

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФГБОУ ВО «Пермский государственный национальный
исследовательский университет»

УДК 519-6, 004.421

*Кафедра прикладной математики
и информатики*

**РЕШЕТОЧНЫЕ ПЕРКОЛЯЦИОННЫЕ МОДЕЛИ СТРУКТУРЫ
ПОЛИМЕРА, МОДИФИЦИРОВАННОГО УГЛЕРОДНЫМИ
НАНОТРУБКАМИ**

Магистерская диссертация

Работу выполнил магистрант
группы ПМИ-2-2018 НМ ММФ
_____ Боков К. А.
«__» _____ 2020 г.

Научный руководитель:
к. ф.-м. н., доцент кафедры ПМИ
_____ Бузмакова М. М.
«__» _____ 2020 г.

Пермь – 2020

Содержание

| | |
|---|----|
| Введение | 4 |
| Глава 1. Анализ современного состояния исследований структуры и свойств полимерных нанокомпозитов. Методы теории перколяции | 11 |
| 1.1. Обзор исследований по усилению полимеров углеродными нанотрубками..... | 11 |
| 1.2. Обзор исследований по моделированию структуры полимера, модифицированного углеродными нанотрубками..... | 12 |
| 1.3. Основные понятия теории перколяции..... | 13 |
| 1.4. Обзор исследований по перколяции и джеммингу k -меров на квадратной и кубической решетках..... | 17 |
| Глава 2. Методика моделирования структуры и свойств полимера, модифицированного углеродными нанотрубками | 22 |
| 2.1. Постановка задачи в двумерном случае..... | 22 |
| 2.2. Постановка задачи в трехмерном случае..... | 22 |
| 2.3. Методика моделирования..... | 23 |
| 2.4. Разработанные алгоритмы..... | 24 |
| 2.4.1. Алгоритм диспергирования k -меров..... | 24 |
| 2.4.2. Алгоритм разбиения на кластеры..... | 26 |
| 2.4.3. Алгоритм поиска перколяционного кластера..... | 28 |
| 2.4.4. Алгоритм упаковки k -меров для задачи джемминга..... | 29 |
| 2.5. Методика определения порога перколяции..... | 30 |
| 2.6. Методика определения порога джемминга..... | 31 |
| Глава 3. Моделирование перколяции и джемминга k-меров на квадратной решетке | 32 |
| 3.1. Введение..... | 32 |
| 3.2. Результаты моделирования..... | 32 |
| 3.3. Модификации исходной модели..... | 36 |
| 3.3.1. Перколяционная задача k -меров разной длины..... | 37 |
| 3.3.2. Перколяционная задача нелинейных k -меров..... | 38 |
| 3.3.3. Перколяционная задача с учетом связи между k -мерами..... | 40 |
| 3.3.4. Перколяционная задача с учетом упорядочивающего фактора..... | 42 |
| 3.3.5. Комбинации некоторых перколяционных задач..... | 43 |
| 3.4. Джемминг k -меров на квадратной решетке..... | 49 |
| 3.5. Выводы..... | 55 |

| | |
|---|----|
| Глава 4. Моделирование перколяции и джемминга k-меров на кубической решетке | 57 |
| 4.1. Введение..... | 57 |
| 4.2. Результаты моделирования..... | 57 |
| 4.3. Джемминг k -меров на кубической решетке..... | 61 |
| 4.4. Выводы..... | 64 |
| Заключение | 65 |
| Список использованной литературы | 67 |
| Приложение А. Письмо из управления инновационной деятельности ПГНИУ | 72 |

Введение

Среди необычных модификаций углерода, которые проявляют принципиально новые свойства, особое место занимают углеродные нанотрубки (УНТ). Широчайший диапазон свойств углеродных нанотрубок обусловлен многообразием их типов. Тип УНТ характеризуется числом графитовых слоев, геометрическими размерами трубки и хиральностью, которая определяет угол ориентации графитовой решётки относительно оси трубки. Каждый тип УНТ обладает своими достоинствами и недостатками. В зависимости от этого, у каждого типа УНТ есть своя область применения. Они применяются в оптике (дисплеи, светодиоды), электронике (транзисторы, топливные элементы), машиностроении (детали топливной системы, кузовные детали) и т.д. Также УНТ используются в виде наполнителя в полимерах для создания полимерных нанокомпозитов с улучшенными или приобретенными свойствами. Полимерный нанокомпозит получается путем смешивания нанонаполнителя – УНТ и полимера. Подобные наноматериалы все больше находят свое применение в различных областях промышленности. Однако широкомасштабному применению таких материалов препятствует отсутствие универсальных технологий получения наноматериала с заведомо известными свойствами.

Актуальным на сегодняшний день является получение новых фундаментальных знаний о структуре и свойствах полимерных нанокомпозитов, модифицированных углеродными наночастицами, с целью разработок новых технологий получения подобных наноматериалов.

Наиболее важными факторами при получении полимерных нанокомпозитов являются способ замешивания нанонаполнителя в полимерной матрице, значение необходимой концентрации для достижения определённых свойств, наличие межфазного и межчастичного взаимодействия. Исследования в данном направлении демонстрируют большой разброс результатов у разных авторов. Одни утверждают, что улучшение свойств наноматериала происходит монотонно при увеличении концентрации нанонаполнителя, другие отмечают

скачкообразное изменение свойств. Разница существует и в определении значения оптимальной концентрации нанонаполнителя. О характере и свойствах межфазного и межчастичного взаимодействия практически отсутствуют какие-либо знания. Возникает потребность в проведении исследований в данном направлении, в частности в построении адекватных математических и компьютерных моделей структуры полимерных нанокомпозитов, модифицированных углеродными нанотрубками, с целью теоретического изучения структуры наноматериала и прогнозирования его свойств.

Целью настоящей работы является теоретическое исследование структуры полимера, модифицированного углеродными нанотрубками. Для достижения поставленной цели были поставлены и решены следующие **задачи**:

- проанализированы теоретические и экспериментальные исследования структуры и свойств полимерных нанокомпозитов, содержащих углеродные наночастицы;
- рассмотрены методы и подходы теории перколяции для моделирования структуры и свойств полимерных нанокомпозитов, содержащих углеродные наночастицы, в том числе проанализированы решенные ранее перколяционные задачи;
- предложена математическая модель структуры тонкой пленки полимера, модифицированной углеродными нанотрубками;
- на основе предложенной математической модели реализован ряд перколяционных задач, решающих проблемы оптимальной концентрации нанотрубок в тонкой пленке полимера с учетом: наличия изгибов нанотрубок, разной длины нанотрубок, присутствия межфазных областей и взаимодействия между нанотрубками;
- предложена математическая модель структуры полимера, модифицированного углеродными нанотрубками;
- на основе предложенной математической модели реализована перколяционная задача, решающая проблему оптимальной концентрации нанотрубок в полимере;

- для компьютерной реализации перколяционных задач разработаны эффективные алгоритмы: диспергирования УНТ в полимере, распределения нанотрубок по кластерам, нахождения перколяционного кластера;
- рассмотрена задача максимально возможного заполнения полимера нанотрубками (задача джемминга);
- разработано программное приложение для проведения вычислительного эксперимента по диспергированию УНТ в полимере (в тонкой пленке и объемных образцах) и вычисления порога перколяции, порога джемминга и других характеристик перколяционной системы.

Объектом исследования являются перколяционные процессы, протекающие в полимерных нанокompозитах. **Предметом исследования** является полимер (на примере эпоксидной смолы), модифицированный углеродными нанотрубками.

Новизна настоящего исследования обусловлена изучением новых перколяционных моделей, разработкой оригинальных эффективных алгоритмов и получением новых результатов по значению порога перколяции и джемминга k -меров на квадратной и кубической решетках, которые соответствуют критической концентрации углеродных нанотрубок в полимере.

Научная значимость работы заключается в получении новых фундаментальных знаний теории структуры полимерных нанокompозитов, содержащих углеродные наночастицы. **Практическая значимость** состоит в возможности применения разработанных автором эффективных алгоритмов для решения новых перколяционных задач.

Настоящее исследование проведено методами Монте-Карло с использованием подходов теории перколяции, теории вероятностей и математической статистики и применением современных информационных технологий. Автором работы разработан программный продукт «Моделирование перколяции и джемминга неточечных объектов на квадратной

решетке», который в настоящее время проходит государственную регистрацию в Роспатенте.

Настоящая работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и двух приложений.

Во введении приведены: обоснование выбранной автором темы исследования, его актуальность, поставленные цели и задачи, новизна исследования, научная и практическая значимость, объект и предмет исследования, методология исследования и краткое содержание работы.

В первой главе проведен анализ современных состояний исследований структуры и свойств полимерных нанокомпозитов, модифицированных углеродными нанотрубками, описаны основные определения и методы теории перколяции, рассмотрены перколяционные модели структуры и свойств полимерных нанокомпозитов.

Во второй главе приведена математическая постановка задачи настоящего исследования, описаны перколяционные модели структуры полимера (тонкой плёнки и объемного образца), модифицированного углеродными нанотрубками, представлено описание разработанных автором эффективных алгоритмов.

В третьей главе представлены результаты моделирования перколяционных задач k -меров на квадратной решетке, описывающих структуру тонкой пленки полимера, модифицированного углеродными нанотрубками.

В четвертой главе представлены результаты моделирования перколяционных задач k -меров на кубической решетке, описывающих структуру полимера, модифицированного углеродными нанотрубками.

В заключении приведены основные результаты настоящего исследования и сформулированы выводы.

В приложении А представлено письмо из управления инновационной деятельности ПГНИУ подтверждающее, что созданный автором программный продукт «Моделирование перколяции и джемминга неточечных объектов на квадратной решетке» проходит государственную регистрацию в Роспатенте.

Настоящая работа проведена при финансовой поддержке РФФИ (в рамках научных проектов № 17-41-590649, № 16-31-00064) и Правительства Пермского края (№ С-26/793). Во время работы над исследованием автор принял участие в 7 научных конференциях и опубликовал 11 научных работ, в том числе 2 статьи в журналах Scopus.

Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях:

- Всероссийская научно-практическая конференция молодых учёных с международным участием «Математика и междисциплинарные исследования – 2017» в рамках форума «Наука и глобальные вызовы XXI века», г. Пермь, 15-20 мая 2017 г.
- VII Международная молодежная научная школа-конференция «Современные проблемы физики и технологий», г. Москва, НИЯУ МИФИ, 16-21 апреля 2018 г.
- Форум "Наука и глобальные вызовы XXI века": Всероссийская научно-практическая конференция молодых ученых с международным участием "Математика и междисциплинарные исследования – 2018", г. Пермь, 14-18 мая 2018 г.
- II Международная научная конференция "Высокие технологии, определяющие качество жизни", г. Пермь, 17-19 сентября 2018 г.
- Международная инновационная конференция молодых учёных и студентов по современным проблемам машиноведения МИКМУС-2018, г. Москва, 20-23 ноября 2018 г.
- VIII Международная молодежная научная школа-конференция «Современные проблемы физики и технологий», г. Москва, НИЯУ МИФИ, 15-20 апреля 2019 г.
- Форум "Наука и глобальные вызовы XXI века": Всероссийская научно-практическая конференция молодых ученых с международным участием

"Математика и междисциплинарные исследования – 2019", г. Пермь, 15-18 мая 2019 г.

По теме диссертации в соавторстве и самостоятельно опубликованы следующие работы:

- Боков К. А., Бузмакова М. М. Моделирование диспергирования углеродных нанотрубок в полимере. Математика и междисциплинарные исследования – 2017: материалы Всероссийской научно-практической конференции молодых учёных с международным участием, Пермь, 2017, том 2, с. 14-18.
- Боков К. А., Бузмакова М. М. Компьютерное моделирование перколяции k -меров на квадратной решетке. Вестник Пермского университета. Математика. Механика. Информатика, Пермь, 2018, с. 51-55.
- Боков К. А. Моделирование тонкой пленки полимера, модифицированного углеродными нанотрубками, с применением методов теории перколяции. Современные проблемы физики и технологий: VII Международная молодежная научная школа-конференция, Москва, 2018, с. 267-268.
- Боков К. А., Бузмакова М. М. Перколяционная модель структуры тонкой пленки полимера, модифицированной углеродными нанотрубками. Математика и междисциплинарные исследования – 2018: материалы Всероссийской научно-практической конференции молодых учёных с международным участием, Пермь, 2018, с. 155-157.
- Боков К. А., Бузмакова М. М. Моделирование нанокompозита, получаемого путем модификации эпоксид-полимера наночастицами. Высокие технологии, определяющие качество жизни: Материалы II Международной научной конференции, Пермь, 2018, с. 154-156.
- Боков К. А., Бузмакова М. М. Перколяционная модель структуры тонкой пленки эпоксидной смолы, модифицированной углеродными нанотрубками, с учетом межфазных областей. Материалы Международной

инновационной конференции молодых ученых и студентов ИСУСС-2018, Москва, 2018, с. 537-540.

- Боков К. А., Бузмакова М. М. Моделирование структуры полимерного нанокompозита, содержащего углеродные нанотрубки. Современные проблемы физики и технологий: VIII Международная молодежная научная школа-конференция, Москва, 2019, том 2, с. 230-231.
- Bokov K. A., Buzmakova M. M. The Modeling of the Polymer's Thin Film, Modified by Carbon Nanotubes, this Using of the percolation theory's methods. Journal of Physics: Conference Series 1189 (2019) 012012.
- Боков К. А., Бузмакова М. М. Джемминг k -меров разной формы на квадратной решетке. Математика и междисциплинарные исследования – 2019: материалы Всероссийской научно-практической конференции молодых учёных с международным участием, Пермь, 2019, с. 50-54.
- Bokov K. A., Buzmakova M. M. The Percolation Model of the Structure of the Polymer Nanocomposite, Containing the Carbon Nanotubes, with the Orient Factor Availability. Journal of Physics: Conference Series 1439 (2020) 012027.
- Боков К. А., Бузмакова М. М. Компьютерное моделирование джемминга для перколяционной задачи Накамуры. Математические методы и информационно-технические средства: материалы XV Всероссийской научно-практической конференции, Краснодар, 2019, с. 27-31.

Глава 1. Анализ современного состояния исследований структуры и свойств полимерных нанокомпозитов. Методы теории перколяции

1.1. Обзор исследований по усилению полимеров углеродными нанотрубками

В настоящий момент исследователями разработано немалое количество методов получения полимерных нанокомпозитов, содержащих углеродные наполнители. Экспериментально установлено, что с введением малой доли углеродных наночастиц в материал при условии их равномерного распределения, тот приобретает новые или улучшает существующие свойства.

Создание различных эпоксидных компонентов, модифицированных углеродными нанотрубками, производилось в работах [1-10]. Ниже подробнее рассмотрены некоторые из них, представляющие наибольший интерес.

В [6] показано, что степень усиления нанокомпозитов контролируется двумя факторами: структурой нанокомпозита и типом армирующей компоненты. Введение нанонаполнителя в матричный полимер изменяет его структуру в силу формирования межфазных областей, так что авторы пришли к выводу, что свойства нанокомпозитов в первую очередь определяются уровнем межфазных взаимодействий.

Статья [8] посвящена достаточно подробному обзору способов придания полимерным нанокомпозитам повышенной электропроводности. Авторы также провели эксперименты по получению полимерных композиционных материалов на основе нековалентно функционализированных углеродных нанотрубок. Результаты достаточны для успешного придания различного рода изделиям антистатических свойств и увеличению стойкости материалов к воздействию молниевых разрядов.

В работе [9] также подробно рассмотрены способы получения эпоксидных композиционных материалов, армированных углеродными нанотрубками.

Обсуждены зависимости электропроводности эпоксидных полимеров от концентрации наполнителя в виде однослойных и многослойных нанотрубок и изложены современные представления о механизме усиления эпоксидных полимеров углеродными нанотрубками.

В статье [10] описываются эксперименты по получению эпоксидных матриц, модифицированных углеродными нанотрубками, при непрерывном протекании тока в процессе их полимеризации. Установлено, что проводимость образцов эпоксидных матриц, через которые протекал ток при полимеризации, больше проводимости образцов, через которые ток не протекал. Дополнительно исследована проводимость эпоксидной матрицы при различных массовых концентрациях нанотрубок. Также исследована зависимость проводимости образцов от температуры через 24 часа после начала полимеризации.

Результатом экспериментов стал вывод, что необходимо создание адекватной теоретической модели ориентационного упорядочивания нанотрубок в жидкой полимерной матрице в электрическом поле, которая в свою очередь позволит изготавливать композитные материалы с заданными электрофизическими и механическими свойствами при помощи воздействия на них электрических полей в процессе полимеризации.

1.2. Обзор исследований по моделированию структуры полимера, модифицированного углеродными нанотрубками

Попытки моделирования полимерного нанокомпозита, содержащего наночастицы, предпринимались в работах [11-16].

В [13] предложена перколяционная модель для описания экстремальной зависимости степени усиления нанокомпозитов, которые модифицированы углеродными нанотрубками. Модель позволяет описать зависимость модуля упругости от содержания нанонаполнителя для указанных нанокомпозитов.

В работе [14] описана схема проведения численного моделирования деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих многостенные углеродные трубки.

Вопрос проницаемости полимерных пленок рассмотрен в [15]. В этой статье применен вероятностный подход к моделированию проницаемости на примере полимерной пленки, поверхность которой обработана нанокompозитами.

В статье [16] рассмотрены две теоретические модели усиления нанокompозитов со стеклообразной и эластомерной матрицей. Углеродные нанотрубки моделируются как кольцеобразные формирования, показана взаимосвязь уровня их анизотропии и относительной доли межфазных областей. В работе установлено, что существует минимальное содержание межфазных областей, не влияющее на степень усиления нанокompозитов.

1.3. Основные понятия теории перколяции

Теория перколяции (теория протекания, теория просачивания) успешно используется для моделирования структуры и исследования свойств полимеров, модифицированных углеродными наночастицами, в частности нанотрубками. В перколяционных моделях углеродные нанотрубки чаще всего представлены k -мерами (в решеточных моделях k -мер представляет собой k подряд занятых узлов в каком-либо из направлений, в континуальных моделях – отрезок с заданной длиной k) [17].

Теория перколяции изучает образование связанных структур из различных объектов в неупорядоченных средах. В рамках этой теории существуют решеточные и континуальные задачи. В решеточных моделях перколяция исследуется на различных регулярных решетках, а в континуальных – в непрерывных системах. Решеточные задачи являются наиболее изученными и делятся на задачу узлов, задачу связей и смешанную задачу.

С математической точки зрения эти задачи посвящены исследованию свойств регулярного графа при случайном удалении из него вершин и/или ребер. В случае перколяции узлов рассматривается граф (решетка) в d -мерном пространстве – рисунок 1.1. Каждая вершина графа (узел решетки) может быть занята с вероятностью p или свободна с вероятностью $1 - p$ [18].

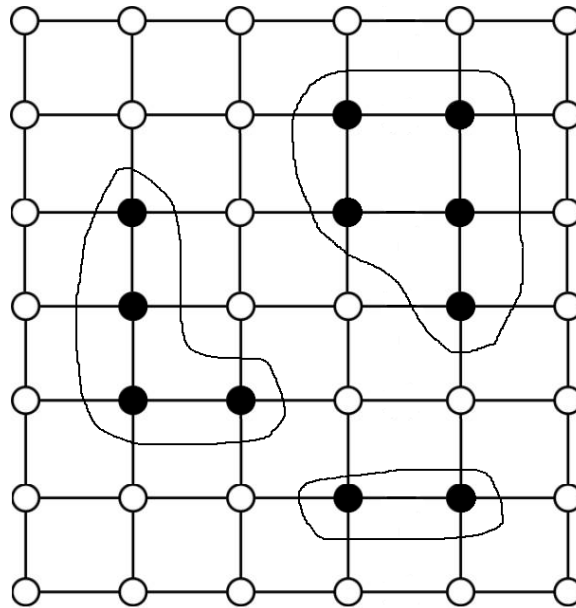


Рисунок 1.1. Соседние занятые узлы формируют кластеры на квадратной решётке

Подобного рода задачи могут рассматриваться также на треугольных и шестиугольных сетках, деревьях, различных трехмерных решетках, в частности на простой кубической, и многих других. Также рассматривают и различные осаждающие на саму решетку объекты. Например, k -меры (рис. 1.2, $k = 5$) или блоки (рис. 1.11) и др.

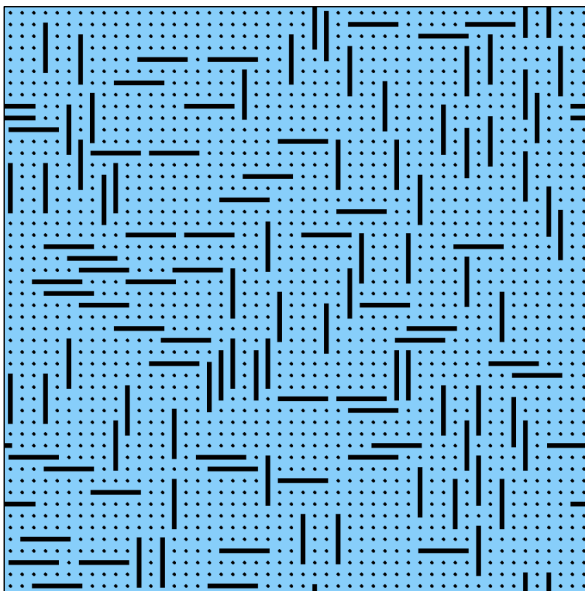


Рисунок 1.2. Случайное распределение 5-меров на решетке размера $L = 50$

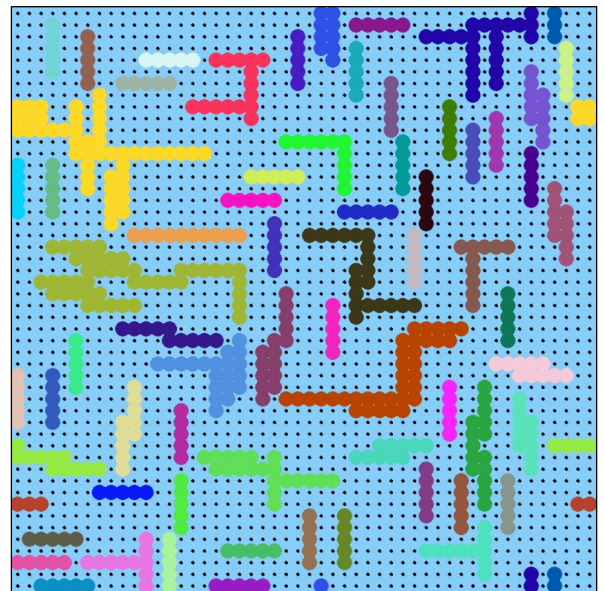


Рисунок 1.3. Образование кластеров из 5-меров при условии их связности (соприкосновения)

Распределенные случайным образом объекты на решетке могут образовывать кластеры. Кластером называется группа связанных между собой объектов по какому-либо критерию. Самым распространенным критерием

принадлежности двух объектов одному кластеру является их расположение на определенном расстоянии друг от друга – рисунки 1.1, 1.3. С увеличением количества объектов на решетке небольшие кластеры сливаются друг с другом в более крупные кластеры, и при достижении определенного количества объектов наступает момент, когда образуется кластер, пронизывающий всю систему, – перколяционный кластер.

Наглядный пример возникновения перколяционного кластера при увеличении количества объектов на решетке продемонстрирован на рисунках 1.4-1.9. Получены шесть различных структур распределения k -меров ($k = 1$) при различной их концентрации p на простой квадратной решетке размера 1000×1000 узлов.

