УДК 004:519.688:519.2:51.72

АЛГОРИТМЫ ДИСПЕРГИРОВАНИЯ ЧАСТИЦ В НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СРЕДЕ

Бузмакова М.М., Русаков С.В.

ФГБОУ ВО «Пермский государственный национальный исследовательский университет», Пермь, e-mail: mariya_nazarova@mail.ru, rusakov@psu.ru

В данной статье предложены и исследованы два алгоритма диспергирования частиц в неупорядоченной среде. Неупорядоченная среда представлена континуальной перколяционной моделью, в которой частицы – непересекающиеся сферы одинакового размера с радиусом R, упакованные в куб линейным размером L. В первом алгоритме диспергирования, если частица имеет пересечение с другими ранее упакованными частицами, она отклоняется. Во втором алгоритме диспергирования, если частица имеет пересечение с другими ранее упакованными частицами, то происходит поиск другого ее положения в неупорядоченной среде, и если такое положение не найдено, то частица отклоняется. Для генерации случайных чисел – координат центров сферы – используется алгоритм «Вихрь Мерсенна». Для обоих алгоритмов диспергирования была произведена оценка равномерности распределения частиц в неупорядоченной среде с помощью пяти различных критериев. По четырем критериям оба алгоритма эквивалентны. Критерий типа Колмогорова – Смирнова показал, что предпочтительнее использовать второй алгоритм диспергирования частиц. Таким образом, структура неупорядоченной среды, полученная вторым алгоритмом диспергирования частиц, более однородна, чем структура, полученная первым алгоритмом.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, неупорядоченная среда, диспергирование частиц, теория перколяции, теория вероятности, математическая статистика

THE ALGORITHMS OF THE PARTICLES DISPERSION IN THE DISORDERED MEDIUM

Buzmakova M.M., Rusakov S.V.

Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education Perm State National Research University, Perm, e-mail: mariya_nazarova@mail.ru, rusakov@psu.ru

In this paper, two algorithms for the particles dispersion in the disordered medium is proposed and investigated. Disordered medium presented by the continuum percolation model – the packing particles in the finite system. The particles are spheres of the equal size with the radius r, packed in the cubic this the linear dimension L. The spheres cannot intersect. In the first algorithm for the particles dispersion, if the particle is having overlap with other previously distributed particles, then the particle is rejected. In the second algorithm for the particles dispersion, if the particle is having overlap with other previously distributed particles then the search of another position in the environment occurs, and if it is not found, then the particle is rejected. To generate random numbers – the coordinates of the sphere's centers – the algorithm «Mersenne Twister» is used. For both algorithms, the distribution uniformity assessments are conducted using the five criteria. By four criteria, the distributions, obtained by both algorithms, are equivalent. The Kolmogorov-Smirnov test showed that it is preferable to use the second algorithm for the particles dispersion. Thus, the structure of the disordered medium, obtained by the second algorithm for the particles dispersion, is more homogeneous than the structure, obtained by the first algorithm.

Keywords: the computer modeling, the disordered medium, the particles dispersion, the percolation theory, the theory of probability, the mathematical statistics

При моделировании структуры неупорядоченной среды успешно используются методы теории перколяции и теории фракталов. Простая задача теории перколяции имеет следующий вид: дана решетка, состоящая из проводящих и непроводящих узлов (распределение которых случайно), в которой p – концентрация проводящих узлов и $(1 – p)$ – концентрация непроводящих узлов. Найти такую минимальную концентрацию p, при которой существует путь по проводящим узлам через всю решетку. Такую концентрацию p называют порогом перколяции (протекания). Свойства перколяционной системы кардинально изменяются при переходе через порог перколяции.

Теория перколяции имеет два основных направления исследований: геометрическое и физическое. Геометрическая часть теории перколяции исследует вопросы структуры, статистики, связности конечных и бесконечных кластеров в пространствах различной мерности, физическая часть теории перколяции исследует различные физические процессы. Перколяционные модели бывают решеточными и континуальными. Континуальные перколяционные модели позволяют получать более точные результаты исследования структуры и свойств неупорядоченных сред.

В настоящей работе исследована геометрическая структура неупорядоченной среды, которая представлена континуальной перколяционной моделью. Важным фактором при моделировании структуры неупорядоченных сред является равномерное распределение частиц. Исследователи используют различные генераторы случайных чисел для получения распределений частиц, и чаще всего полученные распределения даже не проверяются на равномерность или проверяются каким-либо одним стандартным способом математической статистики. Равномерность таких распределений остается под большим вопросом. Более того, до сих пор не существует универсального алгоритма диспергирования частиц, который гарантировал бы случайное равномерное распределение. В рамках рассмотренной модели предложены и исследованы два алгоритма диспергирования частиц. Первый алгоритм является стандартным и используется во множестве исследований, второй алгоритм предложен авторами настоящей работы впервые.

