
УДК 681.326.32.

Компьютерное моделирование перколяционных процессов в однородных структурах

Назаров А.В.

Аннотация

В статье представлены результаты компьютерного моделирования перколяционных процессов в однородных структурах. В процессе моделирования порог перколяции автоматически определялся на основе метода многократной маркировки кластеров Хошена и Копельмана. При помощи разработанного алгоритма экспериментально определены: порог перколяции для квадратной решетки, зависимость времени моделирования от размеров поля для разных шагов роста вероятности заполнения ячеек моделируемой структуры, зависимость порога перколяции от размеров поля, а также зависимость времени моделирования от шага роста концентрации.

Ключевые слова

перколяция, маркировка кластеров, протекание среды, порог перколяции, однородная структура, соединяющий кластер, индексация кластеров, дискретное рабочее поле.

Введение

Перколяция (от англ. percolation - просачивание) – явление протекания среды, т.е. образования в некоторой среде области, по своим свойствам отличной от остального объема, соединяющей условно-противоположные границы рассматриваемой среды. Основоположники теории перколяции [4] использовали термин «перколяция» для противопоставления термину «диффузия». Если в случае диффузии мы имеем дело со случайным блужданием частицы в регулярной среде, то в случае перколяции речь идет о регулярном движении частиц в случайной среде [2].

Моделирование подобных структур на ЭВМ является важной задачей научных исследований в самых разных областях, поскольку перколяционные процессы являются неотъемлемой частью получения или эксплуатации многих перспективных материалов. Именно понимание и возможность прогнозирования зависимости макропараметров материалов от их микроструктуры позволяют реализовать требуемые функции этих материалов. Проходящие в них перколяционные процессы оказывают существенное влияние на поведение или синтез данных микроструктур. Например, перколяционные процессы в дорожных покрытиях из асфальтового бетона непосредственно определяют срок их эксплуатации. В основе структурной перестройки расплава при стекловании чистых металлов лежит процесс образования перколяционного кластера из контактирующих и взаимопроникающих икосаэдров. Изучение

перколяционных процессов при получении металлополимерных нанокомпозитов позволило создать на их основе новые емкостные датчики температуры с тепловой памятью. Кроме того, изучение перколяционных процессов имеет значение для порошковой металлургии, производства композитов, микроэлектроники.

Целью настоящей работы является моделирование перколяционного процесса в однородной структуре и определение порога перколяции. Наибольший практический интерес здесь представляет отработка алгоритма нумерации кластеров. Сама структура материала выбрана абстрактно, без привязки к какой-либо физической задаче и, поэтому, результаты моделирования могут быть применены к широкой группе материалов.

Модель среды представлена в виде таблицы чисел (рис.1–а), заполненной ненулевыми элементами с определённой вероятностью. Нулевое значение ячейки характеризует её как неизменный фрагмент среды. Остальные значения элементов «среды» примем равными единице. Под кластером понимается совокупность граничащих друг с другом ненулевых элементов. Для упрощения анализа примем, что диагональные элементы соседними не являются. Кластер, элементы которого присутствуют на любых двух противоположных краях таблицы, является перколяционным, т.е. образующим путь для «просачивания» сквозь среду (рис. 1–б).



Рис.1 Модель среды в виде таблицы чисел: а) без перколяции, б) с перколяцией.

Известно [1,2], что порогом перколяции называется такая вероятность заполнения ячеек среды, при которой появляется первый бесконечный кластер на бесконечной решетке. Однако, для конечной решетки, которую мы можем промоделировать на ЭВМ, всегда существует ненулевая вероятность того, что будет появляться соединяющий кластер, связывающий одну сторону решетки с другой. Поэтому порогом перколяции будем считать среднее значение вероятности заполнения ячеек, при которой появляется первый соединяющий кластер.

Таким образом, поставленную задачу решает многократная генерация модели среды, сопровождаемая наращиванием вероятности наличия ненулевого элемента в ячейке, до появления первого перколяционного кластера. Вероятность, при которой возникла перколяция, и есть искомое экспериментальное значение. Точность получаемого результата повышается уменьшением шага возрастания вероятности, увеличением числа экспериментов и размера таблицы-среды.