Основной задачей теории перколяции является определение различного рода критических характеристик той или иной системы. Основными двумя являются порог перколяции и порог джемминга. Порогом перколяции называется такая концентрация объектов на решетке, при которой с вероятностью 50% в системе будет возникать перколяционный кластер. Если безостановочно осаждают объекты на решетку, в некоторый момент возникает ситуация, когда свободные узлы присутствуют в системе, но их недостаточно для размещения очередного объекта. Такое явление называется джеммингом, а максимально возможная концентрация объектов на решетке – порогом джемминга.

При решении перколяционных задач используются различные виды граничных условий. Самые распространенные из них: открытые граничные условия (к каждому граничному слою добавляются нулевые слои и, таким образом, все объекты становятся эквивалентными) и периодические граничные условия (каждый объект размещается в системе с периодом, равным линейному размеру системы, по всем направлениям) [19]. Выбранный тип границ при моделировании может оказывать значительное влияние на упаковку объектов в системе вблизи границ, последующую идентификацию кластеров (кластеры могут быть разрезаны границами), наличие перколяционного кластера в системе.

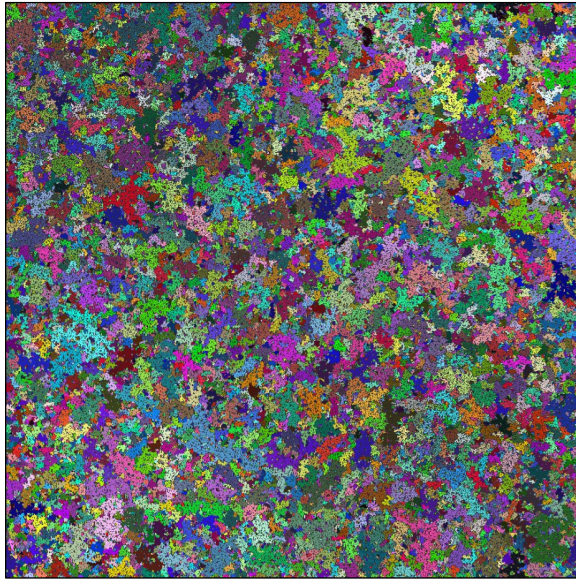


Рисунок 1.4. $p = 55\%$

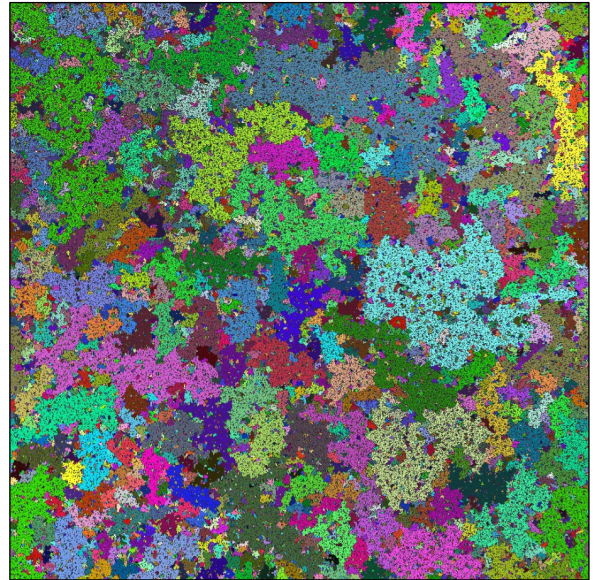


Рисунок 1.5. $p = 58\%$

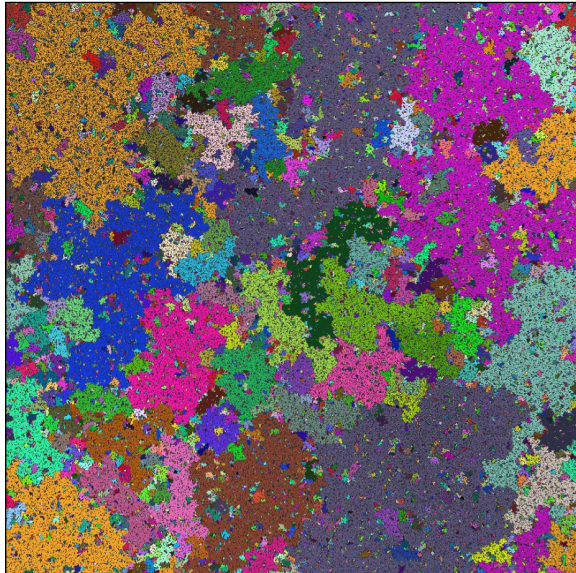


Рисунок 1.6. $p = 58.8\%$

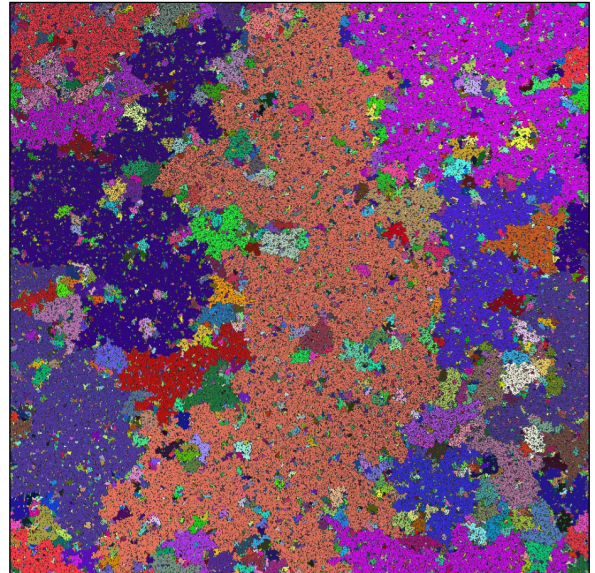


Рисунок 1.7. $p = 59\%$

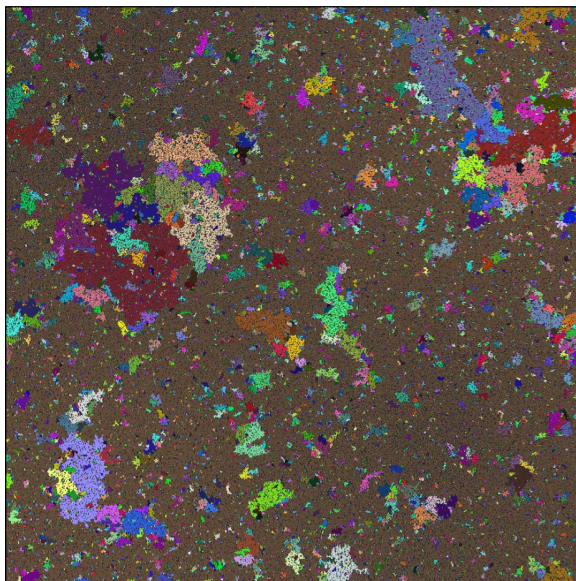


Рисунок 1.8. $p = 59.5\%$

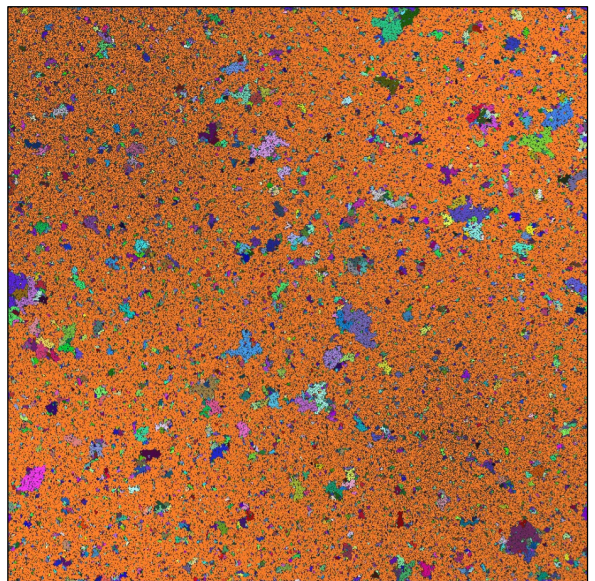


Рисунок 1.9. $p = 60\%$

Решеточные задачи представляют интерес в первую очередь с теоретической точки зрения – для них доказан ряд строгих утверждений и соотношений. Однако они имеют и практическое применение: таких простых моделей достаточно, чтобы описать, например, движение электронов в полупроводнике, процесс распространения эпидемии или лесного пожара [20].

1.4. Обзор исследований по перколяции и джеммингу k -меров на квадратной и кубической решетках

Попытки моделирования перколяции k -меров производились несколькими исследователями. В таблице 1.1 приведена сводка значений порогов перколяции на квадратной решетке при различных k .

Таблица 1.1. Пороги перколяции при различных k

| $k \setminus P_c$ | [21] | [22] | [23] |
|-------------------|---------|-------|-------|
| 1 | 0.5927 | — | 0.593 |
| 2 | 0.5619 | 0.562 | 0.561 |
| 3 | 0.52797 | 0.528 | — |
| 4 | 0.5050 | 0.504 | 0.504 |
| 5 | 0.48997 | 0.490 | — |
| 6 | 0.48026 | 0.479 | — |
| 7 | 0.47600 | — | — |
| 8 | 0.4697 | 0.474 | 0.470 |
| 9 | 0.4668 | — | — |
| 10 | — | 0.467 | — |
| 16 | 0.4638 | — | 0.463 |
| 24 | — | — | 0.466 |
| 32 | 0.4748 | — | 0.471 |
| 40 | — | — | 0.484 |

На рисунке 1.10 показан пример заполнения решетки k -мерами. В этой системе наблюдается состояние джемминга (решетка заполнена k -мерами до максимальной концентрации). В таблице 1.2 соответственно приведены значения порогов джемминга при различных k . В [22] было выявлено, что отношение порогов перколяции к порогам джемминга является константой и равно 0.62 ± 0.01 . Авторы выдвинули предположение, что близко упакованные k -меры представляют собой блоки размером $k \times k$ – рисунок 1.11. В ходе

эксперимента они также выяснили, что отношение порогов джемминга k -меров к порогам джемминга блоков тоже является константой и равно 0.79 ± 0.01 .

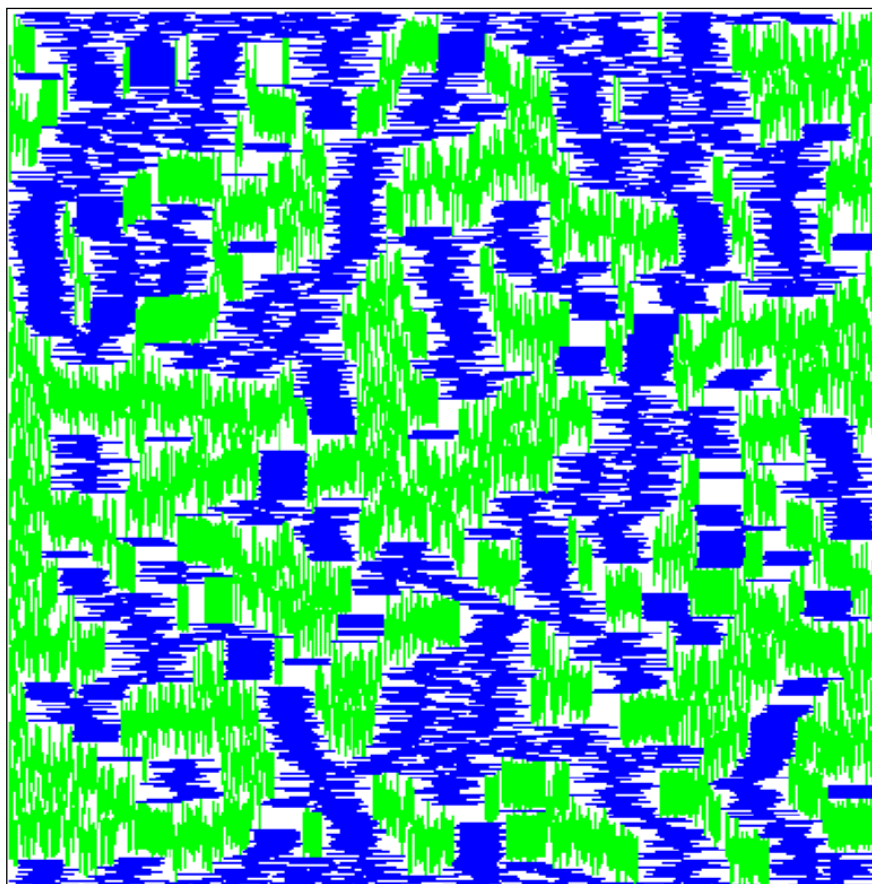


Рисунок 1.10. Состояние джемминга на решетке $L = 500$, $k = 20$ [22]

Таблица 1.2. Пороги джемминга при различных k

| $k \setminus P_j$ | [21] | [22] |
|-------------------|--------|-------|
| 2 | 0.906 | 0.906 |
| 3 | 0.846 | 0.847 |
| 4 | 0.81 | 0.811 |
| 5 | 0.7868 | 0.787 |
| 6 | 0.7703 | 0.770 |
| 7 | 0.7579 | — |
| 8 | 0.747 | 0.757 |
| 9 | 0.7405 | — |
| 10 | — | 0.741 |
| 16 | 0.71 | — |
| 32 | 0.689 | — |

Исследователи пришли к выводу, что полученные константы отношений порогов перколяции к порогам джемминга k -меров и порогов джемминга k -меров к порогам джемминга блоков демонстрируют некую универсальность связи в

геометрии перколяции и джемминга как для анизотропных форм (k -меры на квадратной решетке), так и для изотропных форм объектов (блоки $k \times k$ на квадратной решетке).

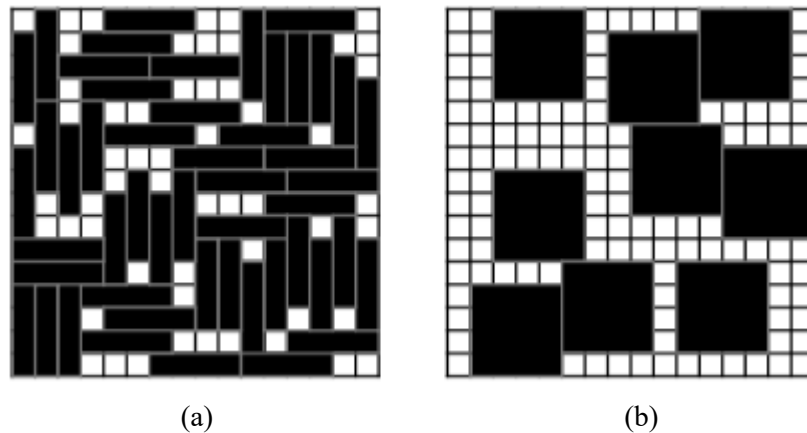


Рисунок 1.11. Джемминг 4-меров и блоков 4×4 на решетке $L = 16$ [6]

Однако подобные отношения верны лишь для небольших k . Это подтверждается в работе [24]. В ней получены значения порогов перколяции и джемминга для k -меров при больших k – таблица 1.3. Более того, выяснилось, что порог перколяции является немонотонной функцией. Минимум по некоторым источникам [23, 25] достигается при $13 \leq k \leq 15$.

Таблица 1.3. Пороги перколяции и джемминга для больших k , где $k = 2^n$ [24]

| n | P_c | P_j |
|-----|--------|--------|
| 6 | 0.4894 | 0.6755 |
| 7 | 0.5111 | 0.6686 |
| 8 | 0.5292 | 0.6628 |
| 9 | 0.5450 | 0.6618 |
| 10 | 0.5628 | 0.6592 |
| 11 | 0.5740 | 0.6596 |
| 12 | 0.5850 | 0.6575 |
| 13 | 0.5913 | 0.6571 |
| 14 | 0.6003 | 0.6561 |
| 15 | 0.6039 | 0.6548 |
| 16 | 0.6086 | 0.6545 |
| 17 | 0.6067 | 0.6487 |

В статье [26] авторами исследовано влияние упорядоченности k -меров на значение порога перколяции. Коэффициент упорядоченности – $s \in [0; 1]$ равен нулю, когда ориентация k -меров не упорядочена (горизонтальные и

вертикальные k -меры равновероятны), и равен единице, когда ориентация упорядочена – k -меры осаждаются на решетку лишь в одном направлении.

В общем случае увеличение коэффициента упорядоченности ведет к увеличению порога перколяции. Авторы также выяснили, что зависимости порогов перколяции для полностью упорядоченных ($s = 1$) и частично упорядоченных систем ($s < 1$) при увеличении k различны. Для полностью упорядоченных систем значения порогов перколяции монотонно уменьшаются по мере увеличения k , когда для частично упорядоченных систем значения порогов перколяции представляют собой немонотонную функцию.

Этими же авторами в статье [27] было исследовано влияние упорядоченности k -меров и на значение порога джемминга. В рамках предложенных моделей был использован тот же коэффициент упорядоченности $s \in [0; 1]$. Было установлено, что для малых k -меров ($k \leq 4$) в неупорядоченных системах получаются более плотные структуры по сравнению с полностью упорядоченными системами. Однако более длинные k -меры демонстрировали прямо противоположное поведение.

Работа [21] также интересна тем, что дополнительно посвящена исследованию влияния дефектов на поведение значения порога перколяции. В ней предложены две модели: Ld – идеальные k -меры осаждаются на решетку с дефектами, Kd – k -меры с дефектами осаждаются на идеальной решетке – рисунок 1.12.

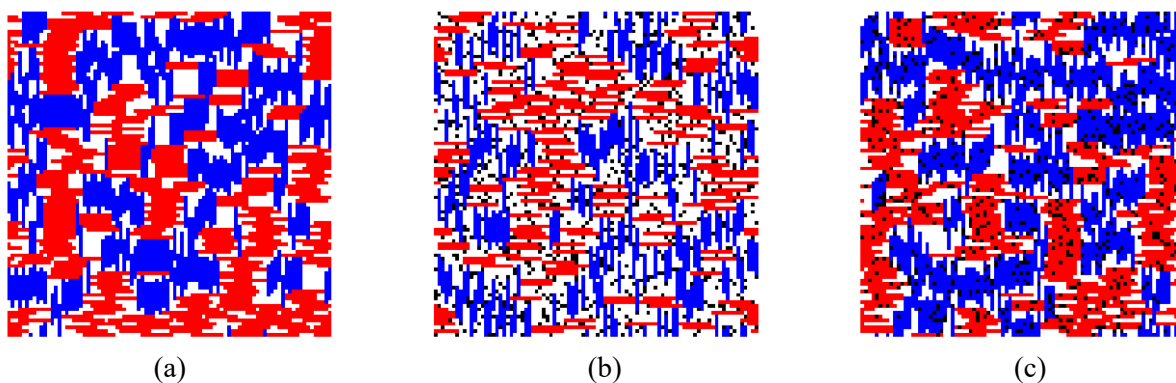


Рисунок 1.12. (a) – стандартная модель без дефектов, (b) – модель Ld , (c) – модель Kd [11]

В моделях под дефектами подразумеваются непроводящие точечные примеси. В обоих случаях авторами установлена тривиальная зависимость: увеличение количества дефектов на решетке приводит к увеличению значения порога перколяции.

Попытки моделирования перколяции k -меров производились также и для трехмерных случаев. Так, в работе [28] представлены значения порогов перколяции и джемминга для кубической решетки при $2 \leq k \leq 64$ – таблица 1.4. Выявлено, что порог перколяции, порог джемминга и отношение порога перколяции к порогу джемминга являются монотонно убывающими функциями при увеличении k .

Таблица 1.4. Пороги перколяции и джемминга при различных k [28]

| k | P_c | P_j |
|-----|--------|----------|
| 2 | 0.2555 | 0.918388 |
| 3 | 0.2129 | 0.838860 |
| 4 | 0.1800 | 0.780344 |
| 5 | 0.1555 | 0.736061 |
| 6 | 0.1364 | 0.701346 |
| 7 | 0.1218 | 0.673355 |
| 8 | 0.1089 | 0.650282 |
| 9 | 0.0990 | 0.630901 |
| 10 | 0.0901 | 0.614384 |
| 11 | 0.0831 | 0.600130 |
| 12 | 0.0772 | 0.587696 |
| 13 | 0.0714 | 0.576780 |
| 14 | 0.0661 | 0.567044 |
| 15 | 0.0632 | 0.558360 |
| 20 | 0.0478 | 0.525676 |
| 24 | 0.0411 | 0.507750 |
| 32 | 0.0299 | 0.483360 |
| 48 | 0.0191 | 0.456071 |
| 64 | 0.0143 | 0.440655 |

Глава 2. Методика моделирования и алгоритмы

2.1. Постановка задачи в двумерном случае

Для исследования структуры и свойств тонкой пленки полимера, содержащего углеродные нанотрубки, предлагается модель, которую можно описать следующим математическим соотношением:

$$M = \langle L, Z_n, k, p, N \rangle,$$

где L – линейный размер квадратной решетки в узлах, $Z_n = \{a_i, b_i\}$, $i = \overline{1, n}$ – множество пар координат начала k -мера, где $1 \leq a_i \leq L$, $1 \leq b_i \leq L$, k – длина k -мера, p – заданная концентрация k -меров на решетке, N – количество проводимых испытаний на каждом уровне концентрации.

Полимерная матрица представлена в виде квадратной решетки с линейным размером L , в роли углеродных нанотрубок выступают k -меры. k -мер представляет собой k подряд занятых узлов в горизонтальном или вертикальном направлении. k -меры не могут пересекаться между собой. Горизонтальные и вертикальные ориентации k -меров равновероятны. k -меры равномерно распределены по всей решетке. При моделировании использованы периодические граничные условия.

2.2. Постановка задачи в трехмерном случае

Для исследования структуры и свойств полимера, содержащего углеродные нанотрубки, предлагается перколяционная модель, которую можно описать следующим математическим соотношением:

$$M = \langle L, Z_n, k, p, N \rangle,$$

где L – линейный размер кубической решетки в узлах, $Z_n = \{a_i, b_i, c_i\}$, $i = \overline{1, n}$ – множество троек координат начала k -меров, где $1 \leq a_i \leq L$, $1 \leq b_i \leq L$, $1 \leq c_i \leq L$, k – длина k -мера, p – заданная концентрация k -меров на решетке, N – количество проводимых испытаний на каждом уровне концентрации.

Полимерный нанокомпозит представлен в виде кубической решетки с линейным размером L , в роли углеродных нанотрубок выступают k -меры. k -мер представляет собой k подряд занятых узлов в одном из трех возможных направлений. k -меры не могут пересекаться между собой. Ориентации k -меров равновероятны. k -меры равномерно распределены по всей решетке. При моделировании использованы периодические граничные условия.

2.3. Методика моделирования

Каждый проводимый эксперимент по исследованию критической концентрации k -меров, при которой с вероятностью 50% возникает перколяционный кластер в системе, имеет свои параметры (независимо от размерности модели): L – длина моделируемой решетки, k – длина упаковываемых k -меров, p_0 – начальная концентрация k -меров на решетке, h – шаг по концентрации, N – количество независимых испытаний на каждом уровне концентрации p_i , $i = \overline{1, n}$. p_n – концентрация k -меров, при которой вероятность возникновения перколяционного кластера равна 100%.

Очевидно, что после достижения концентрации p_n повышать дальше количество k -меров на решетке не имеет смысла, так как в этом случае в таких структурах перколяционные кластеры будут образовываться также с вероятностью 100%.

