

УДК 530.182, 538.93

Х. Д. Ламажапов<sup>1</sup>, С. А. Прохоров<sup>2</sup>, Д. А. Рыбаков<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Самарский государственный университет путей сообщения  
1й Безымянный переулок, 18, Самара, 443066, Россия

<sup>2</sup> Самарский государственный аэрокосмический университет им. Королёва  
Московское шоссе, 34, Самара, 443086, Россия  
E-mail: dim1r@yandex.ru; hubita@mail.ru

## СВОЙСТВА ТРЕХМЕРНЫХ КЛАСТЕРОВ, СОСТАВЛЕННЫХ ИЗ ПАРАЛЛЕЛЕПИПЕДОВ

Исследована компьютерная модель трехмерных контактных кластеров. Элементы модели имели такие характеристики, как положение, вытянутость и ориентацию. Показано, что вытянутость и ориентация элементов заметно влияют на значение порога перколяции. При увеличении углового разброса элементов порог перколяции уменьшается. Также порог уменьшается при увеличении вытянутости элементов. Длина кратчайшего пути в кластере максимальна на пороге перколяции. Скорость переноса в кластере на пороге перколяции минимальна.

*Ключевые слова:* порог перколяции, кластеры, вытянутые элементы, угловое распределение, процессы переноса, длина пути.

### Введение

Теория перколяции описывает резкие изменения свойств системы, состоящей из двух и более компонентов, при увеличении плотности одного компонента [1–4]. Она применима для описания большого класса физических явлений. Однако недостаточно изученными являются случаи с вытянутой геометрией базовых элементов. Такая геометрия может возникнуть в газах, в которых ионизированность не равномерная, а имеет взрыхленный, фрактальный характер. Случайно разбросанные свободные электроны возникают под действием фонового излучения или после пролета космических частиц. Внешнее электрическое поле вызывает развитие вытянутых лавин, которые в совокупности образуют взрыхленную низкотемпературную плазму. Такой процесс имеет отношение к образованию молний и искровых разрядов. Пробойные явления возникают, когда образуются перколяционные проводящие кластеры, замыкающие промежутки [5].

Также теорию перколяции используют при описании процессов тепло- и массообмена [6; 7]. Однако зачастую исследователи используют двумерные расчеты на решетках. Переходу к расчетам в трех измерениях

препятствует кубический закон потребления памяти компьютеров. Нами предпринята попытка создания трехмерной модели, отличной от решетчатой, которая позволяет выявить некоторые нерассмотренные ранее особенности перколяционных кластеров.

### Методика расчетов

В кубическом промежутке с ребром  $L = 1$  разбрасывались  $n = 5 \cdot 10^5 \dots 10^6$  почти одинаковых параллелепипедов меньшего размера. Пара элементов считалась связанной, если существовало геометрическое пересечение между ними. Кластером считалась совокупность связанных элементов.

Для более полного учета мы рассмотрели два случая: с учетом трансляционной симметрии и без нее. При наличии трансляционной симметрии противоположные грани промежутка замыкались, что моделировало ситуацию, когда копиями промежутка заполнено все пространство. Далее, где не указано специально, режим трансляции отсутствует.

Если в бесконечном объеме перколяционным кластером считается бесконечный кластер, то в отношении конечного объема этот вопрос неоднозначен. Таковым можно считать кластер, касающийся противопо-

ложных сторон только в одном из направлений либо касающийся всех сторон промежутка сразу. В зависимости от этих условий полученные величины могут варьироваться. Но при переходе к бесконечному объему разница стремится к нулю [4].

За значение плотности заполнения бра-лась величина  $p = \frac{\sum v_i}{V_0}$ , где  $V_0$  – объем моделируемого промежутка, а  $v_i$  – объем элемента  $p \in [0, 1]$ . Плотность, при которой возникает перколяционный кластер, называется порогом перколяции  $p_c$ .

Для каждого захода фиксировался набор величин ( $L, K, \theta_{\max}$ ), где  $K = \frac{l_1}{l_2}$  – вытянутость элементов,  $\theta_{\max}$  – максимальный угол отклонения элемента. Для каждого элемента генерировался набор величин ( $x, y, z, \varphi, \theta, \phi$ ) (рис. 1). Поворот вокруг собственной оси не учитывался,  $\phi = 0$ . Величины  $l_1$  и  $l_2$  имели небольшой разброс  $\pm 0,5\%$ . Процедуры генерации углов различались для изотропного случая и для случая с выделенным направлением. Для случая с выделенным направлением углы генерировались напрямую с помощью псевдослучайных чисел с равномерным распределением  $\varphi \in [0, 2\pi]$  и  $\theta \in [0, \theta_{\max}]$ .

