4. Г. Цегелик, Л. Підківка, Н. Федчишин. Екстраполяційний метод мажорантного типу розв'язування задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. та інформатика.–2002.– Вип. №4.– С.76-82.

5. Н. Грипинська. Нелінійний, неявний, однокроковий чисельний метод розв'язування задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь першого порядку // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. та інформатика.–2002.– Вип. №4.– С.23-29.

МОДЕЛЮВАННЯ КЛАСТЕРОУТВОРЕННЯ В ГЕТЕРОГЕННИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Становський О.Л., Герганов М.Л., Оніщенко О.Г.
Одеський національний політехнічний університет

Проблема моделювання процесів переносу крізь пористі матеріали є актуальною для багатьох галузей промисловості. Зокрема, така проблема виникає при виборі причини – структури і складу пористих середовищ, які забезпечують необхідний наслідок – задані параметри переносу. Рішення зворотної задачі (пошук причини по заданому наслідку) подібного типу зводиться до численних рішень прямих задач. Тому зниження часової складності прямих рішень є важливим чинником реальної здійсненності зворотного.

Останнім часом одержали розвиток перколяційні моделі, у яких структурні перетворення здійснюються за рахунок змін характеристик зв'язків між окремими фіксованими точками усередині об'єкта моделювання. Це дозволяє моделювати такі явища, як зміна проникності при зростанні пористості початково суцільного середовища, тощо [1].

У процесі такого моделювання, зв'язки, які довільно додаються, (елементи) з'єднуються в кластери – групи, потужність яких (кількість елементів, об'єднаних у кластер) росте. Важливим якісним моментом в процесі моделювання є такий, коли один з кластерів стає нескінченним, тобто одержує виходи на протилежні поверхні моделюємого об'єкта. Потужність кластера пов'язана, з одного боку, зі складом гетерогенної системи і, з іншого, – з параметрами її провідності. Знаючи ці зв'язки кількісно, можна вирішувати початкову зворотну задачу, тобто визначати склад, який забезпечує необхідні властивості.

Ітерація моделювання «нагромадження» потужності кластерів складається з двох процедур: «призначення» місця нового елемента на кубічній (або для двомірного випадку – квадратній) решітці і розрахунку наприкінці кожної ітерації сумарної провідності такої моделі.

Процедура призначення може здійснюватися повністю стохастично з використанням генератора випадкових чисел або із введенням деякої переваги (наприклад, по напрямку або зонах). Існують програми, які дозволяють повністю автоматизувати цей процес [2]. Але існуюча технологія модельного експерименту, яка складається на кожній ітерації з операцій «викидання» чергового елемента сітки, визначення скінченності утворених кластерів та розрахунку їх потужності, на жаль, призводить до великих обчислювальних витрат при більш-менш прийнятній розмірності сітки, особливо на тривимірній моделі.

Тому запропоновано два нових методи зниження часової складності моделювання. Перший полягає у визначенні будь-якого елемента або групи елементів як єдиного макроса та подальше обчислення окремих макросів як окремих елементів. Другий метод передбачає те, що до «викидання» $100P$ % можливих елементів (де P – імовірнісний поріг появи нескінченного кластера; $P \sim 0{,}51$) розрахунки скінченності та потужності взагалі не виконуються. Надалі розрахунки виконують не після кожної ітерації «викидання», а після кожних M таких ітерацій, де значення $M = 2, 3, \ldots$ встановлюється на початку експерименту, виходячи з існуючих потреб його точності..

Порівняльна оцінка часової складності методів в цілому показує, що застосування першого з них знижує загальний час модельного експерименту (при інших рівних умовах) на 35 – 40 %, а другого – на 65 – 70 %.

При використанні моделей великих розмірів розрахунки скінченності та потужності стають занадто тривалими, навіть при застосуванні ЕОМ та методів зниження часової складності обчислень. Одним зі шляхів розв'язання цієї проблеми є створення автоматизованої системи, яка здійснює після кожної ітерації зниження складності нескінченного кластера шляхом заміни його на спрощену еквівалентну схему.

