К вопросу о перколяции в структурах, формируемых протяженными нанообъектами

Д.С. Милованов, В.Г. Прокошев, Д.В. Абрамов

Владимирский государственный университет,
ross23@mail.ru, laser@vlsu.ru, awraam@mail.ru

Введение

В статье предлагаются подходы построения формальной модели, при помощи которой предполагается описывать физические свойства наноматериалов. Основной структурный элемент моделирования это узел – «частица» (наночастица; объект, имеющий размеры порядка 10^{-9} м). То есть при моделировании не учитывается ни атомарная, ни молекулярная структура наноматериала. Совокупность узлов специального вида – «трубка» (нанотрубка). На данном этапе рассматриваются только общие принципы построения такой модели. Поэтому, употребляя такие понятия как «частица» и «трубка», мы, все же, не предполагаем, что речь идет буквально о наночастицах или нанотрубках; моделируются просто точечные и протяженные объекты. Цель исследования – выявить качественное соответствие поведения модели, поведению реальных физических систем. Конкретно, изучается (в рамках формальной конструкции) зависимость изменения порога перколяции от таких факторов как: длина и изогнутость трубок, неравномерности распределения материала. При моделировании пространственной структуры, для получения физически значимых результатов, необходимо промоделировать взаимодействие в сети содержащей, не менее 10^8 узлов. Это потребует, по нашим оценкам, использования 125 параллельных процессов и порядка 80 – 100 гигабайт оперативной памяти; что соответствует приблизительно 25% – 35% возможностей, имеющегося в нашем распоряжении суперкомпьютера СКИФ-МОНОМАХ. Рассматриваемая же в статье модель «напыления тонкого слоя наноматериала на поверхность» – существенно проще. Простота определяется не только её 2-мерностью, но и тем, что используется проекционный вариант модели (см. ниже).

Загрузка материала

Трехмерную, по сути, задачу о напылении материала мы будем моделировать двумерной решеточной структурой с нечетной длиной стороны N_s (площадь $S = N_s \times N_s$), система координат такова, что центральный узел решетки имеет координаты (0, 0). Для построения распределения материала по решетке был предложен следующий алгоритм, который мы назвали исчерпыванием объема. Для заданной концентрации p суммарный объем (число составных частиц) загружаемого материала равен $V_n = pS$. Общая схема загрузки такова:

- входными параметрами алгоритма является концентрация p и длина трубок d;
- запускаем построение трубки длиной d из клетки (0, 0);
- пока остаточный объем больше 0, запускаем построение трубки длиной d из клетки (r_x, r_y), где r_x, r_y – случайные, целые, равномерно распределенные величины;

Схема построения трубки длиной d из клетки (r_x, r_y) такова:

- заполняем текущий узел (r_x, r_y);
- генерируется случайный вектор направления $a = (a_x,a_y)$: $| a_i | = 0$ или 1, $|a| > 0$;
- в цикле по i от 2 до d заполняем текущий узел (r_x+a_x, r_y+a_y) и смещаемся: $r_x := r_x + a_x$, $r_y := r_y + a_y$;
- заполнение узла (x,y) означает уменьшение остаточного объема на 1 и увеличение внутреннего счетчика узла (x,y) на 1; таким образом, одна и та же клетка

может соответствовать нескольким трубкам; внутренний счетчик эквивалентен *высоте* материала, нарастающего на клетку (x,y).

Отметим две следующие особенности:

- координаты (x,y) могут выйти за пределы области, в таком случае построение продолжается так, словно такая клетка существует, но корректировки счетчиков не происходит;
- случайное приращение координаты может быть посчитано не однократно (в самом начале), а может быть пересчитываемо на каждом шаге цикла по длине с вероятностью 1 или некоторой вероятностью $p_c < 1$. Таким образом, мы можем влиять на степень изогнутости трубки.

В силу построения (а именно: в силу того, что структуры нарастают на одну и ту же плоскость) касание структур можно определить по касанию проекций на площадь S. Исследуется вопрос протекания из центра на границу, а именно необходимо ответить на вопрос: обеспечивает ли концентрация p такую конфигурацию материала, при котором «почти наверное» имеет место протекание.

Численный эксперимент

Для исследования процессов перколяции был поставлен следующий эксперимент. Он реализован на универсальном параллельном сетевом симуляторе с модульной архитектурой (ПСС) [5]. Применение высокопроизводительных вычислений вызвано тем, что адекватные результаты могут быть получены только на больших размерах сетей, а также большими затратами моделирования структур. Симулятор достаточно универсален для решения большого класса задач, которые можно свести к сетевой (графовой) постановке. Различия целиком заключаются в модулях расширения, с которыми работает ядро симулятора. Модули расширения имеют унифицированный интерфейс, позволяющий выстраивать эксперимент как последовательный вызов цепочки модулей. Для решения рассматриваемой в статье задачи реализован один модуль расширения, который включает в себя две необходимые компоненты:

- построение топологии на основе распределения материала (заполняются списки смежности узлов и, тем самым, формируется граф, представляющий распределения материала в пространстве);
- запуск лавины на сформированном графе с целью определения наличия протекания из центра на границу (лавина моделируется стандартная: каждый узел, получив пакет с данными, *однократно* рассылает всем своим соседям, за исключением узла-отправителя, его копию).

