $n = -0,5$, $n_1 = -0,1$, $p = 2$ и начальном состоянии $\Omega(0) = \Omega_3$ с вероятностями распределения единичных клеток $P_{\Omega_3}^1 = 0,01$, $P_{\Omega_3}^2 = 0,1$, $P_{\Omega_3}^3 = 0,3$ в результате эволюции $\aleph_S$ формируется пористая структура, представленная на рис. 3, в. На рис. 3 представлены осреднённые глобальные состояния $\aleph_S$, серый цвет соответствует меньшей концентрации единичных клеток, чёрный — большей концентрации.

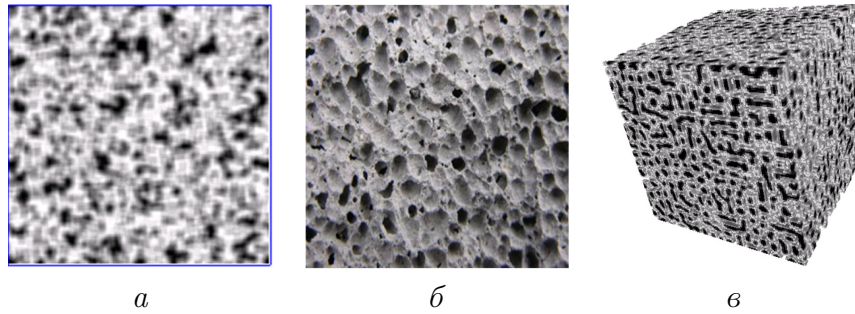


Рис. 3. Структура, формирующаяся в результате эволюции $\aleph_S$ при $\mu = \alpha$ в двумерном случае $|X_{\text{TCA}}^2| = 200 \times 200$ для $n = -0,5$, $n_1 = -0,1$, $p = 3$ и $P_f = 0,01$, $P_t = 0,7$ (а); фотография пористого материала (б); структура, формирующаяся в трёхмерном случае при $|X_{\text{TCA}}^3| = 100 \times 100 \times 100$, $n = -0,5$, $n_1 = -0,1$, $p = 2$ и $P_f = 0,5$, $P_t = 5 \cdot 10^{-5}$ (в)

Морфология формирующихся пористых структур меняется в течение эволюции $\aleph_S$. Для её анализа на каждой итерации вычисляются следующие численные характеристики:

- 1) $L(1)$ и $L(0)$ — число компонент связности для единиц и нулей. Компонента связности — это множество клеток с одинаковыми состояниями ($u = 1$ либо $u = 0$), в котором для всех клеток есть путь из одной клетки в другую;
- 2) $P_v(1)$, $P_g(1)$ и $P_v(0)$, $P_g(0)$ — степень перколяции вдоль клеток с $u = 1$ и с $u = 0$ по вертикали (P_v) и горизонтали (P_g). Степень перколяции — это количество клеток, принадлежащих правой (или нижней) границе массива, в которые есть путь из клеток, принадлежащих противоположной границе;
- 3) Porosity — пористость; вычисляется как отношение количества клеток с $u = 0$ к размеру всего массива;
- 4) $Np(1)$ — процент клеток с состоянием $u = 1$; вычисляется как отношение количества единичных клеток к размеру всего массива, умноженное на 100 %;
- 5) Tortuosity — степень извилистости; вычисляется как число углов на границах связных компонент.

Возможность визуального наблюдения за эволюцией $\aleph_S$ и вычисления значений характеристик в процессе моделирования позволяет получать компьютерные представления пористых материалов с нужной морфологией.

При заданных начальном распределении единичных клеток, значениях активаторов и ингибиторов на каждой итерации формируются структуры с различными характеристиками (рис. 4). При получении компьютерного представления пористого материала с требуемыми характеристиками вычислительный процесс может быть остановлен, а глобальное состояние $\aleph_S$ сохранено в файл для дальнейшего анализа.