Каждый эксперимент по исследованию среднего значения максимального заполнения решетки k -мерами также имеет свои параметры (независимо от размерности модели): L – длина моделируемой решетки, k – длина упаковываемых k -меров, $q(L)$ – сложность упаковки, количество попыток на упаковку каждого k -мера, N – количество независимых испытаний.

Для генерации направления и координат размещения k -меров, используется встроенный генератор случайных чисел, основанный на измененной версии алгоритма генератора случайных чисел с вычитанием [29].

Варьируемая длина k -меров получается с помощью преобразования Бокса-Мюллера, которое позволяет сгенерировать нормально распределенные случайные величины на основе равномерно распределенных величин [30].

Для реализации моделей в разделах 2.1-2.2 и их модификаций были написаны программы с пользовательским интерфейсом на языке программирования C#. Моделирование проводилось с использованием методов Монте-Карло.

2.4. Разработанные алгоритмы

Все предложенные и разработанные алгоритмы по своей сути идентичны для двумерного и трехмерного случая. Присутствуют некоторые нюансы, которые будут в каждом из алгоритмов отдельно подмечены.

2.4.1. Алгоритм диспергирования k -меров

Равномерное распределение k -меров на решетке (либо квадратной, либо кубической) происходит следующим образом:

1. Генерируется направление k -мера. Количество возможных направлений зависит от размерности решетки: в двумерном случае их два, в трёхмерном соответственно три.
2. Генерируются координаты начала k -мера (пара целых чисел x, y , где $1 \leq x, y \leq L$, или тройка целых чисел x, y, z , где $1 \leq x, y, z \leq L$, – в зависимости от размерности решетки, L – размер решетки).
3. Производится попытка упаковать k -мер со сгенерированными направлением и координатами начала:
 - а) проверяется, свободны ли k -подряд узлов в выбранном направлении, начиная с узла, являющимся началом k -мера;
 - б) если при проверке узлов, все оказываются свободными, они помечаются как занятые, и текущий k -мер считается упакованным;

- с) иначе текущий k -мер отвергается. Генерируются другие координаты для размещения k -мера, и производится попытка упаковки с новыми координатами.
4. Распределение k -меров происходит до тех пор, пока не будет достигнута необходимая концентрация p – рисунки 2.1-2.2.

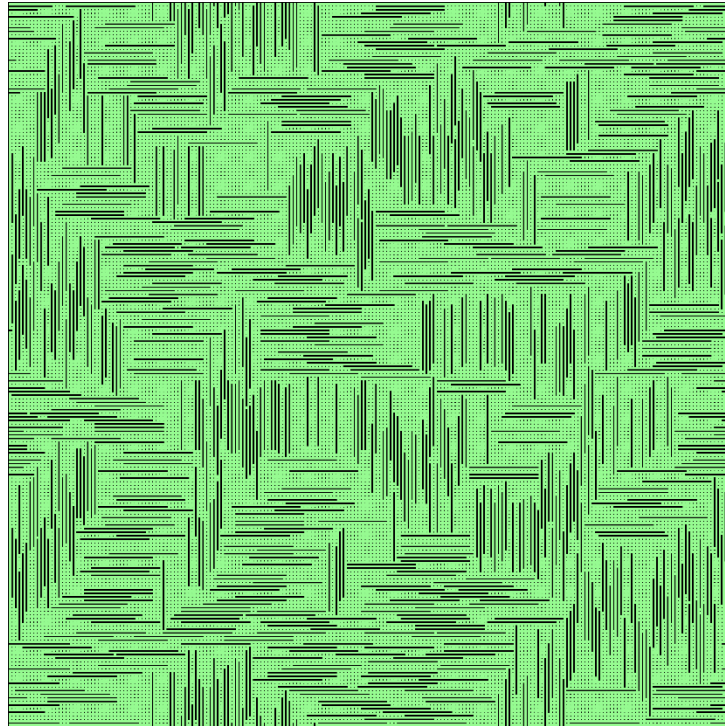


Рисунок 2.1. Распределение 20-меров на квадратной решетке размера $L = 200$, $p = 45\%$

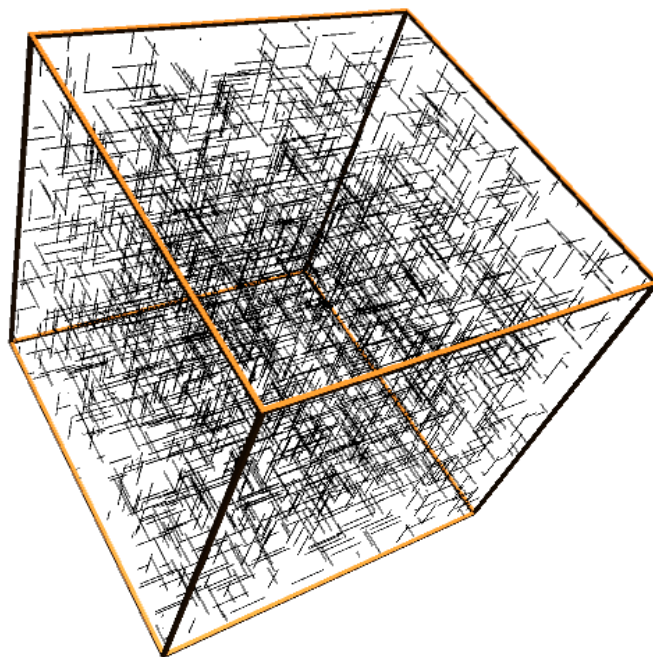


Рисунок 2.2. Распределение 50-меров на кубической решетке размера $L = 500$, $p = 0.1\%$

2.4.2. Алгоритм разбиения на кластеры

Разбиение текущего распределения k -меров на кластеры в двумерном случае происходит следующим образом (см. рисунки 2.3-2.4):

1. Создаются списки координат узлов $coor_cluster[m]$, принадлежащих m -му кластеру, создается список-помощник cl_help , $i=1$, $j=1$, $m=1$. Списки пустые, $1 \leq i \leq L$, $1 \leq j \leq L$.
2. Узел решётки $[i][j]$ проверяется, является ли он занятым и непроверенным.
3. Если узел $[i][j]$ занят и не проверен, то он принадлежит m -му кластеру:
 - a) узел $[i][j]$ помечается проверенным и помещается в список $coor_cluster[m]$;
 - b) рассматриваются соседние узлы текущего узла – $[i][j+1]$, $[i][j-1]$, $[i+1][j]$, $[i-1][j]$. Если $i+1=L+1$, или $j+1=L+1$, или $i-1=0$, или $j-1=0$, то производится корректировка индексов соседних узлов с учетом граничных условий. Каждый из граничных узлов, если является занятым и непроверенным, то заносится в список cl_help .
4. Если список cl_help непустой, то для каждого его элемента выполняется пункт 3, иначе переходим к пункту 5.
5. Кластер под номером m идентифицирован, $m=m+1$, начинается поиск следующего кластера. Обнуляется cl_help , если $j < L$, то $j=j+1$. Если же $j=L$ и $i < L$, то $j=1$, $i=i+1$ и осуществляется переход к пункту 2, в противном случае алгоритм прекращает свою работу.

В описанном алгоритме не возникает конфликта кластерных меток, как это наблюдается в [31], так как при нахождении очередного занятого непроверенного узла идентифицируется сразу весь кластер, которому этот узел принадлежит.

Алгоритм для трехмерного случая отличается лишь тем, что на кубической решетке у каждого узла есть 6 соседей, когда на квадратной их всего 4.

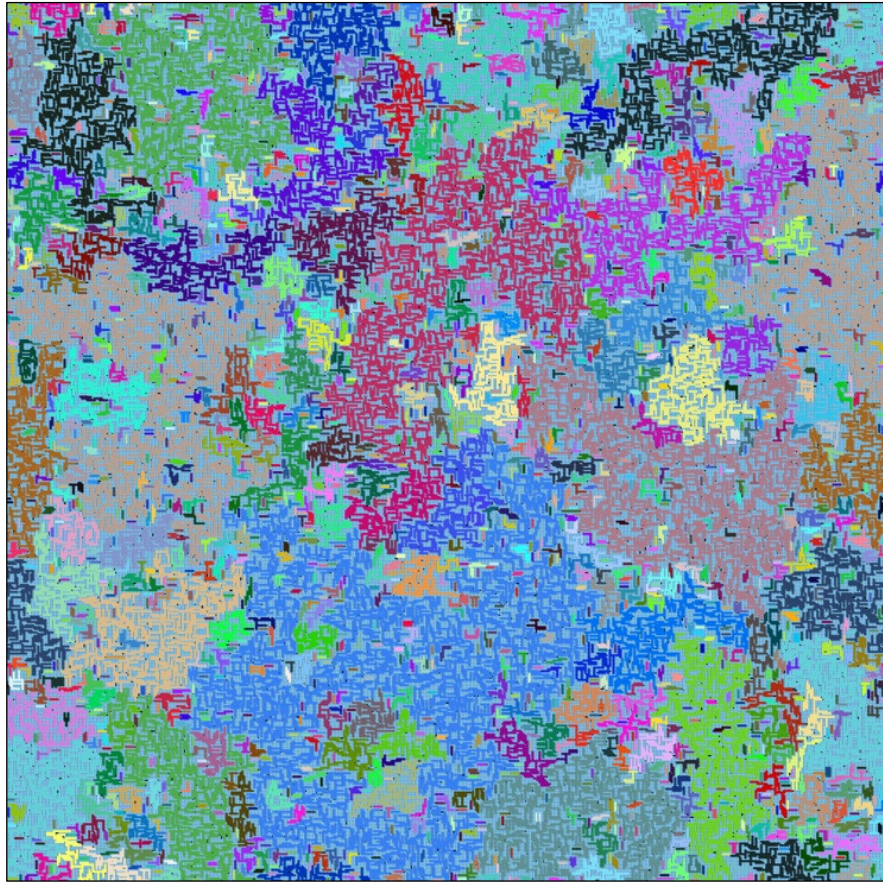


Рисунок 2.3. Идентификация кластеров на решетке размера $L = 500$, $k = 5$, $p = 47\%$

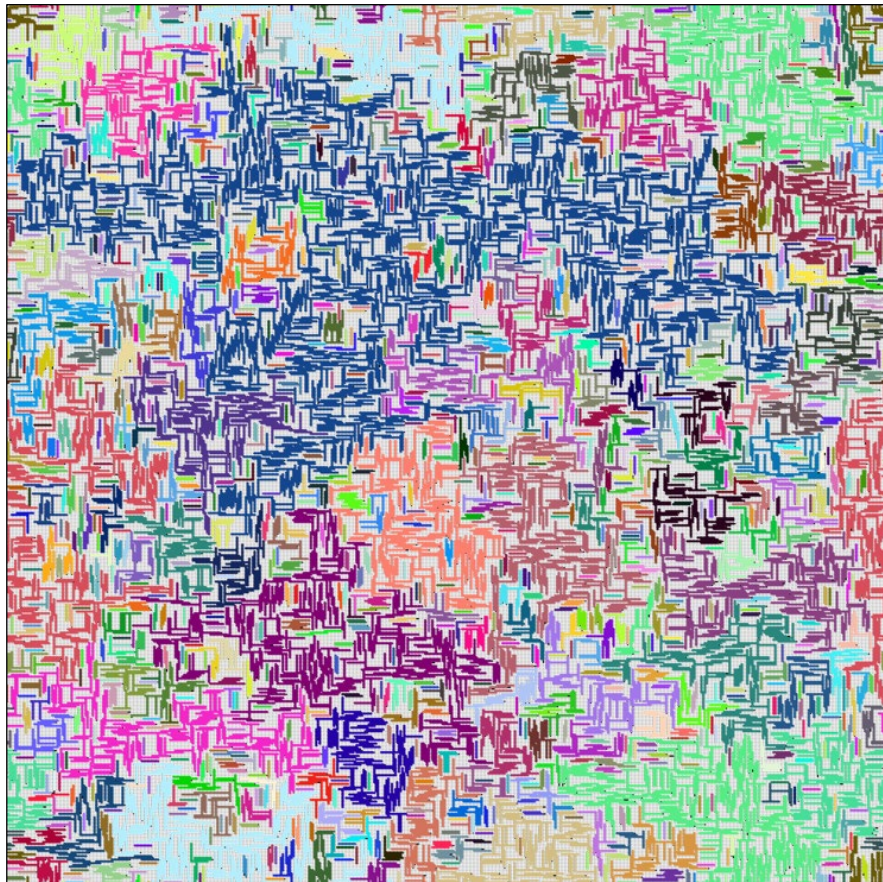


Рисунок 2.4. Идентификация кластеров на решетке размера $L = 500$, $k = 10$, $p = 43\%$

2.4.3. Алгоритм поиска перколяционного кластера

На этапе идентификации кластеров дополнительно для каждого кластера производятся две проверки, а именно:

1. Есть ли у кластера узлы в 1-ом и L -ом слое решетки в любом из направлений?
2. Размер кластера (число узлов в кластере) больше или равен длине решетки L ?

Если для некоторого кластера выполняются условия выше, то он заносится в список кластеров, которые могут являться перколяционными – *verif_cluster*. Имея этот список, достаточно найти в нем хотя бы один перколяционный кластер.

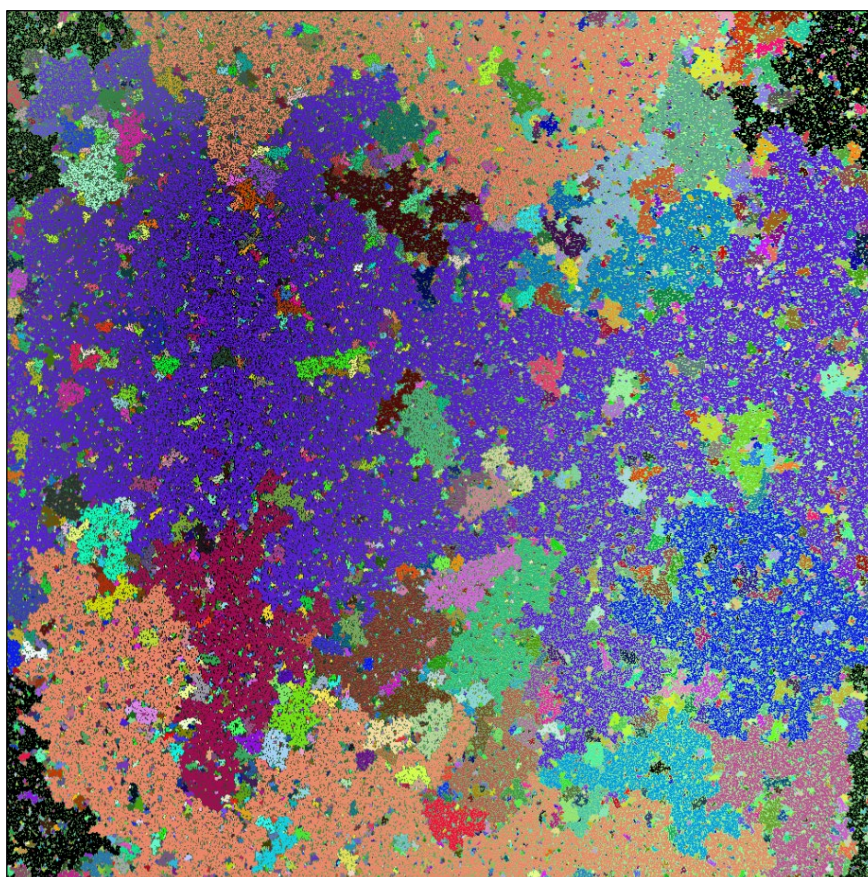


Рисунок 2.5. Пример перколяционного кластера (кластер фиолетового цвета)

Поиск перколяционного кластера в списке *verif_cluster* производится следующим образом:

1. Если список *verif_cluster* не является пустым, то для каждого его элемента переходим к пункту [2], иначе перколяционного кластера нет.

2. Происходит проверка, содержатся ли узлы проверяемого кластера в каждом слое решетки.

а) если узлы кластера содержатся в каждом слое решетки, то данный кластер является перколяционным, иначе не является.

Примеры перколяционных кластеров на квадратной решетке можно рассмотреть на рисунках 2.5-2.6.

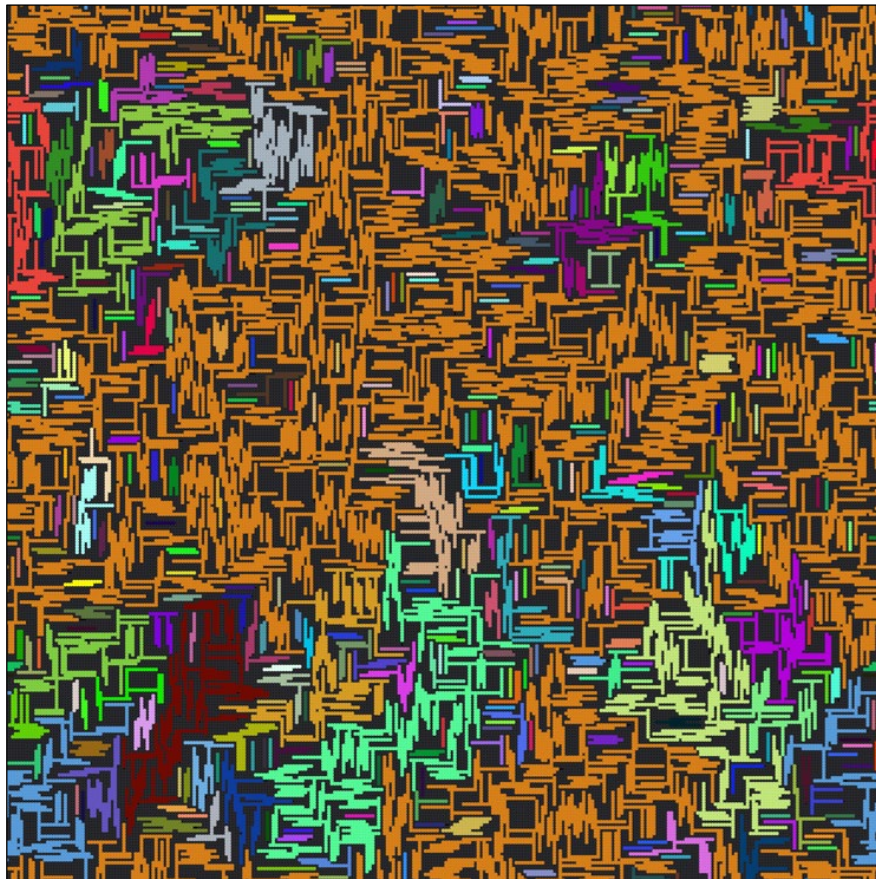


Рисунок 2.6. Пример перколяционного кластера (кластер оранжевого цвета)

2.4.4. Алгоритм упаковки k -меров для задачи джемминга

Алгоритм максимальной упаковки для задачи джемминга отличается от обычного алгоритма диспергирования k -меров лишь процессом осаждения k -меров на решетку, у которого нет четкого условия останова.

При моделировании закономерно встает вопрос: когда остановить выполнение алгоритма заполнения решетки k -мерами и понять, что решетка уже максимально заполнена? Было решено реализовать вариант, когда каждому текущему k -меру, который алгоритм пытается упаковать, выделяется конечное

число попыток упаковки, зависящее некоторым образом от размера решетки – $q = f(L)$. Если в процессе упаковки у определенного k -мера текущее количество попыток на его упаковку превышает некоторое выделенное число, то такой k -мер отвергается, и вызывается функция, в которой просматривается вся решетка по поиску свободного места для осуществления попыток упаковки k -меров с любым направлением.

2.5. Методика определения порога перколяции

Результатом работы программы являются текстовые файлы с данными по вероятности возникновения перколяционного кластера при каждом уровне концентрации k -меров на решетке для модели с заданными параметрами.

Данные вычислительного эксперимента аппроксимируются функцией вида (см. рисунок 2.7):

$$P(p) = b + \frac{a - b}{1 + \exp\left[\frac{p - p_c(L)}{c}\right]}, \quad (2.1)$$

где p – концентрация k -меров на решетке, $P(p)$ – вероятность возникновения перколяционного кластера, a , b , c – константы, p_c – порог перколяции.

При аппроксимации экспериментальных данных определяется порог перколяции для решетки конечного размера L . Далее для каждого значения длины k -мера вычисляются как минимум три значения порогов перколяции для различных решеток. Для определения значения порога перколяции для случая бесконечной системы используется скейлинговое соотношение:

$$|p_c(L) - p_c(\infty)| \propto L^{-1/\nu} \quad (2.2)$$

где ν – универсальный критический показатель и равен $4/3$ в случае рассмотрения двумерных и $7/8$ в случае трехмерных перколяционных задач [20].

Пример применения этого соотношения продемонстрирован в следующих разделах, на рисунках 3.1, 3.2, 4.1, 4.2.

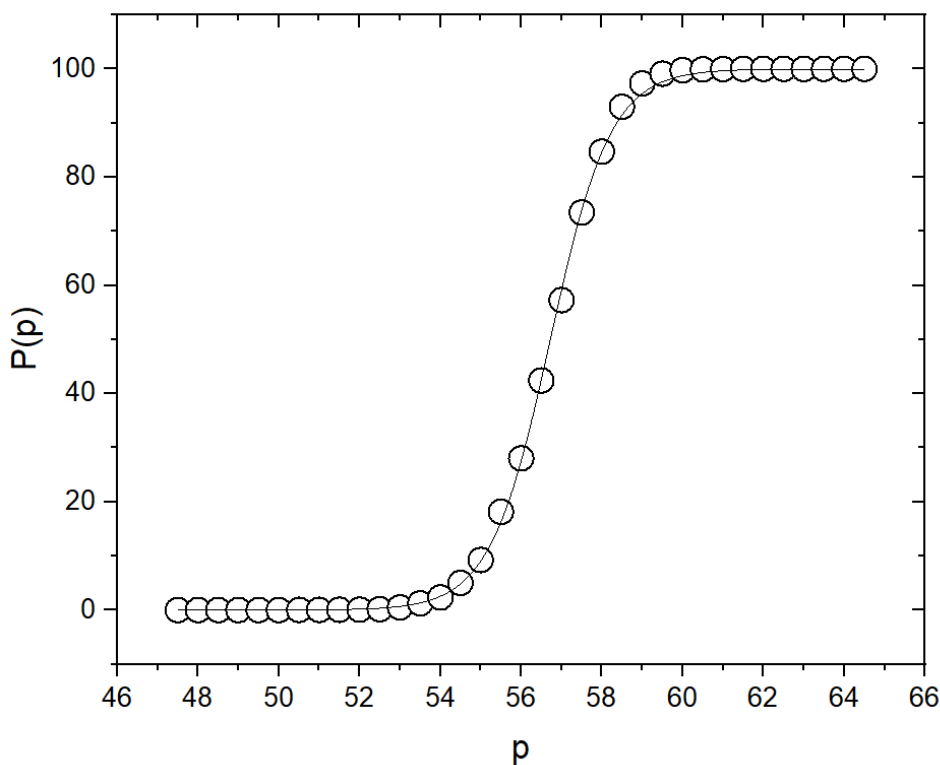


Рисунок 2.7. Вероятность возникновения перколяционного кластера на квадратной решетке при $k = 1, L = 100$,
 ○ – данные вычислительного эксперимента, — – аппроксимация функцией вида (2.1)

2.6. Методика определения порога джемминга

Значения порогов джемминга получаются немного иначе, чем значения порогов перколяции. На решетке размера L алгоритм упаковки заполняет k -мерами решетку до некоторой максимальной концентрации p_i . Производится N независимых испытаний. Значение порога джемминга вычисляется, как среднее полученных значений.

