

УДК 519.876.5

Л.В. Мигаль, Н.А. Чеканов, В.Г. Бондарев

АЛГОРИТМЫ УПРАВЛЕНИЯ СТРУКТУРОЙ СТОХАСТИЧЕСКОЙ УПАКОВКИ СИСТЕМЫ ЖЕСТКИХ ДИСКОВ

Постановка проблемы и анализ основных исследований. Одной из наиболее актуальных проблем теории плотноупакованных систем является оценка структурных характеристик плотноупакованных систем частиц, расположенных случайным образом, в пространствах различных размерностей. Теоретические и экспериментальные исследования процессов, происходящих при упаковке частиц, пока не дают четкой картины образования такого типа систем. В этом случае компьютерное моделирование реального экспериментального процесса может стать полезным компромиссом. При компьютерном моделировании уже учитываются вероятностные аспекты, что позволяет исследовать механизмы формирования случайных (стохастических) плотных упаковок (random close packing, RCP). Влияние второстепенных факторов в этом случае может быть либо полностью устранено, либо их можно учесть в процессе построения упаковки. Однако переход от феноменологического к детальному структурному описанию требует разработки алгоритмов, позволяющих направленно управлять процессами формирования RCP-упаковок. Результаты, полученные при построении RCP-упаковок, могут иметь приложения в самых различных областях научных знаний: биологии (кластеризация бактерий, клеточные структуры), химии (адсорбция частиц на мембране, молекулярные структуры), физике (металлы, стекла, расплавы, аморфные материалы), а также во многих технических областях, таких как нанотехнология, металлургия, керамическое производство и химическая технология.

Наиболее распространёнными алгоритмами упаковки сферических частиц являются алгоритмы, основанные на методе Монте-Карло [1-3]. В настоящее время известен целый ряд алгоритмов, генерирующих требуемое расположение частиц в выбранной области. Простейший - «струя частиц» (stream of particles, SP) представляет собой алгоритм, построение упаковки в котором состоит в поочередном размещении частиц [4]. Исходный набор частиц упорядочивается каким-либо образом, например, по увеличению x -координаты на каждом из уровней установки. На самом нижнем из свободных уровней размещается очередная частица вплотную к левой границе рабочей области. Эффективность данных алгоритмов в значительной степени зависит от метода, применяемого для упорядочивания частиц. К более сложным алгоритмам относится способ последовательно-одиночного размещения (sequentially-individual allocation, SIA), предложенный Ю.Г. Стояном [5]. Этот метод состоит в том, что все элементы располагаются последовательно по одному, причем ранее установленные считаются неподвижными, то есть их параметры размещения имеют определенные фиксированные значения. Каждый элемент устанавливается так, что значение целевой функции достигает минимума только по тем переменным, которые являются параметрами этого элемента. В представленной статье предложен комплекс алгоритмов, реализующих аналогичный подход и который также можно отнести к данному типу алгоритмов.

Постановка задачи. В основу построения стохастической упаковки был положен метод частиц [1]. Данный метод используется для широкого класса задач, в которых дискретное описание физических явлений рассматривает систему взаимодействующих друг с другом частиц. В качестве базовой была выбрана модель двумерных «жестких сфер». Каждая сфера обладает набором собственных атрибутов, таких как координаты центра и диаметр сферы, и атрибутов отношений – координационные числа и расстояния до ближайших частиц. Постановку задачи выполним следующим образом.

Пусть дано некоторое множество, состоящее из N сферических частиц одинакового диаметра a , находящихся под действием слабой однонаправленной силы. Требуется расположить частицы в выбранной прямоугольной области, определенной при помощи $\{x, y \mid 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq H\}$, где L - ширина, а H - высота области установки, таким образом, чтобы в результате процесса формирования стохастической упаковки число попавших в область частиц было максимально возможным, при следующих условиях:

- каждая частица касается как минимум двух соседних частиц из данной конфигурации;
- установленные частицы не пересекаются (не имеют общих внутренних точек) ни с одной частицей из данной конфигурации;
- сумма всех расстояний между частицами конфигурации является наименьшей из возможных реализуемых физически конфигураций частиц.