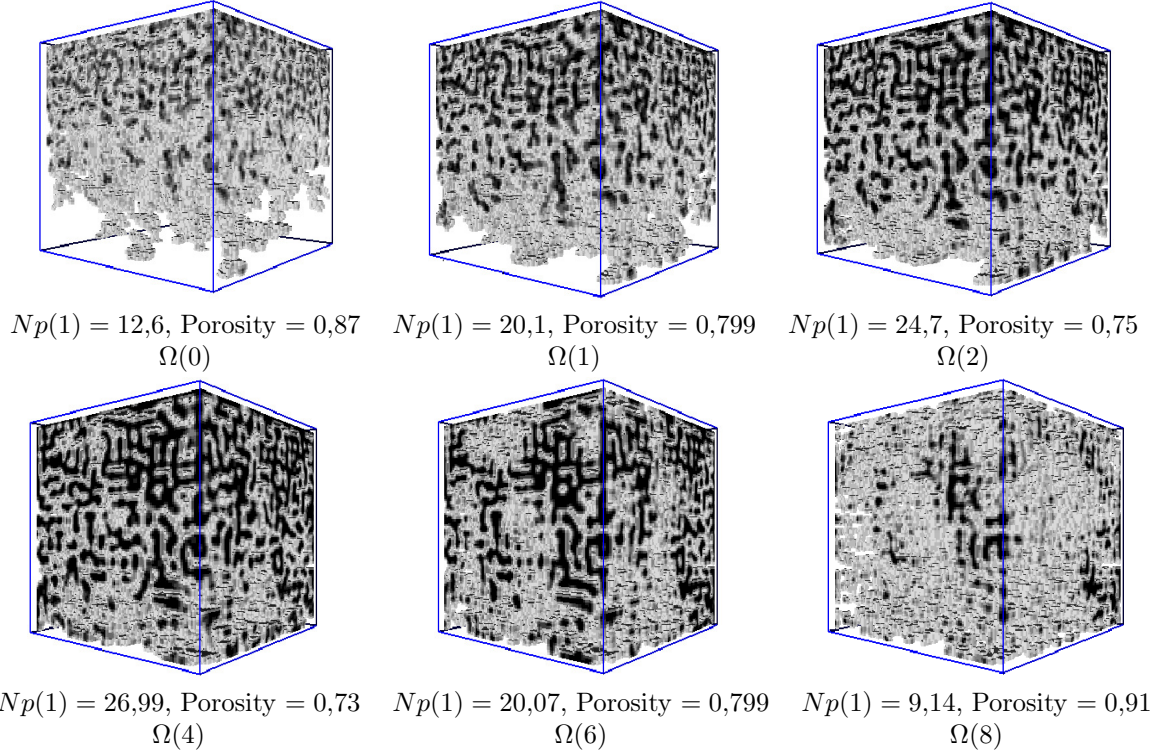


Рис. 4. Изменение морфологии компьютерного представления пористого материала, формирующегося в течение эволюции $\aleph_S$ при начальном распределении $\Omega(0) = \Omega_3$ с $P_{\Omega_3}^1 = 0,05$, $P_{\Omega_3}^2 = 0,001$, $P_{\Omega_3}^3 = 0,0001$ и $|X_{TCA}^3| = 100 \times 100 \times 100$, $n = -0,5$, $n_1 = -0,1$, $p = 3$ и $P_f = 0,5$, $P_t = 5 \cdot 10^{-5}$

