

ДИСКРЕТНЫЕ МОДЕЛИ РЕАЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ

УДК 004.942

СОПУТСТВУЮЩАЯ КЛАСТЕРНАЯ СТРУКТУРА, ФОРМИРУЕМАЯ
АЛГОРИТМОМ ХАММЕРСЛИ — ЛИСА — АЛЕКСАНДРОВИЦА
ПРИ ГЕНЕРАЦИИ ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ КЛАСТЕРОВ

Д. В. Алексеев, Г. А. Казунина

*Кузбасский государственный технический университет им. Т. Ф. Горбачёва, г. Кемерово,
Россия*

Построен трёхмерный клеточный автомат, реализующий моделирование роста перколяционного кластера на простой кубической решётке по алгоритму Хаммерсли — Лиса — Александровица и впервые вводящий в рассмотрение сопутствующую кластерную структуру, формируемую из клеток, исключаемых из процесса роста. Сопутствующая кластерная структура промоделирована в широком интервале значений вероятности прорастания периметра $0,3117 < P < 0,6883$ на решётке размером $100 \times 100 \times 100$ и проанализирована с помощью функций распределения числа и массы кластеров сопутствующей структуры по размерам. В результате вычислительного эксперимента получены зависимости от вероятности прорастания периметра основных характеристик кластерной структуры, таких, как масса основного кластера, масса максимального кластера сопутствующей структуры, полная масса сопутствующей структуры, среднеквадратичные радиусы основного кластера и максимального кластера сопутствующей структуры, число кластеров сопутствующей структуры, отношение массы максимального кластера сопутствующей структуры к массе основного кластера. Установлено, что в интервале вероятности прорастания $0,3117 < P < 0,62$ в сопутствующей структуре формируется доминирующий кластер, среднеквадратичный радиус которого близок к среднеквадратичному радиусу основного кластера. При дальнейшем росте вероятности прорастания размеры доминирующего кластера резко уменьшаются, а при $P \leq 0,67$ наблюдается его распад.

Ключевые слова: клеточный автомат, модели кинетического роста, алгоритм Хаммерсли — Лиса — Александровица.

DOI 110.17223/ 20710410/47/10

CONCOMITANT CLUSTERS STRUCTURE CREATING
BY HAMMERSLEY — LEATH — ALEXANDROWICHZ ALGORITHM
FOR PERCOLATION CLUSTER GENERATING

D. V. Alekseev, G. A. Kazunina

*Kuzbass State Technical University named after T. F. Gorbachev, Kemerovo, Russia***E-mail:** dmitryalekseev@live.ru, gt-kga@yandex.ru

A three-dimensional cellular automaton implementing the simulation of growth of a percolation cluster on a simple cubic lattice according to the Hammersley — Leath —

Alexandrowichz algorithm was built for the first time introducing into consideration the concomitant cluster structure formed out of cells excluded from the growth process. The concomitant cluster structure is modelled in a wide interval of perimeter germination probability values $0,3117 < P < 0,6883$ on a $100 \times 100 \times 100$ lattice and analyzed by using the functions of distribution of number and mass of clusters of the accompanying structure by size. As a result of the computational experiment, there were obtained dependencies on the probability of perimeter germination for such basic characteristics of the cluster structure as the mass of the main cluster; the mass of the maximum cluster of concomitant structure; the total mass of the concomitant structure; mean-square radii of the main cluster and the maximum cluster of the concomitant structure; the number of clusters of concomitant structure; mass ratio of the maximum cluster of the concomitant structure to the mass of the main cluster. It has been established that in the interval of germination probability $0,3117 < P < 0,62$ in the concomitant structure, the dominant cluster is formed with the mean-square radius close to the mean-square radius of the main cluster. With a further increase in probability of germination, the size of the dominant cluster decreases sharply, and at $P \leq 0,67$ its decay is observed.

Keywords: *cellular automaton, kinetic growth models, Hammersley — Leath — Alexandrowichz algorithm.*

Введение

Моделирование разнообразных физических и физико-химических процессов клеточными автоматами, приводящее к фрактальным кластерным структурам, широко используется в настоящее время [1–8]. При этом значительное число работ посвящено исследованию перколяционных кластеров [1, 2, 9–11], для генерации которых используются алгоритмы типа Хаммерсли — Лиса — Александровица (далее — ХЛА) [1, 2, 5, 6, 9, 12, 13]. Такие алгоритмы формируют перколяционный кластер путём случайного проращивания периметра затравочной клетки (первый шаг) и периметра растущего кластера на дальнейших шагах. В ходе работы алгоритма на каждом шаге могут возникать клетки, которые не присоединяются к кластеру и исключаются из процесса роста на последующих шагах, то есть алгоритмы типа ХЛА генерируют не только основной кластер, но и сопутствующую кластерную структуру.