Сферичность частиц является общепринятым модельным приближением для начальных стадий рассмотрения формирования упаковки. Поэтому, в качестве геометрической модели упаковки, была выбрана система двумерных сфер (дисков), структуру S которой можно описать следующим образом

$$S = \{(x_i, y_i) : x_i \in R^2, y_i \in R^2, i = \overline{1, N}\}, \quad (1)$$

где x_i и y_i - координаты центра i -го диска. Для исключения краевых эффектов и эффектов, связанных с конечным размером моделируемой системы, рассмотрению была подвергнута стохастическая упаковка частиц, расположенных в прямоугольной области с «проницаемыми» стенками.

Основная часть. Стохастическая упаковка дисков на плоскости формируется на основе имитационного моделирования с использованием метода послойной упаковки [6]. Алгоритмы компьютерного моделирования реализуют поэтапную схему стохастических процессов формирования локальных слоев упаковки. При этом выделяются три основных этапа описания процесса:

1. Построение одномерной цепочки дисков в полосе (начальный этап).
2. Построение двумерного слоя дисков (основной этап).
3. Уплотнение слоя за счет перераспределения позиций дисков верхней цепочки (заключительный этап).

Для реализации каждого из данных этапов разработаны соответствующие алгоритмы. Ниже приводится описание алгоритмов для основных этапов моделирования.

На первом этапе, для построения начальной цепочки дисков в полосе, ограниченной плоскими проницаемыми стенками предложен алгоритм, названный “полосовым алгоритмом”. Физическая идея алгоритма заключается в следующем. На выбранном отрезке длиной L , случайным образом определяются координаты центров частиц, в соответствии с заданным законом распределения вероятностей. Диапазон разброса значений y -координаты определяется априорно, с учетом возможной толщины локального слоя частиц. Расстояния $r_{i,i+1}$ между центрами i -той и $i+1$ частицами также ограничивались в пределах: $a \leq r_{i,i+1} \leq a\sqrt{3}$. Выполнение данного условия производится путем применения счетчика случайных чисел, для оценки межцентровых расстояний, с последующим определением x -координат центров частиц. Следовательно, на основе данных, полученных методом Монте-Карло, для значений y -координаты и межцентрового расстояния можно однозначно определить позиции частиц начальной цепочки. Координаты центра первой частицы выбирают аналогичным образом, принимая в качестве позиции предыдущей частицы, координаты середины левой стороны установочной полосы. Процесс установки частиц повторяется многократно до достижения правой границы полосы.

