

ФОРМИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ МОДЕЛЕЙ СЛУЧАЙНО - НЕОДНОРОДНЫХ СРЕД

Грачев Н.Е., Громов П.А., Скрипка Е.М., Смирнов А.С., Цу- канов А.А., Сердобольская М.Л., Грачев Е.А.

(Москва)

Много явлений и процессов в природе могут быть описаны и исследоваться с использованием методов математического моделирования случайно-неоднородных сред. Эти модели могут использоваться для анализа биологических структур, полимеров, аморфных полупроводников, порошковых и наноматериалов и так далее. Представлены некоторые результаты компьютерного моделирования для простых типов случайных сред и некоторые теоретические оценки их свойств.

FORMATION AND ANALYSIS OF MODELS RANDOM - INHOMOGENEOUS MEDIUMS

Grachev N.E., Gromov P.A., Skripka E.M., Smirnov A.S., Tsuckanov A.A., Serdobolskaya M.L., Grachev E.A.

(Moscow)

Many phenomena and processes in nature can be described and researched using methods of mathematical modeling of random - inhomogeneous mediums. For analysis of biological structures, polymers, amorphous semiconductors, powdered and nanomaterials etc., these models can be used. Some results of computer modeling for simple types of random mediums and some theoretical estimations of their properties are represented in this article.

Во многих разделах физики математическое моделирование происходит с использованием моделей физических сред со случайными в пространстве свойствами.

К таким разделам можно отнести биофизику, физику неупорядоченных полупроводников и диэлектриков, оптику (радио-

физику) случайно-неоднородных сред, механику грунтов и композитов, физику взаимодействия излучений (пучков частиц, высокотемпературной плазмы) с веществом, физику наноматериалов и т.д.

В компьютере нужно создать образ некой «сцены», геометрической области, где будут разыгрываться события в процессе математического моделирования той или иной физической задачи [1-4, 6, 7]. При решении задачи на случайно-неоднородных средах могут быть выделены следующие этапы работы [1]:

- построение компьютерной модели среды (сцены) с заданными свойствами (геометрические и динамические методы);
- анализ модели среды, выделение и анализ кластеров, включая выделение их границ, других особенностей;
- аттестация среды (стохастические, комбинаторные, геометрические, топологические, фрактальные и другие характеристики);
- собственно постановка физической, химической, биологической и т.п. задачи.

Мы рассмотрим ряд методов и математических моделей, позволяющих создавать экземпляры стохастических (и фрактальных) сцен с заданными свойствами, вложенных в пространства различной размерности, а также простейшие методы их исследования и аттестации, опишем «геометрические» модели получения таких сред, в которых в заданной области случайным образом размещаются непересекающиеся объекты различных размеров, или объединения пересекающихся объектов образуют кластеры различного размера и конфигурации.

Другим подходом к формированию сред, вложенных в двух- и трехмерные евклидовы пространства, является «динамический» основанный на упрощенном методе молекулярной динамики [2].

Модели одномерных случайно-неоднородных сред (например, отрезок или окружность, заполненные случайно расположенными отрезками, дугами меньшего размера со случайной длиной) позволяют эффективно исследовать общие свойства процедуры формирования стохастических сред, допускают ряд

простых теоретико-вероятностных аналитических оценок. Их можно также использовать как элемент конструкции или анализа сред большей размерности (не только целой).

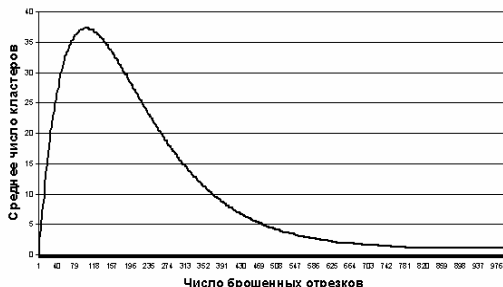


Рис. 1. Среднее число образовавшихся на отрезке $[0, 1]$ кластеров при бросании на него от 1 до 1000 малых отрезков длины 0.01.