Если свойства основного ХЛА-кластера изучены подробно (см., например, [1, 2, 9]), то свойства сопутствующей кластерной структуры фактически не изучались. Только в [14] впервые рассмотрена сопутствующая кластерная структура на двумерных решётках (квадратной и треугольной). В то же время модели, включающие одновременно как основной ХЛА-кластер, так и сопутствующую кластерную структуру, могут оказаться полезными, например при моделировании химических реакций в твёрдой фазе, когда в неоднородной среде образуются два продукта реакции.

В настоящей работе изучены свойства сопутствующей кластерной структуры, образующейся при генерации трёхмерных перколяционных кластеров ХЛА-алгоритмом на простой кубической решётке (шесть ближайших соседей) в широком интервале $0,3117 < P < 0,6883$ вероятности проращивания периметра. Как известно [1], при формировании перколяционных кластеров на простой кубической решётке алгоритмом многократной маркировки для значений вероятности оккупации из указанного интервала перколяция происходит как по оккупированным, так и по свободным узлам.

1. Формализация и реализация алгоритма

Использованная в работе реализация ХЛА-алгоритма представляется в виде клеточного автомата, манипулирующего состояниями клеток, локализованных на узлах решётки. Алфавит клеточного автомата, описывающий возможные состояния клетки, задаётся вектором, формируемым парой булевых переменных:

$$A = \{(0;0), (0;1), (1;0), (1;1)\}.$$

Первая переменная указывает, занята клетка или свободна. Вторая — активна клетка (способна изменить состояние) или деактивирована (остаётся в неизменном состоянии). То есть на каждом шаге алгоритма клетка может находиться в одном из четырёх состояний:

- 1) (0;0) — клетка свободна и активна;
- 2) (1;0) — клетка занята и активна;
- 3) (0;1) — клетка свободна и деактивирована;
- 4) (1;1) — клетка занята и деактивирована.

Каждая клетка идентифицируется именем $(I; J; K)$ — тройкой координат; на множестве имён

$$M = \{(I; J; K) : I, J, K = 0, 1, \dots, N\}$$

задаётся шаблон соседства $T(I, J, K)$, определяемый типом решётки. Так, на простой кубической решётке шаблон соседства указывает для каждой клетки имена шести её ближайших соседей:

$$T(I, J, K) = \{(I-1; J; K); (I+1; J; K); (I; J-1; K); (I; J+1; K); (I; J; K-1); (I; J; K+1)\}.$$

Состояния клеток изменяются под действием локального оператора, выполняющего проращивание основного кластера по периметру, и реализуются следующей последовательностью шагов:

- 1) все клетки переводятся в состояние (0;0);
- 2) задаётся вероятность проращивания периметра P ;
- 3) переводом в состояние (1;0) фиксируется затравочная клетка (как правило, в центре решётки);
- 4) в случайном порядке перебираются ближайшие соседи затравочной клетки и с вероятностью P переводятся в состояние (1;0) или, с вероятностью $1 - P$, в состояние (0;1). При этом затравочная клетка переходит в состояние (1;1);
- 5) клетки, перешедшие в состояние (1;0), формируют периметр растущего кластера и способны изменять состояние своих ближайших соседей, находящихся в состоянии (0;0);
- 6) в случайном порядке перебираются ближайшие соседи клеток периметра и те из них, которые находятся в состоянии (0;0), переводятся или в состояние (1;0), или в состояние (0;1) по правилам шага 4, а все клетки периметра переводятся в состояние (1;1);
- 7) клетки, перешедшие в состояние (1;0), формируют обновленный периметр;
- 8) шаги 6, 7 повторяются до тех пор, пока:
 - а) рост кластера не остановится (при переборе ближайших соседей периметра не образовалось ни одной клетки в состоянии (1;0));
 - б) из клеток в состоянии (1;1) не сформировался кластер, соединяющий пару противоположных граней решётки;

- 9) из клеток в состоянии $(0;1)$ формируются кластеры при помощи алгоритма маркировки [6, 15].

Таким образом, в результате работы клеточного автомата формируются два набора клеток:

- 1) основной кластер (клетки в состоянии $(1;1)$);
- 2) сопутствующая кластерная структура (клетки в состоянии $(0;1)$).

При этом клетки в состоянии $(1;0)$ отсутствуют, но остаются клетки в состоянии $(0;0)$, незатронутые процессом роста.