При проведении N испытаний определяется порог джемминга для решетки конечного размера L . Для определения значения порога джемминга по некоторым источникам [24, 27, 32] для случая бесконечной системы используется следующее скейлинговое соотношение:

$$|p_j(L) - p_j(\infty)| \propto L^{-1} \quad (2.3)$$

Для применения соотношения необходимо также вычислить как минимум три значения порога джемминга для различных решеток.

Глава 3. Моделирование перколяции и джемминга k -меров на квадратной решетке

3.1. Введение

В настоящей главе исследована модель перколяции линейных k -меров на квадратной решетке. Для этой модели были разработаны и реализованы эффективные алгоритмы: диспергирования k -меров на решетке, распределения k -меров по кластерам, поиска перколяционного кластера. В дополнение к основной модели были также предложены и исследованы следующие ее модификации: с варьированной длиной k -меров, с нелинейным типом k -меров, с разной длиной связи между k -мерами, с учетом упорядочивающего фактора. Были также изучены и некоторые модели, являющиеся комбинацией определенных модификаций.

Исследована модель джемминга k -меров разной формы на квадратной решетке. Рассмотрены случаи упаковки линейного и нелинейного типа k -меров.

3.2. Результаты моделирования

Ниже представлен подробнее способ получения порога перколяции для бесконечной системы при $k = 1$. Для остальных k критические значения приведены в таблицах.

Следуя разделу 2.5, вначале требуется получить значения порогов перколяции для различных конечных решеток. Эти значения представлены в таблице 3.1. Значения N были приняты таким образом, чтобы один эксперимент производился на вычислительной машине за удовлетворительное время. Далее используя скейлинговое соотношение (2.2) и аппроксимируя значения линейной функцией на ось P_c , вычисляется порог перколяции для бесконечной решетки – 59.27441 ± 0.00083 (см. рис. 3.1). Полученное значение совпадает до 5-го знака после запятой (если применить к значению нормировку от 0 до 1) с известным значением [33-34].

Таблица 3.1. Пороги перколяции при $k = 1$ для различных L

| L | P_c | $Error$ | N |
|------|---------|---------|---------|
| 10 | 47.4196 | 0.03388 | 1000000 |
| 15 | 49.8373 | 0.02951 | 1000000 |
| 20 | 51.3666 | 0.03234 | 1000000 |
| 25 | 52.4528 | 0.02523 | 1000000 |
| 40 | 54.3275 | 0.02161 | 1000000 |
| 50 | 55.0496 | 0.02027 | 100000 |
| 100 | 56.7212 | 0.01323 | 10000 |
| 200 | 57.7437 | 0.00827 | 10000 |
| 500 | 58.4986 | 0.00545 | 10000 |
| 700 | 58.6712 | 0.00318 | 5000 |
| 1000 | 58.8155 | 0.00226 | 5000 |
| 2000 | 59.0004 | 0.00180 | 5000 |
| 3000 | 59.0736 | 0.00241 | 1000 |
| 4000 | 59.1115 | 0.00106 | 1000 |
| 5000 | 59.1354 | 0.00074 | 1000 |
| 6000 | 59.1542 | 0.00107 | 1000 |
| 7000 | 59.1695 | 0.00084 | 1000 |

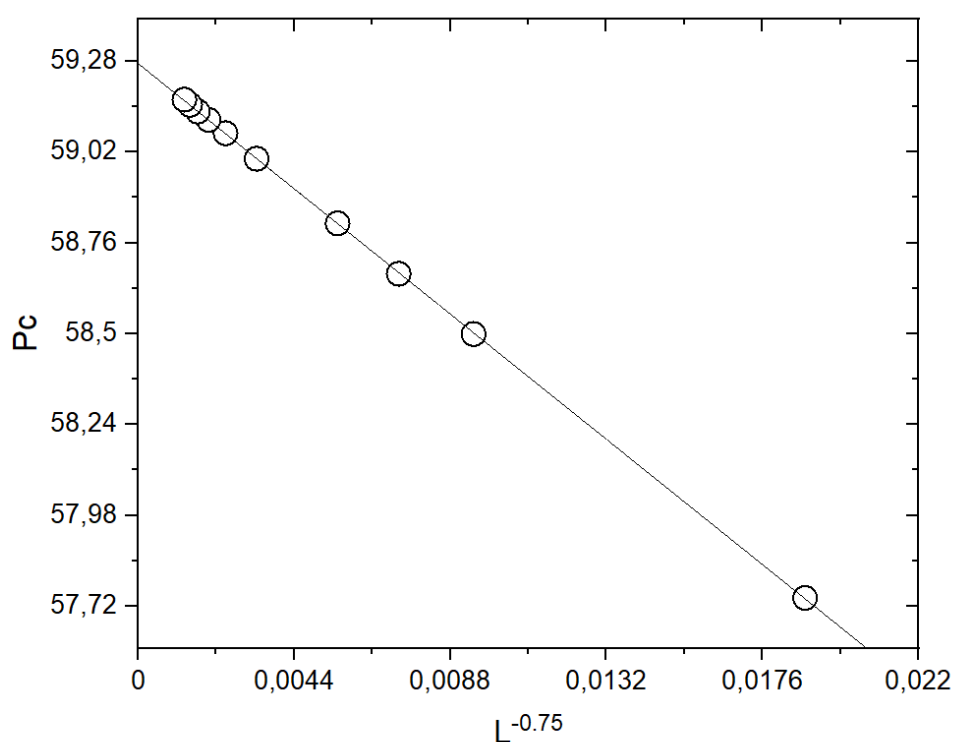


Рисунок 3.1. Получение значения порога перколяции при $k = 1$, $200 \leq L \leq 7000$

○ – данные вычислительного эксперимента, — – аппроксимация линейной функцией

По рисунку 3.1 также можно заметить, что скейлинг производится не по всем значениям, а лишь по тем, которые лежат в следующем диапазоне: $200 \leq L \leq 7000$. Это объясняется тем, что пороги перколяции, полученные на

небольших решетках, могут внести погрешность в итоговое значение. На практике также выявлено, что к подобному могут привести и значения, полученные с недостаточным отношением L / k в ходе эксперимента.

По аналогии были получены значения порогов перколяции для случая бесконечных систем при $2 \leq k \leq 10$. Для этого были вычислены пороги перколяции на решетках размера $L = 1000, 5000, 7500$ (см. таблицу 3.2), а на основе их и соответствующие итоговые значения для бесконечных систем – рисунок 3.2.

Таблица 3.2. Пороги перколяции при $k = 2...10$

| $k \setminus L$ | 1000 | 5000 | 7500 | ∞ |
|-----------------|---------|---------|---------|----------|
| 2 | 55.6846 | 56.0359 | 56.0788 | 56.1888 |
| 3 | 52.2147 | 52.6195 | 52.6683 | 52.7948 |
| 4 | 49.8609 | 50.3022 | 50.3566 | 50.4948 |
| 5 | 48.2904 | 48.7899 | 48.8448 | 49.0023 |
| 6 | 47.2651 | 47.7970 | 47.8541 | 48.0209 |
| 7 | 46.5551 | 47.1439 | 47.2080 | 47.3938 |
| 8 | 46.0857 | 46.7096 | 46.7801 | 46.9765 |
| 9 | 45.7512 | 46.4233 | 46.4935 | 46.7064 |
| 10 | 45.5214 | 46.2278 | 46.3069 | 46.5293 |

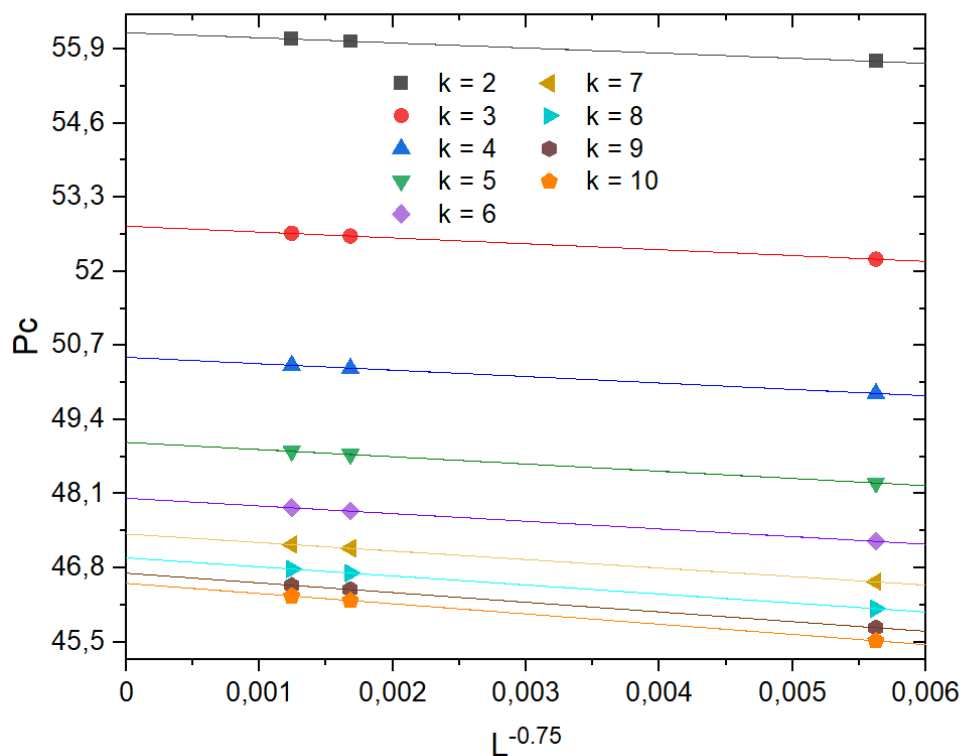


Рисунок 3.2. Получение значений порогов перколяции при $k = 2...10$ для бесконечных систем на основе значений из таблицы 3.2

Эти значения совпадают или близки со значениями, полученными другими исследователями (см. табл. 1.1 в главе 1), что в очередной раз доказывает адекватность построенной модели. По ним можно было бы предположить, что порог перколяции будет монотонно уменьшаться и дальше при увеличении k . Однако результаты при $10 < k \leq 100$ показали обратное – уменьшение порога перколяции происходит до определенного значения k , а далее происходит его возрастание (см. таблицы 3.3-3.4, рисунок 3.3). Минимум достигается при $k = 14$.

Таблица 3.3. Пороги перколяции при $k = 11...16$

| $k \setminus L$ | 5000 | 6000 | 7500 | ∞ |
|-----------------|----------|----------|----------|----------|
| 11 | 46.10647 | 46.15365 | 46.19186 | 46.43458 |
| 12 | 46.04073 | 46.08280 | 46.12463 | 46.36287 |
| 13 | 46.00256 | 46.04393 | 46.08937 | 46.33312 |
| 14 | 45.99532 | 46.03472 | 46.07955 | 46.31670 |
| 15 | 45.99095 | 46.03716 | 46.09132 | 46.37385 |
| 16 | 46.02201 | 46.06774 | 46.11888 | 46.39146 |

Таблица 3.4. Пороги перколяции при $25 \leq k \leq 100$

| $k \setminus L$ | 7500 | 8000 | 9000 | 9500 | 10000 | ∞ |
|-----------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| 25 | — | 46.61724 | 46.64918 | — | 46.67264 | 46.97573 |
| 50 | — | — | 48.08718 | 48.11413 | 48.13684 | 48.74433 |
| 75 | 48.97922 | — | 49.07623 | — | 49.11504 | 49.68139 |
| 100 | 49.64327 | — | 49.77364 | — | 49.84065 | 50.66055 |

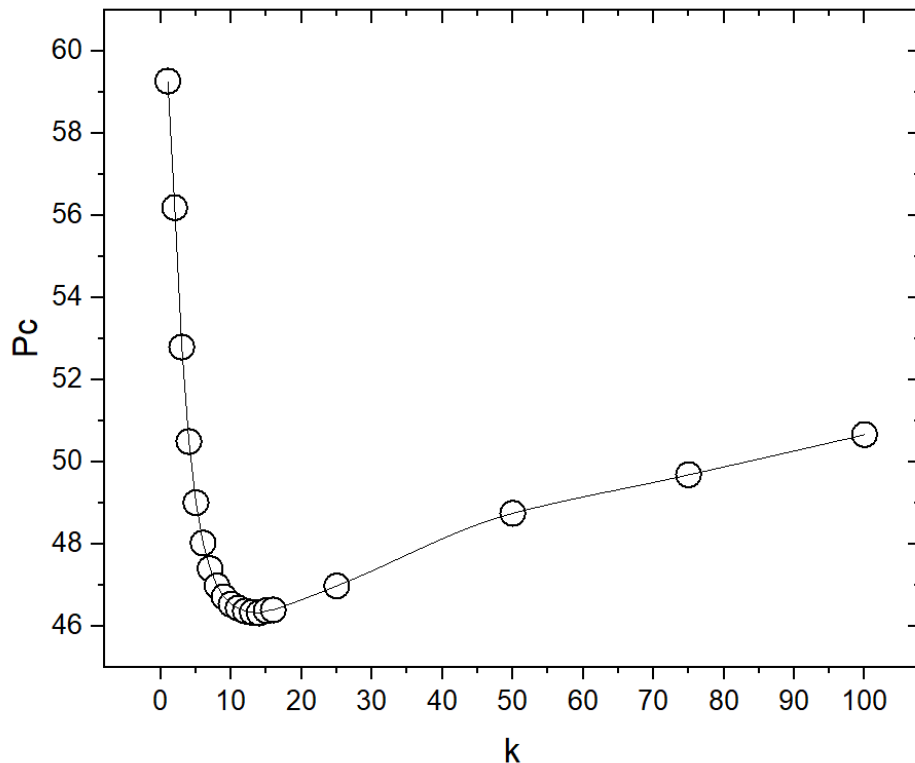


Рисунок 3.3. Интерполяция значений порогов перколяции при $1 \leq k \leq 100$

Немонотонное поведение порога перколяции при увеличении k можно объяснить тем, что чем длиннее k -мер, тем у него в большей степени выражена способность к агломерации. Это заметно на рисунке 3.4, на котором k -меры скучиваются в различные образования. Вследствие этой особенности было принято решение о модификации исходной модели. Это необходимо для того, чтобы понизить порог перколяции, тем самым приблизиться к реальному эксперименту. Модифицированные модели будут рассмотрены далее.

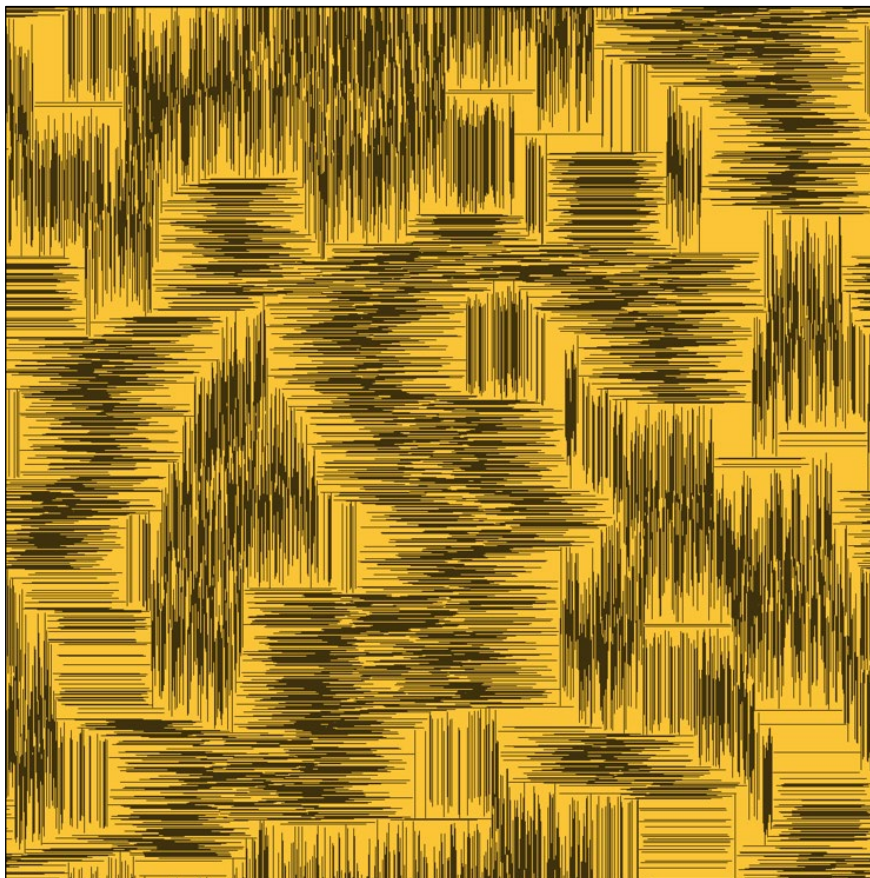


Рисунок 3.4. Агломерация 100-меров на решетке размера $L = 1000$, $p \approx 45\%$

3.3. Модификации исходной модели

Для попытки уменьшения значения порога перколяции при $k = 100$ и приближения модели к натурному эксперименту, были предложены следующие модификации исходной модели:

- ведение вариации длины k -мера (углеродные нанотрубки по своей длине не являются одинаковыми, поэтому длины k -меров в модели будут иметь нормальное распределение);

- рассмотрение нелинейных k -меров (углеродные нанотрубки не являются абсолютно все прямыми, некоторые могут иметь изгибы);
- введение длины связи между k -мерами – изменение условия принадлежности k -меров одному кластеру (моделирование наличия межфазной области между полимером и наполнителем);
- рассмотрение упорядочивающего фактора – разворачивание k -меров вдоль определенного направления после стадии диспергирования на решетке (приближение к натурному эксперименту [10]).

Дополнительно для выявления различных особенностей было решено рассмотреть некоторые комбинации выше предложенных модификаций, а именно: модель с нелинейными k -мерами и учетом длины связи между ними, модель с учетом упорядочивающего фактора и длины связи между k -мерами.

3.3.1. Перколяционная задача k -меров разной длины

В рамках предложенной модификации k -меры имеют не постоянную длину, а варьированную. Длина k -мера подчиняется нормальному закону распределения с заданным математическим ожиданием и среднеквадратическим отклонением. Пример структуры с k -мерами варьированной длины представлен на рисунке 3.5.

Моделирование проводилось со следующими параметрами: $L = 5000, 7500, 10000$; $\bar{k} = 100$; $\sigma = 5, 10, 15, 20$; $N = 1000$. Соответствующие результаты представлены в таблице 3.5. В таблицу также внесен результат для сравнения, полученный в разделе 3.2 (см. табл. 3.4 при $k = 100$). Он равнозначен экспериментам в текущей задаче при условии $\sigma = 0$ (постоянная длина k -меров).

Таблица 3.5. Пороги перколяции при $\bar{k} = 100$ и различных σ

| $\sigma \setminus L$ | 5000 | 7500 | 10000 | ∞ |
|----------------------|----------|----------|----------|----------|
| 0 | 49.28737 | 49.64327 | 49.84065 | 50.66055 |
| 5 | 49.15010 | 49.47962 | 49.66200 | 50.41230 |
| 10 | 48.77472 | 49.12310 | 49.32663 | 50.13131 |
| 15 | 48.32490 | 48.66995 | 48.87416 | 49.68046 |
| 20 | 47.79959 | 48.12576 | 48.31078 | 49.06018 |

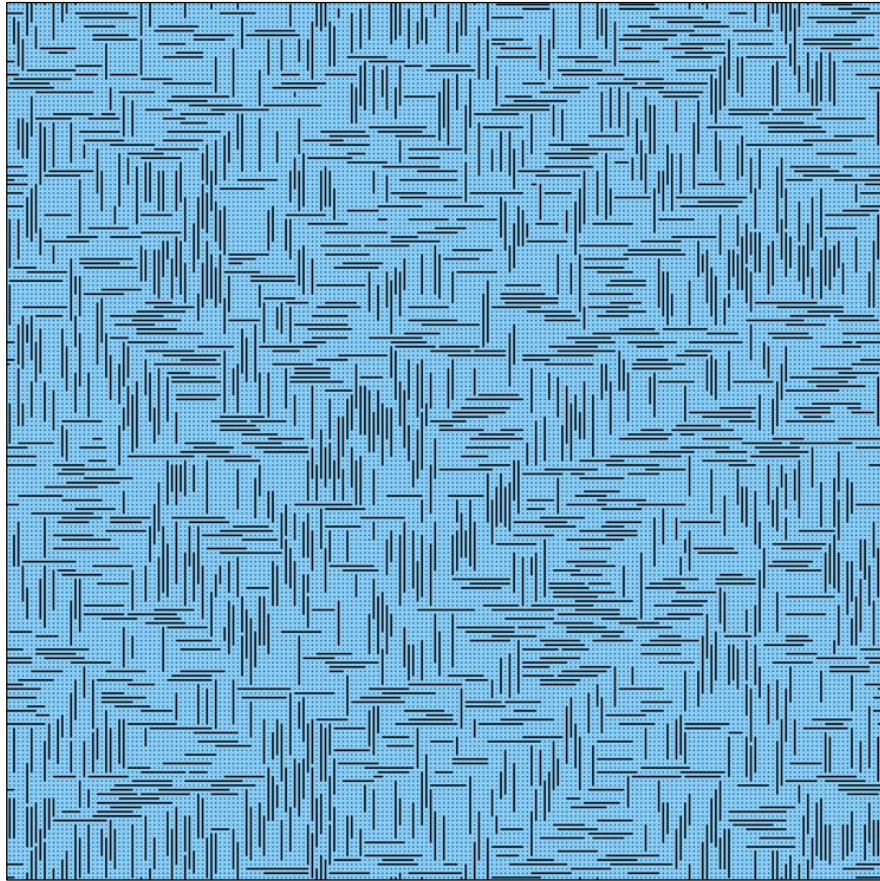


Рисунок 3.5. Распределение k -меров на решетке размера $L = 200$, $\bar{k} = 10$, $\sigma = 3$, $p \approx 40\%$

По таблице 3.5 можно заметить, что чем больше среднее квадратическое отклонение длины 100-мера, тем порог перколяции для случая бесконечной системы получается меньше.

3.3.2. Перколяционная задача нелинейных k -меров

В этой модификации помимо линейных k -меров рассматриваются нелинейные. Предложены два простейших типа нелинейных k -меров – рисунок 3.6. В исходной модели появляется параметр pn , обозначающий долю нелинейных k -меров в структуре.

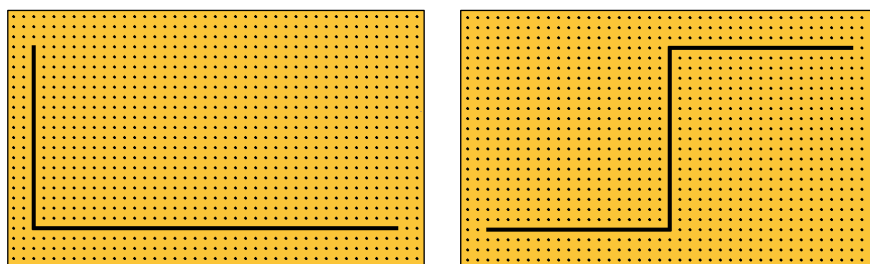


Рисунок 3.6. Два предложенных типа нелинейных k -меров, $k = 55$

Пример структуры, содержащей нелинейные k -меры, представлен ниже, на рисунке 3.7.

