

ИНФОРМАТИКА ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ

УДК 004.94

Компьютерное моделирование перколяции k -меров на квадратной решетке

К. А. Боков, М. М. Бузмакова

Пермский государственный национальный исследовательский университет
Россия, 614990, г. Пермь, ул. Букирева, 15
cyrilevel@rambler.ru, mariya_nazarova@mail.ru

Предложена перколяционная модель k -меров на квадратной решетке. Для модели разработаны алгоритмы упаковки k -меров на квадратной решетке, распределения k -меров по кластерам, поиска перколяционного кластера – кластера, пронизывающего всю решетку. При моделировании использованы периодические граничные условия. Получены значения порога перколяции для $k = 1, 2, \dots, 10$. Для $k = 1, 2, 3$ значения порога перколяции совпали со значениями других исследователей. Данная модель может быть использована для описания структуры и изменения свойств тонкой пленки полимера, модифицированной углеродными нанотрубками.

Ключевые слова: математическое и компьютерное моделирование; теория перколяции; полимер; углеродные нанотрубки.

DOI: 10.17072/1993-0550-2018-1-51-55

Введение

Перколяционные модели успешно используются для описания структуры и свойств полимерных нанокомпозитов [см., например, 1–2]. Известно, что для таких материалов характерно перколяционное поведение – скачкообразное изменение свойств наноматериала при изменении концентрации наномодификатора. Критическая концентрация, при которой меняется или возникает какое-либо свойство материала, соответствует порогу перколяции. Однако существует разброс в результатах разных исследователей по значению критической концентрации нанонаполнителя.

Для углеродных нанотрубок эти значения варьируют от доли до нескольких процентов [3–4]. Кроме того, не существует единой теории структуры и свойств нанокомпозитов, каждый вновь получаемый наноматериал обладает индивидуальными особенностями. Поэтому теоретическое исследование структуры и изменения свойств таких материалов остается актуальным на сегодняшний день.

В настоящей работе предложена и исследована перколяционная модель тонкой пленки полимера, модифицированного углеродными нанотрубками.

1. Постановка задачи

В рамках предложенной перколяционной модели в роли полимерной матрицы выступает квадратная решетка, углеродные нанотрубки – k -меры, k -мер – это k подряд заня-

© Боков К. А., Бузмакова М. М., 2018
Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 16-31-00064, 17-41-590649).

тых узлов решетки в одном направлении (горизонтальном или вертикальном). Горизонтальные и вертикальные ориентации k -меров равновероятны. k -меры равномерно распределены по всей решетке. Модель описана следующим математическим соотношением:

$$M = \langle L, Z_n, k, p, K \rangle, \quad (1)$$

где L – линейный размер квадратной решетки, $Z_n = \{x_i, y_i\}$ ($i = 1, 2, \dots, n$) – множество пар координат начала k -мера; k – длина k -мера; p – заданная концентрация k -меров; K – количество испытаний.

k -меры могут образовывать кластеры – группы рядом находящихся элементов. При увеличении концентрации k -меров увеличивается количество и размеры кластеров, малые кластеры начинают объединяться в большие и далее на решетке образуется перколяционный кластер – кластер, пронизывающий всю систему. Основной задачей перколяции является определение порога перколяции. Порог перколяции соответствует концентрации k -меров в системе, при которой вероятность возникновения перколяционного кластера равна 50 %.

2. Методы моделирования и алгоритмы

Моделирование проводилось с использованием методов Монте-Карло. Для реализации модели была написана программа с пользовательским интерфейсом на языке программирования C#. Для равномерного диспергирования k -меров на квадратной решетке, распределения k -меров по кластерам и поиска перколяционного кластера были разработаны эффективные алгоритмы. При моделировании использованы периодические граничные условия.

2.1. Алгоритм диспергирования k -меров на квадратной решетке

Распределение k -меров производится следующим образом:

1. Генерируется направление k -мера (либо горизонтальное, либо вертикальное).
2. Генерируются координаты начала k -мера (пара целых чисел i и j , где $1 \leq i \leq L$ и $1 \leq j \leq L$, L – линейный размер решетки).
3. Производится попытка упаковать сгенерированный k -мер:
 - а) k – подряд свободных узлов в выбранном направлении помечаются как занятые;

б) если при проверке узлов все оказались свободными, мы помечаем их как занятые и текущий k -мер считается упакованным;

с) иначе текущий k -мер отвергается и производится попытка упаковать его в противоположную сторону (направление и начало k -мера остаются те же);

д) если такой k -мер размещается, переходим к пункту 1, иначе – переходим к пункту 2.