Заключение

Разработана двухслойная тоталистическая КА-модель $\aleph_S$ процессов структурообразования, являющаяся параллельной композицией тоталистического КА $\aleph_{TCA}$ и асинхронного КА второго слоя. Предложенная КА-модель $\aleph_S$ позволяет генерировать компьютерное представление двумерных и трёхмерных пористых материалов с различной морфологией. В зависимости от начального распределения единичных клеток, значений активаторов и ингибиторов в результате эволюции $\aleph_S$ формируется большое многообразие различных устойчивых структур. Для анализа формирующихся структур в процессе моделирования вычисляются численные характеристики глобального состояния КА: число компонент связности, степень перколяции, пористость, процент единичных клеток. Двухслойный ТКА $\aleph_S$ является эффективным инструментом для генерации компьютерного представления пористых материалов с нужной морфологией, так как визуальное отображение глобальных состояний $\aleph_S$ и вычисление значений характеристик на каждом шаге моделирования позволяет подбирать пористые структуры с требуемой морфологией.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Bandman O. L.* Using Cellular Automata for porous media simulation // J. Supercomputing. 2011. V. 57. No. 2. P. 121–131.
2. *Бандман О. Л.* Метод построения клеточно-автоматных моделей процессов формирования устойчивых структур // Прикладная дискретная математика. 2010. № 4. С. 91–99.
3. *Chua L. O., Hasler M., Moschytz G. S., and Neirynck J.* Autonomous cellular neural networks: A unified paradigm for pattern formation and active wave propagation // IEEE Trans. Circuits and Systems. 1995. V. 42. P. 559–577.
4. *Young D. A.* A local activator-inhibitor model of vertebrate skin patterns // Math. Biosciences. 1984. V. 72. P. 51–58.
5. *Turing A. M.* The chemical basis of morphogenesis // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Ser. B. Biol. Sci. 1952. V. 237. No. 641. P. 37–72.
6. *Gierer A. and Meinhardt H.* A theory of biological pattern formation // Kybernetik. 1972. V. 12. No. 1. P. 30–39.
7. *Gierer A.* Generation of biological patterns and form: Some physical, mathematical and logical aspects // Progress in Biophysics and Molecular Biology. 1981. V. 37. P. 1–47.
8. *Бандман О. Л.* Клеточно-автоматные модели пространственной динамики // Системная информатика. Методы и модели современного программирования. 2006. № 10. С. 59–113.
9. *Bandman O. L.* Cellular Automata composition techniques for spatial dynamics simulation // Bulletin of the Novosibirsk Computing Center. Ser. Comp. Sci. 2008. V. 27. P. 1–39.
10. *Chopard B. and Droz M.* Cellular Automata Modeling of Physical Systems. Cambridge University Press, 1998. 337 p.

REFERENCES

1. *Bandman O. L.* Using Cellular Automata for porous media simulation. J. Supercomputing, 2011, vol. 57, no. 2, pp. 121–131.
2. *Bandman O. L.* Metod postroenija kletочно-avtomatnyh modelej processov formirovaniya ustojchivyh struktur. Prikladnaya Diskretnaya Matematika, 2010, no. 4, pp. 91–99. (in Russian)
3. *Chua L. O., Hasler M., Moschytz G. S., and Neirynck J.* Autonomous cellular neural networks: A unified paradigm for pattern formation and active wave propagation. IEEE Trans. Circuits and Systems, 1995, vol. 42, pp. 559–577.
4. *Young D. A.* A local activator-inhibitor model of vertebrate skin patterns. Math. Biosciences, 1984, vol. 72, pp. 51–58.
5. *Turing A. M.* The chemical basis of morphogenesis. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Ser. B. Biol. Sci., 1952, vol. 237, no. 641, pp. 37–72.
6. *Gierer A. and Meinhardt H.* A theory of biological pattern formation. Kybernetik, 1972, vol. 12, no. 1, pp. 30–39.
7. *Gierer A.* Generation of biological patterns and form: Some physical, mathematical and logical aspects. Progress in Biophysics and Molecular Biology, 1981, vol. 37, pp. 1–47.
8. *Bandman O. L.* Kletочно-avtomatnye modeli prostranstvennoj dinamiki. Sistemnaja Informatika. Metody i Modeli Sovremennogo Programmirovaniya, 2006, no. 10, pp. 59–113. (in Russian)
9. *Bandman O. L.* Cellular Automata composition techniques for spatial dynamics simulation. Bulletin of the Novosibirsk Computing Center. Ser. Comp. Sci., 2008, vol. 27, pp. 1–39.
10. *Chopard B. and Droz M.* Cellular Automata Modeling of Physical Systems. Cambridge University Press, 1998. 337 p.