Для непосредственного моделирования описанный вероятностный клеточный автомат реализован в Microsoft Visual Basic 2017 в виде однодокументного Windows-приложения с программным подключением Microsoft Excel в качестве клиента сохранения и обработки данных моделирования и является трёхмерной версией прототипа, использованного для моделирования сопутствующей кластерной структуры на двумерных решётках [15].

2. Результаты моделирования

Качественные различия характеристик кластерной структуры вблизи границ рассматриваемого интервала вероятности P прорастания периметра ($0,3117 < P < 0,6883$) видны уже из её визуального представления (рис. 1 и 2). Так, при 0,312 (рис. 1) чётко видна рыхлая структура основного кластера и наличие в сопутствующей кластерной структуре доминирующего (максимального) кластера, размеры которого многократно превышают размеры остальных кластеров. Напротив, при 0,688 (рис. 2) легко прослеживается плотная структура основного кластера и присутствие в сопутствующей структуре кластеров разнообразных размеров при отсутствии явно выделяющегося максимального кластера.

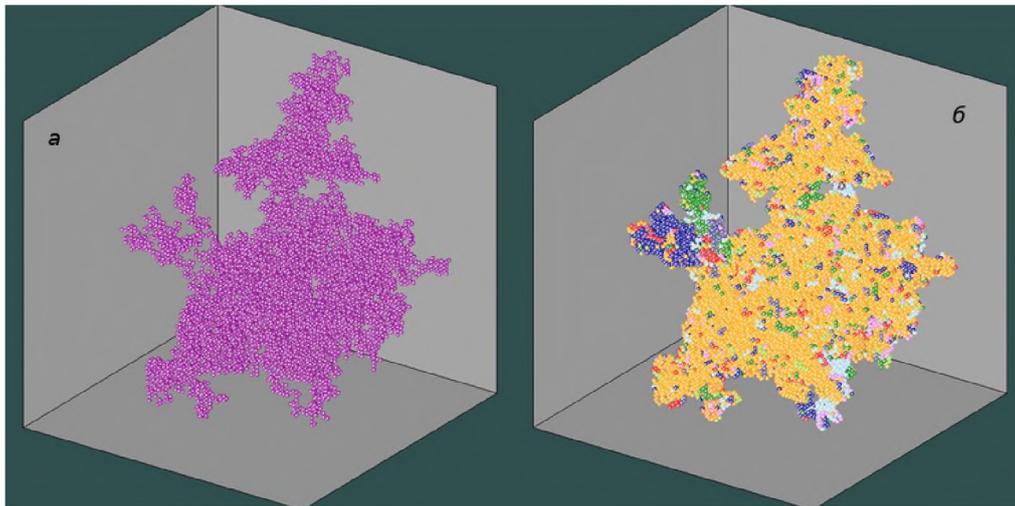


Рис. 1. Основной кластер (а) и сформировавшаяся в ходе его роста сопутствующая кластерная структура (б) для вероятности $P = 0,312$ на решётке $100 \times 100 \times 100$

Наиболее полную информацию о характеристиках сопутствующей кластерной структуры дают функции распределения числа и массы кластеров этой структуры по размерам (рис. 3).

Функции распределения строятся как зависимости числа N или общей массы (числа клеток) M кластеров, размер которых не превосходит заданного значения R . В нор-

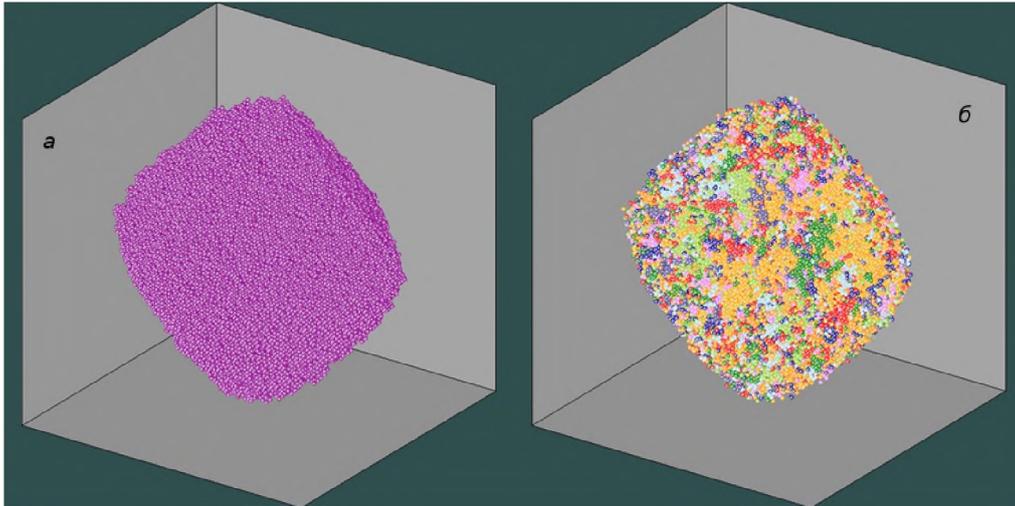


Рис. 2. Основной кластер (а) и сформировавшаяся в ходе его роста сопутствующая кластерная структура (б) для вероятности $P = 0,688$ на решётке $100 \times 100 \times 100$

мированных координатах размер нормируется на среднеквадратичный радиус максимального кластера R_{\max} , масса — на полную массу M_{total} , а число кластеров — на полное число кластеров N_{total} .