Материалы и методы исследования

При исследовании геометрической структуры неупорядоченной среды были использованы методы компьютерного моделирования, теории перколяции, теории вероятности и математической статистики.

Континуальная перколяционная модель неупорядоченной среды представлена в виде конечной системы, равномерно заполненной частицами. В роли частиц выступают сферы одинакового размера с радиусом r, упакованные в куб линейного размера L. Сферы пересекаться не могут. При моделировании использованы периодические граничные условия по всем трем направлениям. Для генерации случайных чисел – координат центров сфер – использован алгоритм «Вихрь Мерсенна», обладающий большим периодом, значения которого более чем достаточно для решения поставленной задачи [13]. Исследованы два алгоритма заполнения системы частицами. В рамках первого алгоритма генерируются поочередно три значения координат центра сферы. Если сгенерированная сфера не пересекается с ранее упакованными, то она принимается, иначе отвергается. Количество сфер определяется необходимым значением концентрации частиц неупорядоченной среды. В рамках второго алгоритма генерируются поочередно списки x-координат, y-координат и z-координат центров всех сфер. Далее из этих списков формируется структура, состоящая из непересекающихся сфер, количество которых также определяется необходимым значением концентрации частиц неупорядоченной среды. Если возникает ситуация, что из оставшихся координат не удается выбрать центр сферы, которая не пересекалась бы с ранее упакованными, то отвергается не три координаты, а одна, и генерируется новая. Если с вновь сгенерированной координатой также не нашлось нужной комбинации, генерируется вторая, потом третья и так далее, пока не будет достигнуто необходимое количество сфер. В обоих алгоритмах одинаковые критерии близости сфер, одинаковые параметры исследуемой системы, и задано максимальное число попыток упаковать очередную сферу, равное $L \times L \times L$ (то есть предполагается, что если $L \times L \times L$ раз подряд не удалось упаковать очередную сферу в куб, то свободного места для размещения элемента нет (явление джэмминг); можно было бы сделать это число еще большим, однако при увеличении числа попыток разница в количестве упакованных сфер не значительна, а временные затраты весьма значительны).

Так как выбор алгоритма диспергирования частиц является ключевым моментом при моделировании структуры неупорядоченной среды, то авторами было принято решение провести оценку равномерности полученного распределения сфер в кубе, используя пять критериев. Критерии включают в себя как оценку непосредственно закона распределения, так и проверку качества генератора псевдослучайных чисел: критерий χ-квадрат Пирсона [5]; второй способ основывается на том, что точки (центры сфер) считаются равномерно распределенными по некоторому объему V_L, если в любом элементарном объеме V_{L_i} $\left(V_{L_i} \subset V_L\right)$ количество точек n_i пропорционально величине этого объема [1]; третий способ основан на сведении трехмерной задачи к одномерной и включает в себя следующие действия (строится функция распределения среднего количества сфер от размера куба, где размер куба меняется от $L/10$ до L с шагом $L/10$ и по коэффициентам аппроксимирующей функции проводится оценка равномерности распределения сфер) [5]; четвертый способ проводит проверку генератора псевдослучайных чисел, используя оценку математического ожидания полученного распределения (генератор псевдослучайных чисел дает удовлетворительное распределение по заданному закону с вероятностью не менее 90%, если рассчитанное в результате компьютерного моделирования математическое ожидание не отклоняется от теоретического, более чем на 10%) [1]; критерий типа Колмогорова – Смирнова [6, 7].

Основной проблемой при применении критерия Пирсона является выбор оптимального количества малых кубиков, на которые необходимо разбить рассматриваемый куб для достижения объективной оценки равномерности распределения (так называемое оптимальное число интервалов). По этой проблеме проводятся исследования [3, 4, 8–12, 14, 15]. Предложено несколько формул для нахождения оптимального числа интервалов, но ни одна из них научно не обоснована. Выбор какой-либо формулы для нахождения оптимального числа интервалов гистограммы стоит за исследователем и несет субъективный характер. Авторами настоящей работы было решено модифицировать формулу Скотта определения оптимального числа интервалов [14], которая является более или менее научно обоснованной, удовлетворяет некоторым требованиям в рамках предложенной перколяционной модели. Авторами была получена следующая модификация формулы Скотта:

