

TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA HÀ NỘI
VIỆN CÔNG NGHỆ THÔNG TIN VÀ TRUYỀN THÔNG



BÀI TẬP LỚN TÍNH TOÁN KHOA HỌC

DIFFUSION LIMITED AGGREGATION

Nhóm sinh viên

| | |
|-------------------------|-----------------|
| Sinh viên | SHSV |
| Đinh Thị Hà Ly | 20101849 |
| Trần Văn Nhuận | 20072164 |
| Trần Hữu Cường | 20093398 |
| Youikham Phinith | 20101795 |
| Trần Chí Thanh | 20092392 |

Giảng viên hướng dẫn
TS Vũ Văn Thiệu

Ngày 25 tháng 12 năm 2013

LỜI CẢM ƠN

Chúng em xin cảm ơn thầy **Vũ Văn Thiệu** đã cung cấp kiến thức để chúng em hoàn thành đề tài này.

| | |
|-------------------------|-----------------|
| Sinh viên | SHSV |
| Đinh Thị Hà Ly | 20101849 |
| Trần Văn Nhuận | 20072164 |
| Trần Hữu Cường | 20093398 |
| Youikham Phinith | 20101795 |
| Trần Chí Thanh | 20092392 |

PHÂN CHIA CÔNG VIỆC

Đinh Thị Hà Ly: Code chương trình, thực nghiệm, viết báo cáo.

Trần Văn Nhuận: Tìm hiểu lí thuyết, viết báo cáo.

Trần Hữu Cường: Code chương trình, viết báo cáo.

Youikham Phinith: Tìm hiểu lí thuyết.

Trần Chí Thanh: Tìm hiểu lí thuyết.

Mục lục

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Giới thiệu bài toán | 4 |
| 2 | Phương pháp số sử dụng | 4 |
| 3 | Cài đặt | 5 |
| 3.1 | DLA Scheme | 5 |
| 3.2 | Trình diễn kết quả | 7 |
| 4 | Thực nghiệm | 7 |
| 4.1 | Trường hợp 1: Thả một vi khuẩn ở giữa hàng cuối cùng của đĩa thức ăn . | 7 |
| 4.2 | Trường hợp 2: Thả một vi khuẩn ở trung tâm của đĩa thức ăn | 8 |
| 4.3 | Trường hợp 3: Thả vi khuẩn ở toàn bộ hàng cuối cùng của đĩa thức ăn . | 9 |
| 5 | Kết luận | 10 |

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Danh sách hình vẽ

| | | |
|---|---|----|
| 1 | Tìm các ứng cử viên (Nguồn: Chapter 1 - Numerical Solvers)) | 5 |
| 2 | Trường hợp thả vi khuẩn ở giữa hàng cuối cùng của đĩa thức ăn | 8 |
| 3 | Trường hợp thả vi khuẩn ở trung tâm của đĩa thức ăn | 9 |
| 4 | Trường hợp thả vi khuẩn ở toàn bộ hàng dưới cùng của đĩa thức ăn . . . | 9 |
| 5 | Khảo sát giá trị ω với sai số $\delta = 1e - 6$ | 10 |

1 Giới thiệu bài toán

Trong bài tập lớn này, chúng tôi tập trung mô phỏng hai quá trình: quá trình khuếch tán và quá trình phát triển của vi khuẩn.

- Quá trình khuếch tán: cụ thể trong bài viết của chúng tôi là sự khuếch tán của chất dinh dưỡng từ nơi có nồng độ chất dinh dưỡng cao sang nơi có nồng độ thấp.
- Quá trình phát triển của vi khuẩn: vi khuẩn ăn chất dinh dưỡng và phát triển, nó sẽ phát triển theo hướng nào có nhiều chất dinh dưỡng nhất.

Chính quá trình tiêu thụ chất dinh dưỡng của vi khuẩn làm xuất hiện sự chênh lệch về nồng độ chất dinh dưỡng, từ đó mà kích thích quá trình khuếch tán chất dinh dưỡng diễn ra.