4. Распределение k -меров происходит до тех пор, пока не будет достигнута необходимая концентрация p (см. рис. 1).

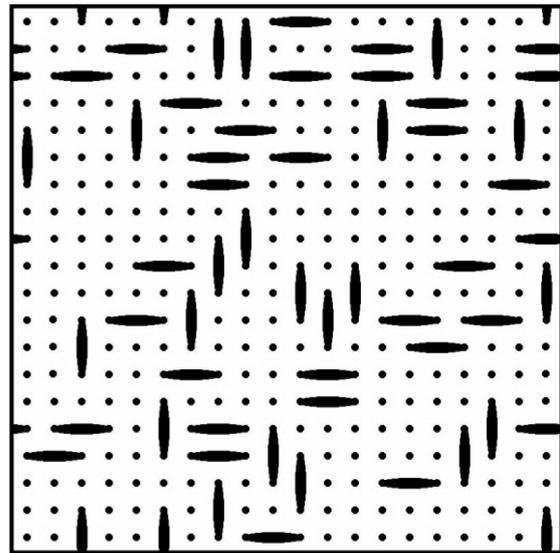


Рис. 1. Диспергирование 3-меров на квадратной решетке с линейным размером $L = 20$, $p = xx$

Для предложенного алгоритма была проведена оценка равномерности распределения стандартными методами математической статистики и теории вероятностей, которая показала его способность получать равномерное распределение k -меров на квадратной решетке даже на малых долях концентрации с уровнем надежности более 90 % [5].

2.2. Алгоритм распределения k -меров по кластерам

Распределение k -меров по кластерам происходит по следующему порядку:

1. Создаются списки координат узлов $koor_kl[k]$, принадлежащих k -му кластеру, пока пустые. $i=1, j=1, k=1$, где $1 \leq i \leq L$ и $1 \leq j \leq L, k > 0$.

2. Узел решетки $[i][j]$ проверяется: является ли он занятым и непроверенным.

3. Если текущий узел $[i][j]$ занят и непроверен, то он принадлежит k -му кластеру:

а) координаты узла $[i][j]$ добавляются в список $koor_kl[k]$, и узел $[i][j]$ помечается "проверенным";

б) рекурсивно выполняется пункт [3] для соседних "непроверенных" узлов: $[i][j+1]$, $[i][j-1]$, $[i+1][j]$, $[i-1][j]$.

Иначе работа рекурсивной функции в данном направлении останавливается.

4. $k = k+1$ (k -й кластер идентифицирован и начинается поиск следующего кластера), если $j \leq L$, то $j=j+1$, иначе если $i \leq L$, то $j=1$, $i=i+1$ и осуществляется переход к пункту 2, иначе функция прекращает работу.

Распределение k -меров по кластерам по данному алгоритму показано на рис. 2.

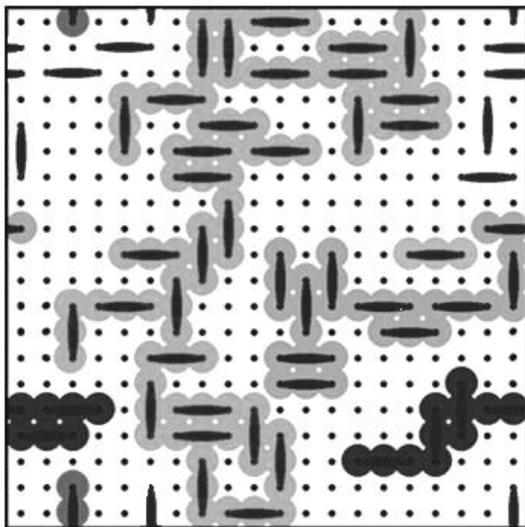


Рис. 2. Распределение 3-меров по кластерам на квадратной решетке с линейным размером $L = 20$, $p = xx$

Основным достоинством алгоритма является то, что при нахождении очередного занятого непроверенного узла, по сути, идентифицируется весь кластер, которому он принадлежит; и не возникает конфликта кластерных меток, как это наблюдается в алгоритме Хошена–Копельмана [6].

2.3. Алгоритм поиска перколяционного кластера

При распределении k -меров по кластерам производится проверка для каждого идентифицированного кластера, может ли он являться перколяционным, то есть:

1. Есть ли у кластера узлы в 1-м и L -м слое решетки?

2. Размер кластера (число узлов в кластере) больше либо равен линейному размеру решетки L ?