$$m = \left(\left[\sqrt[9]{\frac{2n}{3}}\right] + 1\right)^3. \qquad (*)$$

Результаты исследования и их обсуждение

При моделировании для обоих алгоритмов упаковки сфер были использованы следующие входные параметры: линейный размер куба $L = 50$, радиус сферы $r = 0{,}5$, количество сфер n варьировалось от 1000 (концентрация сфер составляет 0,42 %) до 60000 (концентрация сфер составляет около 25,13 %), количество испытаний $k = 100$ для каждого значения n, число интервалов m гистограммы для критерия Пирсона вычислялось по формуле (*). Соотношения размера сферы и куба достаточно для получения достоверных результатов, применимых для бесконечных систем. Также ний, равное 100, является достаточным для получения адекватных статистических данных с точностью 0,05 и вероятностью получения данной точности 0,99 [1].

Основным результатом моделирования является полученная зависимость количества отвергнутых сфер от доли заполнения системы частицами для обоих алгоритмов диспергирования (рис. 1).

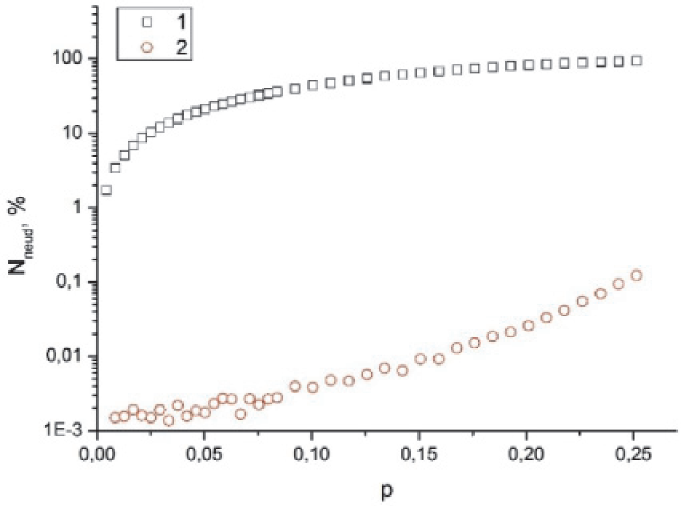

Рис. 1. Количество отвергнутых сфер при случайном распределении в куб при различных долях заполнения: 1 – первый алгоритм; 2 – второй алгоритм

применимость результатов моделирования для бесконечных систем основывается на применении периодических граничных условий при моделировании. Выбор значения концентрации от 0,5 до 25 % для моделирования основывается на следующих факторах. Во-первых, порог перколяции для жестких сфер соответствует значению 30–34 % концентрации (разные исследователи получают различные значения порога), порог перколяции жестких сфер с проницаемыми оболочками меняется от 5–6 до 30–34 % в зависимости от толщины проницаемой оболочки. Интерес при исследовании структуры свойств неупорядоченных сред представляют именно допороговые и пороговые концентрации. Во-вторых, при заполнении системы свыше 30 % содержания сфер получаются довольно плотные упаковки, а свыше 40–45 % часто возникает явление джэмминга (явление, при котором пустоты еще есть, но их размера недостаточно для размещения очередной сферы). Таким образом, временные затраты на моделирование велики, а результаты моделирования не представляют особого интереса, так как после порога перколяции система слабо меняет свои свойства. Число испыта-

На графике видно, что при первом алгоритме количество отвергнутых сфер растет значительно с увеличением доли заполнения и уже после 0,2 доля отвергнутых сфер превышает 90 %. Для второго алгоритма, наоборот, отвергается очень мало сфер и в рассмотренном диапазоне долей заполнений не превышает 1 %. Можно предположить, что распределение, полученное вторым алгоритмом диспергирования, удовлетворяет заданному закону распределения с большей надежностью, так как последовательность случайных чисел, представленная генератором, практически не меняется. Для доказательства данного предположения были проведены оценки равномерности распределения для обоих алгоритмов диспергирования. По критерию Пирсона получена зависимость отношения χ^2 / χ_t^2 от доли заполнения системы сферами. Зависимость аппроксимируется функцией вида $x(p) = Ap^b$, где $x = \chi^2 / \chi_t^2$, и коэффициенты принимают значения, представленные в таблице. Если $\chi^2 / \chi_t^2 \le 1$, то распределение можно считать равномерным с надежностью 0,99999 ($\chi_t^2(0{,}99999; k-1)$, где k – число интервалов гистограммы). По коэффициентам аппроксимирующих функций видно, что для обоих алгоритмов заполнения получены хорошие значения критерия, согласно которому полученные распределения удовлетворяют равномерному закону.