Mô hình hoá bài toán

- Cho một đĩa chứa chất dinh dưỡng, giả sử coi đĩa chứa chất dinh dưỡng là một lưới chia $N \times N$ điểm. Theo đó chất dinh dưỡng chỉ nằm trên các điểm đó và vi khuẩn cũng phát triển chỉ trên các điểm đó. Tại mỗi điểm lưới có một nồng độ chất dinh dưỡng nhất định.
- Ta thả một con vi khuẩn vào trong đĩa chứa chất dinh dưỡng tại vị trí bất kì. Tại vị trí có vi khuẩn thì nồng độ chất dinh dưỡng bằng $c = 0$.
- Sau khi ăn hết chất dinh dưỡng, quần thể vi khuẩn sẽ chọn tại những điểm lân cận để phát triển với xác suất phụ thuộc vào nồng độ chất dinh dưỡng tại điểm đó. Quần thể vi khuẩn cứ tiếp tục ăn chất dinh dưỡng và phát triển dần theo quy luật đó cho đến khi ăn hết đĩa chất dinh dưỡng.
- Trong quá trình vi khuẩn ăn chất dinh dưỡng, chất dinh dưỡng sẽ khuếch tán từ nơi có nồng độ cao đến nơi có nồng độ thấp.

Bài toán: Mô phỏng quá trình vi khuẩn lớn dần và quá trình khuếch tán của chất dinh dưỡng.

2 Phương pháp số sử dụng

Để mô phỏng quá trình khuếch tán, cần giải phương trình Laplace. Trong bài tập lớn này, chúng tôi sử dụng phương pháp lặp SOR để tính xấp xỉ nồng độ chất dinh dưỡng tại từng lưới điểm của đĩa chứa chất dinh dưỡng.

Đầu vào cho quá trình lặp xấp xỉ SOR là ma trận nồng độ chất dinh dưỡng tại thời điểm hiện tại (trong đó có cả các điểm đã bị vi khuẩn chiếm chỗ).

Công thức được sử dụng để tính xấp xỉ nồng độ chất dinh dưỡng tại mỗi điểm lưới là:

$$c_{i,j}^{k+1} = \frac{\omega}{4} [c_{i+1,j}^k + c_{i-1,j}^{k+1} + c_{i,j+1}^k + c_{i,j-1}^{k+1}] + (1 - \omega)c_{i,j}^k$$

Trong đó:

- i, j là các tọa độ của điểm
- k là lần lặp thứ k

- ω có giá trị nằm trong khoảng (1,2)

Vòng lặp sẽ dừng khi thỏa mãn điều kiện dừng sau:

$$\max_{ij} |c_{i,j}^{k+1} - c_{i,j}^k| < \delta$$

Đầu ra của vòng lặp là một ma trận nồng độ chất dinh dưỡng mới.

3 Cài đặt

3.1 DLA Scheme

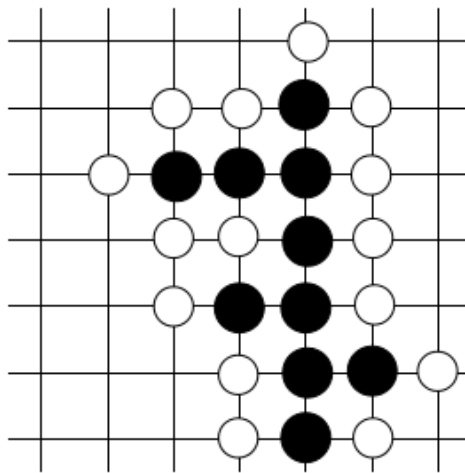
Để thực hiện mô phỏng quá trình trên, chúng tôi sử dụng giải thuật DLA (Diffusion Limited Aggregation) để tính toán quá trình phát triển của quần thể vi khuẩn trong môi trường chất dinh dưỡng.

Giải thuật

1. Giải phương trình Laplace để tính được phân bố nồng độ của chất dinh dưỡng, giả sử tại vị trí của vi khuẩn thì nồng độ chất dinh dưỡng $c = 0$. Trong cài đặt này sử dụng phương pháp lặp SOR.
2. Tìm các ứng cử viên cho việc phát triển của vi khuẩn.
3. Với mỗi ứng cử viên, xác định xác suất để vi khuẩn phát triển tại điểm đó.
4. Phát triển.
5. Trở lại bước 1.