На функциях распределения, полученных при различных значениях вероятности прорастания периметра, чётко выделяются три группы кластеров:

- 1) кластеры, состоящие из одной клетки;
- 2) кластеры средних размеров (квазинепрерывный участок функций распределения);
- 3) один или несколько крупных кластеров.

Из функций распределения также извлекаются такие характеристики сопутствующей кластерной структуры, как масса (число клеток) максимального кластера и полная масса сопутствующей структуры, число кластеров сопутствующей структуры, число «одноклеточных» кластеров и т. п.

На рис. 4 и 5 приведены зависимости относительных вкладов кластеров трёх выделенных выше типов от вероятности прорастания периметра в полное число и полную массу сопутствующей структуры. Из рис. 4 видно, что доля одноклеточных кластеров $N_{\text{one}}/N_{\text{total}}$ лежит в интервале 60–80 %, проходя через максимум при $P \approx 0,45$, а доля кластеров средних размеров $N_{\text{mid}}/N_{\text{total}}$ лежит в интервале 20–40 %, проходя через минимум. Доля крупных кластеров пренебрежимо мала. Так, на решётке $100 \times 100 \times 100$ общее число кластеров при всех рассматриваемых значениях вероятности прорастания лежит в интервале от четырёх до семнадцати тысяч, тогда как число крупных кластеров не превосходит двух десятков.

Для распределения массы кластеров (рис. 5) картина противоположная. Для вероятности прорастания $0,3117 < P < 0,62$ подавляющая часть массы сопутствующей структуры, от 79 до 94 %, сосредоточена в максимальном кластере M_{\max} , масса кластеров средних размеров M_{mid} составляет 3–15 %, а масса одноклеточных кластеров M_{one} — от 3 до 7 %.

При дальнейшем увеличении вероятности прорастания вклад максимального кластера в общую массу сопутствующей структуры начинает резко падать, а вклад кластеров средних размеров — резко расти. Вблизи верхней границы интервала, начиная