Второй этап соответствует основной фазе процесса формирования стохастической

упаковки. На этом этапе моделирования необходимо произвести выбор позиций дисков верхней цепочки, отвечающих условию, определенному в соответствии с принципом «минимума потенциальной энергии». Предложенный вариант несколько отличается от общепринятого метода слабого поля, так как он базируется на методе формирования стохастической упаковки частиц, расположенных в виде отдельных цепочек, межчастичные расстояния между которыми должны быть минимальными [7]. Здесь, после установки частиц начальной (нижней) цепочки, определяются вакантные места для центров частиц следующей, верхней цепочки. Затем, основываясь на понятии графа-дерева, производится поиск всех возможных ветвей, состоящих из последовательностей непересекающихся двумерных сфер. На основе данного подхода нами был разработан алгоритм формирования локального слоя дисков. Опишем его более подробно. Процесс установки центров дисков осуществляется путем выбора их позиций как равноотстоящих на величину диаметра от двух соседних дисков нижней цепочки. Положение центра диска в плоскости XU описывается двумя координатами из множества $\{x_i, y_i\}$ вакантных точек для установки дисков верхней цепочки. Полученное множество вакантных точек разбивается на отдельные подмножества непересекающихся дисков. Для этого центры дисков данного множества сортируются в порядке увеличения по x -координате. Определяются пересекающиеся диски и путем последовательного выбора формируются подмножества непересекающихся дисков. Результатом данной работы является установление соответствия между каждой парой координат из множества $\{x_i, y_i\}$ и некоторым числовым значением, характеризующим номер конкретного диска в соответствующем подмножестве. Данную подзадачу можно сформулировать следующим образом: Задано конечное множество $U = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ вакантных мест в верхней цепочке; требуется выполнить разбиение множества U на непересекающиеся подмножества U_1, U_2, \dots, U_k и найти среди них такое подмножество U_i , центры дисков которого лежат настолько близко друг к другу. Другими словами, нужно разбить исходное множество вакантных позиций на ряд подмножеств, которые, при совмещении данных позиций с центрами дисков, дают нам набор возможных цепочек, состоящих из совокупностей непересекающихся дисков. Затем, по значению целевой функции Ψ_i , необходимо произвести выбор подмножества, имеющего минимальную сумму расстояний между центрами дисков рассматриваемых смежных цепочек

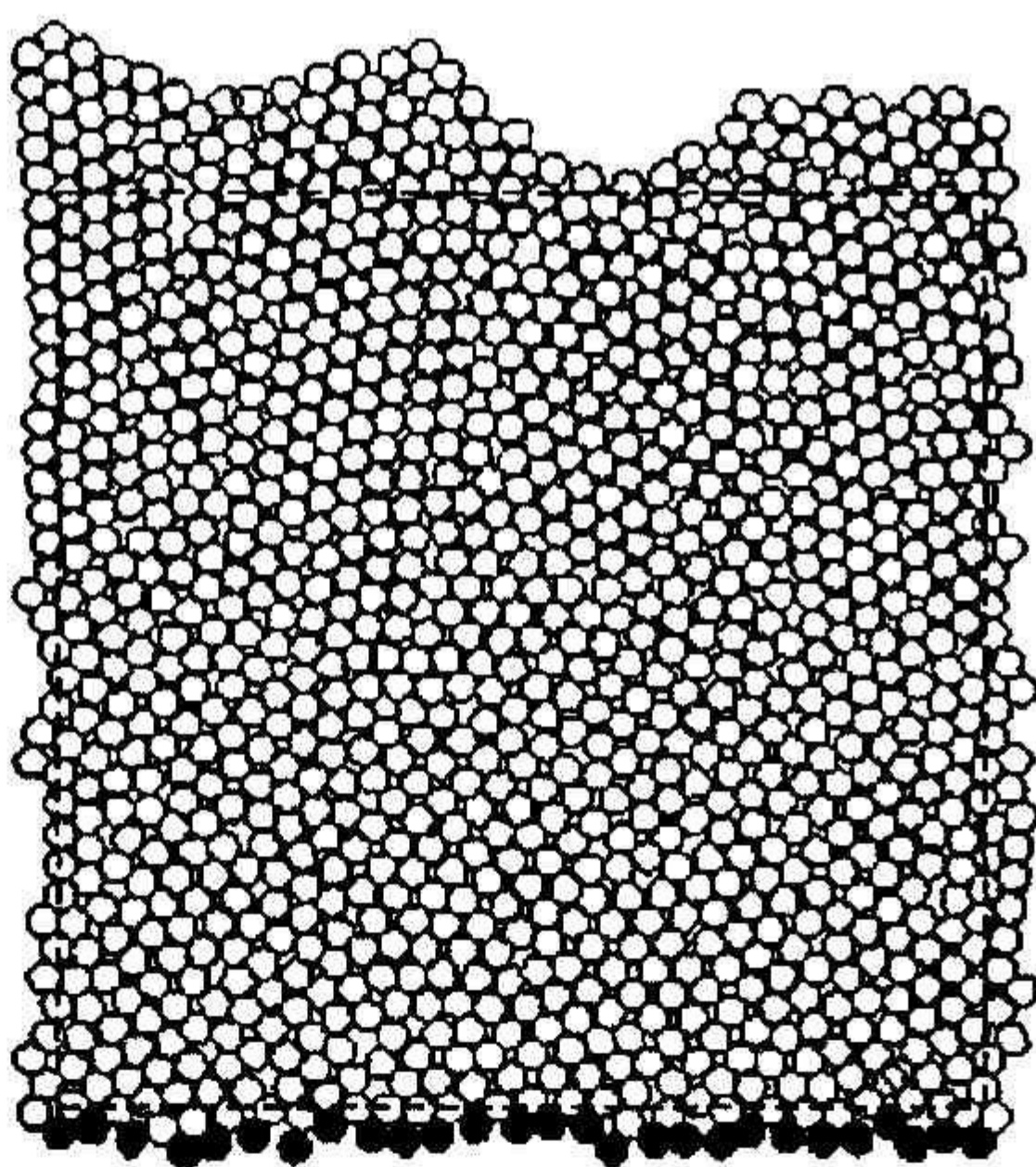
$$\min \Psi_i = \frac{1}{n_i - 1} \sum_{j=1}^{n_i-1} D(U_j, U_{j+1}) + \frac{1}{n_i m} \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^{n_i} z_{kj} D(P_k, U_j), \quad (2)$$