На отрезок единичной длины «бросают» n малых отрезков фиксированного размера $d < 1$. Положение каждого из брошенных отрезков выбирается случайным образом независимо от положения прочих отрезков. Если два или более отрезков закрыли собой часть отрезка $[0, 1]$ без пробелов, их объединение называется кластером. Интерес представляет распределение количества кластеров, их длин, а также распределение суммарной длины всех кластеров. На рис.1 представлена характерная зависимость выборочной характеристики - среднего количества кластеров от числа N брошенных отрезков [1].

Для подсчета распределения длины заполненной области предположим, что задана $q(x)$ — плотность распределения центра каждого из случайных отрезков, $2d < 1$ — его длина, и результаты бросаний независимы. Допустим также, что на отрезке $[0, 1]$ расположены M точек x_1, x_2, \dots, x_M регистрации, в которых определяется, накрыты ли данные точки хотя бы одним из брошенных N отрезков или нет, причем $|x_{k+1} - x_k| > 2d$. Тогда вероятность того, что k -ая точка накрыта одним из случайных отрезков равна

$$a_k = \int_{x_k - d}^{x_k + d} q(x) dx, \quad k = 1, 2, \dots, M. \quad (1)$$

Если ξ — общее количество точек регистрации, накрытых хотя бы одним из брошенных отрезков, то

$$P(\xi = s) = \sum_{\{n_j\}_{(s)}} a_1^{n_1} a_2^{n_2} \dots a_M^{n_M}, \quad s = 1, 2, \dots, \min(M, n), \quad (2)$$

где суммирование ведется по всем наборам целых неотрицательных чисел n_1, n_2, \dots, n_M , удовлетворяющих двум условиям: $n_1 + n_2 + \dots + n_M = N$, среди данных чисел присутствуют ровно s отличных от нуля. В простейшем случае, когда все вероятности одинаковы: $a_k = a, k = 1, 2, \dots, M$, выражение (2) легко преобразовать

$$P(\xi = s) = a^N C_M^s C_{N-1}^{s-1} \quad s = 1, 2, \dots, \min(M, n). \quad (3)$$

Понятно, что значение ξ может быть использовано как характеристика общей длины области, накрытой отрезками, и распределение (2) позволяет получить статистические свойства данной случайной величины.

В дополнение к рассмотренной задаче было произведено геометрическое 2D моделирование [1] случайного заполнения квадрата 1×1 пересекающимися кругами (дисками) диаметра 0.1 со случайными центрами, равномерно распределёнными в концентрическом квадрате 0.9×0.9 и оценены выборочные характеристики: средняя площадь кластеров, среднее число кластеров и средняя суммарная площадь, занятая кластерами как функция от количества брошенных кругов. Данные сведены в таблицу.

Число дисков	Число кластеров	Среднее число дисков в кластере	Средняя площадь кластера относительно площади диска	Относительное заполнение квадрата 1×1
50	25	2.0	1.53	0.29975
110	14	7.86	4.99	0.54868
250	1	250	108.26	0.84982

Двумерные случайно-неоднородные среды представляют самостоятельный интерес, с их использованием можно уже проводить модельные исследования реальных физических явлений.

Заполнение прямоугольной ямы с бесконечными вертикальными стенками непересекающимися шарами случайных радиусов — пример трехмерной среды. Проведено компьютерное моделирование заполнения и рассчитаны выборочные характери-

стики распределений параметров. Здесь, также как и в случае 2D, возможны два основных подхода к генерации случайной сцены: «геометрический» и «динамический», а также различные комбинированные варианты генерации.

«Динамический» подход. Рассмотрим работу модели в простейшем случае, когда требуется заполнить прямоугольный параллелепипед сферами, имеющими случайным образом распределенные по заданному закону радиусы, со случайно расположенными центрами [1].