Quá trình phát triển của vi khuẩn được tính toán như sau.

Bước 1. Tìm các ứng cử viên



Hình 1: Tìm các ứng cử viên (Nguồn: Chapter 1 - Numerical Solvers))

Mỗi điểm lưới (ngoại trừ biên) đều có 4 điểm lưới khác nằm xung quanh, ta gọi đó là các điểm đông – tây – nam – bắc. Tất cả các điểm lưới có ít nhất một trong 4 điểm đông – tây – nam – bắc là vi khuẩn thì đều được xem là ứng cử viên để vi khuẩn phát triển.

Với mỗi ứng cử viên, xác suất để vi khuẩn phát triển tại điểm đó được tính theo công thức:

$$p_g((i, j) \in \circ \rightarrow (i, j) \in \bullet) = \frac{(c_{i,j})^\eta}{\sum_{(i,j) \in \circ} (c_{i,j})^\eta}$$

Trong đó:

- $c_{(i,j)}$ là nồng độ chất dinh dưỡng tại điểm (i, j) .
- η là tham số quyết định hình dạng của quần thể vi khuẩn, thường nằm trong khoảng 0.5 đến 2.0 (Niemeyer et al. 1984)

Ý nghĩa của η

η thể hiện mức độ ưu tiên của việc vi khuẩn phát triển theo hướng có nồng độ dinh dưỡng cao.

- Nếu η bằng 0 thì mọi điểm ứng cử viên đều có xác suất vi khuẩn phát triển bằng nhau, không phụ thuộc nồng độ dinh dưỡng ở điểm đấy.

Dự đoán: hình dạng quần thể gần với hình cầu.

- Nếu η càng lớn thì những điểm ứng cử viên có nồng độ dinh dưỡng cao sẽ có xác suất vi khuẩn phát triển càng lớn.

Dự đoán: quần thể phát triển không đều theo các hướng, tập trung phát triển ở nơi có nồng độ dinh dưỡng cao.

Bước 2. Quyết định ứng cử viên

Sau khi tính toán xác suất cho từng điểm ứng cử viên, với mỗi ứng cử viên, thực hiện sinh một số ngẫu nhiên trong khoảng $[0, 1]$. Nếu số ngẫu nhiên này nhỏ hơn xác suất của ứng cử viên thì điểm ứng cử viên đó được chọn làm điểm vi khuẩn phát triển (điểm đó trở thành vi khuẩn, $c = 0$). Với cách lựa chọn này thì trung bình mỗi thế hệ sẽ có 1 điểm được lựa chọn.

Mã giả

```
int main(int argc, char** argv)
{
    init();

    for (int i = 1; i <= GENERATION; ++i) {
        sor();
        determineCandidates();
        calculateProb();
        grow();
        writeFile(i);
    }

    return 0;
}
```


3.2 Trình diễn kết quả

Trong quá trình mô phỏng sự phát triển của vi khuẩn, tại mỗi thế hệ, lưu lại ma trận nồng độ chất dinh dưỡng. Sử dụng matlab để hiển thị ma trận nồng độ dưới dạng ảnh, kết hợp các thế hệ lại thành video.

Code Matlab (*Tham khảo code của thầy Vũ Văn Thiệu [1]*)

```
mov = avifile('movie.avi'); % Record the movie in avi format
mov.fps = 1;

t = load('out.0001');
N = size(t, 2);

for i=1:2000
    c = load(sprintf('out.%04d', i));
    index = find(c==0);
    c(index) = 0.3; % chọn màu vi khuẩn
    imagesc(c);
    axis square;
    lm = colormap(hsv);
    colorbar;
    F = getframe(gca);
    mov = addframe(mov,F);
end;

mov = close(mov);
```

4 Thực nghiệm

Chúng tôi tiến hành thực nghiệm trên đĩa thức ăn kích thước 256 x 256 với các trường hợp:

- Thả vi khuẩn ở giữa hàng cuối cùng của đĩa thức ăn
- Thả vi khuẩn ở trung tâm của đĩa thức ăn
- Thả vi khuẩn ở toàn bộ hàng cuối cùng của đĩa thức ăn.