Хай, наприклад, після 86 ітерацій у момент утворення нескінченного кластера на плоскій квадратній решітці 10 × 10 його потужність склала $N_{86} = 61$ (рис. 1 *а*). Якщо розглядати кожен елемент кластера як електричний опір величиною R, то сумарний опір кластера R_n (де n – номер останньої ітерації) у даному прикладі порівняно легко підрахувати. Побудуємо для цього еквівалентну електричну схему нескінченного кластера за наступним алгоритмом.

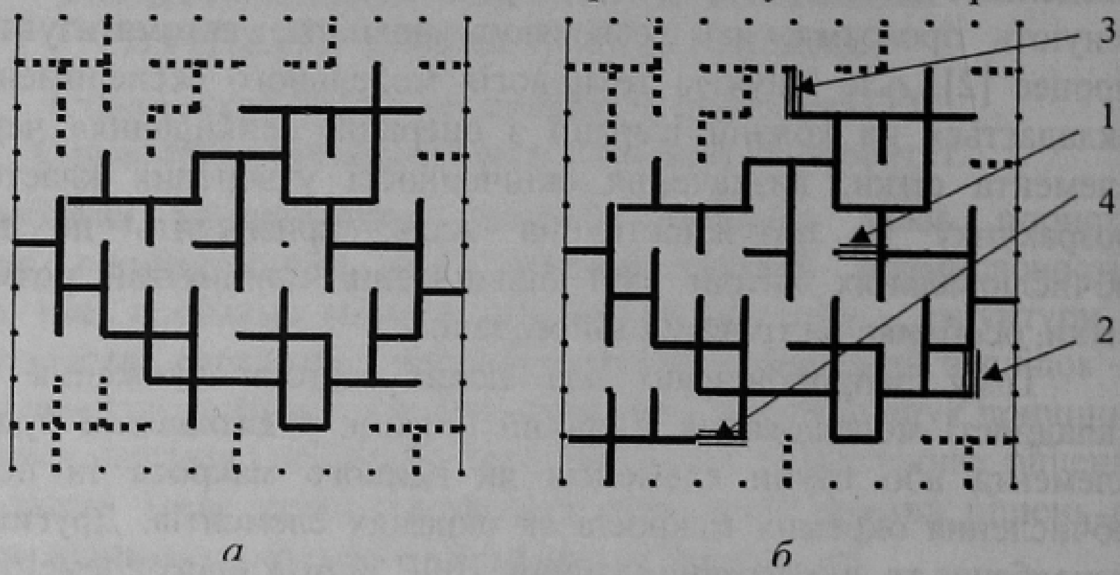
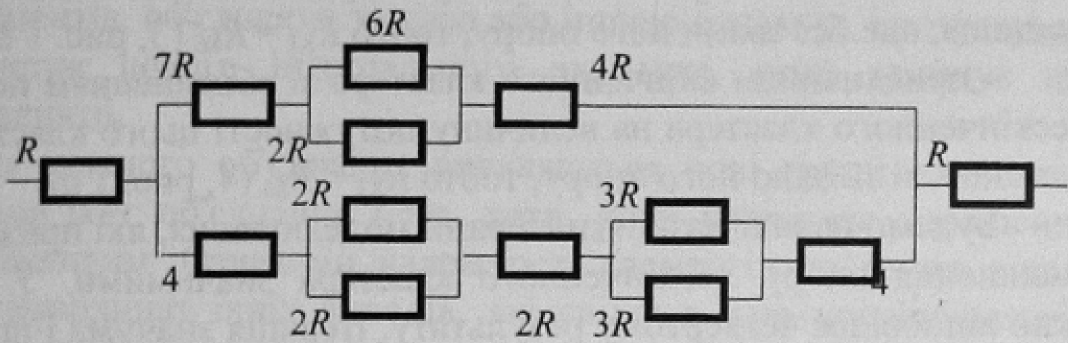


Рисунок 1 - Стан перколяційної моделі
а – у момент утворення нескінченного кластера; б – у момент збільшення потужності нескінченного кластера за рахунок приєднання додаткового скінченного кластера

а)



б)