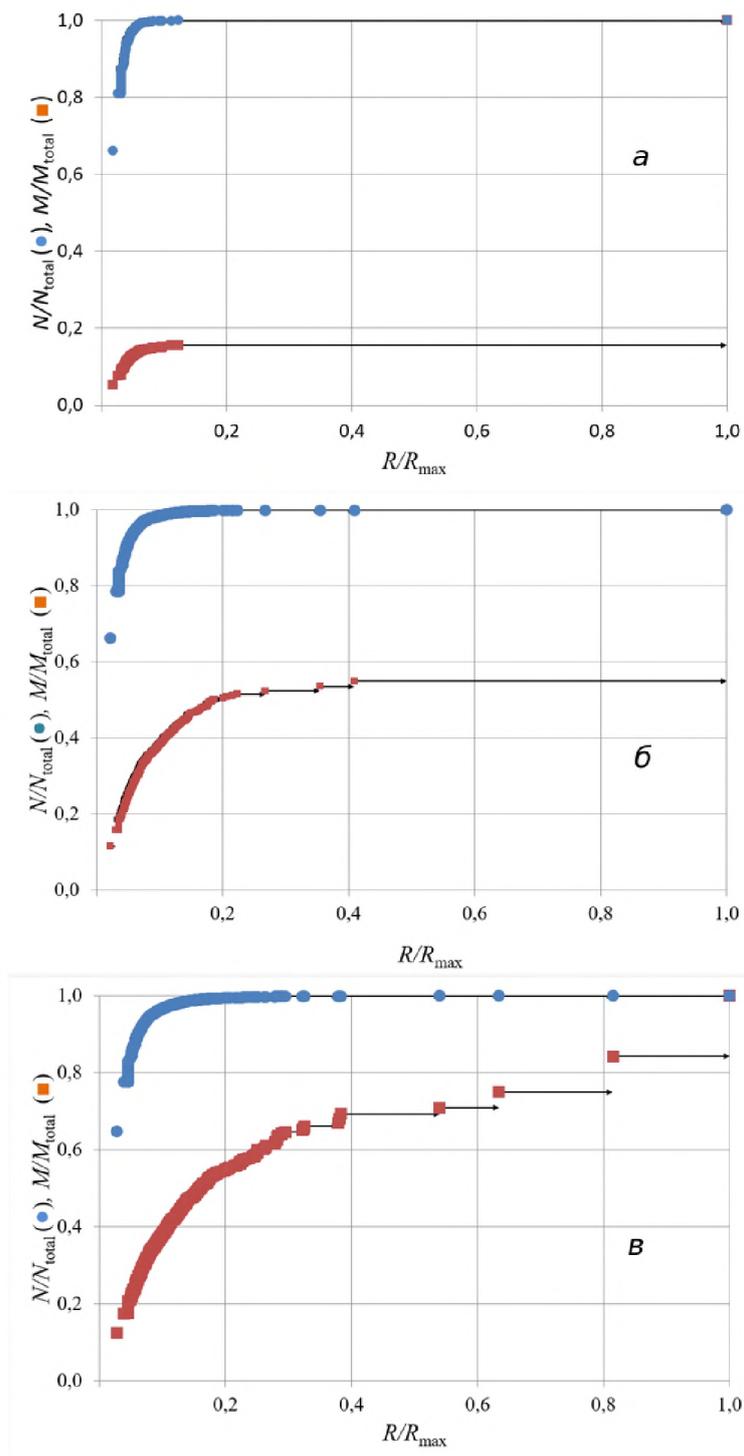


Рис. 3. Распределение числа и массы кластеров сопутствующей структуры по размеру для вероятностей $P = 0,32$ (а), $0,67$ (б) и $0,68$ (в)

с вероятности $P \approx 0,67$, когда максимальный кластер начинает распадаться, вклад крупных кластеров в общую массу становится меньше 50 %, а затем падает до 26 %. В то же время вклад в общую массу кластеров средних размеров резко растёт, превышая 60 % вблизи верхней границы интервала. Доля одноклеточных кластеров в общей массе на всём интервале изменения вероятности прорастания составляет от 3 до 13 %: сначала незначительно убывает с 6 до 3 %, а затем медленно возрастает до 13 %.

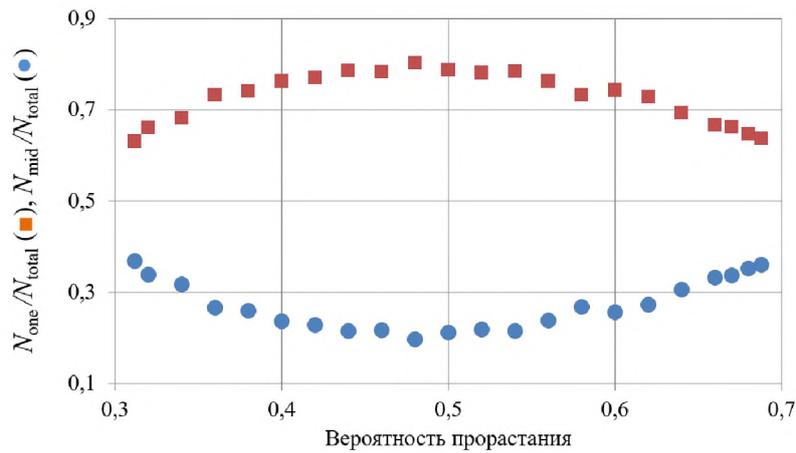


Рис. 4. Зависимость числа одноклеточных кластеров и кластеров средних размеров от вероятности F в нормированных координатах

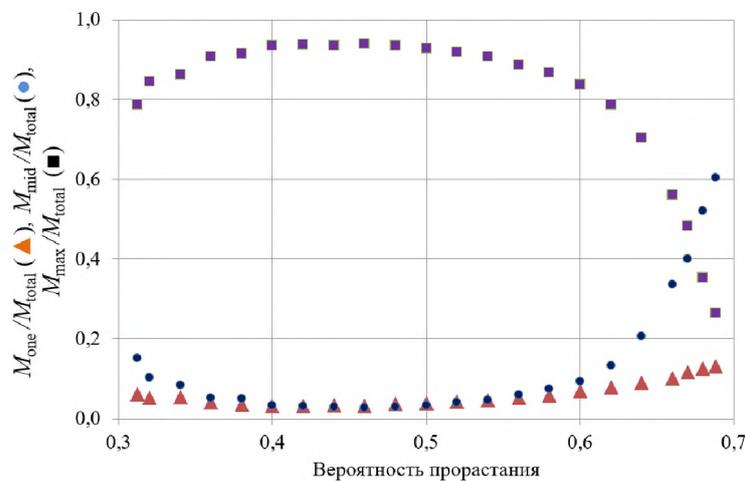


Рис. 5. Зависимость массы одноклеточных кластеров, кластеров средних размеров и максимального кластера сопутствующей структуры от вероятности F