В условиях кластера удобно запускать параллельно серию экспериментов, варьируя один из параметров. Такое необходимо, например, для поиска порога перколяции, который проводится следующим образом. Выделяется интересующий нас отрезок [pMin, pMax], на котором предполагается наличие перехода (изначально это [0,1]; далее он стягивается на основании данных, получаемых на каждом предыдущем шаге). Этот отрезок P точками делится на P-1 равных по длине отрезков, где P – число вычислительных узлов кластера. Мы работаем с 16 вычислителями (P = 15, так как один из них является управляющим). Этого более чем достаточно сначала для грубой локализации перехода, а затем и для более точной.

Для одного и того же набора точек разбиения $\{p^i\}$ проводится $N_e = 5$ экспериментов с последующим усреднением выходной величины I{«наличие протекания из центра на границу»}. Формируется выборка $\{p^i, w^i\}$, где p^i – концентрация, w^i – *доля* экспериментов, в которых при концентрации p^i наблюдалось протекание. Из полученной выборки формируются два выходных параметра: p_1 – минимальное p^i такое, что $w^i > 0$, и p_2 – минимальное p^i такое, что $w^i, w^{i+1}, w^{i+2}, \ldots = 1$. Эти параметры назовем соответственно нижним и верхним порогом перколяции. В условиях ПСС эксперимент прово-

дился на топологии квадратной решетки (2N+1)x(2N+1) с использованием диагональных связей: у каждого узла 8 соседей. Процесс протекания на границу легко моделируется лавинным распространением одного служебного пакета данных. При выходе его на границу моделирование прекращается. На выходе имеем параметр I = 1, либо I = 0, показывающем наличие протекания в данной конкретной конфигурации, определяемой входными параметрами и начальным значением датчика случайных чисел, которое каждый раз задается новым.

Результаты численных экспериментов

1. Пороги перколяции для прямых трубок

Результаты по нижнему и верхнему порогам перколяции представлены на рис.1. Представлены графики зависимости p_1 и p_2 от длины трубок. Рассмотрены два случая N = 150, N = 250. Установлено наличие скачкообразного изменения свойств среды при повышении концентрации. Кроме того показано, что с ростом длины трубки порог перколяции падает (примерно на порядок, если рассматривать случаи d = 1 и d = 100, что примерно соответствует практически полученным значениям).

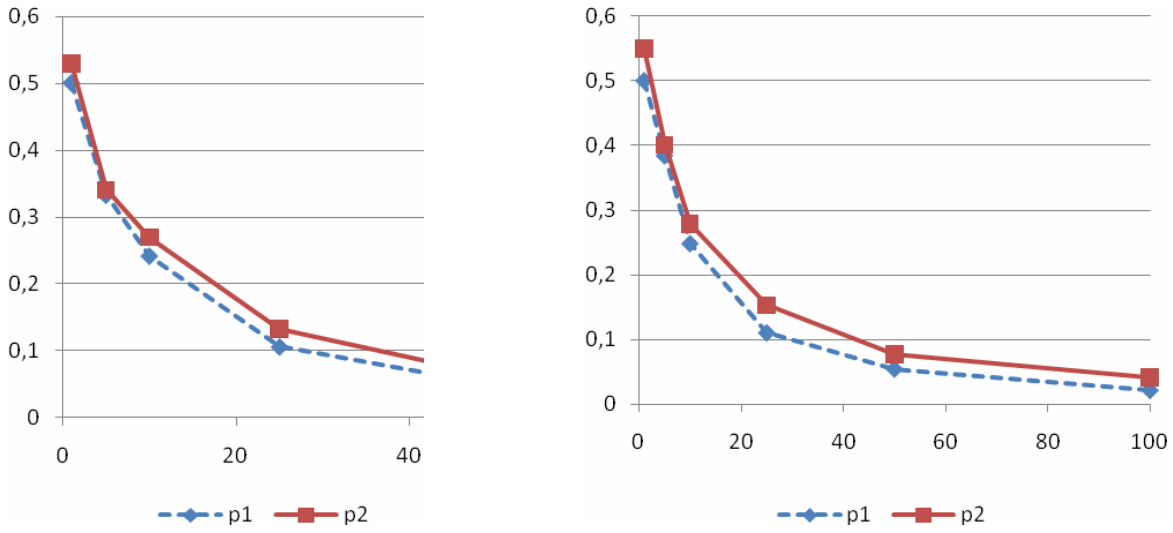

Рисунок 1. Верхний (p_2) и нижний (p_1) пороги перколяции в случае прямых трубок длины d, слева N = 150, справа N = 250.