Заданный параллелепипед представляется заполненным слабовязкой средой, в которую, через его грани вбрасываются (вдавливаются) в случайных точках и направлениях, в случайные моменты времени, сферы случайного радиуса. Под действием «силы тяжести» сферы опускаются на «дно», постепенно заполняя весь объём параллелепипеда.

Время от времени вектор силы тяжести изменяет своё направление и величину, чем обеспечивается дополнительное перемешивание. Обратный выход шара за пределы параллелепипеда невозможен («алгоритм бетономешалки»). Взаимодействие частиц происходит по законам упругого соударения, с гранями параллелепипеда – таким же образом, или могут быть заданы периодические граничные условия. При необходимости, вводятся потенциалы взаимодействия шаров, например, типа Леннарда - Джонса, или чистого отталкивания. Интегрирование уравнений движения проводится достаточно грубо, так как это практически не имеет значения для целей работы, а введённая вязкость (жидкостное трение) обеспечивает устойчивость вычислительного процесса. Далее система как бы «замораживается», и информация о размерах шаров, их расположении, а также статистические данные («паспорт») на полученный экземпляр случайной среды, сохраняются.

Последняя информация готовится аттестующей частью программы. Исследуются фактическое распределение шаров по размерам, плотность и флуктуации (дисперсия) плотности общего количества (массы) и размеров шаров [3, 5, 6]. После задания условий контакта шаров в форме:

$$|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| < R_i + R_j + dR,$$

(где $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j$ – координаты (радиус - векторы) центров шаров;

R_i, R_j – радиусы шаров;

$dR > 0$ – малая константа, с точностью до которой устанавливается условие контактирования шаров), могут быть построены матрицы инцидентий (соприкосновений) шаров данного экземпляра случайной среды. При задании дополнительных характеристик (например, длины максимального пути и других), рисунок укладки шаров может быть разбит на кластеры [3, 5, 6], с выводом их матриц инцидентий и графов.

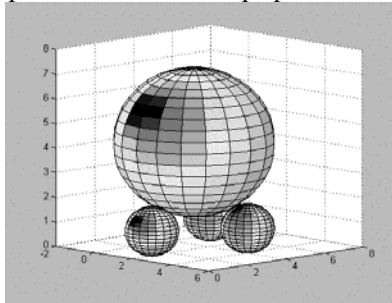


Рис. 2. «Случайная» 3D среда из четырёх шаров разных радиусов.

«Геометрический» подход. Заполнение прямоугольной ямы непересекающимися шарами случайных радиусов. Прямоугольная яма имеет в основании единичный квадрат, расположенный в плоскости XOY и бесконечно высокие стенки. На бесконечности (по оси OZ) последовательно во времени «зарождаются» независимо друг от друга шары, радиусы которых случайны. Шары «летят» - проецируются вниз. Если какой-либо из шаров на своем пути не встречает других, зародившихся на более ранних шагах, он «прилипает» к дну и останавливается. Если данный шар встретился с каким-либо из более ранних, он «скатывается» по нему вплоть до встречи с дном или иным из ранних шаров. Падение продолжается до тех пор, пока данный шар не займет устойчивое положение на дне или между более ранними шарами. На рис.2 представлены результаты работы 3D алгоритма для четырёх шаров разных радиусов.

Далее строится радиальная функция распределения, т.е., в данном случае, выделяется и фиксируется некоторый из упавших N шаров. Он окружается системой концентрических с ним шаровых слоев, радиусы которых увеличиваются с постоянным

шагом ΔR . После этого производится расчет количества шаров, чьи центры расположены в каждом из шаровых слоев, и данная величина нормируется на объем шарового слоя. Результаты могут усредняться по нескольким или всем (особым образом учитывая границы) шарам системы.

Аналогичные исследования проведены и для 2D случая. Пример полученной структуры среды (из дисков) представлен ниже, на рис.3, показана также радиальная плотность распределения в ближайших к центру структуры участках и некоторые паспортные данные структуры.