Для изотропного случая угол  $\theta_{\max}$  игнорировался, а вместо этого генерировались три случайные величины, равномерно распределенные в диапазоне  $[-1, +1]$ ,  $\vec{v}_r = (x_r, y_r, z_r)$  с ограничением  $|\vec{v}_r| \leq 1$ , а по ним вычислялись углы ( $\varphi, \theta$ ).

Порог перколяции  $p_c$  и другие пороговые величины искались следующим образом: сначала генерировалась сцена с плотностью  $p < p_c$ . Затем элементы пропорционально

увеличивались таким образом, чтобы плотность увеличивалась на величину порядка 1%. Процедура повторялась, пока не образовывался перколяционный кластер. Так получалось одно из значений порога перколяции. Этот процесс повторялся как минимум 60 раз. В результате получался набор значений ( $p_1, p_2, p_3, \dots$ ). Значения в нем распределены по нормальному закону [4] и  $p_c = \langle p_i \rangle$ .

### Порог перколяции $p_c$

Модель на основе параллелепипедов родственна задаче перекрывающихся сфер [4]. В нашей модели присутствуют такие параметры, как вытянутость и угловое распределение элементов.

С одной стороны, плотность характеризуется суммой объемов, которая ничего не говорит о форме элементов, с другой стороны,  $p_c$  зависит от формы элементов и углового распределения (рис. 2, 3). Чтобы понять зависимость  $p_c$  от формы, надо проанализировать, что изменяется на уровне отдельных элементов, когда они обретают вытянутость, сохраняя объем.

Вероятность пересечения двух сфер с радиусом  $r_0$  и расстоянием между центрами  $r$ , имеет форму ступеньки:  $P(r) = 1$  при  $r \leq 2r_0$ , и  $P(r) = 0$  в остальных случаях. Для параллелепипедов количество параметров больше: вероятность зависит не только от  $r$ , но и от вытянутости и углового распределения (рис. 4).

Если для куба вероятность еще напоминает ступеньку, то вытянутость сильно изменяет форму графика  $P(r)$ . На рис. 4 приведено сравнение  $P(r)$  для двух крайних случаев. В первом случае параллелепипеды ориентированы параллельно. Во втором – случайно. Третий график показывает  $P(r)$  для двух случайно ориентированных кубов того же объема, что у параллелепипедов.

Поведение графика  $P(r)$  обуславливает изменение эффективного радиуса захвата для вытянутых элементов. Высокая вероятность пересечения при больших радиусах для изотропной ориентации приводит к увеличению эффективного радиуса захвата и к уменьшению значения  $p_c$ . Для второго случая  $\theta_{\max} = 0$  наблюдается резкий спад  $P(r)$  при  $r > l_2$ , что уменьшает эффективный радиус захвата и тем самым увеличивает  $p_c$ . Таким образом, порог перколяции становится

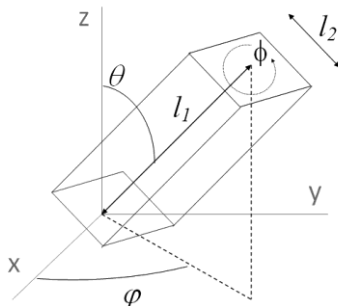


Рис. 1. Условные обозначения

ся зависимым от вытянутости элементов и от ориентации (см. рис. 2, 3).

В более ранних работах производились попытки найти пороги перколяции для случаев с произвольной формой базовых объектов. Однако наиболее ясно сильная зависимость порога от вытянутости элементов была показана в работе [8] на примере эллипсоидов вращения с фиксированным анизотропным угловым распределением.

Следует заметить, что при подсчете суммы объемов элементов не учитывался объем взаимных пересечений элементов. Он был оценен путем покрытия всего множества мелкой кубической решеткой. Разница между объемом, подсчитанным с помощью решетки, и суммой объемов элементов составила порядка 3 %.

Если элементы параллельны  $\theta_{max} = 0$ , то порог перколяции близок к порогу перекрывающихся сфер. Если максимальное отклонение от оси  $\theta_{max}$  увеличивается, то эффективный радиус захвата увеличивается, а порог протекания  $p_c$  уменьшается. Например, в случае изотропной ориентации при вытянутости  $K = 6$  порог перколяции в 2,7 раза отличается от порога перекрывающихся сфер, при  $K = 20$  – в 8,3 раза, а при  $K = 100$  – в 50 раз.