Если для i -кластера ответы на оба вопроса положительные, то он заносится в список кластеров, подозрительных на перколяционные $perkl_podozg$. Имея список $perkl_podozg$, достаточно найти в нем хотя бы один перколяционный кластер. Поиск перколяционного кластера производится следующим образом:

1. Если список $perkl_podozg$ не является пустым, то для каждого его j -элемента ($1 \leq j \leq m$, где m – количество кластеров, подозрительных на перколяционный) переходим к пункту 2, иначе перколяционного кластера нет.

2. Для каждого j -го кластера проверяется, содержатся ли его узлы в каждом слое решетки.

3. Если узлы кластера содержатся в каждом слое решетки, то данный j -й кластер является перколяционным, иначе переходим к пункту 1, увеличив j на единицу.

Пример перколяционного кластера можно посмотреть на рис. 2 (светло-голубой кластер).

2.4. Методика определения порога перколяции

Результатом работы программы являются текстовые файлы с данными по вероятности возникновения перколяционного кластера в зависимости от значения концентрации k -меров. Данные вычислительного эксперимента аппроксимируются функцией вида

$$P(p) = (1 + \exp(-(p - p_c(L))a))^{-1}. \quad (2)$$

Пример аппроксимации экспериментальных данных показан на рис. 3. При аппроксимации экспериментальных данных определяется порог перколяции для решетки конечного размера L . Далее для каждого значения длины k -мера находится как минимум три значения порога перколяции для различных решеток. Значение порога перколяции для случая бесконечной системы определяется с помощью скейлингового соотношения (например, рис. 4):

$$|p_c(L) - p_c(\infty)| \propto L^{-1/\nu}, \quad (3)$$

где ν – универсальный критический показатель и равен $4/3$ в случае рассмотрения двумерных перколяционных задач.

Подробно данная методика определения порога перколяции описана в работе [7].

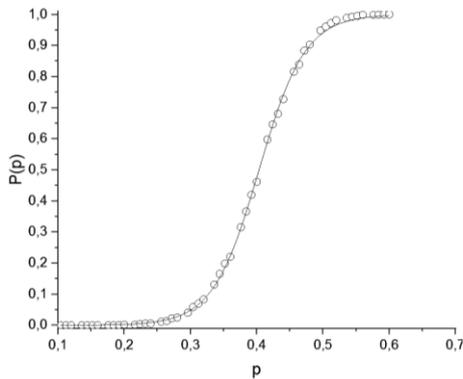


Рис. 3. Вероятность возникновения перколяционного кластера при $k = 5$, $L = 125$, \circ – данные вычислительного эксперимента, — – аппроксимация функцией вида (2)

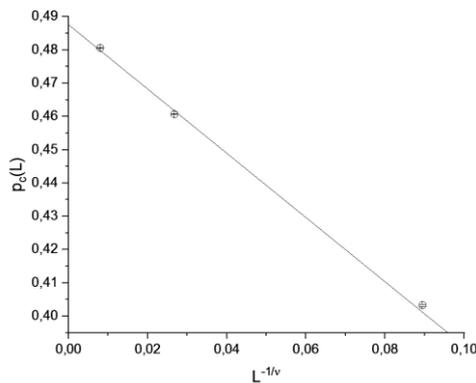


Рис. 4. Получение значения порога перколяции при $k = 5$, \circ – данные вычислительного эксперимента, — – аппроксимация функцией вида (3)

3. Результаты моделирования и их обсуждение

Получены значения порога перколяции при значениях $k = 1, 2, \dots, 10$ (см. рис. 5). На графике видно, что при увеличении длины k -мера, порог перколяции уменьшается. Для $k = 1$ (перколяционная задача узлов), $k = 2$ и 3 значения порога перколяции совпадают или близки к значениям, полученными другими исследователями [8–10], что подтверждает адекватность построенной модели.

Полученные значения порога перколяции аппроксимируются функцией

$$p_c(k) = A + B \cdot \exp(-0,39k); \quad (4)$$

где $A = 0,463 \pm 0,001$; $B = 0,186 \pm 0,001$.

Можно предположить, что при достижении определенной длины k -мера, порог перколяции перестанет уменьшаться и будет равен значению, близкому к параметру A .