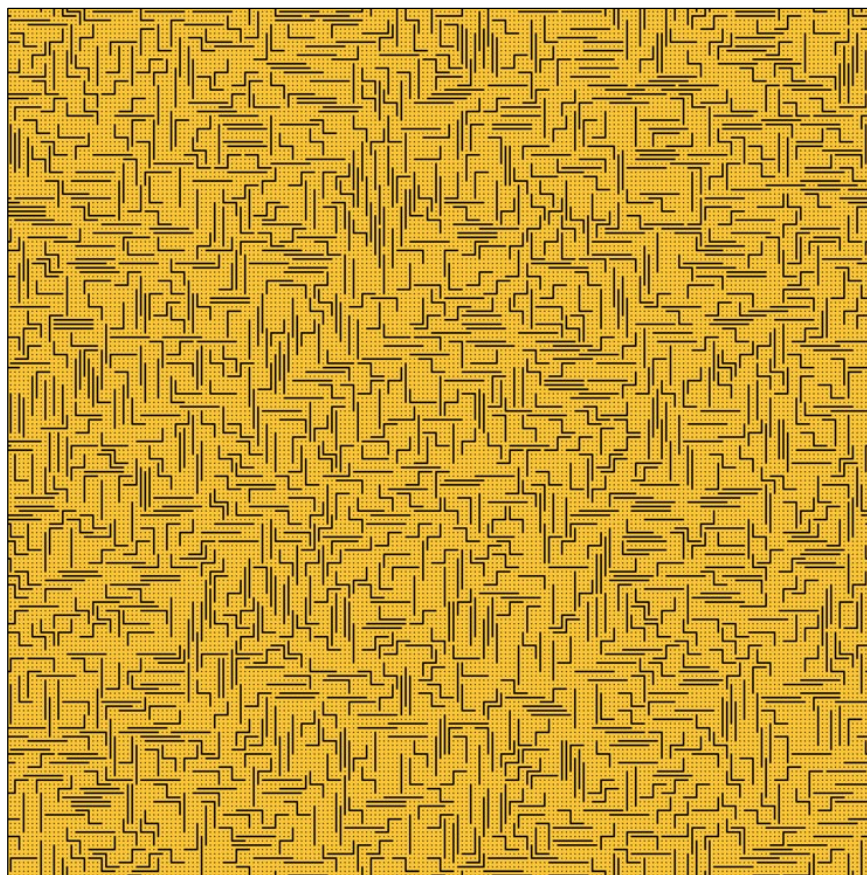


Рисунок 3.7. Распределение 10-меров на решетке размера $L = 200$, $pn = 50\%$, $p \approx 40\%$

Таблица 3.6. Пороги перколяции при $k = 100$ и различных pn

| $pn \setminus L$ | 5000 |
|------------------|----------|
| 0 | 49.28737 |
| 25 | 36.24436 |
| 50 | 29.78825 |
| 75 | 25.71557 |

Моделирование проводилось со следующими параметрами: $L = 5000$; $k = 100$; $pn = 0, 25, 50, 75\%$; $N = 1000$. Результаты приведены в таблице 3.6. По результатам наблюдения уменьшается порог перколяции при увеличении доли нелинейных k -меров.

Стоит отметить, что моделирование именно этой модификации занимает наибольшее время по отношению с остальными ввиду того, что на этапе диспергирования нелинейные k -меры склонны по своей структуре к более частому пересечению уже с ранее упакованными. По этой причине получены

результаты лишь для решетки размера $L = 5000$. Однако по значениям для конечных решеток можно прогнозировать и поведение порога перколяции в скейлинге.

3.3.3. Перколяционная задача с учетом связи между k -мерами

Примеры структур, в которых на этапе идентификации кластеров учитывается связь между k -мерами, представлены на рисунках 3.8-3.9



Рисунок 3.8. Пример разбиения k -меров на кластеры с учетом длины связи, $L = 1000$, $k = 100$, $sw = 10$, $p = 3\%$

Длина связи (sw) обозначает расстояние в узлах от k -мера, которое по внешнему виду иллюстрирует некую «оболочку» k -мера. Во всех ранних экспериментах без этого параметра связанными узлами (или k -мерами) считались те, между которыми не было зазора из свободных узлов. Соответственно по этой причине в один кластер входили только те k -меры, которые соприкасались между собой. Введение параметра sw позволяет

подобное скорректировать и засчитывать в один кластер все k -меры, которые соприкасаются между собой своими «оболочками».

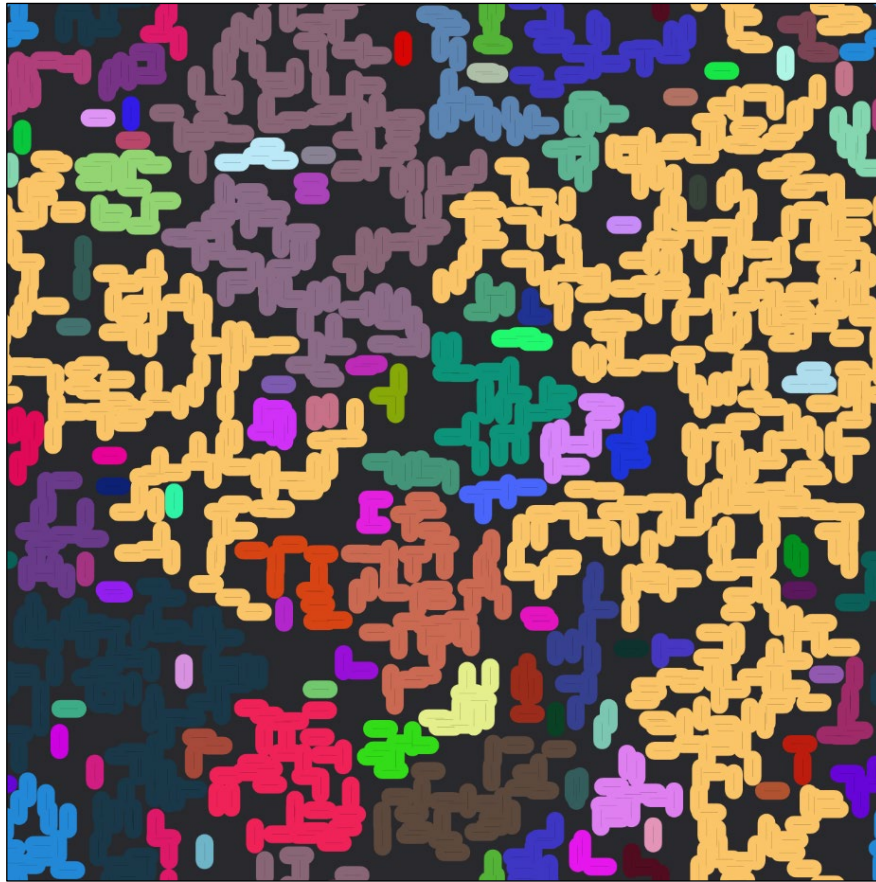


Рисунок 3.9. Пример разбиения k -меров на кластеры с учетом длины связи, $L = 5000$, $k = 100$, $sw = 50$, $p = 0.46\%$

Моделирование в рамках модификации проводилось со следующими параметрами: $L = 5000, 7500, 10000$; $k = 100$; $sw = 2, 5, 10, 25, 50, 100$; $N = 1000$. Результаты представлены в таблице 3.7. В таблицу по аналогии с предыдущими разделами внесен результат для сравнения при $sw = 0$ (см. раздел 3.2).

Таблица 3.7. Пороги перколяции при $k = 100$ и различных sw

| $sw \setminus L$ | 5000 | 7500 | 10000 | ∞ |
|------------------|---------|---------|---------|----------|
| 0 | 49.2873 | 49.6432 | 49.8406 | 50.6605 |
| 2 | 13.4112 | 13.5998 | 13.7003 | 14.1241 |
| 5 | 5.5688 | 5.6644 | 5.7154 | 5.9324 |
| 10 | 2.7456 | 2.7951 | 2.8202 | 2.9293 |
| 15 | 1.8215 | 1.8544 | 1.8748 | 1.9528 |
| 20 | 1.3571 | 1.3841 | 1.3999 | 1.4622 |
| 25 | 1.0679 | 1.0926 | 1.1066 | 1.1633 |
| 30 | 0.8731 | 0.8941 | 0.9059 | 0.9542 |
| 50 | 0.4674 | 0.4831 | 0.4904 | 0.5241 |
| 100 | 0.1706 | 0.1774 | 0.1823 | 0.1989 |

По результатам наблюдения значительное уменьшение порога перколяции при увеличении длины связи между k -мерами – рисунок 3.10. Значения порогов перколяции для случая бесконечных систем аппроксимируется функцией:

$$P_c(k) = b + \frac{a - b}{1 + \left(\frac{k}{c}\right)^d} \quad (3.1)$$

где $a = 0.06 \pm 0.06$, $b = 50.66 \pm 0.07$, $c = 0.87 \pm 0.01$, $d = 1.16 \pm 0.01$.

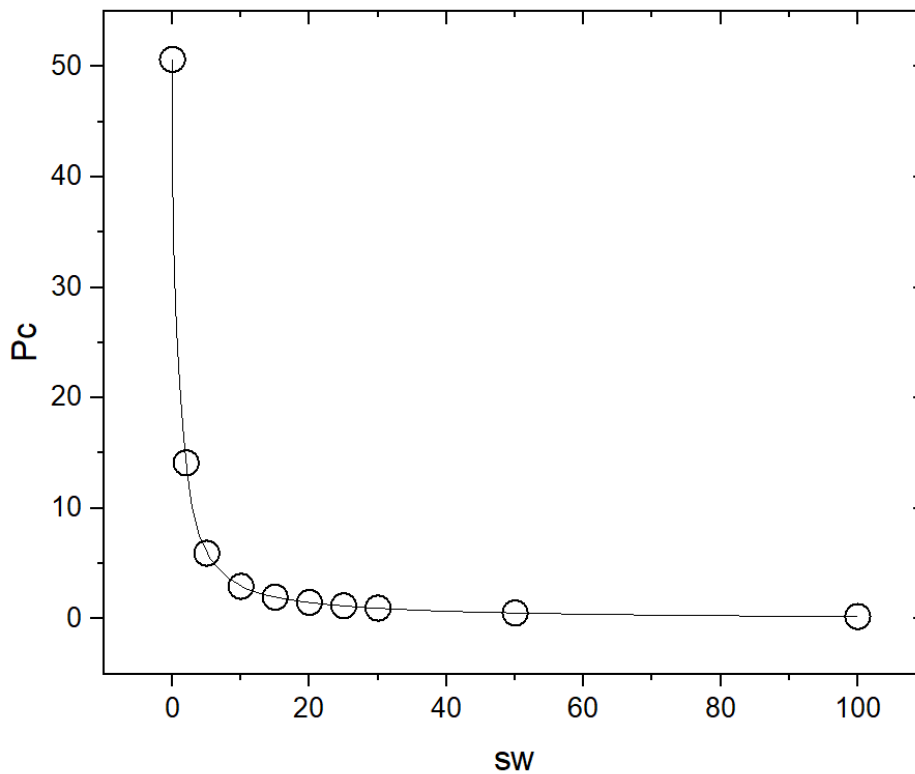


Рисунок 3.10. Аппроксимация значений P_c при $k = 100$ и различных sw функцией (3.1)

3.3.4. Перколяционная задача с учетом упорядочивающего фактора

Предложенная модификация подразумевает получение сначала типичного распределения k -меров на решетке (см. рис. 3.11), а затем упорядочивание k -меров вдоль любого направления – рисунок 3.12. k -меры в стадии упорядочивания разворачиваются относительно своей середины. Повернутый k -мер в любом случае принимается независимо от того, накладывается ли он на другой k -мер либо же нет.

Моделирование в рамках модификации проводилось со следующими параметрами: $L = 5000, 7500, 10000$; $k = 100$; $N = 1000$.

Результаты были внесены в таблицу 3.8, которая находится в следующем разделе (см. строку при $sw = 0$). Получен порог перколяции для бесконечной решетки, который равен 59.1292 ± 0.066 . Это значение гораздо больше того, которое было получено для неупорядоченного распределения (50.66055 ± 0.00162 , см. раздел 3.2). Однако для распределения с упорядочиванием характерно образование нескольких перколяционных кластеров, что будет также подробнее рассмотрено в следующем разделе.

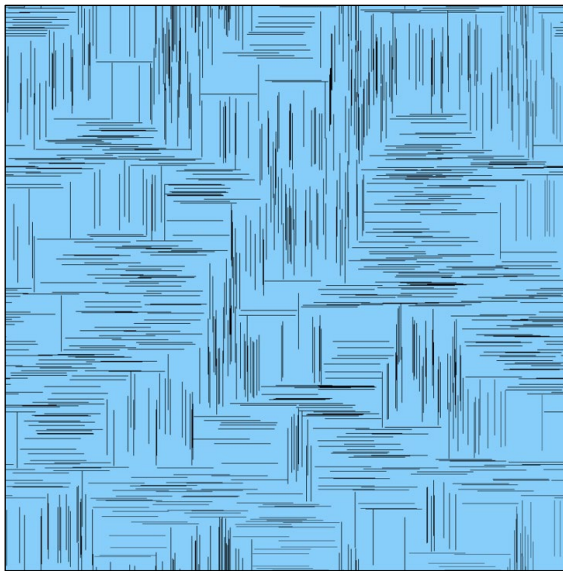


Рисунок 3.11. Равновероятное распределение k -меров на решетке

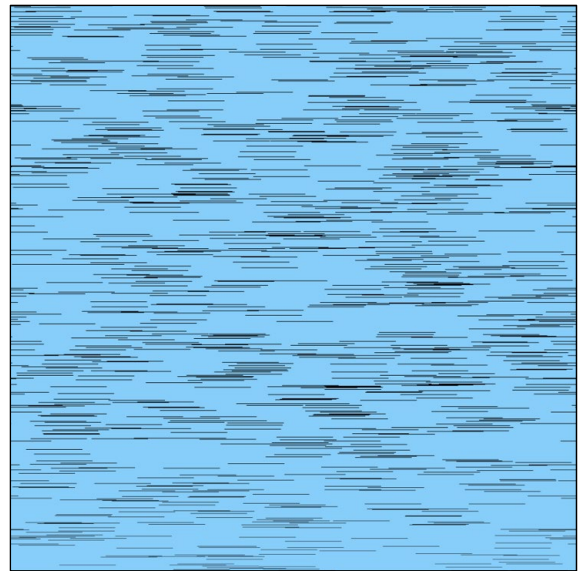


Рисунок 3.12. Упорядочивание k -меров вдоль горизонтального направления

3.3.5. Комбинации некоторых перколяционных задач

Дополнительно были рассмотрены две следующие задачи: перколяция нелинейных k -меров с учетом длины связи, перколяция упорядоченных k -меров с учетом длины связи.

Пример перколяционной структуры нелинейных k -меров с учетом связи между ними представлен на рисунке 3.13. Моделирование для этой задачи проводилось со следующими параметрами: $L = 5000, 7500, 10000$; $k = 100$; $sw = 2, 5, 10, 15, 20, 25, 30, 50, 100$; $pn = 25, 50, 75\%$; $N = 1000$. Результаты представлены в таблицах 3.8-3.10.



Рисунок 3.13. Пример разбиения k -меров на кластеры с учетом их нелинейности и длины связи, $L = 2000$, $k = 100$, $sw = 10$, $pn = 75\%$, $p = 2.4\%$

Таблица 3.8. Пороги перколяции при $k = 100$ и различных sw , $pn = 25\%$

| $sw \setminus L$ | 5000 | 7500 | 10000 | ∞ |
|------------------|---------|---------|---------|----------|
| 0 | 36.2443 | — | — | — |
| 2 | 9.9981 | 10.1256 | 10.1989 | 10.4942 |
| 5 | 4.6636 | 4.7330 | 4.7649 | 4.9154 |
| 10 | 2.5427 | 2.5805 | 2.6034 | 2.6911 |
| 15 | 1.7627 | 1.7923 | 1.8077 | 1.8742 |
| 20 | 1.3395 | 1.3641 | 1.3778 | 1.4340 |
| 25 | 1.0673 | 1.0894 | 1.1016 | 1.1518 |
| 30 | 0.8763 | 0.8972 | 0.9084 | 0.9555 |
| 50 | 0.4749 | 0.4896 | 0.4973 | 0.5304 |
| 100 | 0.1725 | 0.1808 | 0.1852 | 0.2040 |

Наблюдается общее поведение: при всех рассматриваемых долях нелинейных k -меров при увеличении длины связи порог перколяции прогнозируемо уменьшается. Однако при различных долях нелинейных k -меров и одном и том же значении длины связи порог перколяции ведет себя по-разному. Минимальное значение порога перколяции при $sw = 2$ достигается при максимальной концентрации нелинейных k -меров. Далее при увеличении длины

связи наблюдается смещение минимума в сторону уменьшения доли нелинейных k -меров. Сводка результатов для бесконечных систем при различных sw и pn представлена в таблице 3.11. В эту же таблицу для сравнения добавлены значения, полученные в разделе 3.3.3 (см. табл. 3.7 при $pn = 0\%$).

Таблица 3.9. Пороги перколяции при $k = 100$ и различных sw , $pn = 50\%$

| $sw \setminus L$ | 5000 | 7500 | 10000 | ∞ |
|------------------|---------|--------|--------|----------|
| 0 | 29.7882 | — | — | — |
| 2 | 8.4869 | 8.5800 | 8.6336 | 8.8493 |
| 5 | 4.2435 | 4.2912 | 4.3208 | 4.4288 |
| 10 | 2.4511 | 2.4855 | 2.5041 | 2.5817 |
| 15 | 1.7405 | 1.7688 | 1.7845 | 1.8490 |
| 20 | 1.3375 | 1.3648 | 1.3771 | 1.4357 |
| 25 | 1.0738 | 1.0975 | 1.1099 | 1.1629 |
| 30 | 0.8884 | 0.9087 | 0.9177 | 0.9599 |
| 50 | 0.4847 | 0.4979 | 0.5061 | 0.5372 |
| 100 | 0.1753 | 0.1830 | 0.1883 | 0.2067 |

Таблица 3.10. Пороги перколяции при $k = 100$ и различных sw , $pn = 75\%$

| $sw \setminus L$ | 5000 | 7500 | 10000 | ∞ |
|------------------|---------|--------|--------|----------|
| 0 | 25.7155 | — | — | — |
| 2 | 7.6389 | 7.7161 | 7.7645 | 7.9472 |
| 5 | 4.0439 | 4.0837 | 4.1136 | 4.2158 |
| 10 | 2.4313 | 2.4623 | 2.4791 | 2.5492 |
| 15 | 1.7521 | 1.7790 | 1.7949 | 1.8577 |
| 20 | 1.3539 | 1.3809 | 1.3962 | 1.4585 |
| 25 | 1.0957 | 1.1168 | 1.1296 | 1.1793 |
| 30 | 0.9058 | 0.9258 | 0.9370 | 0.9827 |
| 50 | 0.4951 | 0.5089 | 0.5175 | 0.5503 |
| 100 | 0.1785 | 0.1870 | 0.1911 | 0.2094 |

Таблица 3.11. Пороги перколяции для бесконечных систем при $k = 100$ и различных sw , pn

| $sw \setminus pn, \%$ | 0 | 25 | 50 | 75 |
|-----------------------|---------|---------|--------|--------|
| 0 | 50.6605 | — | — | — |
| 2 | 14.1241 | 10.4942 | 8.8493 | 7.9472 |
| 5 | 5.9324 | 4.9154 | 4.4288 | 4.2158 |
| 10 | 2.9293 | 2.6911 | 2.5817 | 2.5492 |
| 15 | 1.9528 | 1.8742 | 1.8490 | 1.8577 |
| 20 | 1.4622 | 1.4340 | 1.4357 | 1.4585 |
| 25 | 1.1633 | 1.1518 | 1.1629 | 1.1793 |
| 30 | 0.9542 | 0.9555 | 0.9599 | 0.9827 |
| 50 | 0.5241 | 0.5304 | 0.5372 | 0.5503 |
| 100 | 0.1989 | 0.2040 | 0.2067 | 0.2094 |

При длине связи $sw \approx 30$ и ее дальнейшем увеличении минимальное значение порога перколяции достигается при $pn = 0\%$. Это означает, что при определенной длине связи перколяция раньше всего наступает в тех структурах, в которых k -меры все абсолютно прямые.

В рамках второй комбинации пример перколяционной структуры представлен на рисунке 3.14.

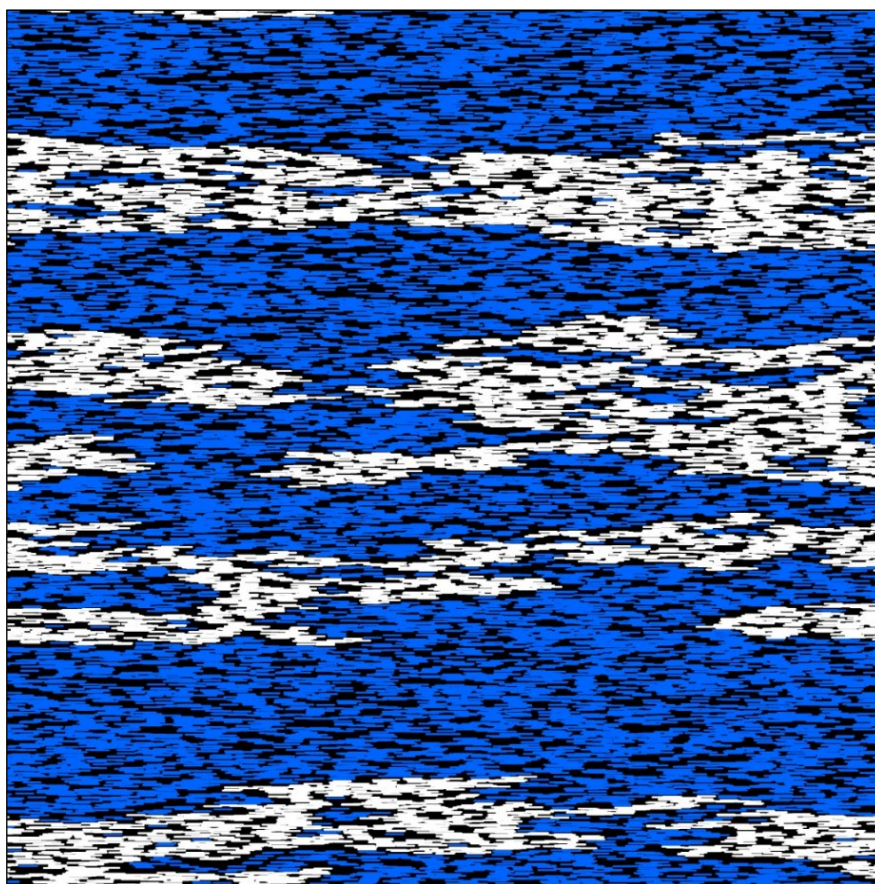


Рисунок 3.14. Пример разбиения k -меров на кластеры с учетом упорядочивающего фактора и длины связи, образование 4-х перколяционных кластеров (выделены белым цветом, все остальные кластеры – синим), $L = 5000$, $k = 100$, $sw = 5$, $p = 8.95\%$

Моделирование проводилось со следующими параметрами: $L = 5000, 7500, 10000, 20000$; $k = 100$; $sw = 0, 1, 2, 5, 10, 15, 20, 25, 40, 50, 75, 100$; $N = 1000$. Результаты представлены в таблице 3.12.