Данный эффект можно использовать для изменения свойств системы, если с помощью какого-либо воздействия можно управлять угловым распределением или вытянутостью элементов, оставляя концентрацию иголок на одном уровне.

### Динамика переноса в кластерах на качественном уровне

При моделировании переноса учитывался минимум эффектов, чтобы обозначить тенденции вблизи порога перколяции, связанные со структурой кластеров. В реальных задачах количество эффектов, влияющих на ход процесса, может быть намного больше [6].

Были рассмотрены кластеры, состоящие из кубов  $K = 1$ . Взаимное расположение элементов фиксировалось, а размеры элементов пропорционально перестраивались. Варьируя плотность заполнения в широких пределах, программа находила наибольший кластер при текущей плотности. При  $p < p_c$  образуются только маленькие кластеры.

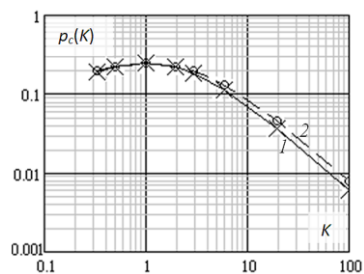


Рис. 2. Величина порога перколяции  $p_c$  от вытянутости элементов ( $K > 1$  – иголки,  $K < 1$  – таблетки,  $K = 1$  – кубы): 1 – анизотропная ориентация; 2 –  $\theta_{max} = 1$  радиан

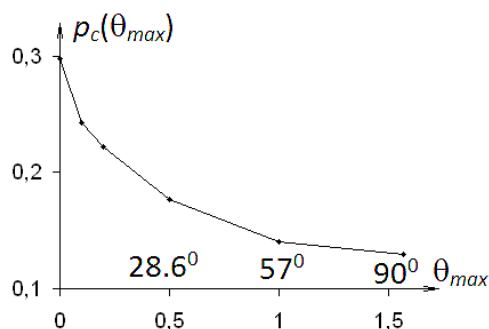


Рис. 3. Зависимость порога перколяции  $p_c$  от максимального отклонения элементов от оси  $\theta_{max}$  при вытянутости  $K = 5$ . Кластер касался только двух противоположных сторон

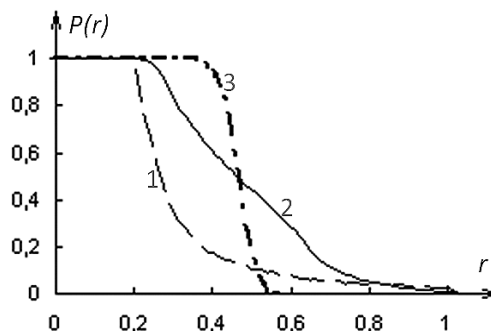


Рис. 4. Вероятность пересечения двух параллелепипедов в зависимости от расстояния между их центрами: 1 –  $l_1 = 1, l_2 = 0,2, \theta_{max} = 0$ ; 2 –  $l_1 = 1, l_2 = 0,2$  – изотропное распределение по углам; 3 – куб с таким же объемом  $l_1 = l_2 = 0,342$  – изотропное распределение по углам

При  $p = p_c$  образуется разреженный перколяционный кластер. При увеличении плотности этот кластер охватывает все больше и больше элементов, и его плотность становится все выше.

Чтобы исследовать динамику использовалась упрощенная схема в квазистационарном приближении: в первый момент времени загорелся один крайний элемент наибольшего кластера. На каждом последующем шаге загорались те элементы, которые имеют пересечение с элементами, воспламененными на предыдущем шаге. Таким образом, образовывался изрезанный фронт распространения горения. Считалось, что загоревшись, элемент равномерно выделяет энергию на протяжении всего последующего времени. Полное энерговыделение пропорционально количеству горящих в данный момент элементов.

Были рассмотрены следующие величины: степень сгорания  $F(p)$ , время полного возгорания кластера  $T(p)$  и относительная мощность  $W(p, t)$ .

$F(p)$  равна отношению объема элементов кластера к объему всех элементов модели.

