ПОСТРОЕНИЕ КЛАСТЕРНЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ ДЛЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ АНСАМБЛЕЙ С РАЗЛИЧНЫМ РАДИУСОМ СВЯЗНОСТИ

А.С. Акуленко, В.В. Гулевич

Учреждение образования «Гомельский государственный технический университет имени П.О.Сухого», Республика Беларусь

Научный руководитель О.Д. Асенчик

Разбиение системы взаимодействующих центров на подсистемы, элементы внутри которых взаимодействуют друг с другом, эффективный и распространенный способ уменьшения количества операций при численном моделировании таких систем. Такой подход является распространенным при анализе процессов переноса возбуждения, электрона, вируса и т. д. в неупорядоченных ансамблях взаимодействующих центров. Решив линейные или нелинейные кинетические уравнения для каждой из подсистем, состоящей из n центров ($n \ll N$, где N-общий размер системы), значения для средних величин можно получить, зная функцию распределения количества подсистем (кластеров) по размеру n [1].

Целью настоящей работы являлось: получение функции распределения кластеров по размерам в зависимости от средней концентрации центров, случайным образом распределённых пространстве в зависимости от радиуса связности. Под радиусом связности понимается наибольшее расстояние между двумя соседними центрами, при котором эти центры считаются взаимодействующими друг с другом.

Расчётная часть проекта была реализована при помощи различных систем. На языке системы Matlab были написаны модули для: генерации координат центров в трёхмерном пространстве; визуализации распределения; реализации алгоритма функции распределения; графического представления результатов и интерполяции полученных данных, записанных в двоичные файлы. Данная система ориентирована на работу с массивами и реальными данными и позволяет выполнять достаточно быстрое вычисление в арифметике с плавающей точкой.

В среде DELPHI был создан ряд процедур и функций, позволяющих генерировать координаты центров, учитывая условия заполнения области, и разбивать сгенерированные точки на кластеры. Так же приложение позволяло решать ряд других сопутствующих задач. Одной из них являлась задача ускорение процесса генерации точек (проблема плотной упаковки). Она возникла в связи с заданным по условию ограничением на расположение точек и, связанным с этим, длительным периодом создания новой точки. Для решения данной проблемы предлагались три метода: метод перенесения вновь созданной точки, для которой условия заселения не выполнялось, на окружность (сферу), описанную около точки, созданной ранее; метод смещения вновь созданной точки, для которой условия заселения не выполнялось, по радиус-вектору, соединяющему точку, созданную ранее и исследуемую точку; метод пересчёта координат вновь созданной точки, для которой условия заселения не выполнялось. После анализа данных трёх методов, как для двухмерной, так и для трёхмерной областей, было получено следующее: наиболее эффективным во временном отношении является первый метод (метод “перенесения на сферу”), при этом число циклов проверки расположения точки после соответствующего сдвига рекомендуется принимать равным 10, большее число циклов проверки является возможным, но нецелесообразным.

Для получения распределений использовались: двухмерная область, представляющая собой квадрат с длиной стороны 50R, и трёхмерное пространство, представляющее собой куб с длиной ребра 30R. В двух- и трёхмерные области случайным образом заселялись центры на расстоянии не менее R, где R – то наименьшее расстояние, на котором могут находиться два центра.

Для проверки правильности работы алгоритма генерации точек и их разбиения по кластерам было проведено сравнение с решеточной моделью, для которой известны перколяционные пороги [2]. Получено асимптотическое соответствие.

Анализ среднего значения функции распределения, то есть зависимости среднего размера кластера от концентрации центров при различных радиусах связности, показал, что перколяция, ведущая к образованию единого кластера, как в трехмерной, так и двухмерной исследуемой области, происходит на несколько больших интервалах концентрации, что ведёт к более плавному, равномерному переходу, что свойственно для квазиперколяции.

На порог квазиперколяции непосредственно влияет радиус связности. В ходе исследования было установлено, что с уменьшением радиуса связности, интервал концентраций, при которых происходит квазиперколяция, уменьшается и на графике функции в этом интервале происходит резкий скачек. С увеличением радиуса связности порог квазиперколяции смещается в область низких концентраций, с одновременным увеличением среднего размера кластера.

При уменьшении радиуса связности область перехода, ведущая к образованию единого кластера, сужается и смещается в сторону увеличения концентрации центров, при этом погрешности, связанные с размером исследуемой области, уменьшаются прямо пропорционально увеличению характерных линейных размеров.

В результате выполненной работы была получена функция распределения кластеров по размерам в зависимости от средней концентрации случайным образом распределенных центров в двух- и трехмерном пространстве в зависимости от радиуса связности. Функция представляется в виде графика (рис. 1) и набора текстовых и двоичных файлов. Интерполяция полученных данных, при любых заданных радиусах связности и концентрации, позволяет определить средний размер кластера и функцию распределения 1.

Рис. 1

Литература

1. Ван Кампен. Стохастические процессы в физике и химии – М.: Высшая школа, 1990. – 376 с.
2. Киркпатрик С. Сб. Теория и свойства неупорядоченных материалов /Ред. В.Л. Бонч-Бруевич; Перевод статьи S.Kirkpatrick, Rev.Mod.Phys. 45, 574 (1973), 1977. – Мир.