На рис. 6–8 приведены зависимости от вероятности прорастания периметра дополнительных характеристик кластерной структуры:

- 1) масс основного кластера M_{hla} , максимального кластера M_{max} и всей сопутствующей структуры M_{total} , нормированных на число узлов решётки N_{latt} (рис. 6);
- 2) среднеквадратичных радиусов основного кластера R_{hla} и максимального кластера сопутствующей структуры M_{max} , нормированных на половину длины ребра решетки L (рис. 7);
- 3) числа кластеров сопутствующей структуры N_{total} , нормированного на число узлов решётки, и отношения массы максимального кластера сопутствующей структуры к массе основного кластера (рис. 8).

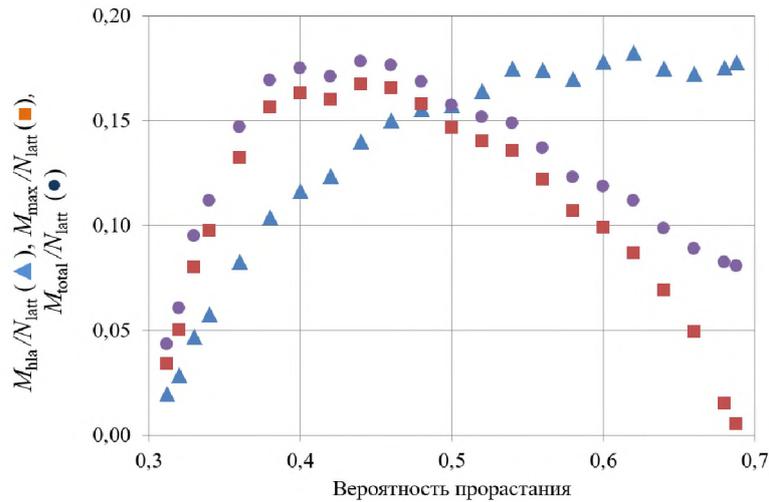


Рис. 6. Зависимости от вероятности P массы основного кластера, массы максимального кластера и полной массы сопутствующей структуры, нормированных на число узлов решётки

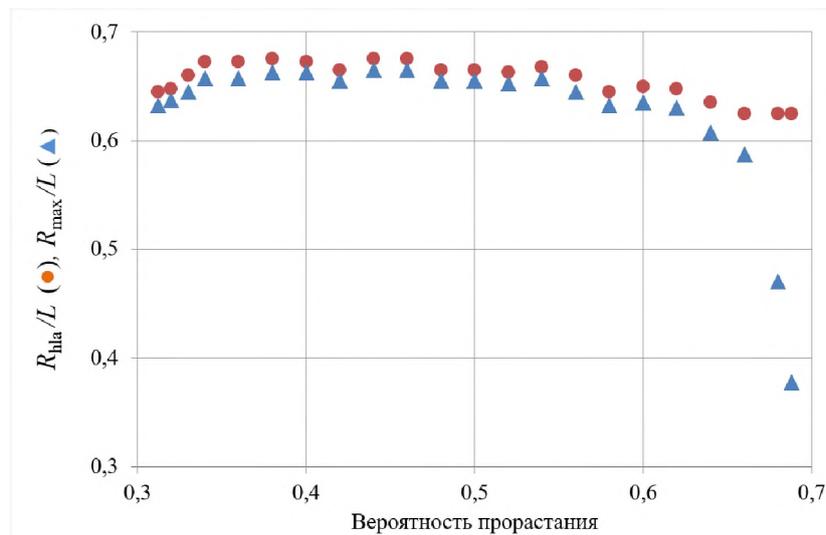


Рис. 7. Зависимость от вероятности P среднеквадратичных радиусов основного кластера и максимального кластера сопутствующей структуры

Из рис. 6 видно, что в интервале $0,312 < P < 0,55$ масса основного кластера монотонно возрастает, а далее остаётся практически неизменной (так проявляется конечность размеров решётки), тогда как полная масса и масса максимального кластера сопутствующей структуры сначала растут, проходя через максимум при $P \approx 0,45$, а далее убывают. При этом убывание массы максимального кластера идёт значительно резче, что является следствием его распада на более мелкие кластеры.