Значения порогов перколяции для бесконечных решеток из таблицы 3.12 превышают значения, полученные для неупорядоченного осаждения k -меров при аналогичных параметрах модели (см. раннее табл. 3.7). Однако, как уже было отмечено в разделе 3.3.4, особенностью структур, полученных с

упорядочиванием k -меров, является образование нескольких перколяционных кластеров.

Таблица 3.12. Пороги перколяции с учетом упорядочивающего фактора при $k = 100$ и различных sw, L

| $sw \setminus L$ | 5000 | 7500 | 10000 | 20000 | ∞ |
|------------------|---------|---------|---------|---------|----------|
| 0 | 53.2997 | 54.9015 | 55.7022 | 57.0582 | 59.1292 |
| 1 | 28.0465 | 29.8046 | 30.8178 | 32.6631 | 35.1327 |
| 2 | 17.9814 | 19.1449 | 19.8332 | 21.0589 | 22.6781 |
| 5 | 7.8501 | 8.3070 | 8.5636 | 9.0403 | 9.6856 |
| 10 | 3.6795 | 3.8605 | 3.9600 | 4.1401 | 4.3915 |
| 15 | 2.2766 | 2.3738 | 2.4313 | 2.5309 | 2.6696 |
| 20 | 1.6136 | 1.6771 | 1.7150 | 1.7810 | 1.8736 |
| 25 | 1.2243 | 1.2744 | 1.3007 | 1.3515 | 1.4210 |
| 40 | 0.6578 | 0.6834 | 0.6991 | 0.7251 | 0.7618 |
| 50 | 0.4871 | 0.5059 | 0.5178 | 0.5375 | 0.5651 |
| 75 | 0.2707 | 0.2818 | 0.2893 | 0.3023 | 0.3195 |
| 100 | 0.1717 | 0.1805 | 0.1852 | 0.1942 | 0.2052 |

При моделировании кроме поиска перколяционных кластеров в структурах дополнительно производился и подсчет их количества. В экспериментах было принято считать среднее количество перколяционных кластеров, полученных в N испытаниях при определенной концентрации p , в виде отношения зафиксированного общего количества перколяционных кластеров в структурах (в таких, в которых присутствуют перколяционные кластеры) на количество таких структур.

На рисунке 3.15 показана зависимость полученного среднего количества перколяционных кластеров от концентрации 100-меров на решетках размера $L = 5000, 7500, 10000, 20000$. Подобная зависимость означает следующее: вначале в структурах образуется по одному перколяционному кластеру (или полосе), а по мере увеличения концентрации k -меров растет и количество полос, достигая некоторый максимум, а далее ввиду слияния небольших кластеров в более крупные перколяционные полосы также сливаются, их количество убывает, и при определенной концентрации в системах наблюдается образование снова лишь единственных перколяционных полос, но которые зачастую пронизывают и стороны решетки, противоположные направлению упорядочивания.

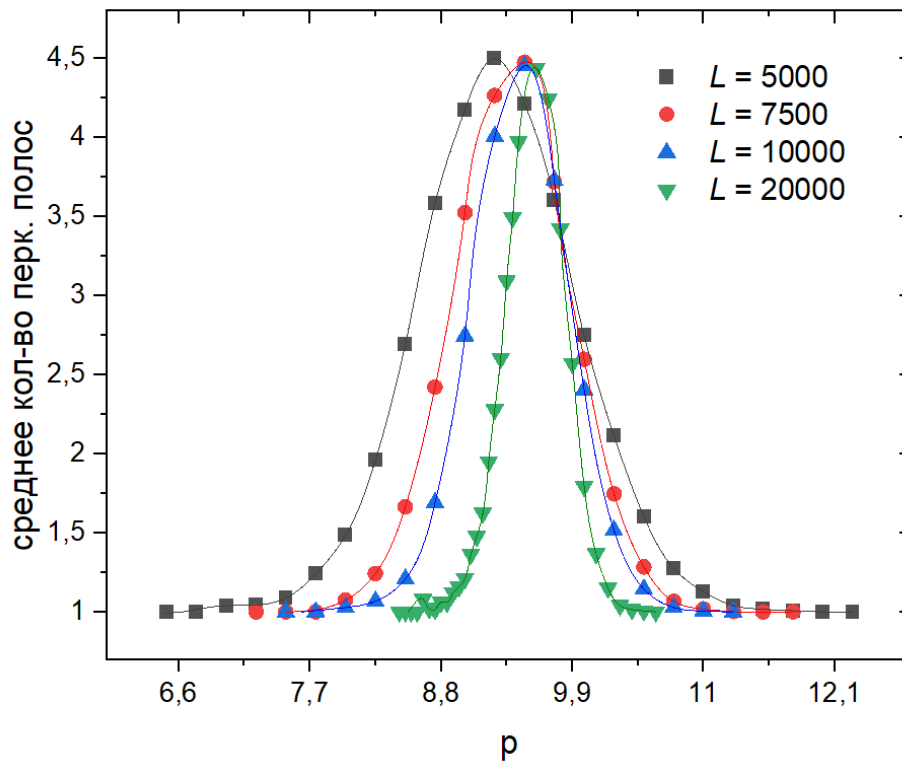


Рисунок 3.15. Зависимость количества образующихся перк. кластеров от концентрации на различных решетках, $k = 100$, $sw = 5$

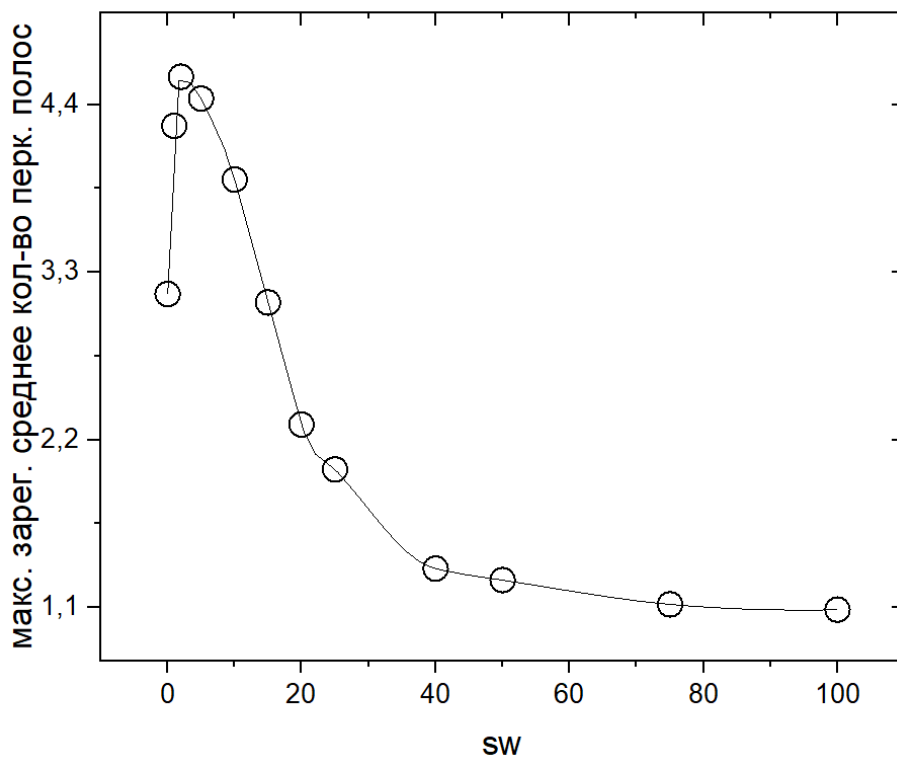


Рисунок 3.16. Зависимость количества образующихся перк. кластеров от длины связи, $L = 20000$, $k = 100$

Было исследовано и влияние длины связи на количество образующихся перколяционных кластеров. Во экспериментах на решетке размера $L = 20000$ были взяты значения максимально зарегистрированного среднего количества

перколяционных кластеров и сопоставлены на рисунке 3.16. Максимум достигается при $2 \leq sw < 5$.

Дополнительно было проанализировано влияние длины k -меров на количество образующихся перколяционных кластеров в системе. Результаты представлены на рисунке 3.17. Если сопоставить этот рисунок с предыдущим, можно отметить следующее общее поведение: количество перколяционных кластеров напрямую зависит от аспектного отношения k -мера вместе с его «оболочкой» (длиной связи sw). Чем больше отношение, тем вероятность образования нескольких перколяционных кластеров выше.

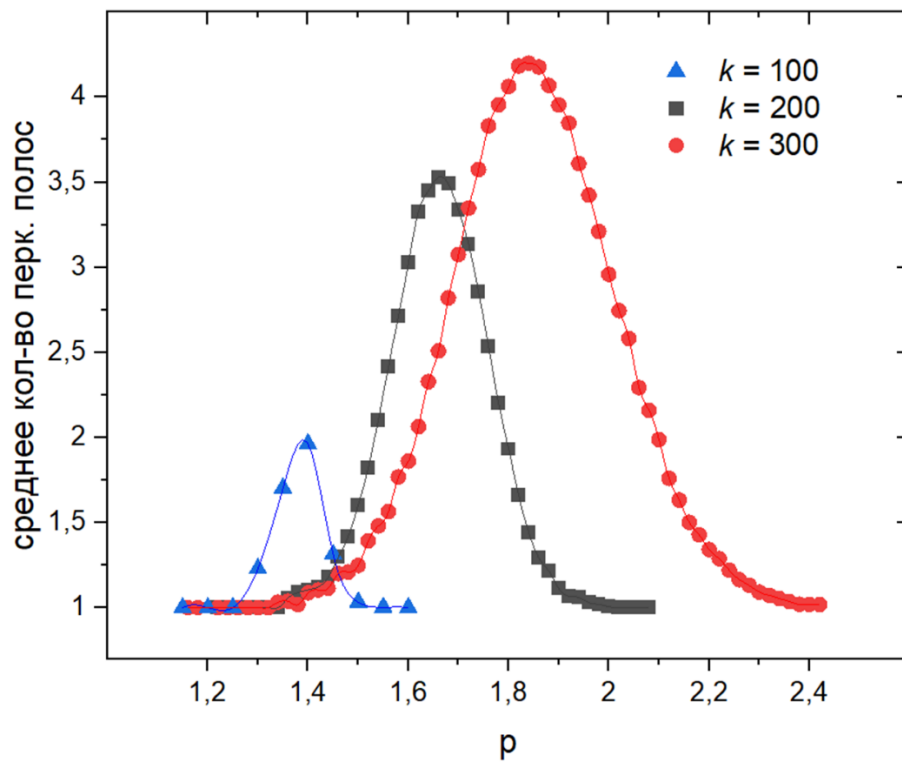


Рисунок 3.17. Зависимость количества образующихся перк. кластеров от длины k -мера, $L = 10000, sw = 25$

3.4. Джемминг k -меров на квадратной решетке

Примеры максимального заполнения квадратной решетки k -мерами представлены на рисунках 3.18-3.19.

В ходе моделирования экспериментальным путем была выбрана оптимальная сложность упаковки k -меров с точки зрения точности получаемых значений и времени выполнения работы программы – $q(L) = L \times L$. Этот выбор

был сделан на основе значений из таблицы 3.13. Взятое такое количество попыток на упаковку определенного k -мера, как $q(L) = L \times L \times \text{sqrt}(L)$ или $q(L) = L \times L \times L$, гарантирует вычисление более точного значения порога джемминга для заданного набора параметров модели, однако необходимо учитывать, что это может занять весьма большое количество времени, даже несмотря на выбранное небольшое количество проводимых испытаний (в особенности это заметно на больших решетках, когда на упаковку каждого k -мера выделяется слишком много попыток). Именно по этой причине в таблице 3.13 в некоторых местах присутствуют пропуски.

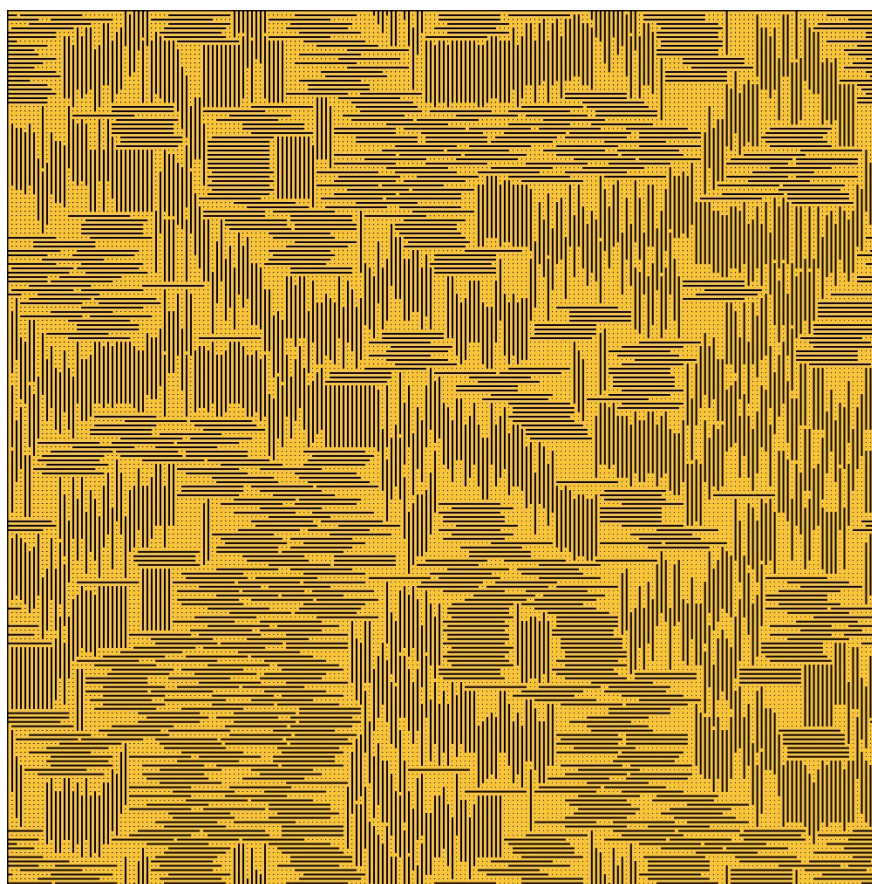


Рисунок 3.18. Максимальное заполнение решетки размера $L = 200$
при $k = 15, p \approx 71.4\%$

Исследуя таблицу 3.13, можно заметить еще одну особенность: на маленьких размерах L k -меры упаковываются более плотно при всех $q(L)$, но еще плотнее в сочетании со сложностями упаковки, как $q(L) = L$ или $q(L) = L \times \text{sqrt}(L)$. Но в независимости от $q(L)$ при росте L значения порогов джемминга выходят на некоторое постоянное значение.

Таблица 3.13. Пороги джемминга при $k = 2$ для различных $L, q(L)$

| N | $L \setminus q(L)$ | L | $L \times \text{sqrt}(L)$ | $L \times L$ | $L \times L \times \text{sqrt}(L)$ | $L \times L \times L$ |
|----------|--------------------|----------|---------------------------|--------------|------------------------------------|-----------------------|
| 99999999 | 10 | 92.39814 | 91.03461 | 90.77222 | 90.75304 | 90.75222 |
| 99999999 | 15 | 92.20098 | 90.88344 | 90.72436 | 90.71722 | 90.71701 |
| 99999999 | 20 | 92.01278 | 90.80797 | 90.70558 | 90.70322 | 90.70320 |
| 99999999 | 25 | 91.85513 | 90.76444 | 90.69792 | 90.69568 | 90.69580 |
| 99999999 | 40 | 91.52713 | 90.71151 | 90.68815 | 90.68799 | 90.68845 |
| 99999999 | 50 | 91.38470 | 90.69927 | 90.68601 | 90.68573 | 90.68563 |
| 99999999 | 75 | 91.16290 | 90.68747 | 90.68344 | 90.68417 | 90.68402 |
| 99999999 | 100 | 91.03529 | 90.68502 | 90.68321 | 90.68213 | 90.68298 |
| 99999999 | 200 | 90.83137 | 90.68292 | 90.68302 | 90.68243 | 90.68265 |
| 99999999 | 500 | 90.71820 | 90.68273 | 90.68257 | 90.68259 | 90.68214 |
| 99999999 | 1000 | 90.69214 | 90.68218 | 90.68213 | 90.68205 | — |
| 1000 | 2000 | 90.68519 | 90.68211 | 90.68210 | 90.68227 | — |
| 1000 | 5000 | 90.68215 | 90.68211 | 90.68222 | 90.68205 | — |
| 1000 | 7500 | 90.68223 | 90.68224 | 90.68214 | — | — |
| 1000 | 10000 | 90.68214 | 90.68221 | 90.68216 | — | — |

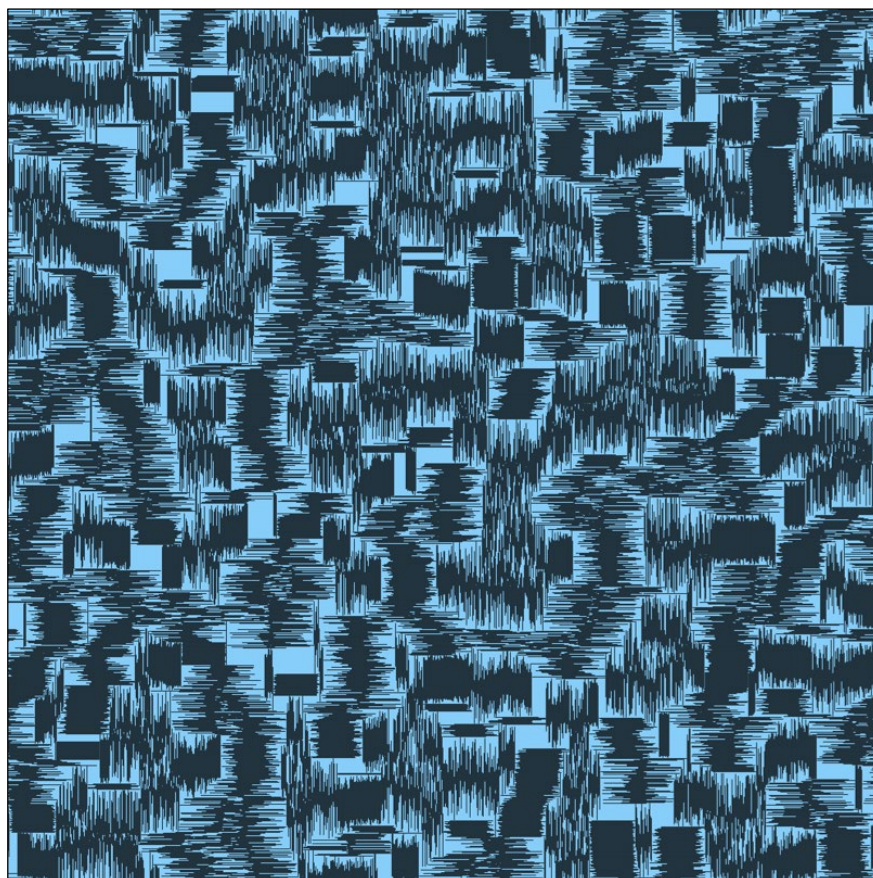


Рисунок 3.19. Максимальное заполнение решетки размера $L = 1000$ при $k = 50, p \approx 68.1\%$

В ходе моделирования на основе выбранной сложности упаковки были найдены значения плотности максимального заполнения при различных

значениях k . Было проведено по $N = 1000$ испытаний на решетках размера $L = 10000$ – таблица 3.14, рисунок 3.20.

Таблица 3.14. Пороги джемминга при различных k

| k | P_j |
|-----|----------|
| 1 | 100.0000 |
| 2 | 90.6822 |
| 3 | 84.6589 |
| 4 | 81.0398 |
| 5 | 78.6628 |
| 6 | 76.9866 |
| 7 | 75.7398 |
| 8 | 74.7736 |
| 9 | 74.0000 |
| 10 | 73.3657 |
| 11 | 72.8353 |
| 16 | 71.0890 |
| 32 | 68.9256 |
| 64 | 67.6113 |
| 100 | 67.0307 |
| 128 | 66.8265 |
| 256 | 66.3211 |
| 384 | 66.1389 |
| 512 | 66.0559 |

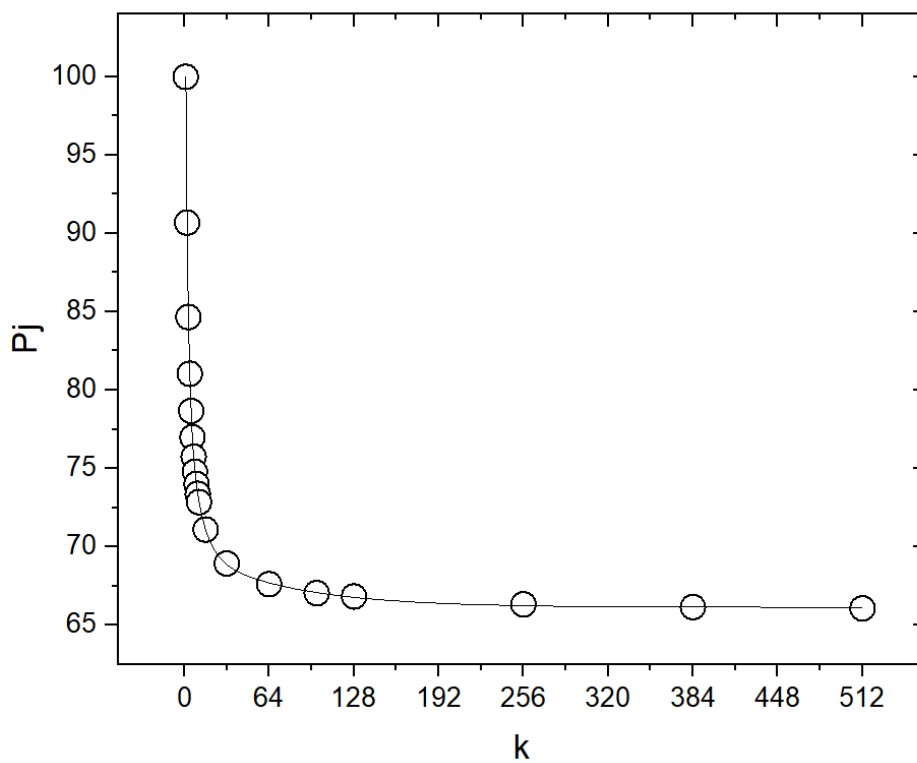


Рисунок 3.20. Значения порогов джемминга при различных k и их аппроксимация функцией (3.2)

Значения порогов джемминга аппроксимируются функцией вида:

$$P_j(k) = b + \frac{a-b}{1 + \left(\frac{k}{c}\right)^d} \quad (3.2)$$

где $a = 125.42 \pm 3.18$, $b = 66.11 \pm 0.12$, $c = 1.35 \pm 0.14$, $d = 0.98 \pm 0.03$.

Полученные значения близки или совпадают со значениями, представленными в таблицах 1.2-1.3 (см. главу 1).

Дополнительно были найдены значения плотностей максимального заполнения для структур с различными долями нелинейных k -меров. Рассматривались типы нелинейных k -меров, которые были предложены в разделе 3.3.2. Было проведено по $N = 100$ испытаний на решетках размера $L = 10000$ при различных k со сложностью упаковки $q(L) = L \times L$. Доля нелинейных k -меров варьировалась от 0 до 100%. Результаты моделирования представлены в таблице 3.15.