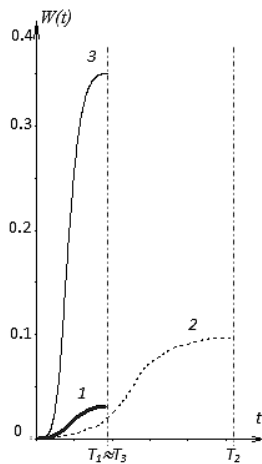


Рис. 5. Мощность  $W(t)$  при разных плотностях без учета тушения: 1 –  $p < p_c$ , маленький кластер; 2 –  $p = p_c$ , наиболее долгое горение; 3 –  $p > p_c$ , быстрое и интенсивное горение при высокой плотности кластера

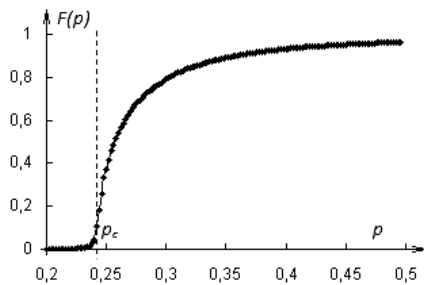


Рис. 6. Доля сгораемого вещества  $F(p)$

$T(p)$  вычислялась как количество шагов, необходимых для распространения горения в кластере. При  $p < p_c$  быстрое время переноса  $T(p)$  обусловлено маленьким размером кластера. При достижении порога кластер имеет наиболее извилистую и фрагментированную структуру, и время распространения максимально. При плотности  $p > p_c$  кластер стремится к равномерному сплошному заполнению промежутка, и его извилистость падает. При  $p = 1$  наблюдается сплошное заполнение, в котором фронт распространения имеет форму полусферы. Таким образом,  $T(p) \rightarrow T_0$  при  $p \rightarrow 1$ , где  $T_0 \sim \frac{L}{l}$

( $L$  – это длина промежутка, а  $l$  – средний размер элемента). Так как конкретные величины сильно зависят от соотношения длины промежутка и базового элемента  $\frac{L}{l}$ , то некоторые графики представлены только на качественном уровне без чисел.

$$W(t) = \frac{\sum v'_i}{\sum v_i},$$

где  $\sum v'_i$  – сумма объемов элементов, горящих в данный момент времени,  $\sum v_i$  – сумма всех элементов модели. Без учета тушения для  $W(p, t)$  наблюдалось характерное S-образное поведение графика (рис. 5). Степень сгорания на пороге перколяции  $F(p_c)$  получалась  $\approx 10\%$ , т. е. большая часть частичек оставалась безучастной (рис. 6).

В случае, когда время горения отдельного элемента  $\tau$  конечно, то через время  $\tau$  запускается процесс тушения, который повторяет процесс зажигания, только при этом распространяется фронт тушения. Энерговыделение в таком случае имеет вид  $W_\tau(p, t, \tau) = W(p, t) - W(p, t + \tau)$  (рис. 7). Так как динамика возгорания имеет более плавный характер, чем в среде вдали от порога перколяции, то этот эффект может использоваться для более мягкой передачи энергии механическим частям тепловой машины.

Чтобы охарактеризовать извилистость кластера, была рассмотрена длина кратчайшего пути внутри кластера  $L_{\text{path}}$  (рис. 8). Концами пути считались крайние элементы кластера – с минимальным и максимальным значениями  $x$ . Длиной пути  $L_{\text{path}}$  считалась длина ломаной линии, проходящей через центры элементов кластера.  $L_{\text{path}} \rightarrow L$  при

$p \rightarrow 1$ . На пороге перколяции длина пути максимальна и форма пути наиболее извилиста. График  $L_{path}(p)$  похож на график  $T(p)$ , поэтому о времени сгорания можно судить по длине минимального пути внутри кластера.

Наблюдаемые пики на графиках возникли вблизи  $p_c$ , поэтому нетрудно предположить, что при изменении вытянутости или ориентации происходит смещение  $p_c$  и пиков графиков.

### Фрактальные свойства кластеров

На данный момент не существует строгого определения фрактала. В нашем случае фракталом можно называть множество, имеющее самоподобную или приближенно самоподобную структуру. Общеизвестно, что перколяционные кластеры обладают более выраженным самоподобием, чем кластеры вдали от порога перколяции. Этот эффект наблюдается и в данной модели.

