С. С. Деречнник

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРКОЛЯЦИИ С ПОНИЖЕНИЕМ РАЗМЕРНОСТИ ПРОСТРАНСТВА

Предложен новый алгоритм моделирования явления перколяции на регулярных решетках, основанный на представлении исследуемого объекта (например, пористого материала) как макроскопически изотропной однородно неупорядоченной системы, в которой, при возникновении перколяции, происходит фазовый переход второго рода. Особенностью алгоритма является понижение размерности модельного пространства на единицу, за счет чего существенно снижается его вычислительная сложность.

Введение

Перколяция, как явление протекания через пористую среду, весьма важно в физике неупорядоченных систем, поскольку обусловливает многие свойства реальных материалов: влаго(газо)проницаемость, проводимость, распределение трещин (прочность) и т.д. Перколяция относится к так называемым «критическим явлениям», которые характеризуются некоторой «критической точкой», в которой определенные свойства системы резко меняются, т.е. происходит фазовый переход второго рода [1].

Эффективным методом исследования явления перколяции является компьютерное моделирование, при котором исследуемый объект представляется в виде регулярной решетки. Наиболее трудоемкой процедурой такого моделирования является поиск кластеров, объединяющих соседние ячейки по заданному признаку, с целью выявления т.н. перколяционного кластера (например, пути от стенки модельного поля до противоположной стенки). Поэтому моделирование решеток большого размера, в особенности объемных, требует больших вычислительных затрат.

I. Алгоритм моделирования перколяции

Известно, что фазовый переход вблизи порога перколяции сопровождается изменением типа структуры кластеров, которая может быть описана с использованием параметра корреляционной длины. Так, ниже порога перколяции средний размер конечного кластера описывается корреляционной длиной ξ, которая выше порога характеризует средний размер пустот внутри бесконечного кластера. Можно рассматривать $\xi(p)$, где p — плотность заполнения решетки, в качестве типичного расстояния, вплоть до которого бесконечный кластер является самоподобным (фрактальным). На масштабах же длин, больших ξ, структура кластера таковой уже не является, и кластер можно рассматривать как однородный. Переход от фрактального к однородному состоянию принято называть *кроссовер* [2].

Нами предложен новый, эффективный в вычислительном отношении, алгоритм исследования перколяции, который основан на обнаружении кроссовера и на известном из статистической физики положении, что случайно неупорядоченная многочастичная система (какой становится кластер на масштабах длин, больших ξ) макроскопически изотропна, поэтому все ее сечения статистически идентичны. В данном алгоритме осуществляется понижение размерности исследуемого объекта на единицу, т.к. вместо квадратной решетки рассматривается непрерывная строка большой длины (соответственно, вместо кубической структуры — последовательность квадратных решеток) со случайным образом заполненными ячейками. Далее собирается статистика по размерам пустот в этой строке (либо наборе решеток) и строится зависимость массы (количества ячеек) пустот от размерного масштаба. Вывод о наличии либо отсутствии перколяции делается на основе принадлежности полученного распределения к классу фрактальных либо однородных, т.е. по величине угла наклона зависимости «масса кластера (число частиц в кластере)» – «радиус покрывающей сферы», выраженной в двойных логарифмических координатах.

II. Выводы

Новый алгоритм исследования перколяции с понижением размерности модельного пространства позволяет, путем проведения серий вычислительных экспериментов с последующей статистической обработкой результатов, находить порог перколяции и оценивать вероятность возникновения перколяционного кластера вблизи такого порога. По сравнению с известными, алгоритм отличается меньшей вычислительной сложностью.

Список литературы

1. Эфрос А. Л. Физика и геометрия беспорядка / А. Л. Эфрос. – М.: Наука, 1997. – 200 с.
2. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы / Ю. Ю. Тарасевич. – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 112 с.

Деречнник Станислав Станиславович, аспирант кафедры «Электронные вычислительные машины и системы» БрГТУ, stanislav.derechennik@gmail.com.

Научный руководитель: Тур Виктор Владимирович, заведующий кафедрой «Технолия бетона и строительные материалы» БрГТУ, доктор технических наук, профессор, tur.s320@mail.ru.