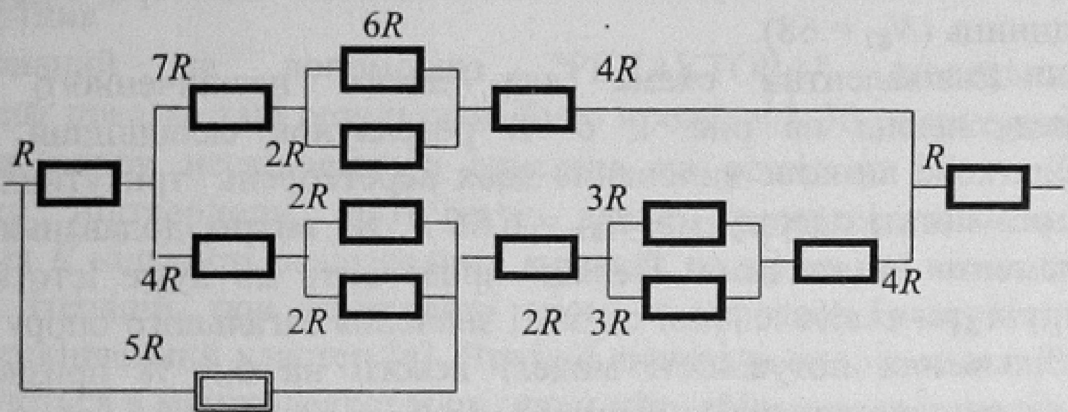


Рисунок 2 - Еквівалентні схеми опору нескінченного кластера а – після 86-ї ітерації; б – після 87-ї ітерації

1. На дереві кластера розшукуються і видаляються усі бічні, не замкнуті на стовбур гілки, незалежно від їхньої потужності.

2. Розшукуються всі ланцюжки послідовно з'єднаних елементів кластера і кожний замінюється одним елементом схеми, який має сумарний опір.

Таким чином, після видалення «висячих» і об'єднання зв'язаних елементів приведений на рис. 1 *а* нескінченний кластер може бути апроксимовано електричною схемою (рис. 2 *а*).

Додавання чергового елемента на 87-й ітерації може, у загальному випадку, завершитися одним з наступних наслідків:

- збільшенням потужності нескінченного кластера на одиницю без зміни його опору, тобто $R_{87} = R_{86}$ (1, рис. 1 *б)*;

- збільшенням потужності нескінченного кластера на одиницю зі зміною його опору, тобто $R_{87} < R_{86}$ (2, рис. 1 *б)*;

- приєднанням скінченного кластера зі збільшенням потужності нескінченного кластера на величину потужності цього кластера плюс одиниця, але без зміни його опору, тобто $R_{87} = R_{86}$ (3, рис. 1 *б)*;

- приєднанням скінченного кластера зі збільшенням потужності нескінченного кластера на величину потужності цього кластера плюс одиниця, зі зміною його опору, тобто $R_{87} < R_{86}$ (4, рис. 1 *б)*.

Будемо надалі називати ітерації моделювання, які призводять до зменшення опору нескінченного кластера значимими. У випадку, який відповідає четвертому результату, ітерація значима і призводить до збільшення потужності нескінченного кластера відразу на 7 одиниць ($N_{87} = 68$).

Еквівалентна схема для такого нескінченного кластера представлена на рис. 2 *б*. Її розрахунок складніший, оскільки додатково вимагає виконання двох перетворень "трикутник – зірка". У результаті одержуємо: $R_{87} = 6{,}86\ R$. Як видно, додавання кожного елемента на значимій ітерації призводить до дуже істотної зміни структури еквівалентної схеми і значення загального опору кластера (збільшення потужності моделі всього на 0,5 % призводить до зменшення опору нескінченного кластера на 16,8 %).

В описаному простому прикладі і побудова еквівалентних схем, і їхній розрахунок виконані "вручну", хоча і зажадали значного часу. У реальних моделях, особливо при дослідженні об'єктів складної конфігурації, коли кількість чарунок в решітці сягає десятків тисяч, здійснення цих процедур без ЕОМ стає неможливим. Для подолання цієї проблеми розроблена програма "РЕДАКТОР" [3], яка дозволяє будувати і розраховувати еквівалентні схеми нескінченного кластера в кожній ітерації моделювання.

Алгоритм ітерації виглядає, при цьому, таким чином.

1. Додавання чергового елемента.

2. Визначення значимості ітерації.

3. Якщо операція незначима, ітерація завершується, якщо значима – перехід до п. 4.

4. Побудова і розрахунок еквівалентних схем за допомогою програми "РЕДАКТОР" для всіх нескінченних кластерів моделі.

5. Завершення ітерації.