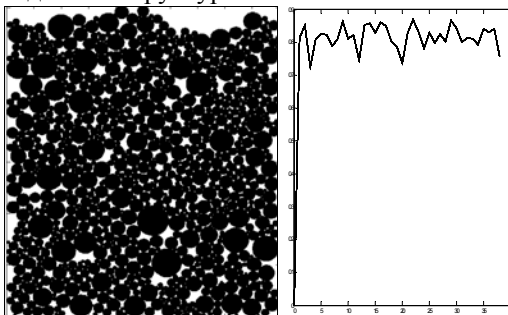


Рис. 3. «Дно» - отрезок $[0, 1]$. Число дисков $N = 1000$; Радиус дисков R распределён в пределах от 0.005 до 0.05, средний радиус около 0.027; Среднее число дисков, касающихся некоторого выделенного около 5.

На основе представленного алгоритма были также промоделированы иные 2D структуры, путем изменения случайным образом радиуса дисков. В первом случае (рис.4) радиус уменьшался, во втором (рис.5) – либо уменьшался либо увеличивался от 0 до 100% исходного размера.

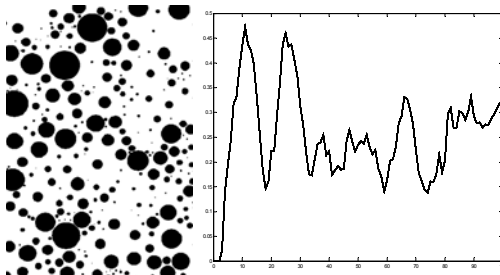


Рис. 4. «Дно» - отрезок $[0, 0.8]$. Число дисков $N = 300$; Исходный радиус дисков R был распределён в пределах от 0.005 до 0.05. Затем радиус каждого диска уменьшался случайным образом на величину от 0 до 100% исходного.

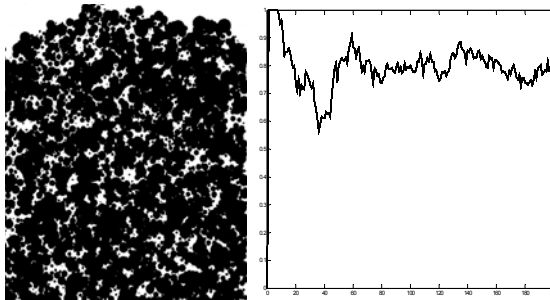


Рис. 5. «Дно» - отрезок $[0, 1]$. Число дисков $N = 1000$; Исходный радиус дисков R был распределён в пределах от 0.005 до 0.05. Затем радиус каждого диска уменьшался или увеличивался случайным образом на величину от 0 до 100% исходного.

При достаточно большой дисперсии исходных размеров дисков и величине их изменения удаётся создавать 2D и 3D кластерные структуры с регулируемой фрактальной размерностью и стохастическими характеристиками.

Особый класс случайно – неоднородных сред образуют дендритные структуры. Хорошо известны такие механизмы образования подобных структур, как механизм пробоя или механизм агрегации, ограниченной диффузией. Если ставить целью не моделирование этих процессов как физических явлений, а только получение компьютерных «сцен» типа дендритов, обладающих заданными стохастическими и фрактальными характеристиками, генерация таких структур может быть осуществлена значительно более экономными в вычислительном отношении

алгоритмами.

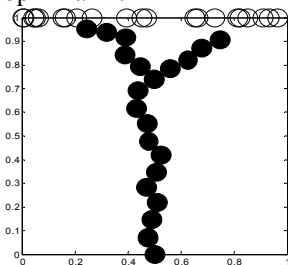


Рис. 6. Схема построения дендрита из дисков

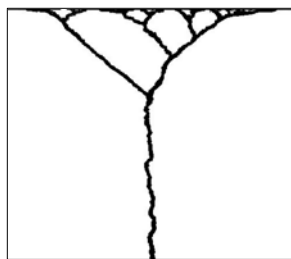


Рис. 7. Многократные случайные бифуркации на дендрите.