Алгоритмы генерации и заполнения таблицы ненулевыми значениями являются тривиальной задачей и не требуют подробного описания. Интерес представляет алгоритм определения

перколяционного кластера. Для определения последнего был применен метод многократной маркировки кластеров Хошена и Копельмана (2). Суть метода заключается в следующем: сначала производится последовательная индексация кластеров, на основании уже проиндексированных позиций, то есть предыдущей строки и предыдущего столбца. Рассматриваемой ячейке присваивается либо наименьший из индексов соседей (рассматриваются только два из четырех соседей ячейки), либо новый индекс, если в соседних ячейках пусто. При такой индексации неизбежны ошибки, так как не учитываются два других соседа ячейки. Это может привести к тому, что один кластер будет в разных своих частях иметь разные индексы. Поэтому по окончании индексации производится поиск ошибочных индексов. С этой целью создается массив, где в позиции, соответствующей неверному индексу, хранится тот, на который следует его заменить. Далее, последовательно рассматриваются все ненулевые ячейки и их соседи, а также элементы массива исправлений для них и из всех индексов выбирается наименьший. Он записывается по адресу рассмотренной ячейки в массив исправлений.

Для полного исключений ошибок постоянно ведется анализ массива исправлений. В процессе анализа для ячейки, хранящей ненулевой индекс исправления, осуществляется проверка по адресу этого индекса, и так до тех пор, пока не будет получен адрес, по которому хранится ноль. Таким образом, при анализе очередной ячейки и её соседей мы получаем не просто наименьший из индексов этих ячеек, а наименьший из возможных индексов исправления. Причем в случае, если по адресу рассматриваемой ячейки в массиве исправлений хранится меньший индекс, чем найденный указанным выше способом, то изменяется именно этот меньший индекс. Таким образом, проверка имеет двусторонний характер.

По окончании процедуры анализа массива исправлений, основываясь на содержании массива исправлений, производится переиндексация основной таблицы. В результате генерируется массив верно проиндексированных кластеров. Последние удобны для вычисления всевозможных характеристик моделируемой структуры, в частности для определения наличия перколяционного кластера. Проверка перколяции проводится обычным способом, то есть, поиском одинаковых индексов кластера на противоположных сторонах таблицы.

Как было сказано выше, для вычисления порога перколяции, реализована многократная генерация таблицы заданного размера, с увеличением вероятности заполнения ячеек с указанным шагом. По истечении заданного числа достижений перколяции вычисляется среднее значение вероятности, при которой появлялся первый перколяционный кластер в каждом случае.

Моделирование, проведенное с исходными условиями: таблица 100×100 , шаг возрастания вероятности 0,001, число экспериментов 100, дало результат: пороговая вероятность $P_s=0,568$. Физически это означает, что для появления в некоторой среде области, отличной по свойствам от остальной среды и при этом соединяющей условно-противоположные ее границы, необходимо, чтобы более 56,8% объема этой среды было по свойствам тождественно соединяющей области. Однако, это не означает, что соединяющая область занимает 56,8% объема среды. Согласно теоретической оценке порога перколяции для квадратной ре-

сетки [2], он должен попадать в интервал (0,509535; 0,68189). Как видно, результаты моделирования укладываются в эти рамки, что подтверждает достоверность эксперимента. Тем не менее, если целью определенных технологических операций является именно получение перколяции в определенном объеме, то можно говорить о том, что 56,8% это достаточно много, так как необходимо изменить свойства более половины первоначального объема.

Для иллюстрации особенности работы изложенного выше алгоритма приведем зависимости времени и результатов моделирования от входных параметров. На рис. 2 представлены зависимости $t = t(D)$ времени (t) времени достижения перколяции от размеров поля (D) для разных шагов роста вероятности заполнения ячеек P в процессе моделирования на ЭВМ.