При вычислении фрактальной размерности  $D$  физических объектов чаще всего используется алгоритм подсчета кубов. Этот алгоритм похож на способ вычисления размерности Минковского без перехода к пределу [9]. Его суть состоит в том, что если множество начать покрывать совокупностью кубов с ребром  $\sigma \in [\sigma_{min}, \sigma_{max}]$ , то понадобится минимум  $N$  кубов. Наклон графика  $\ln(N(\sigma))$  от  $\ln(\sigma)$  равен размерности  $D$ . Этот наклон ищется методом наименьших квадратов, который скрывает возможную нелинейность этой зависимости.

В отличие от решетчатых моделей данная модель допускает плавное изменение  $\sigma$ . Поэтому стоит вопрос о выборе диапазона  $[\sigma_{min}, \sigma_{max}]$ . Если график имеет неравномерный наклон, то размерность  $D$  зависит от выбранного диапазона. Величина  $\sigma_{min}$  диктуется характерным размером элементов. При  $\sigma < \sigma_{min}$  покрывающие кубы начинают реагировать на трехмерную структуру составляющих элементов, и наклон графика начинает плавно стремиться к 3. Величина  $\sigma_{max}$  диктуется размером моделируемого промежутка. При  $\sigma_{max} > 0,1 \cdot L$  график имеет крупные ступеньки и случайные выбросы, которые можно объяснить, если внимательно рассмотреть геометрию процесса.

Наклон графика  $\ln(N(\sigma))$  от  $\ln(\sigma)$  может иметь разное значение в разных диапазонах  $\sigma$ .

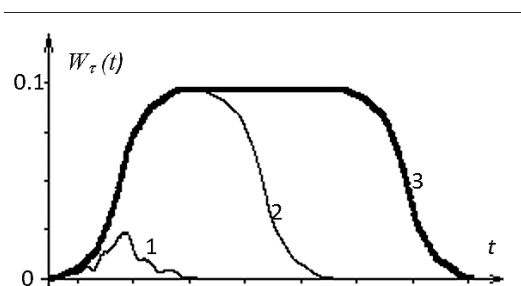


Рис. 7. Относительная мощность  $W_\tau(t)$  на пороге перколяции при разном времени горения отдельного элемента: 1 –  $\tau < T(p)$ , тушение начинается, пока развивается загорание; 2 –  $\tau = T(p)$ , тушение начинается сразу после окончания загорания; 3 –  $\tau > T(p)$ , некоторое время горят все элементы, на что указывает плоская часть графика

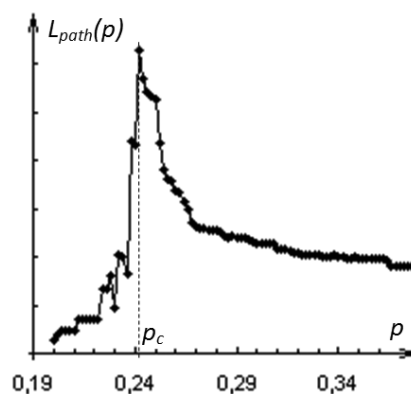


Рис. 8. Длина пути в кластере

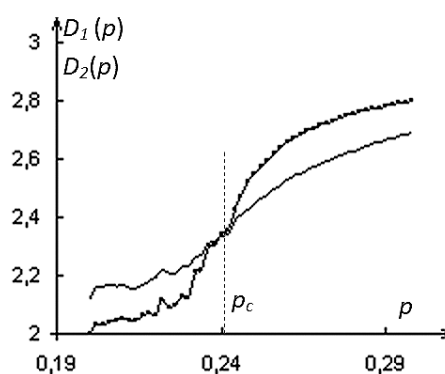


Рис. 9. Размерность наибольшего кластера  $D(p)$  вычисленная по разным диапазонам изменения ребра куба  $\sigma$ , покрывающего множества

Если исследуемое множество обладает выраженным самоподобием, то наклон графика будет стабильным в максимальном диапазоне  $[\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$ . Если самоподобие менее выражено, то график может иметь переменный наклон, и при выборе разных диапазонов  $[\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$  можно получать разные размерности для одного множества. Сравнивая диапазоны равномерного поведения графика, можно судить о степени самоподобия множества.