Процес зниження складності нескінченного кластера також є ітераційним: кожен його крок складається з двох етапів – пошуку групи елементів, об'єднаних за тією або іншою ознакою, і розрахунку характеристик нового інтегрального елемента, який заміщує цю групу в ланцюзі.

Після кожного об'єднання виявляються нові групи елементів, виконується їхнє об'єднання і т.д. доти, поки подальше спрощення стає неможливим. Ознаками належності елементів до групи є такі значення координат їхніх виводів, які свідчать про послідовне або рівнобіжне з'єднання елементів, а також про їхній зв'язок у "зірку" або "трикутник".

Виконаний за допомогою "РЕДАКТОРА" модельний експеримент показав такі результати. Було проведено 30 розрахунків зменшення опору нескінченного кластера на решітках 50 × 50. Розрахунки підтвердили, що існує деяке критичне значення відношення K кількості реалізованих ітерацій до загальної кількості можливих ітерацій, при досягненні якого з високою імовірністю виникає нескінченний кластер [4]. Вихідні значення опорів кластерів концентруються в межах деякої зони, що у міру збільшення ітерацій і досягнення їх гранично можливої кількості стягується в точку з координатами $\{1; R\}$ (рис. 3).

Точки, які потрапили в зону, можуть бути апроксимовані виразом:

$$R_n = 1 + 23{,}85(1 - K)^{1{,}64},$$

який дозволяє розраховувати кількість добавок K, необхідну для забезпечення заданого опору R_n, тобто вирішувати задачу, поставлену на початку статті.

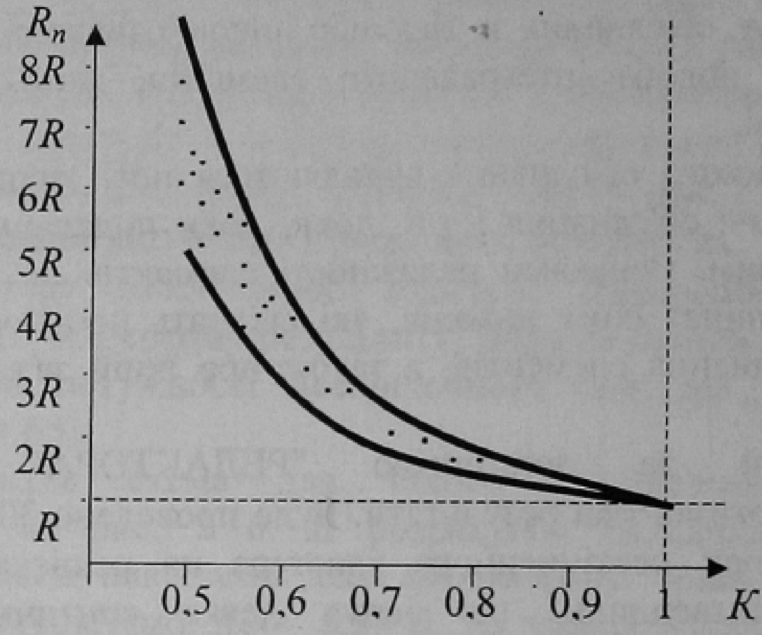


Рисунок 3 - Зміна загального опору кластера в процесі модельного експерименту

Програма "РЕДАКТОР" має зручний інтерфейс для вбудовування в загальний пакет перколяційного машинного експерименту. Її застосування дозволяє набагато спростити процес поточних розрахунків і знизити часову складність останніх у десятки разів.

Список джерел

1. Кострова Г.В., Пурич В.Н., Становский А.Л. Схемотехническое моделирование перколяционных систем // Тезисы докл. V семинара "Моделирование в прикладных научных исследованиях". – Одесса: ОГПУ, 1998.

2. Становский А.Л., Пурич В.Н., Онищенко А.Г. Модельный эксперимент на взаимопроникающих кластерах замещения в литейной форме / Труды Одес. политехн. ун-та. – 1999. – Вып. 1.

3. Герганов М.Л. Исследование систем на надежность с помощью программного продукта «Редактор» // Тезисы докл. VI семинара «Моделирование в прикладных научных исследованиях». – Одесса: ОГПУ, 1999.

4. Федер Е. Фракталы. – М.: Мир, 1991. – 324 с.