Таблица 3.15. Пороги джемминга при различных k, pn

| $k \setminus pn, \%$ | 0 | 25 | 50 | 75 | 100 |
|----------------------|---------|---------|---------|---------|---------|
| 10 | 73.3657 | 71.3427 | 67.0604 | 63.7866 | 61.3219 |
| 19 | 70.4313 | 63.8839 | 57.9244 | 53.3902 | 49.8299 |
| 28 | 69.2313 | 60.3439 | 53.5615 | 48.4043 | 44.2730 |
| 37 | 68.5616 | 58.2001 | 50.9100 | 45.3494 | 40.8320 |
| 46 | 68.1339 | 56.7242 | 49.0752 | 43.2266 | 38.4277 |
| 55 | 67.8131 | 55.6374 | 47.7116 | 41.6340 | 36.6182 |
| 64 | 67.5918 | 54.7979 | 46.6499 | 40.3994 | 35.1786 |
| 73 | 67.4097 | 54.1138 | 45.7840 | 39.3683 | 34.0072 |
| 82 | 67.2384 | 53.5543 | 45.0616 | 38.5200 | 33.0288 |
| 91 | 67.1388 | 53.0593 | 44.4652 | 37.7987 | 32.1653 |
| 100 | 67.0307 | 52.6634 | 43.9424 | 37.1535 | 31.4356 |
| 118 | 66.8663 | 51.9687 | 43.0675 | 36.1353 | 30.1909 |
| 136 | 66.7529 | 51.4653 | 42.3566 | 35.3131 | 29.2048 |
| 154 | 66.6407 | 51.0534 | 41.8329 | 34.5729 | 28.3598 |
| 172 | 66.5618 | 50.6659 | 41.3235 | 33.9677 | 27.6492 |
| 190 | 66.4860 | 50.3767 | 40.8957 | 33.4892 | 27.0207 |
| 199 | 66.4642 | 50.2400 | 40.7476 | 33.2235 | 26.7272 |

В общем случае введение нелинейных k -меров уменьшает порог джемминга, а также способствует более равномерному распределению объектов на решетке – визуально это можно проследить на рисунках 3.21-3.26.

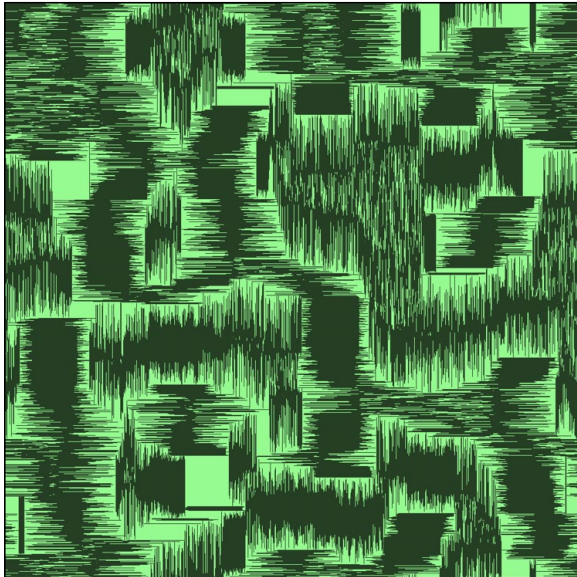


Рисунок 3.21. $pn = 0\%$, $p = 66.9\%$

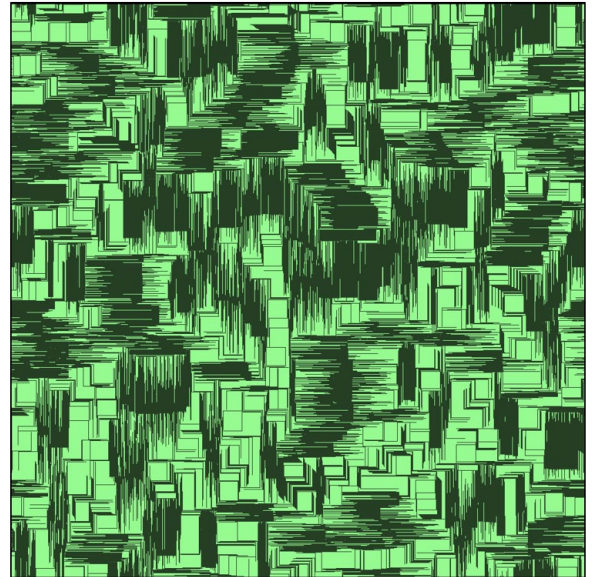


Рисунок 3.22. $pn = 20\%$, $p = 56.6\%$

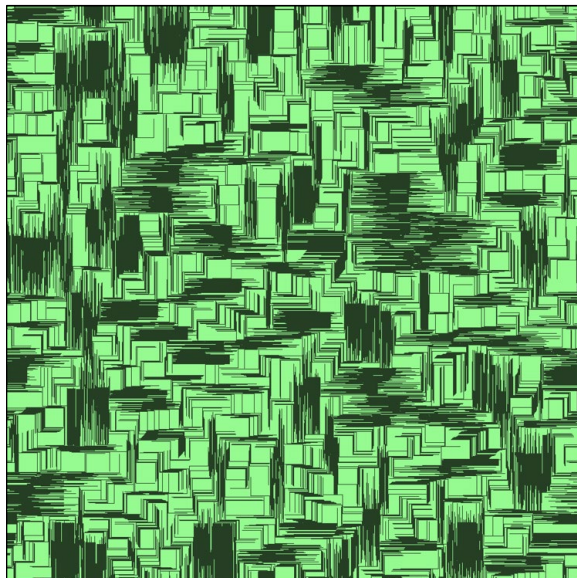


Рисунок 3.23. $pn = 40\%$, $p = 47.2\%$

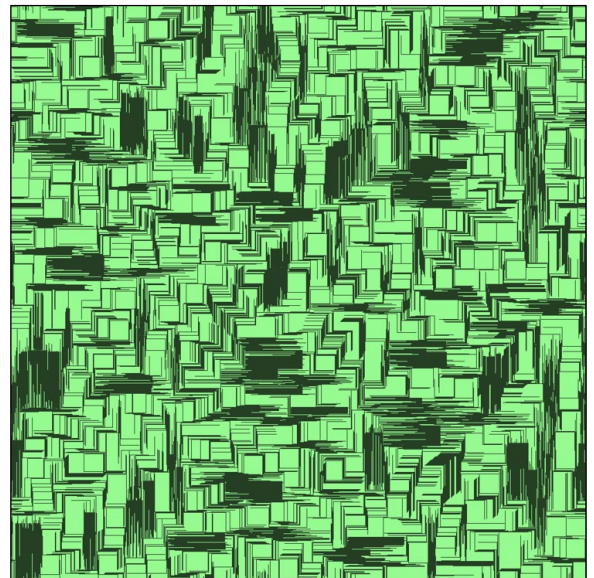


Рисунок 3.24. $pn = 60\%$, $p = 41\%$

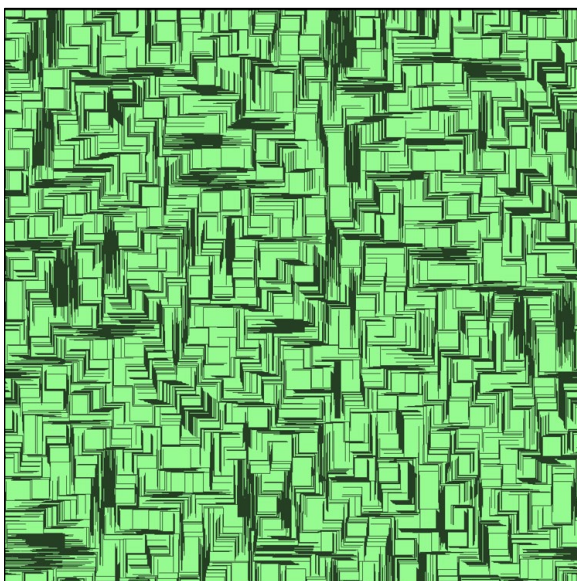


Рисунок 3.25. $pn = 80\%$, $p = 35.6\%$

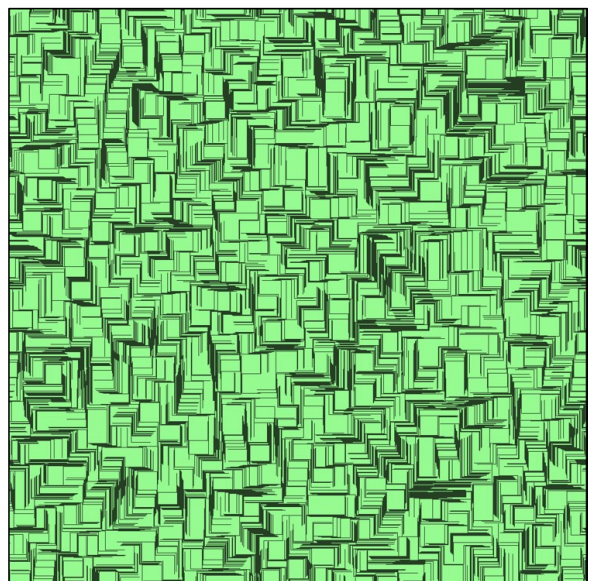


Рисунок 3.26. $pn = 100\%$, $p = 31.4\%$

На представленных рисунках показаны 6 структур распределения 100-меров на решетках размера $L = 1000$ с различной долей нелинейных k -меров. При $pn = 0\%$ k -меры склонны к агломерации, так что на решетке образуются их многочисленные скопления. Вдобавок можно заметить и наличие в структуре крупных свободных участков. При увеличении концентрации нелинейных k -меров заметно уменьшение в размерах как сгущающихся образований (при максимальном значении pn наблюдается почти полная их резорбция), так и незанятых участков.

3.5. Выводы

В этой главе были исследованы двумерные модели перколяции и джемминга k -меров на квадратной решетке.

Рассмотрена перколяция линейных k -меров, k -меров с варьированной длиной, нелинейных k -меров, с учетом длины связи между k -мерами, с учетом упорядочивающего фактора, нелинейных k -меров с учетом длины связи и упорядоченных k -меров с учетом длины связи.

Для модели осаждения простых линейных k -меров получены значения порогов перколяции для бесконечных систем при $1 \leq k \leq 100$. График значений порогов перколяции представляет собой немонотонную функцию. Минимальное значение достигается при $k = 14$. Для предложенных моделей с варьированной длиной k -меров, нелинейными k -мерами и учетом длины связи между k -мерами также получены значения порогов перколяции. Эти значения, как и предполагалось, получились меньше значений для основной модели. Упорядочивание исходного распределения k -меров ведет к увеличению порога перколяции, однако отличительной особенностью подобных структур является возникновение нескольких перколяционных кластеров в системах. Для модели, комбинирующей рассмотрение нелинейных k -меров и длину связи между ними, установлено, что при определенной длине связи ($sw \geq 30$) минимальное значение порога перколяции достигается для 100-меров линейного типа.

Для задачи джемминга в результате моделирования выбрана оптимальная сложность упаковки – $q(L) = L \times L$. Получены значения порогов джемминга при $1 \leq k \leq 512$ для линейных k -меров и при $10 \leq k \leq 199$, $pn = 0 \dots 100\%$ для нелинейных k -меров. Выявлено, что введение нелинейных k -меров в модель влечет за собой уменьшение порога джемминга.

Построенные модели могут быть использованы для описания структуры и изменения свойств тонкой пленки полимера, модифицированной углеродными нанотрубками.

Глава 4. Моделирование перколяции и джемминга k -меров на кубической решетке

4.1. Введение

В настоящей главе исследована трехмерная модель перколяции линейных k -меров на кубической решетке. Для этой модели были разработаны и реализованы эффективные алгоритмы: диспергирования k -меров на решетке, распределения k -меров по кластерам, поиска перколяционного кластера.

Также исследована модель джемминга линейных k -меров на кубической решетке.

4.2. Результаты моделирования

По аналогии с двумерным случаем, вначале были найдены пороги перколяции в простейшем случае ($k = 1$) для многих различных L – таблица 4.1. Это необходимо как для анализа правильности реализованной модели и выбора необходимых размеров решеток для дальнейших экспериментов при других значениях k , так и в целом для оценки адекватности существующей методики поиска значений порогов перколяции для бесконечных решеток.

На основе значений порогов перколяции для конечных решеток (табл. 4.1) при помощи соотношения (2.2) вычисляется порог перколяции для бесконечной решетки – 31.16032 ± 0.00077 – рисунок 4.1. Полученное значение совпадает до 5-го знака после запятой (если применить к значению нормировку от 0 до 1) с известным значением [35-37].

По рисунку 4.1 можно заметить, что скейлинг производится лишь по значениям, которые получены на решетках размера $L = 350, 500, 750, 1000$. Это объясняется тем, что пороги перколяции, полученные на небольших решетках, могут внести приличную погрешность в итоговое значение. На практике также установлено, что к подобному могут привести и значения, полученные с недостаточным отношением L / k в ходе эксперимента.

Таблица 4.1. Пороги перколяции при $k = 1$ для различных L

| L | P_c | $Error$ | N |
|----------|----------|---------|----------|
| 5 | 23.47802 | 0.0306 | 99999999 |
| 10 | 25.93151 | 0.0238 | 9999999 |
| 25 | 28.79123 | 0.01493 | 999999 |
| 50 | 29.98197 | 0.01099 | 99999 |
| 100 | 30.59929 | 0.00521 | 99999 |
| 200 | 30.89847 | 0.00239 | 9999 |
| 350 | 31.02125 | 0.00136 | 1000 |
| 500 | 31.06788 | 0.00132 | 1000 |
| 750 | 31.10369 | 0.00102 | 1000 |
| 1000 | 31.11839 | 0.00035 | 1000 |
| ∞ | 31.16032 | 0.00077 | — |

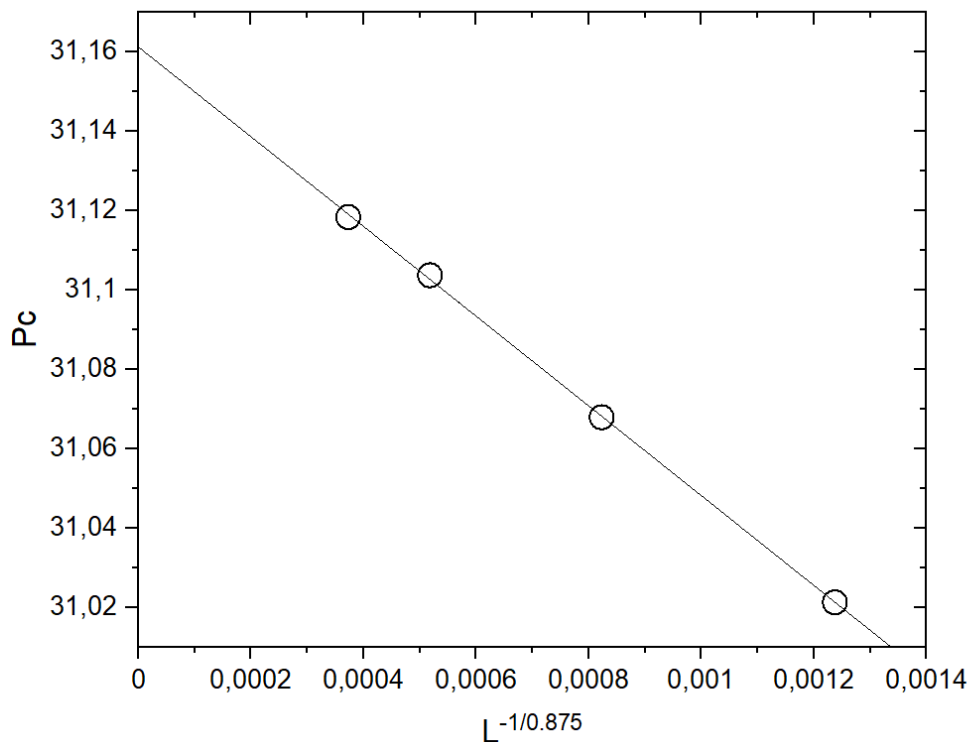


Рисунок 4.1. Получение значения порога перколяции для бесконечной решетки с помощью соотношения (2.2) при $k = 1$, $L = 350, 500, 750, 1000$

Аналогично были получены значения порогов перколяции для случая бесконечных систем при $2 \leq k \leq 200$. Для этого были вычислены пороги перколяции на решетках определенного размера – таблицы 4.2-4.6, а на основе их и соответствующие итоговые значения для бесконечных систем. Использование скейлинга для получения значений для случая бесконечных систем на основе значений из таблицы 4.2 также продемонстрировано на рисунке 4.2.

Таблица 4.2. Пороги перколяции при $2 \leq k \leq 20$

| $k \setminus L$ | 500 | 750 | 1000 | ∞ |
|-----------------|---------|---------|---------|----------|
| 2 | 25.5695 | 25.6075 | 25.6259 | 25.6729 |
| 3 | 21.1241 | 21.1662 | 21.1847 | 21.2347 |
| 4 | 17.8709 | 17.9144 | 17.9348 | 17.9876 |
| 5 | 15.4150 | 15.4616 | 15.4816 | 15.5363 |
| 6 | 13.5118 | 13.5532 | 13.5745 | 13.6271 |
| 7 | 11.9903 | 12.0361 | 12.0560 | 12.1105 |
| 8 | 10.7572 | 10.8018 | 10.8229 | 10.8772 |
| 9 | 9.7383 | 9.7838 | 9.8044 | 9.8590 |
| 10 | 8.8839 | 8.9279 | 8.9491 | 9.0032 |
| 15 | 6.1085 | 6.1513 | 6.1732 | 6.2270 |
| 20 | 4.6027 | 4.6455 | 4.6678 | 4.7221 |

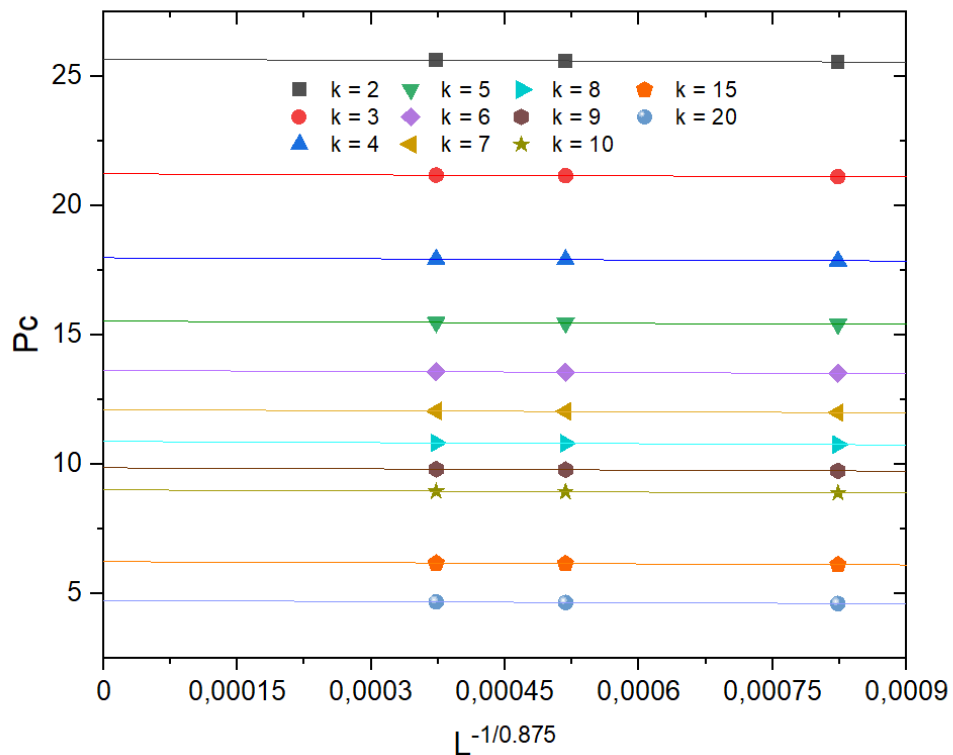


Рисунок 4.2. Получение значений порогов перколяции при $2 \leq k \leq 20$ для бесконечных систем на основе значений из таблицы 4.2

Таблица 4.3. Пороги перколяции при $25 \leq k \leq 50$

| $k \setminus L$ | 750 | 1000 | 1250 | ∞ |
|-----------------|--------|--------|--------|----------|
| 25 | 3.7126 | 3.7329 | 3.7451 | 3.78624 |
| 40 | 2.2790 | 2.3001 | 2.3117 | 2.35291 |
| 50 | 1.7970 | 1.8180 | 1.8298 | 1.87118 |

Таблица 4.4. Пороги перколяции при $80 \leq k \leq 100$

| $k \setminus L$ | 1000 | 1250 | 1500 | ∞ |
|-----------------|--------|--------|--------|----------|
| 80 | 1.0970 | 1.1091 | 1.1170 | 1.1510 |
| 100 | 0.8572 | 0.8708 | 0.8792 | 0.9164 |

Полученные значения порогов перколяции при $2 \leq k \leq 100$ также близки к значениям, полученными другими исследователями (см. табл. 1.4 в главе 1). Стоит сразу отметить, что монотонное убывание порогов перколяции с увеличением k отличается от немонотонного в двумерном случае. Подобное отличие позволяет предположить, что размещение k -меров в трехмерном случае обладает некоторой особенностью, а также что порог перколяции будет монотонно уменьшаться и в дальнейшем и при определенном k выйдет на некоторое постоянное значение.

Для подтверждения предположения были проведены дополнительные эксперименты при $k > 100$. Результаты представлены в таблицах 4.5-4.6.

Таблица 4.5. Пороги перколяции при $110 \leq k \leq 180$

| $k \setminus L$ | 1250 | 1500 | 1750 | ∞ |
|-----------------|--------|--------|--------|----------|
| 110 | 0.7846 | 0.7932 | 0.7986 | 0.8282 |
| 125 | 0.6808 | 0.6898 | 0.6961 | 0.7287 |
| 150 | 0.5529 | 0.5641 | 0.5701 | 0.6068 |
| 180 | 0.4465 | 0.4585 | 0.4657 | 0.5061 |

Таблица 4.6. Пороги перколяции при $k = 200$

| $k \setminus L$ | 1500 | 1750 | 2000 | ∞ |
|-----------------|--------|--------|--------|----------|
| 200 | 0.4054 | 0.4131 | 0.4190 | 0.4539 |

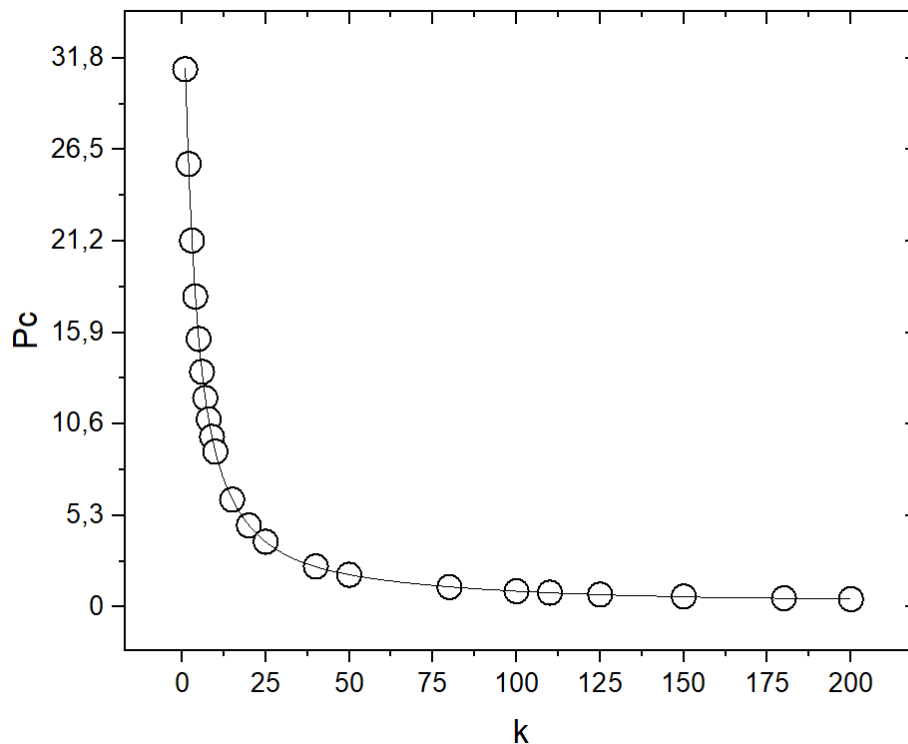


Рисунок 4.3. P_c для бесконечных систем при различных k и их аппроксимация функцией (4.1)

Все найденные значения порогов перколяции для бесконечных решеток представлены также на рисунке 4.3. Эти значения аппроксимируются следующей функцией:

$$P_c(k) = b + \frac{a - b}{1 + \left(\frac{k}{c}\right)^d} \quad (4.1)$$

где $a = 0.15 \pm 0.02$, $b = 38.28 \pm 0.27$, $c = 3.60 \pm 0.05$, $d = 1.17 \pm 0.01$.