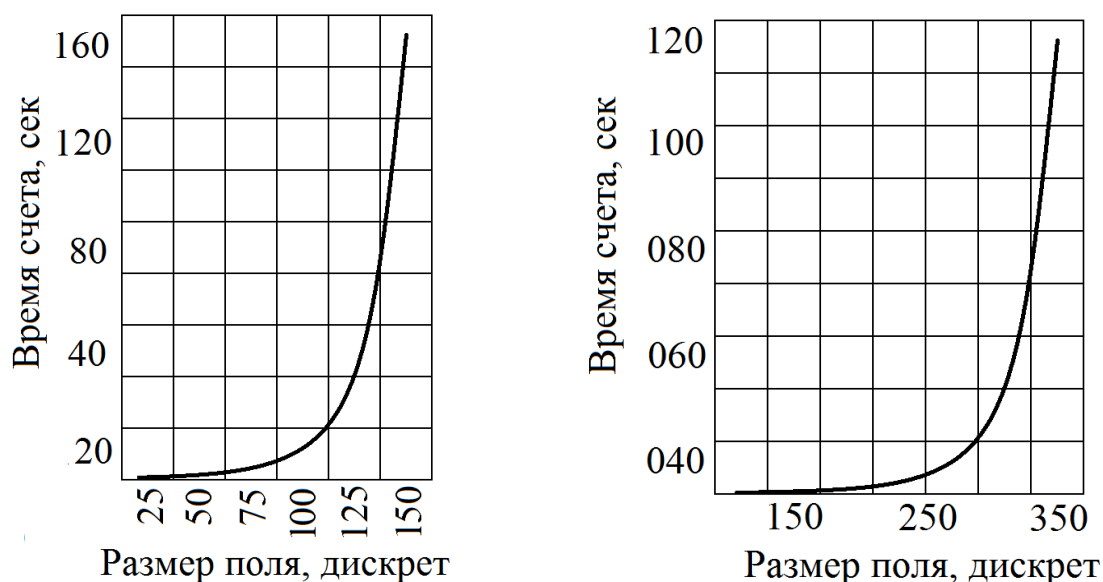


Рис.2 Зависимость $t = t(D)$ для шага роста вероятности: а) $P = 0,01$ и б) $P = 0,001$

Квази-степенной рост затрат машинного времени можно объяснить соответствующей особенностью алгоритма: последовательный перебор всех ячеек поля осуществляется несколько раз. Так как время каждого перебора возрастает пропорционально размерам поля, то в результате время всего моделирования возрастает пропорционально времени перебора в некоторой степени.

На рисунке 3 представлена зависимость порога перколяции от размеров поля. Сплошная (пунктирная) линия слева от значения размерности поля, равного 130 дискрет, показывает изменение порога перколяции от размерности поля для шага роста концентрации, равного 0,01 (0,001). Вид зависимости можно объяснить тем, что с увеличением объема структуры, шансов случайного возникновения перколяции при относительно небольшой для этого концентрации заполненных ячеек уменьшается. При уменьшении же поля вероятность случайного возникновения перколяционного кластера играет большую роль, особенно при медленном возрастании концентрации заполненных ячеек.

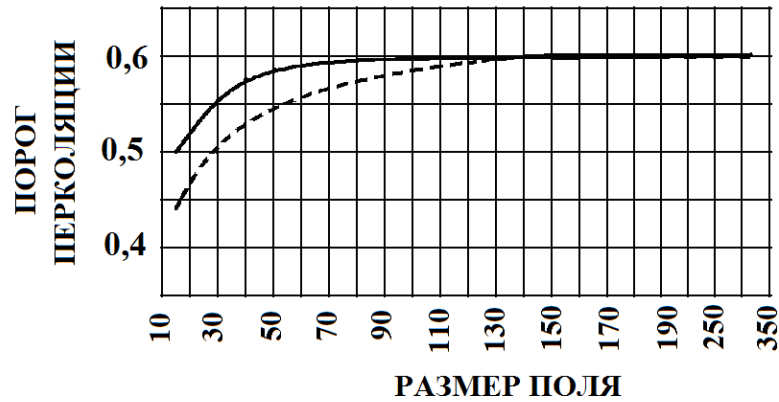


Рис. 3. Зависимость порога перколяции от размеров поля

Так, на поле 10×10 при шаге роста концентрации заполненных ячеек 0.001 перколяция возникает при концентрации заполненных ячеек в $43,3\%$, что ощутимо меньше теоретически найденного нижнего порога.



Рис. 4. Зависимость времени моделирования (в секундах) от шага роста концентрации заполненных ячеек

На рис. 4 представлена зависимость времени моделирования от шага роста концентрации заполненных ячеек на поле 100×100 . Она схожа с зависимостью от размеров поля, но несколько более пологая. Можно сделать вывод о том что при данном размере поля исчерпывающая точность не требует исключительных затрат машинного времени.

Полученные зависимости носят универсальный характер и могут быть полезны при оценке затрат машинного времени определения порога перколяции в однородных структурах при выборе размерности дискретного рабочего поля моделируемой структуры.

Библиографический список

1. Х. Гулд, Я. Тобочник. «Компьютерное моделирование в физике: Части 1 и 2». 1991. – Электронная версия (http://www.libedu.ru/l_a/guld_h_tobochnik_ja.html).
2. Ю.Ю. Тарасевич. «Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. Учебное пособие. М.: Едиториал УРСС, 2002. – 112 с., илл.

3. С.А. Зуев, «Оценки порога перколяции для квадратной решетки», ТВП, 32:3 (1987), 606-609.
4. Broadbent S.K., Hammersley J.M. Percolation Processes I. Crystals and mazes. // Proc. Camb. Phil. Soc. 53, 629–641. 1957.

Сведения об авторах

Назаров Александр Викторович,, профессор Московского авиационного института
(национального исследовательского университета), д.т.н., тел.: +7 499 267-83-00, +7 499
267-83-00,
e-mail: naza46@post.ru