2. Влияние изломов трубок, возникновение неоднородностей

В предыдущем разделе рассматривались только прямые трубки. Нами был смоделирован также полностью противоположный вариант, когда трубки изгибались в каждом своем узле. На рис. 2 представлены результаты по порогам перколяции в двух случаях: все трубки прямые (порог перколяции обозначен за p); все трубки изогнуты (порог перколяции обозначен за p*). Здесь под порогом перколяции в обоих случаях мы подразумеваем полусумму верхнего и нижнего порога. Такое качественно противоположное поведение материала можно объяснить следующим образом. Поскольку трубка изгибается в каждом своем узле, то мы имеем некое компактное образование (сгусток), например, в виде спирали, которое не обеспечивает нужной проводимости в исследуемой плоскости. С ростом длины d такие сгустки исчерпывают все большую массу, не обеспечивая при этом перколяционных свойств, для достижения которых массу необходимо постоянно увеличивать. Результат более подробного исследования приведен на рис. 3. Здесь мы ввели параметр p_c, который равен вероятности изгиба трубки. При доле изломов 0.6 трубки ведут себя так же, как и частицы (порог p = 0.5).

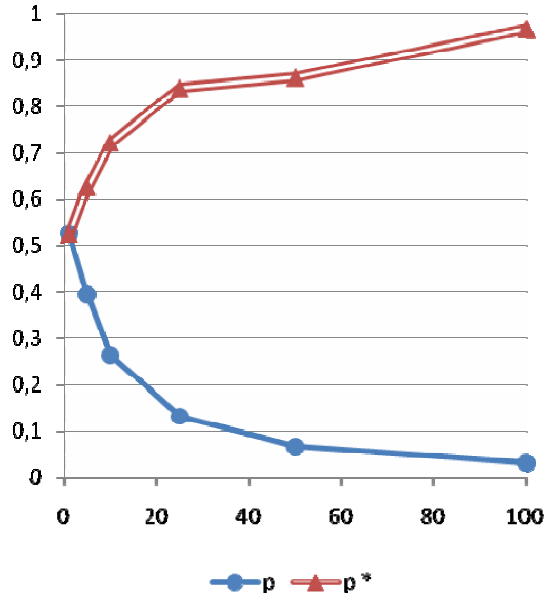

Рисунок 2. Пороги перколяции в случае прямых и изогнутых трубок.

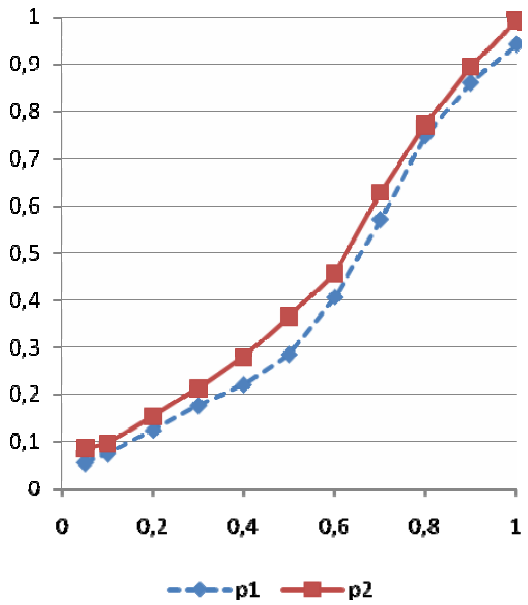

Рисунок 3. Пороги перколяции $p_1(p_c)$, $p_2(p_c)$ в зависимости от доли изгибов.

Выводы

В данной статье исследовался вопрос наличия перколяции в структурах, формируемых дискретными точечными (частицами) и протяженными объектами (трубками), в зависимости от суммарного объема (концентрации) и таких параметров, как длина и изогнутость.

Установлен факт перколяции - скачкообразного изменения свойств среды при росте концентрации материала.

Порог перколяции удается понизить за счет увеличения длины трубок.

Изогнутость трубок влияет на величину порога перколяции: в случае слишком изогнутых трубок формируются «сгустки» материала, и требуется значительная масса для наличия протекания.

Литература

1. G. Vakulya, G. Simon “Energy Efficient Percolation-Driven Flood Routing for Large-Scale Sensor Networks”
2. Ekpe Okorafor and Mi Lu, “Percolation routing in a three-dimensional multicomputer network topology using optical interconnection”
3. Sarshar, Boykin, Roychowdhury “Scalable Percolation Search in Power Law Networks”
4. Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения и алгоритмы –М.: Едиториал УРСС, 2002. – 112с.
5. Шамин, П.Ю. Параллельный сетевой симулятор: концепция и перспективы развития / П.Ю. Шамин, А.С. Алексанян, В.В. Прокошев // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. — СПб, 2009. — № 3. — С. 18-24.
6. Вентцель, Е.С. Теория случайных процессов и её инженерные приложения: Учеб. пособие для студ. втузов. / Е.С. Вентцель, Л.А. Овчаров. — Изд. 3-е, перераб. и доп. — М.: Издательский центр «Академия», 2003. — 432 с.