Следствием распада максимального кластера является и поведение его среднеквадратичного радиуса (рис. 7). Так, на интервале вероятности прорастания $0,3117 < P < 0,62$ среднеквадратичный радиус максимального кластера сопутствующей структуры составляет более 95 % от среднеквадратичного радиуса основного кластера и резко уменьшается при дальнейшем увеличении вероятности прорастания.

В то же время общее число кластеров сопутствующей структуры увеличивается примерно в 4 раза: сначала наблюдается резкий рост, затем небольшой спад и далее монотонный рост (рис. 8).

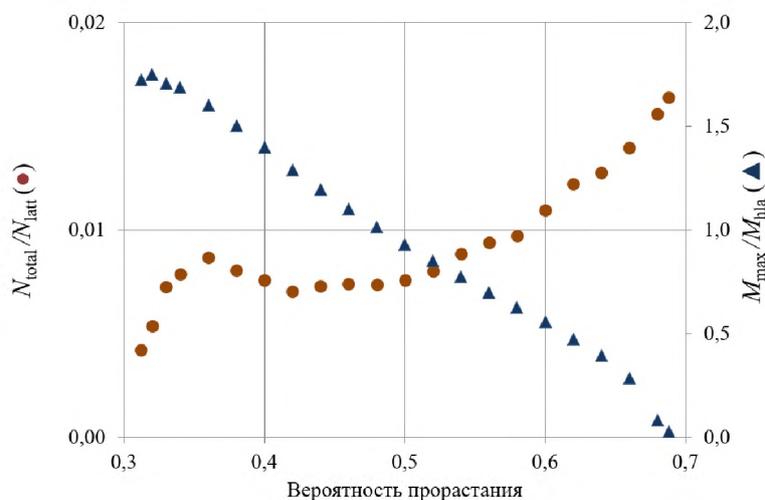


Рис. 8. Зависимости отношения масс (по правой оси) и полного числа кластеров сопутствующей структуры от вероятности прорастания периметра

Заключение

Построена и реализована трёхмерная клеточно-автоматная модель роста кластера по алгоритму Хаммерсли — Лиса — Александровица, включающая как основной перколяционный кластер, так и образующуюся в ходе его роста сопутствующую кластерную структуру. Она может оказаться полезной для построения моделей химических реакций в твёрдой фазе, когда в результате реакции образуются два продукта.

На основе анализа функций распределения числа и массы кластеров сопутствующей структуры по размерам получены зависимости от вероятности прорастания периметра следующих числовых характеристик кластерной структуры:

- 1) масс основного кластера и максимального кластера сопутствующей структуры, а также полной массы сопутствующей структуры;
- 2) среднеквадратичных радиусов основного кластера и максимального кластера сопутствующей структуры;
- 3) числа кластеров сопутствующей структуры и отношения массы максимального кластера сопутствующей структуры к массе основного кластера.

Установлено, что вблизи верхней границы рассмотренного интервала вероятности прорастания периметра при $P \geq 0,67$ наблюдается необратимый распад максимального кластера сопутствующей структуры на более мелкие кластеры, число которых лежит в пределах двух десятков.

ЛИТЕРАТУРА

1. Федер Е. Фракталы. М.: Мир, 1991. 258 с.
2. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: в 2-х частях. Ч. 2. М.: Мир, 1990. 390 с.
3. Бандман О. Л. Дискретное моделирование физико-химических процессов // Прикладная дискретная математика. 2009. № 3 (5). С. 33–49.

4. Бандман О. Л. Дискретная стохастическая модель просачивания жидкости через пористое вещество // Сибирский журнал вычислительной математики. 2018. № 1. С. 5–22.
5. Алексеев Д. В., Казунина Г. А. Моделирование кинетики накопления повреждений вероятностным клеточным автоматом // ФТТ. 2006. Т. 48. № 2. С. 255–261.
6. Алексеев Д. В., Казунина Г. А., Чередниченко А. В. Клеточно-автоматное моделирование процесса разрушения хрупких материалов // Прикладная дискретная математика. 2015. № 2 (28). С. 103–118.
7. Лобанов А. И. Моделирование клеточных автоматов // Компьютерные исследования и моделирование. 2010. Т. 2. № 3. С. 273–293.
8. Матюшкин И. В., Заплетина М. А. Обзор по тематике клеточных автоматов на базе современных отечественных публикаций // Компьютерные исследования и моделирование. 2019. Т. 11. № 1. С. 9–57.
9. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2018. 112 с.
10. Москалев П. В. Анализ структуры перколяционного кластера // ЖТФ. 2009. Т. 79. № 6. С. 2–7.
11. Москалев П. В. Структура модели перколяционных узлов на трехмерных квадратных решётках // Компьютерные исследования и моделирование. 2013. Т. 5. № 4. С. 607–622.
12. Alexandrowicz Z. Critically branched chains and percolation clusters // Phys. Lett. A. 1980. V. 80. No. 4. P. 284–286.
13. Leath P. Cluster size and boundary distribution near percolation threshold // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. No. 11. P. 5046–5055.
14. Алексеев Д. В., Казунина Г. А. Сопутствующая кластерная структура, образующаяся при генерации перколяционного кластера по алгоритму Хаммерсли — Лиса — Александровица // Актуальные направления научных исследований XXI века: теория и практика. 2018. № 6 (42). С. 18–20.
15. Алексеев Д. Введение в компьютерное моделирование физических задач: использование Microsoft Visual Basic. М.: ЛЕНАНД, 2019. 272 с.