Рассмотрим пример построения 2D дендрита, легко обобщающийся на случай 3D. На стороне AD прямоугольника ABCD фиксирована точка M, называемая точкой роста дендрита. На стороне BC, параллельной стороне AD, «зарождаются» элементы построения дендрита, например, шарики (диски) радиуса r , центры которых можно считать независимыми случайными величинами, имеющими заданное распределение. Первый шарик летит вдоль прямой, соединяющей его центр и точку роста M, и «прилипает» к точке M. Каждый из последующих шариков, летит вдоль прямой, соединяющей его центр и ближайший из центров предыдущих шариков, и «прилипает», касаясь поверхности ближайшего шарика. В результате образуется структура, пример которой приведен на рис.6.

Пусть для некоторого (k -го) шарика первый раз имела место следующая ситуация: ближайшим является не предыдущий ($k-1$ -ый) шарик, а какой-либо из упавших на более ранних шагах. Тогда будем говорить, что на k -ом шаге произошла первая бифуркация дендрита, т.к. далее случайная структура будет расти по двум ветвям.

Бифуркация появляется в случае, если общая касательная между двумя последующими шариками в их точке соприкосновения пересекает область зарождения, и два последующих шарика появляются в области зарождения по разные стороны касательной. На каждой из ветвей могут иметь место последующие бифуркации, рис.7 (построен из значительно меньших элементов).

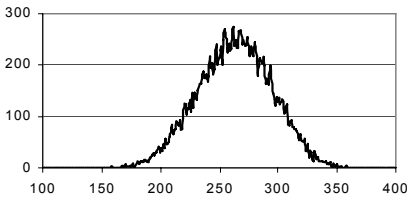


Рис. 8. Гистограмма распределения координат точки первой бифуркации.

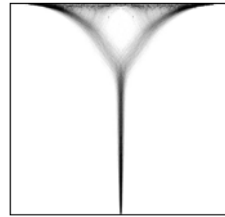


Рис.9. Наложение изображений 2000 построенных при одинаковых условиях дендритов - «статистический дендрит».

Полезно провести анализ распределения координат точек первой бифуркации, а также номера шага, на котором она происходит.

На рис.8 приведена гистограмма распределения координат точки первой бифуркации (номера шага, на котором эта бифуркация произошла). Расчет произведен для следующей конфигурации: отрезок BC, на котором происходит зарождение шариков, имеет единичную длину и отстоит от отрезка AD, содержащего точку роста M, на расстояние единица, причем точка M расположена посередине отрезка AD. Распределение центров зарождающихся шаров равномерно, и производится до $N=1000$ независимых зарождений, диаметр каждого шарика $1/500$.

Изображение на следующем рис.9 представляет собой наложение изображений 2000 построенных дендритов вышеописанного типа на поле размером 1×1 , диаметр элементов построения (шариков) – $1/500$.

Нетрудно заметить, что точка первой бифуркации всегда находится внутри круга радиуса R , построенного на отрезке зарождения шариков как на диаметре. В связи с этим представляет интерес распределение возможных концов дендрита на каждом шаге по отношению к данному полукругу.

В приближении бесконечно малого радиуса шарика можно вывести уравнение, описывающее форму дендрита до момента первой бифуркации. Заметим, что при таком предельном переходе дискретная последовательность $\langle x_k, y_k \rangle$, $k=1, 2, \dots$, центров шаров стремится к непрерывной кривой, которую в параметри-

ческом виде можно задать парой функций $\langle x(t), y(t) \rangle, t > 0$. Последовательности случайных величин $\xi_k, k=1,2,\dots$, определяющая координаты центров зарождающихся шаров, при этом предельном переходе заменяется случайным процессом $\xi(t), t > 0$. Введем следующую систему декартовых координат. Совместим начало координат с правым нижним углом прямоугольника, ось абсцисс направим вдоль правой вертикальной стороны, ось ординат — вдоль нижней. В этих координатах уравнение, описывающее рост дендрита, имеет вид:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{2R \cdot \xi(t) - y}{H - x}, \quad x(0) = 0, y(0) = y_0. \quad (4)$$

Здесь $2R$ и H — ширина и высота прямоугольника соответственно.