График (рис. 9) показывает, что наиболее выраженное самоподобие кластеров данной модели проявляется в районе порога перколяции. Для построения этого графика брался фиксированный набор точек, определяющих положение элементов. Путем пропорционального изменения размеров элементов плотность  $p$  изменялась в широком диапазоне. Для каждой плотности находился кластер с максимальным количеством элементов и для него вычислялись две размерности. Одна размерность  $D_1$  вычислялась при  $\sigma \in [\sigma_{\min 1}, \sigma_{\max 1}]$ , а вторая  $D_2$  – при  $\sigma \in [\sigma_{\min 2}, \sigma_{\max 2}]$ . Мы брали  $\sigma_{\min 1} = \sigma_{\min 2}$  и  $\sigma_{\max 1} = 2\sigma_{\max 2}$ . Равенство  $D_1(p_c) = D_2(p_c)$  говорит о том, что в районе порога перколяции график зависимости  $\ln(N(\sigma))$  от  $\ln(\sigma)$  ведет себя наиболее равномерно.

Кроме этого, вычислялась средняя размерность перколяционного кластера  $D_c$ . Для этого использовался тот же способ, что и для вычисления порога перколяции  $p_c$ , с той разницей, что вычислялась фрактальная размерность кластера. Перколяционный кластер генерировался 30 раз, и в результате получался набор размерностей ( $D_1, D_2 \dots$ ), по которому находилось среднее значение. Получилось  $D_c = 2,44 \pm 0,04$ . Это значение меньше, чем полученное на решетках в работе [10].

Так же вычислялись размерности плоских сечений. Геометрия сечений тоже имеет выраженную фрактальную структуру при максимальном диапазоне  $\sigma$ . Расчеты в пределах точности вычислений подтверждают утверждение Мандельброта [11], что фрактальная размерность 2-мерного сечения  $D_{\text{cut}}$  связана с размерностью объекта  $D_{\text{cut}} = D_c - 1$ .

## Выводы

Данная компьютерная модель позволяет исследовать ансамбли из большего количе-

ства вытянутых частиц, чем решетчатые модели. Вытянутые элементы образуют среду, в которой порог перколяции зависит от углового распределения элементов. Чем ориентация ближе к изотропному распределению, тем ниже порог перколяции. Также порог уменьшается с ростом вытянутости.

На пороге перколяции образуется разрезанный фрактальный кластер, скорость переноса в котором минимальна. При этом кратчайший путь внутри кластера имеет максимальную длину.

## Список литературы

1. *Тарасевич Ю. Ю.* Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. М., 2002.
2. *Essam J. W., Sykes M. F.* Critical Percolation Probabilities by Series Methods // *Physical Review*. 1964. Vol. 133. P. 310–315.
3. *Sahimi M.* Applications of Percolation Theory. L.: Taylor & Francis, 1992.
4. *Шкловский Б. И., Эфрос А. Л.* Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979.
5. *Ламажанов Х. Д., Рыбаков Д. А.* Перколяционная модель лавинно-стримерного пробоя // *Прикладная физика*. 2008. Т. 6.
6. *Гринчук П. С., Рабинович О. С.* Перколяционный фазовый переход при горении гетерогенных смесей // *Физика горения и взрыва*. 2004. Т. 40, № 4.
7. *Umemura A., Takamori S.* Percolation Theory for FLAME PROPAGATION in Non- or Less-Volatile Fuel Spray: A Conceptual Analysis to Group Combustion Excitation Mechanism // *Combustion and Flame*. 2005. Vol. 141, is. 4. P. 336–349.
8. *Yi Y. B.* Void Percolation and Conduction of Overlapping Ellipsoids // *Physical Review E*. 2006. Vol. 74, art. 031112. P. 1–6.
9. *Кроновер Р. М.* Фракталы и хаос в динамических системах. М., 2006.
10. *Bagnich S. A., Konash A. V.* Computer Investigation of the Percolation Processes in Two- and Three-Dimensional Systems with Heterogeneous Internal Structure. *Mensk*, 2002.
11. *Мандельброт Б.* Фрактальная геометрия природы. М., 2002.

**Kh. D. Lamazhapov, S. A. Prokhorov, D. A. Rybakov**

**PROPERTIES OF THREE-DIMENSIONAL CLUSTERS OF PERALELLEPIPEDS**

Computer model of three-dimensional contact clusters has been examined. Model elements have following attributes: position, oblongness and orientation. It has been shown that oblongness and orientation noticeably influence on percolation threshold. Increase of angular dispersion causes critical density decrease. Element aspect ratio increase causes critical density decrease as well. Shortest path length in cluster is maximal at the percolation threshold. Transfer rate is minimal at the percolation threshold.

*Keywords:* percolation threshold, clusters, prolate elements, angular dispersion, transfer process, path length.