REFERENCES

1. Feder J. Fractals. N.Y., Springer, 1988, 258 p.
2. Guld Kh. and Tobochnik Ya. Компьютерное моделирование в физике [Computer Modeling in Physics]. P. 2. Moscow, Mir Publ., 1990. 390 p. (in Russian)
3. Bandman O. L. Diskretnoe modelirovanie fiziko-khimicheskikh protsessov [Discrete models of physical-chemical processes]. Prikladnaya Diskretnaya Matematika, 2009, no. 3 (5), pp. 33–49. (in Russian)
4. Bandman O. L. A discrete stochastic model of water permeation through a porous substance: parallel implementation peculiarities. Numer. Analys. Appl., vol. 11, iss. 1, pp. 4–15.
5. Alekseev D. V. and Kazunina G. A. Modelirovanie kinetiki nakopleniya povrejdenii veroyatnostnim kletochnim avtomatom [Modeling the of damage accumulation of probabilistic cellular automata]. Fizika Tverdogo Tela, 2006, vol. 48, no. 2, pp. 255–261. (in Russian)
6. Alekseev D. V., Kazunina G. A., and Cherednichenko A. V. Kletochno-avtomatnoe modelirovanie prozessa razrushetiya hrupkih materialov [Cellular automaton simulation of the fracture process for brittle materials]. Prikladnaya Diskretnaya Matematika, 2015, no. 2 (28), pp. 103–118. (in Russian)
7. Lobanov A. I. Modelirovanie kletochnykh avtomatov [Model of cellular automata]. Computer Research and Modeling, 2010, vol. 2, iss. 3, pp. 273–293. (in Russian)

8. *Matyushkin I. V. and Zapletina M. A.* Obzor po tematike kletochnikh avtomatov na baze sovremennykh otechestvennykh publikatsiy [Review on the subject of cellular automata on the basis of modern Russian publications]. *Computer Research and Modeling*, 2019, vol. 11, no. 1, pp. 9–57. (in Russian)
9. *Tarasevich Yu. Yu.* Perkolyaciya: teoriya, prilozheniya, algoritmi [Percolation: theory, applications, algorithms]. Moscow, Librokom Publ., 2018. 112 p. (in Russian)
10. *Moskalev P. V.* Analiz struktury perkolyazionnogo klastera [Analysis of the percolation cluster structure]. *J. Tehnicheskoj Fiziki*, 2009, vol. 79, no. 6, pp. 2–7. (in Russian)
11. *Moskalev P. V.* Struktura modeli perkolyazionnih uzlo na trehmernih kvadratnix rehsetkah [The structure of site percolation models on three-dimensional square lattices]. *Computer Research and Modeling*, 2013, vol. 5, no. 4, pp. 607–622. (in Russian)
12. *Alexandrowicz Z.* Critically branched chains and percolation clusters. *Phys. Lett. A*, 1980, vol. 80, no. 4, pp. 284–286.
13. *Leath P.* Cluster size and boundary distribution near percolation threshold. *Phys. Rev. B*, 1976, vol. 14, no. 11, pp. 5046–5055.
14. *Alekseev D. V. and Kazunina G. A.* Sopotstvuyushchaya klasterная структура, obrazuyushchayasya pri generatsii perkolyatsionnogo klastera po algoritmu Khammersli — Lisa — Aleksandrovitsa [Concomitant clusters structure creating by percolation cluster generating Hammersley — Leath — Alexandrowichz algorithm]. *Aktualnie Napravleniya Nauchnih Issledovaniy XXI Veka: Teorya i Praktika*, 2018, no 6 (42), pp. 18–20. (in Russian)
15. *Alekseev D. V.* Vvedenie v kompyuternoe modelirovanie fizicheskikh zadach: ispolzovanie MicrosoftVisualBasic [An Introduction to Computer Simulation Physical Systems: Using MicrosoftVisualBasic]. Moscow, LENAND Publ., 2019. 272 p. (in Russian)