Если ввести дополнительное условие постоянства во времени приращения кривой вдоль оси x : $dx=vd t$ (что, разумеется, влечет зависимость от времени величины радиуса шариков), то уравнение (4) легко допускает аналитическое решение:

$$y(x) = \frac{H - x}{H} \left(y_0 + 2RH \int_0^{x/v} \frac{\xi(z/v) dz}{(H - z)^2} \right). \quad (5)$$

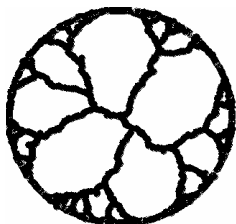
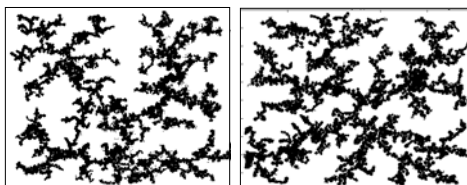


Рис. 10. Дендрит в круге.



а) б)

Рис. 11. Дендриты со случайно распределёнными элементами построения. а) начальный элемент внизу, б) в центре.

Изложенный алгоритм построения дендритных случайных (и фрактальных) структур работает очень быстро, и, при выборе подходящих областей (множеств) генерации элементов и некоторой модификации правил выбора точки присоединения очередного элемента, позволяет получать чрезвычайно разнообразные формы дендритов с различными стохастическими и фрак-

тальными свойствами, как на поверхностях, так и в объёме, причём дендрит легко «вписать» в любую заданную фигуру или тело.

Продemonстрируем некоторые примеры. Дендрит, у которого источники шариков равномерно распределены на окружности, представлен на рис.10.

Если источники элементов построения случайно распределены по области построения, получаются фигуры типа представленных на рис.11а и б.

В первом случае начальная точка роста расположена внизу, во втором – посередине области построения дендрита. Использовано по 1500 элементов построения в каждом случае. Далее диаметр каждого шарика был увеличен в пределах от 1 до 20 процентов, и их внутренняя область была залита черным цветом для целей данной демонстрации. На рис.12 представлен дендрит, источники элементов построения которого находились в полосе в верхней части рисунка («кроне»). Организуя рост дендритов из конечных, континуальных, фрактальных, стохастических множеств точек роста, можно получить дендритные «леса» необходимой архитектуры.



Рис. 12. Дендрит с «кроной».

Заметим в заключение, что во всех случаях построения представленных нами алгоритмов генерации случайных сред, легко может быть сохранена не только обобщающая, аналитическая информация об их структуре и свойствах, но и детальная исходная информация о каждом элементе их построения и его включении в построенный объект (среду, сцену).

Литература.

1. Н.Е.Грачёв, П.А.Громов. Математические модели формирования случайной среды для исследования задач перколяции. В сб. Ломоносов-2002 (физика), МГУ.
2. Х. Гулд и Я Тобочник. Компьютерное моделирование в физике. ч.2. М., Мир, 90.
3. В.Д.Лахно. Кластеры в физике, химии, биологии. М., Ижевск, РХД, 2001.
4. Ю.Ю.Тарасевич. Математическое и компьютерное моделирование. М., УРСС, 2001
5. Д.Худсон. Статистика для физиков. М., Мир, 1967.
6. Н.В.Бриллиантов, О.П.Ревокатов. Молекулярная динамика неупорядоченных сред. Изд. МГУ, 1996.
7. В.Д.Лахно, М.Н.Устинин (ред.). Компьютеры и суперкомпьютеры в биологии. Институт компьютерных исследований, Москва – Ижевск, 2002.