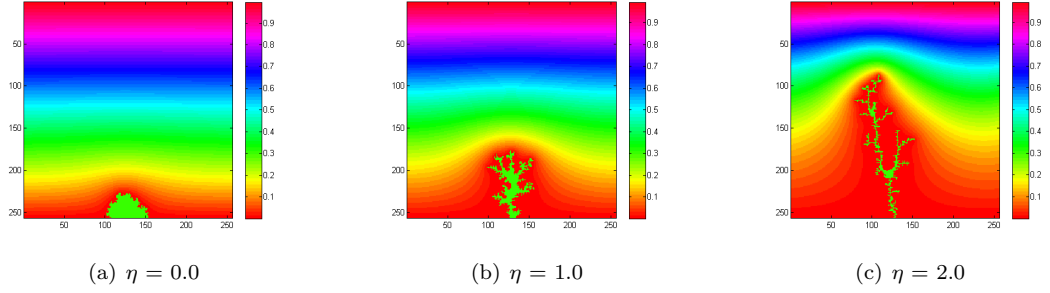
Trong mỗi trường hợp, chúng tôi thử nghiệm với ba giá trị của η , đó là $\eta = 0.0$, $\eta = 1.0$ và $\eta = 2.0$. Các kết quả sau đây có được khi thực hiện lặp 1000 lần giải thuật DLA, hay nói là sau 1000 thế hệ phát triển của vi khuẩn.

4.1 Trường hợp 1: Thả một vi khuẩn ở giữa hàng cuối cùng của đĩa thức ăn

Trong trường hợp này, chúng tôi mô phỏng sự phát triển của vi khuẩn từ vị trí trung tâm ở hàng cuối cùng trong đĩa thức ăn. Điều kiện biên được sử dụng trong trường hợp này như sau:

- Hàng trên cùng của đĩa thức ăn, nồng độ thức ăn tập trung cao nhất ($c = 1$)

- Hàng dưới cùng của đĩa thức ăn, nồng độ thức ăn tập trung thấp nhất ($c = 0$)
- Hai biên trái phải, chúng tôi sử dụng điều kiện biên tuần hoàn.



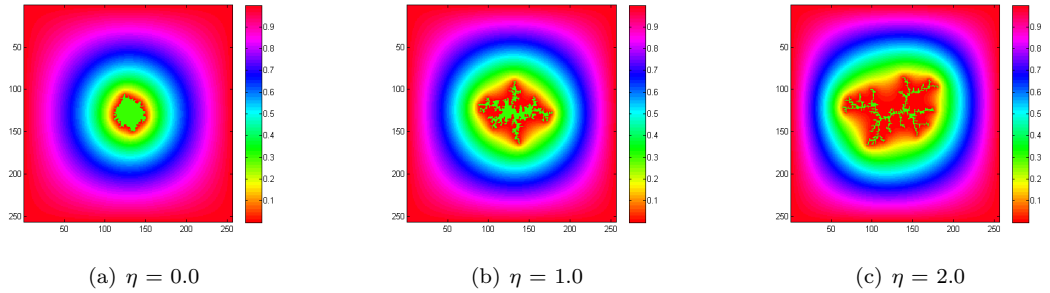
Hình 2: Trường hợp thả vi khuẩn ở giữa hàng cuối cùng của đĩa thức ăn

Hình 2 biểu diễn các kết quả mô phỏng của trường hợp 1 với ba giá trị của η .

- Với giá trị $\eta = 0.0$ (2(a)): tất cả các phía bao quanh vi khuẩn có xác suất phát triển như nhau, do đó, hình dạng của vi khuẩn “tròn”, hay nói cách khác, chúng không phát triển thiên về hướng nào cả.
- Với giá trị $\eta = 1.0$ (2(b)): xác suất phát triển của từng vi khuẩn trong nhóm không còn đồng đều nữa, vi khuẩn phát triển theo nhiều nhánh.
- Với giá trị $\eta = 2.0$ (2(c)): cũng giống như trường hợp $\eta = 1.0$, nhưng có sự phân nhánh vi khuẩn thiên về 1 hướng.