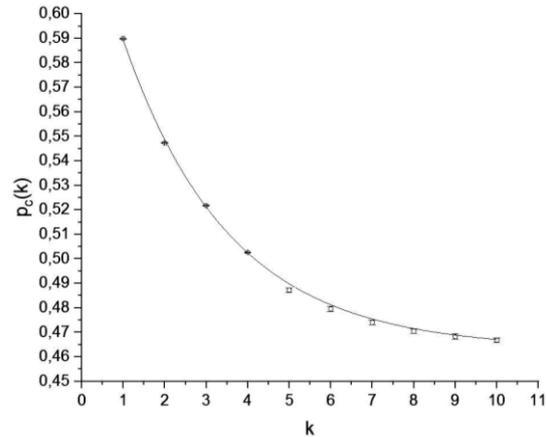


Рис. 5. Значения порога перколяции при различных значениях длины k -мера и их аппроксимация

Заключение

В работе представлена модель тонкой пленки полимера, модифицированной углеродными нанотрубками. Получены значения критической концентрации углеродных нанотрубок в полимере, при которой наноматериал меняет свои свойства в зависимости от длины нанотрубки. Авторами предполагается дальнейшее исследование структуры полимера, модифицированного УНТ путем модификации предложенной перколяционной модели с учетом межфазного и межчастичного взаимодействия и рассмотрения трехмерных систем.

Список литературы

1. Silva J., Ribeiro S., Lanceros-Mendez S., et al. The influence of matrix mediated hopping conductivity, filler concentration, aspect ratio and orientation on the electrical response of carbon nanotube/polymer nanocomposites // Composites Science and Technology. 2011. Vol. 71. P. 643–646.
2. Heng Gu1, Jiaojiao Wang, Choongho Yu. Three-dimensional Modeling of Percolation Behavior of Electrical Conductivity in Segregated Network Polymer Nanocomposites Using Monte Carlo Method // Advances in Materials. 2016. Vol. 5 (1). P. 1–8. URL: <http://www.sciencepublishinggroup.com/j/am> (дата обращения: 11.09.2017).

3. Xiaomei Zeng, Xiaofeng Xu, Prathamesh M. Shenai, et al. Characteristics of the electrical percolation in carbon nanotubes/polymer nanocomposites // URL: <http://www3.ntu.edu.sg/home/zhaoyang/percolation.pdf> (дата обращения: 11.09.2017).
4. Matunya Ye., Boudenne A., Lebovka N., et al. Electrical and thermophysical behaviour of PVC-MWCNT nanocomposites // Composites Science and Technology. 2008. Vol. 68. P.1981–1988.
5. Боков К.А., Бузмакова М.М. Моделирование диспергирования углеродных нанотрубок в полимере // Математика и междисциплинарные исследования: материалы конференции. 2017. Т. 2. С. 14–19.
6. Hoshen J., Kopelman R. Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm // Physical Review B. 1976. Vol. 14, № 8. P. 3438–3445.
7. Бузмакова М.М. Компьютерное моделирование непрерывной перколяции сфер и эллипсоидов с проницаемыми оболочками // дис. канд. физ.-мат. наук. Астрахань, 2013. 168 с.
8. Ziff R.M. Test of scaling exponents for percolation-cluster perimeters // Phys. Rev. Lett. 1986. Vol. 56. P. 545–548.
9. Cherkasova V.A., Tarasevich Y.Y., Lebovka N.I., et al. Percolation of aligned dimers on a square lattice // Eur. Phys. J. B. 2010. Vol. 74, № 2. P. 205–209.
10. Кармазина Н.Н., Тарасевич Ю.Ю. Ориентированная перколяция линейных 3-меров // Тез. XVII конф. МКО-2010. 2010. URL: <http://www.mce.su/rus/archive/mce17/doc62569/> (дата обращения: 11.09.2017).

Computer Modeling of k -meres Percolation on a Square Lattice

К. А. Bokov, М. М. Buzmakova

Perm State University; 15, Bukireva st., Perm, 614990, Russia
cyrilevel@rambler.ru, mariya_nazarova@mail.ru

The paper presents a percolation model of k -meres on a square lattice. The algorithms for packing of k -meres on a square lattice, for distribution of k -meres on the clusters, for search for the percolation cluster – the cluster contained within the whole lattice – were developed for the model. The periodic boundary conditions were used in the simulation. The values of the percolation threshold for $k = 1, 2, \dots, 10$ have been obtained. For $k = 1, 2, 3$, the values of the percolation threshold coincided with those from other researchers. This model can be used to describe changes in the structure and properties of a polymer modified by carbon nanotubes.

Keywords: *mathematical and computer modeling; percolation theory; polymer; carbon nanotubes*