4.4. Джемминг k -меров на кубической решетке

Пример максимального заполнения кубической решетки k -мерами показан на рисунке 4.4.

В ходе моделирования экспериментальным путем была выбрана оптимальная сложность упаковки k -меров с точки зрения точности получаемых значений и времени выполнения работы программы – $q(L) = L \times L$. Выбор был сделан на основе значений из таблицы 4.7.

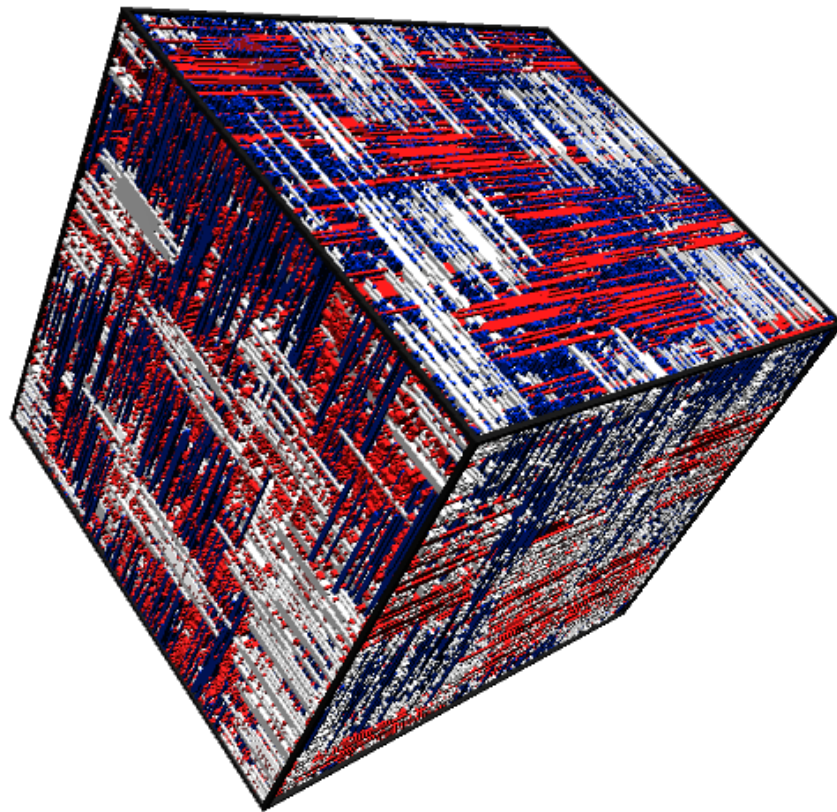


Рисунок 4.4. Джемминг 20-меров на решетке размера $L = 200$, $p \approx 52.5\%$

Таблица 4.7. Пороги джемминга при $k = 2$ для различных L , $q(L)$

| N | $L \setminus q(L)$ | L | $L \times \text{sqrt}(L)$ | $L \times L$ | $\frac{L \times L \times}{\text{sqrt}(L)}$ | $L \times L \times L$ | $\frac{L \times L \times}{L \times \text{sqrt}(L)}$ |
|----------|--------------------|----------|---------------------------|--------------|--|-----------------------|---|
| 10000000 | 5 | 95.07506 | 93.35189 | 92.34637 | 91.91985 | 91.77642 | 91.74862 |
| 10000000 | 10 | 95.37665 | 93.06625 | 92.08611 | 91.86411 | 91.84035 | 91.83973 |
| 1000000 | 15 | 95.09689 | 92.68810 | 91.94288 | 91.84348 | 91.83981 | 91.83948 |
| 1000000 | 20 | 94.82109 | 92.45859 | 91.88751 | 91.84031 | 91.83962 | 91,83913 |
| 100000 | 25 | 94.58123 | 92.30111 | 91.86312 | 91.83893 | 91.83954 | 91.83858 |
| 100000 | 40 | 94.03907 | 92.06501 | 91.84362 | 91.83949 | 91.83903 | 91.83912 |
| 10000 | 50 | 93.78100 | 91.98979 | 91.84070 | 91.83934 | 91.84009 | 91.83903 |
| 10000 | 75 | 93.34111 | 91.90458 | 91.83975 | 91.83992 | 91.83970 | 91.83967 |
| 10000 | 100 | 93.06307 | 91.87219 | 91.83952 | 91.83957 | 91.83937 | 91.83940 |
| 1000 | 200 | 92.52431 | 91.84398 | 91.83958 | 91.83964 | 91.83935 | 91.83997 |
| 1000 | 300 | 92.29968 | 91.84077 | 91.83947 | 91.83946 | 91.83949 | 91.83967 |
| 1000 | 500 | 92.09563 | 91.83968 | 91.83952 | 91.83945 | — | — |
| 100 | 1000 | 91.94331 | 91.83946 | 91.83941 | — | — | — |

Таблица 4.8. Пороги джемминга при различных k

| k | P_j |
|-----|----------|
| 1 | 100.0000 |
| 2 | 91.8394 |
| 3 | 83.8864 |
| 4 | 78.0351 |
| 5 | 73.6063 |
| 6 | 70.1351 |
| 7 | 67.3363 |
| 8 | 65.0283 |
| 9 | 63.0910 |
| 10 | 61.4398 |
| 11 | 60.0136 |
| 12 | 58.7711 |
| 13 | 57.6771 |
| 14 | 56.7042 |
| 15 | 55.8346 |
| 20 | 52.5654 |
| 25 | 50.3991 |
| 30 | 48.8439 |
| 40 | 46.7402 |
| 50 | 45.3681 |
| 64 | 44.0742 |
| 75 | 43.3514 |
| 90 | 42.6151 |
| 100 | 42.2265 |
| 110 | 41.9023 |
| 125 | 41.5083 |
| 150 | 40.9947 |

По таблице 4.7 в основном наблюдается та же специфика в упаковке k -меров, что и в двумерном случае (см. раздел 3.4): k -меры упаковываются более плотно на небольших решетках при любой сложности упаковки и при росте L выходят на некоторую постоянную плотность. Выбранное небольшое количество попыток на упаковку k -меров, как $q(L) = L$ или $q(L) = L \times \text{sqrt}(L)$, также предсказуемо приводит к чуть более плотной упаковке на небольших L . Это объясняется тем, что алгоритм слишком рано переходит из стадии случайной упаковки в стадию неслучайной, когда начинается сканирование всей решетки и поиск свободного места для размещения k -мера.

Однако в условиях критически малого отношения $L \setminus k$ актуальным становится вопрос: как именно упаковываются в этом случае k -меры? Более плотно или менее плотно? Предварительно не выявлено никакой закономерности в подобной упаковке в зависимости от небольших L и $q(L)$ – первые две строки таблицы 4.7.

Судя по всем значениям из таблицы 4.7, можно подтвердить также и предположение, выдвинутое в разделе 3.5, что нет необходимости в использовании соотношения (2.3) для получения значений порогов джемминга для случая бесконечных систем.

В ходе моделирования на основе выбранной сложности упаковки $q(L) = L \times L$ были найдены значения плотности максимального заполнения при следующих значениях k : 1...10, 15, 20, 25, 30, 40, 50, 64, 75, 90, 100, 110, 125, 150. Было проведено по $N = 100$ испытаний на решетках размера $L = 1000$ – таблица 4.8, рисунок 4.5.

Полученные значения порогов джемминга аппроксимируются функцией вида:

$$P_j(k) = b + \frac{a - b}{1 + \left(\frac{k}{c}\right)^d} \quad (4.2)$$

где $a = 114.97 \pm 1.30$, $b = 39.40 \pm 0.27$, $c = 4.19 \pm 0.14$, $d = 1.01 \pm 0.02$.

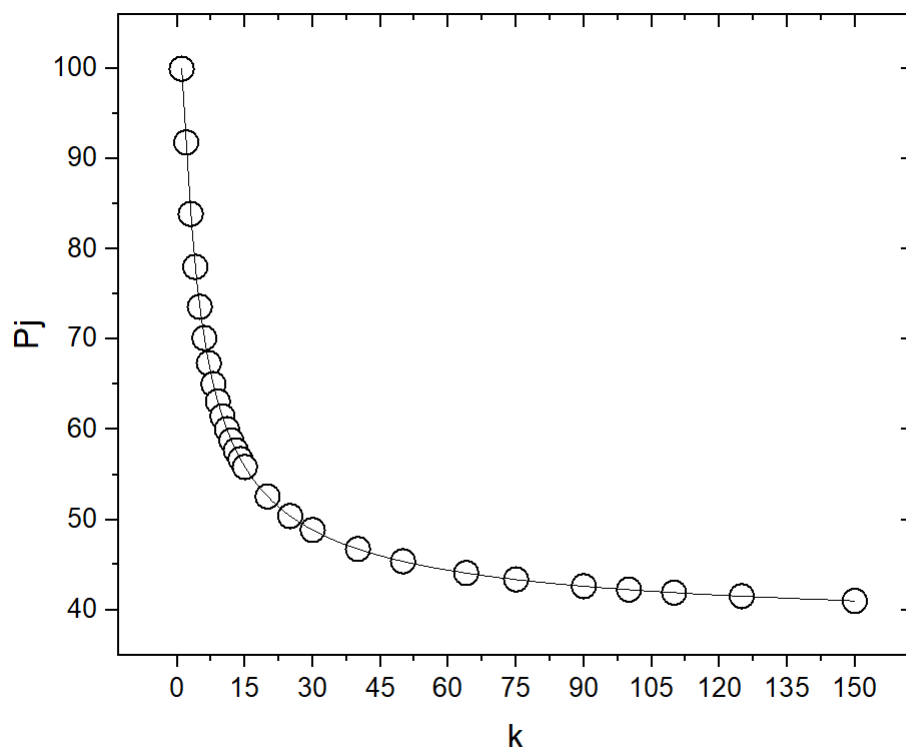


Рисунок 4.5. Значения порогов джемминга при различных k и их аппроксимация функцией (4.2)

4.5. Выводы

В этой главе были исследованы трехмерные модели перколяции и джемминга линейных k -меров на кубической решетке.

Получены значения порогов перколяции для бесконечных систем при $1 \leq k \leq 200$. Выявлено, что график значений порогов перколяции представляет собой монотонно убывающую функцию, в отличие от двумерного случая.

Для задачи джемминга в результате моделирования выбрана оптимальная сложность упаковки – $q(L) = L \times L$. Также получены значения порогов джемминга при $1 \leq k \leq 150$. Выявлено, что для получения точных значений порогов джемминга необходимо, чтобы при моделировании $q(L)$ и отношение $L \setminus k$ были максимально возможными.

Построенные трехмерные модели могут быть использованы для описания структуры и изменения свойств полимерного нанокомпозита, содержащего углеродные нанотрубки.

Заключение

В ходе выполнения работы были проанализированы результаты некоторых экспериментальных исследований по получению полимерных нанокомпозитов, содержащих углеродные наполнители, изучены способы моделирования структуры и свойств полимерных нанокомпозитов, исследованы основные подходы теории перколяции, а также рассмотрены некоторые решенные перколяционные задачи.

Предложены различные модели перколяции k -меров на квадратной и кубической решетках. Для двумерного случая: с линейной постоянной длиной k -меров, с варьированной длиной k -меров, с нелинейным типом k -меров, с учетом длины связи между k -мерами, с учетом упорядочивающего фактора, с нелинейным типом k -меров и учетом длины связи между ними, с учетом упорядочивающего фактора и длины связи между k -мерами. В трехмерном случае рассмотрена только перколяция линейных k -меров постоянной длины.

Предложены модели джемминга линейных k -меров на квадратной и кубической решетках. Для двумерной модели в дополнение рассмотрены случаи упаковки различных долей нелинейного типа k -меров.

Разработаны эффективные алгоритмы для реализации моделей: диспергирования k -меров на решетке, распределения k -меров по кластерам, поиска перколяционного кластера, упаковки k -меров для задачи джемминга. Разработано программное приложение для проведения вычислительного эксперимента, реализующего разработанные алгоритмы.

Экспериментально исследованы все предложенные модели: получены соответствующие значения порогов перколяции и джемминга, выявлены некоторые исключительные особенности. Основные из них:

- для двумерного и трехмерного случая отличается поведение значения порога перколяции для бесконечных систем в модели с линейными k -мерами: на квадратной решетке порог перколяции представляет собой нелинейную

функцию, достигая минимум при $k = 14$, на кубической – монотонно убывающую функцию.

- комбинирование рассмотрения в структурах некоторой доли нелинейных k -меров вместе с учетом длины между k -мерами позволило установить, что при определенной длине связи и больше ($sw \geq 30$) минимальное значение порога перколяции достигается для 100-меров линейного типа.
- для структур, полученных с учетом упорядочивания исходного распределения k -меров, характерно возникновение нескольких перколяционных кластеров в системе, что практически невозможно для структур с k -мерами с неупорядоченной ориентацией.
- для задачи джемминга как в двумерном, так и в трехмерном случае продемонстрирован метод получения наиболее точных значений порогов джемминга, основанный на отсутствии необходимости в существующих скейлинговых соотношениях.

Построенные двумерные и трехмерные модели могут быть использованы для описания структуры и изменения свойств полимера (как тонкой пленки, так и объемного образца), модифицированного углеродными нанотрубками.

Настоящая работа проведена при финансовой поддержке РФФИ (в рамках научных проектов № 17-41-590649, № 16-31-00064) и Правительства Пермского края (№ С-26/793). Результаты магистерской работы докладывались на конференциях, также по ее теме было опубликовано 11 научных работ, в том числе 2 статьи в журналах Scopus. Разработанный автором программный продукт «Моделирование перколяции и джемминга неточечных объектов на квадратной решетке» в настоящее время проходит государственную регистрацию в Роспатенте.

Список использованной литературы

1. *Огнев А. Ю., Теплых А. М., Батаев В. А. и др.* Полимерный композиционный материал на основе эпоксидной смолы, упрочненный многослойными углеродными нанотрубками // Научный вестник НГТУ. 2009. № 4(37). С. 115-122.
2. *Рябов С. А., Захарычев Е. А., Семчиков Ю. Д.* Исследование влияния времени функционализации углеродных нанотрубок на физико-механические свойства полимерных нанокомпозитов на их основе // Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского. 2013. № 2 (1). С. 71-74.
3. *Бочаров Г. С., Елецкий А. В., Книжник А. А.* Нелинейное сопротивление полимерных нанокомпозитов с присадкой углеродных нанотрубок в условиях перколяции // Журнал технической физики. 2016. Т. 86, № 10. С. 64-68.
4. *Блохин А. Н.* Влияние углеродных нанотрубок на электропроводность эпоксидной матрицы // Вопросы современной науки и практики. 2012. № 3(41). С. 384–386.
5. *Воробьева Е. А., Бачурин К. Е., Макунин А. В. и др.* Синтез и исследование нанокомпозитов с включением углеродных нанотрубок // Труды XII Межвузовской научной школы молодых специалистов «Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии и медицине». 2011. С. 127-132.
6. *Козлов Г. В., Долбин И. В., Койфман О. И.* Фрактальная модель усиления нанокомпозитов полимер/углеродные нанотрубки с ультрамалыми концентрациями нанонаполнителя // Доклады академии наук. 2019. Т. 486. № 1. С. 39-43.
7. *Балаева С. М., Козлов Г. В., Заиков Г. Е. и др.* Зависимость степени усиления от структуры нанонаполнителя для нанокомпозитов полиуретан/углеродные

нанотрубки // Вестник технологического университета. 2015. Т. 18. № 2. С. 163-166.

8. *Кондрашов С. В., Гуняева А. Г., Шашкеев К. А. и др.* Электропроводящие гибридные полимерные композиционные материалы на основе нековалентно функционализированных углеродных нанотрубок // Труды ВИАМ. 2016. № 2. С. 81–93.

9. *Иржак В. И.* Эпоксидные композиционные материалы с углеродными нанотрубками // Успехи химии. 2011. Т. 80. № 8. С. 821-840.

10. *Семенов В. А., Русаков С. В., Гилев В. Г.* Об электропроводности эпоксидной матрицы с углеродными нанотрубками // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. 2019. № 3. С. 88-93.

11. *Гаврилов А. А., Гусева Д. В., Чертович А. В. и др.* Мультимасштабное моделирование полимерных нанокомпозитов // Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности. 2017. С. 93-100.

12. *Pereira S., Scocchi G.* Multiscale modeling of polymer/clay nanocomposites // Journal of Multiscale Modelling. 2011. Vol. 3. P. 151-176.

13. *Микитаев А. К., Козлов Г. В.* Описание степени усиления нанокомпозитов углеродными нанотрубками в рамках перколяционных моделей // Физика твердого тела. 2014. Т. 57. № 5. С. 961-964

14. *Громов С. В.* Проведение численного моделирования деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, содержащих ассиметричные включения // Наукоедение. 2013. № 5(18).

15. *Гагарин М. В., Баранов Д. Е., Турченков В. А.* Моделирование проницаемости нанокомпозитов // Авиационные материалы и технологии. 2012. № 3(24). С. 36-39.

16. *Атлуханова Л. Б., Козлов Г. В.* Усиление полимерных нанокомпозитов со стеклообразной и эластомерной матрицей углеродными нанотрубками //

Вестник Брянского государственного технического университета. 2019. № 2(75).
С. 65-69.

17. *Боков К. А.* Компьютерное моделирование перколяции k -меров на квадратной решетке // Выпускная квалификационная работа. 2018. 88 с.

18. *Черкасова В. А.* Компьютерное моделирование концентрационных фазовых переходов в системах анизотропных частиц при наличии упорядочивающих факторов // Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. 2010. 148 с.

19. *Бузмакова М. М.* Компьютерное моделирование континуальной перколяции сфер и эллипсоидов с проницаемыми оболочками // Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. 2013. 168 с.

20. *Тарасевич Ю. Ю.* Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. М.: Едиториал УРСС, 2002. 112 с.

21. *Tarasevich Yu. Yu., Laptev V. V., Vygornitskii N. V., Lebovka N. I.* Impact of defects on percolation in random sequential adsorption of linear k -mers on square lattice // Phys. Rev. E. 2015. Vol. 91, P. 012109.

22. *Vandewalle N., Galam S., Kramer M. A.* A new universality for random sequential deposition of needles // Eur. Phys. J. B. 2000. Vol. 14. P. 407-410.

23. *Leroyer Y., Pommiers E.* A Monte Carlo analysis of percolation of line-segments on a square lattice // Phys. Rev. B. 1994. Vol. 50. P. 2795-2799.

24. *Slutskii M. G., Barash L. Yu., Tarasevich Yu. Yu.* Percolation and jamming of random sequential adsorption samples of large linear k -mers on a square lattice // Phys. Rev. E. 2018. Vol. 98. P. 062130.

25. *Kondrat G., Pekalski A.* Percolation and jamming in random sequential adsorption of linear segments on square lattice // Phys. Rev. E. 2001. Vol. 63. P. 051108.

26. *Tarasevich Yu. Yu., Lebovka N. I., Laptev V. V.* Percolation of linear k -mers on a square lattice: from isotropic through partially ordered to completely aligned state // *Phys. Rev. E*. 2012. Vol. 86. P. 061116.
27. *Lebovka N. I., Karamzina N. N., Tarasevich Yu. Yu.* Random sequential adsorption of partially oriented linear k -mers on square lattice // *Phys. Rev. E*. 2011. Vol. 84. P. 061603.
28. *Garcia G., Sanchez-Varretti F., Centres P., Ramirez-Pastor A.* Random sequential adsorption of straight rigid rods on a simple cubic lattice // *Physics A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier. 2015. Vol. 436. P. 558-564.
29. *Кнут Д. Э.* Искусство программирования. Том 2. Получисленные алгоритмы // Москва: Вильямс. 2001. Т. 2. 832 с.
30. Преобразование Бокса – Мюллера // Википедия. Дата обновления: 11.01.2018. URL: <https://ru.wikipedia.org/?oldid=90212432> (дата обращения: 20.06.2020).
31. *Hoshen J., Kopelman R.* Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm // *Phys. Rev. B*. 1976. Vol. 14, P. 3438-3445.
32. *Lebovka N. I., Tarasevich Yu. Yu., Dubinin D. O., Laptev V. V.* Jamming and percolation in generalized models of random sequential adsorption of linear k -mers on a square lattice // *Phys. Rev. E*. 2015. Vol. 92 P. 062116.
33. *Jacobsen J. L.* Critical points of Potts and $O(N)$ models from eigenvalue identities in periodic Temperley-Lieb algebras // *Journal of Physics A*. 2015. Vol. 48. P. 454003.
34. *Yang Y., Zhou S., Li Y.* Square++: Making a connection game win-lose complementary and playing-fair // *Entertainment Computing*. 2013. Vol. 4. P. 105-113.
35. *Wang J., Zhang W., Garoni T.* Bond and site percolation in three dimensions // *Phys. Rev. E*. 2013. Vol. 87. P. 052107.
36. *Deng Y., Blote H. W.* Monte Carlo study of the site-percolation model in two and three dimensions // *Phys. Rev. E*. 2005. Vol. 72. P. 016126.

37. *Koza Zbigniew, Jakub Pola*. From discrete to continuous percolation in dimensions 3 to 7 // *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*. 2016. Vol. 10. P. 103206.

Приложение А. Письмо из управления инновационной деятельности ПГНИУ



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Пермский государственный национальный исследовательский университет» (ПГНИУ)

УПРАВЛЕНИЕ ИННОВАЦИОННОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

Ул. Букирева, д. 15, г. Пермь, 614990
Телефон +7 (342) 239-65-33, факс +7 (342) 237-16-11
E-mail: mozgovo.psu@gmail.com
Сайт: http://vk.com/mozgovo

От 11.06.2020 № 129
На _____ от _____

Декану механико-математического факультета

А.Г. Кузнецову

Уважаемый Андрей Геннадьевич!

Управление инновационной деятельности в моем лице выражает благодарность Вам и научному руководителю Марии Михайловне Бузмаковой магистранта кафедры прикладной математики и информатики Бокова Кирилла Александровича за развитие студенческой науки. К.А. Боков является автором перспективной программы для ЭВМ «Моделирование перколяции и джемминга неточечных объектов на квадратной решетке», которая в настоящее время находится в процессе государственной регистрации.

Начальник УИД


Управление инновационной деятельности
А.Н. Шахаев