4.2 Trường hợp 2: Thả một vi khuẩn ở trung tâm của đĩa thức ăn

Trường hợp này, vi khuẩn được thả ở trung tâm của đĩa thức ăn với điều kiện biên là cả 4 cạnh bao lấy đĩa thức ăn đều có nồng độ thức ăn tập trung cao nhất ($c = 1$). Cũng



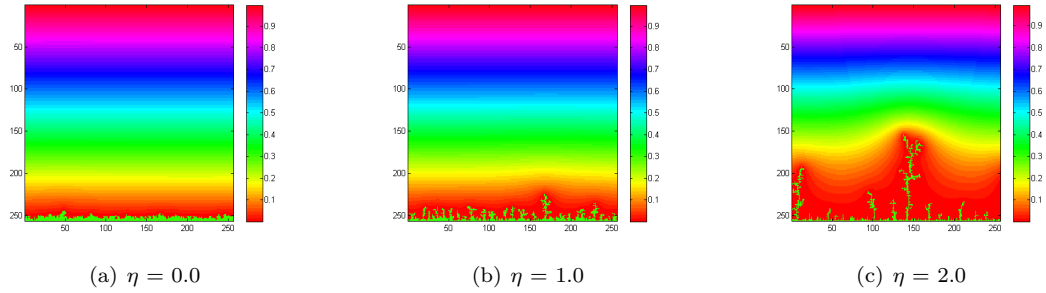
Hình 3: Trường hợp thả vi khuẩn ở trung tâm của đĩa thức ăn

giống như trong trường hợp 1, ở đây:

- Với $\eta = 0.0$ (4(a)), vi khuẩn phát triển đồng đều theo mọi hướng.
- Với $\eta = 1.0$ (4(b)), vi khuẩn có sự phân nhánh, các nhánh khá đồng đều
- Với $\eta = 2.0$ (4(c)), vi khuẩn phân nhánh rõ ràng hơn, chỉ thiên về 1 số hướng.

4.3 Trường hợp 3: Thả vi khuẩn ở toàn bộ hàng cuối cùng của đĩa thức ăn

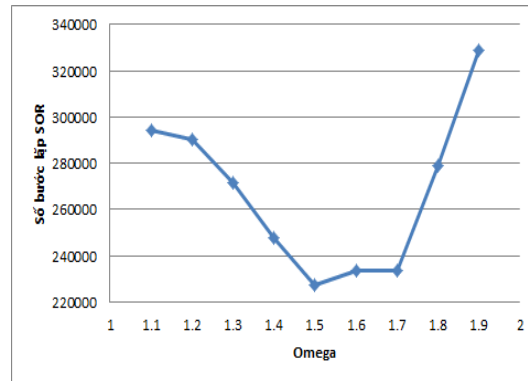
Trong trường hợp này, vi khuẩn được thả ở toàn bộ hàng cuối cùng. Chúng tôi sử dụng điều kiện biên giống với trường hợp 1. Kết quả được mô phỏng ở hình 4



Hình 4: Trường hợp thả vi khuẩn ở toàn bộ hàng dưới cùng của đĩa thức ăn

5 Kết luận

Trong bài tập lớn này, chúng tôi tìm hiểu được lý thuyết của việc mô hình hóa bài toán khuếch tán chất dinh dưỡng cùng với sự phát triển của vi khuẩn. Đây là hai quá trình có quan hệ tương hỗ với nhau. Từ đó, chúng tôi tìm hiểu giải thuật DLA để giải bài toán này. Trong đó, phương pháp SOR được sử dụng để giải phương trình Laplace. Chúng tôi cũng tiến hành khảo sát giá trị ω và thấy rằng, với lưới thức ăn kích thước 256×256 , giá trị phù hợp nhất dao động quanh $\omega = 1.5$ (5).



Hình 5: Khảo sát giá trị ω với sai số $\delta = 1e - 6$

Do thời gian không cho phép, nên chúng tôi chưa tiến hành thực nghiệm việc chia đĩa thức ăn thành các lưới điểm kích thước 512×512 và 1024×1024 , cũng như các giá trị ω tương ứng với mỗi cách chia đó.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Vu Van Thieu. *Modeling Diffusion Limited Aggregation Using Distributed Computing*.
2. Course document: *Numerical Solvers*.