где m – число дисков в нижней цепочке слоя; n_i – число дисков в верхней i -той цепочке вакантных мест; P и U – множества дисков, соответственно, в нижней и верхней цепочках; z_{kj} – коэффициент равный единице, если расстояние $D(P_k, U_j)$, между k -тым установленным диском из нижней цепочки и j -тым диском верхней цепочки, не превышает значения $a\sqrt{3}$, и равный нулю – в противном случае. Предложенная целевая функция позволяет выполнить построение максимально плотной, так называемой связанной упаковки. Для построения свободной упаковки, то есть стохастической упаковки, в которой имеется аспект случайности не только при формировании начальной цепочки, но и при установке частиц верхней цепочки, требуется произвести случайный выбор любого подмножества вакантных позиций из подготовленного набора возможных цепочек.

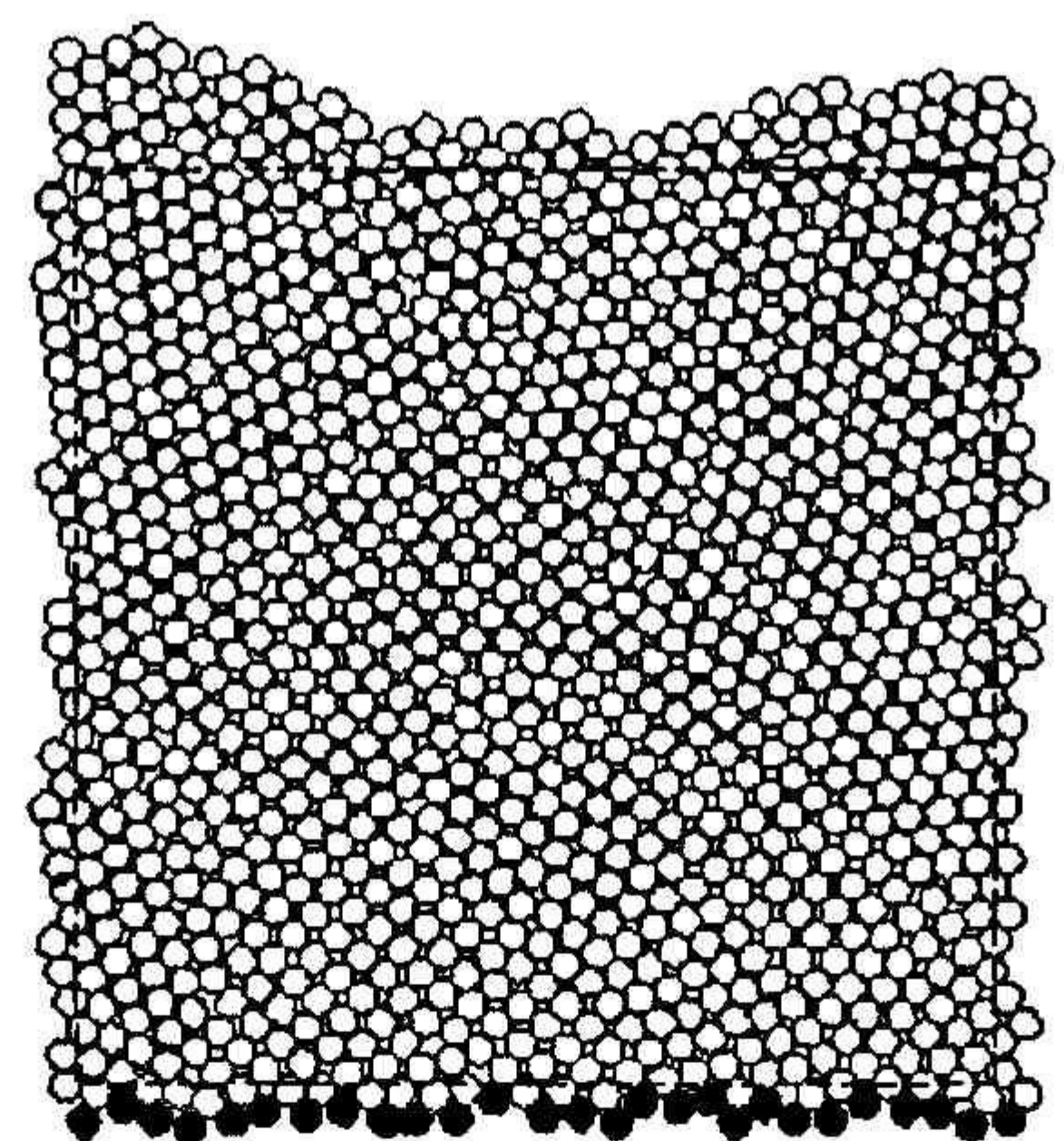
На третьем этапе, после завершения размещения дисков в верхней цепочке, поддерживается сортированный список частиц, с учетом, занимаемых ими позиций. Этот список включает все частицы, которые не имеют между собой интервалов, размер

которых достаточен для расположения других дисков. Когда список содержит все диски, процесс установки дисков завершается. Важным условием, для получения плотноупакованной структуры, является требование полностью закрытых поверхностей нижних цепочек формируемых слоев стохастической упаковки. Это условие должно исключить возможность перекрытия дисков несоприкасающихся цепочек. Однако, если в цепочке остаются потенциально незакрытые места, то в ее состав необходимо включить дополнительные диски. Если при установке таких дисков произошло их перекрытие с дисками верхней цепочки, то алгоритм будет пытаться их "раздвинуть", т.е. выбрать координаты центра дополнительного диска с учетом положения другого из перекрываемых дисков. После того, как все диски верхней цепочки выбраны, анализируются области вблизи левой и правой границ верхней цепочки. В случае отсутствия "приграничных" дисков, они дополнительно включаются в список дисков верхней цепочки.

После завершения имитационного моделирования производится оценка структурных характеристик полученной стохастической упаковки. В качестве результата работы программа выдает найденные значения структурных параметров системы: локальные и интегральную плотности упаковки, координационные числа для отдельных дисков и среднее значение координационного числа системы. На выходе программа, построенная на основе предложенного комплекса алгоритмов, производит формирование свободной и связанной стохастических упаковок и создает их графическое изображение, а также предоставляет данные по количеству частиц, их среднему координационному числу и интегральной плотности упаковки частиц в системе. Также записываются координаты центров частиц и межчастичные расстояния. Имитационное моделирование проводилось методом послойной упаковки [6] на области установки частиц системы размерами от 30×30 до 50×50 диаметров дисков, позволяя расположить в них от 1000 до 3000 дисков в каждой конфигурации, при отсутствии граничных условий.



Свободная упаковка



Связанная упаковка

Рис. 1. Результаты имитационного моделирования стохастической упаковки для области генерации $30a \times 30a$ (черным цветом представлены диски начальной цепочки)

На рис. 1 приведены изображения системы, содержащей более 1000 дисков для свободной и связанной стохастических упаковок. Статистическая оценка плотности упаковки приводит к среднему значению $\phi_{\text{связ}} = 0,823 \pm 0,004$ (среднее координационное число $z = 4,9 \pm 0,3$) для связанной упаковки и к значению $\phi_{\text{своб}} = 0,817 \pm 0,004$ (среднее координационное число $z = 4,6 \pm 0,3$) - для свободной упаковки. Сопоставление полученных с помощью имитационного моделирования данных с экспериментальными

результатами, выполненными различными исследователями [3,4], показывает на правильность выбранного подхода при проведении моделирования стохастической упаковки систем дисков в двумерном пространстве.

Выводы и перспектива дальнейших исследований. Таким образом, рассмотренный комплекс алгоритмов и проведение вычислительного эксперимента позволяют сделать вывод о возможности целенаправленного управления структурными характеристиками стохастической упаковки жестких дисков. Основное достоинство предлагаемого алгоритма заключается в том, что он, используя информацию только о частицах предыдущей цепочки, значительно уменьшает число обрабатываемых частиц и, следовательно, позволяет существенно увеличить скорость нахождения устойчивых положений данных частиц. Также, с помощью компьютерного моделирования стохастической упаковки системы дисков показано, что РСР-упаковка может находиться как в связанном, так и в свободном состояниях. В дальнейшем возможно расширения данного комплекса алгоритмов с целью учета граничных условий, а также построение на его основе алгоритма для описания плотноупакованных систем в трехмерном пространстве.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц: Пер. с англ. - М.: Мир, 1987. – 640 с.
2. Препарата Ф., Шеймос М. Вычислительная геометрия: Пер. с англ. - М.: Мир, 1989.- 478 с.
3. Kausch H.H., Fesko D.G., Tschoegl N.W. The random packing of circles in a plane. //J. of Colloid and Interface Sci. – 1971. - Vol.37, No.3. - P.603-611.
4. Tory E.M., Church B.H., Tam M.K., Ratner M. Simulated random packing of equal spheres.// Can. J. Chem. Eng. – 1973. - Vol. 51. - P.484-493.
5. Стоян Ю.Г., Гиль Н.И. Методы и алгоритмы размещения плоских геометрических объектов. - Киев: Наукова думка, 1976. - 144 с.
6. Бондарев В.Г., Мигаль Л.В. Моделирование случайной упаковки системы сферических частиц в пространстве R^2 / Тр. межд. научно-практ. конф. «Компьютерные технологии в науке и производстве», г. Новочеркасск, 2003.
7. Kansal A.R., Truskett T.M., Torquato S. Nonequilibrium hard-disk packings with controlled orientational order // J. Chem. Phys. – 2000. - Vol.113, No.12. - P.4844-4851.

МИГАЛЬ Лариса Владимировна – аспирант кафедры математического анализа Белгородского государственного университета.

Научные интересы:

- математические модели в классической физике, компьютерное моделирование.

ЧЕКАНОВ Николай Александрович - д.ф.-м.н., профессор кафедры математического анализа Белгородского государственного университета.

Научные интересы:

- математические модели в классической и квантовой физике.

БОНДАРЕВ Владимир Георгиевич - к.т.н., доцент кафедры информатики и вычислительной техники Белгородского государственного университета.

Научные интересы:

- информационные технологии в образовании, компьютерное моделирование.