	The first algorithm	The second algorithm
A	0,0009 ± 0,0001	0,0021 ± 0,0003
b	–0,31 ± 0,04	–0,14 ± 0,05

Согласно второму, третьему и четвертому критериям по результатам моделирования также можно утверждать, что оба алгоритма диспергирования дают распределения, удовлетворяющие равномерному закону с одинаковой надежностью.

Согласно критерию типа Колмогорова – Смирнова получена зависимость $\lambda/\lambda_{кр}$ от доли заполнения системы частицами для обоих алгоритмов диспергирования, которая представлена на рис. 2 и 3. Полагается, что если $\lambda/\lambda_{кр} \leq 1$, то выборка с отвергнутыми сферами и контрольная выборка принадлежат одному закону распределения (равномерного), иначе не принадлежат. По графикам видно, что при малых значениях доли заполнения оба алгоритма диспергирования показывают хорошие результаты. Однако с ростом доли заполнения первый алгоритм ведет себя значительно хуже. Количество точек, в которых первый алгоритм дает неудовлетворительное распределение приблизительно в два раза больше точек, в которых второй алгоритм дает, неудовлетворительное распределение (соотношение 18:10), причем в трех из десяти точек второго алгоритма отклонение от 1 менее чем на 10 %. Кроме того, значения отклонений от 1 у первого алгоритма диспергирования значительно превышают значения отклонений у второго алгоритма. Из этого можно

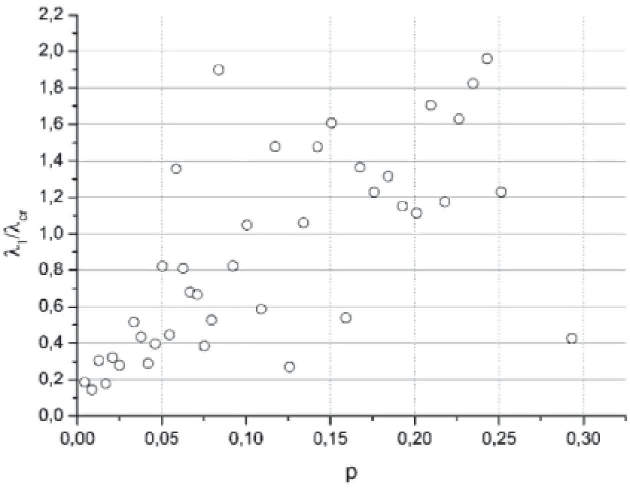

Рис. 2. Результаты двухвыборочной оценки распределения, полученного первым способом диспергирования, с помощью критерия типа Колмогорова – Смирнова

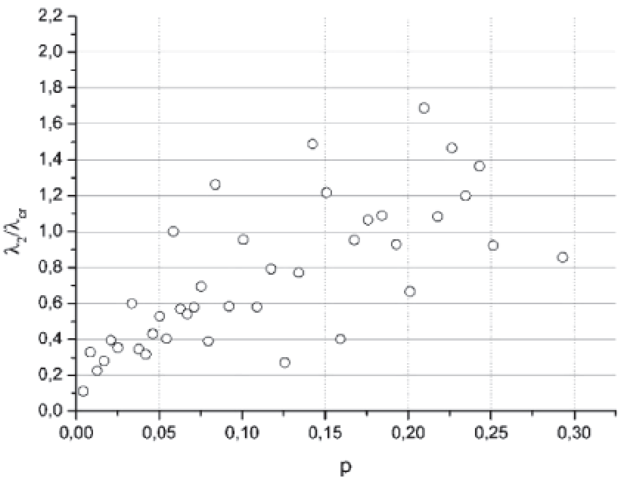

Рис. 3. Результаты двухвыборочной оценки распределения, полученного вторым способом диспергирования, с помощью критерия типа Колмогорова – Смирнова

сделать вывод, что по данному критерию предпочтительнее использовать второй алгоритм диспергирования. Критерий типа Колмогорова – Смирнова является одним из основных и наиболее широко используемых непараметрических методов, так как достаточно чувствителен к различиям в исследуемых выборках [6, 7]. Поэтому результаты оценки, полученные данным критерием, стоит считать наиболее достоверными.

Заключение

В настоящей работе были исследованы два алгоритма диспергирования частиц в неупорядоченной среде. В рамках первого алгоритма частицы, имеющие перекрытие с другими ранее распределенными частицами, отвергаются. В рамках второго алгоритма, для частицы, имеющей перекрытие с другими ранее распределенными частицами, ищется другое положение в среде, и если оно не найдено, то частица отвергается. Получены основные результаты:

1. Для обоих алгоритмов диспергирования частиц была получена зависимость количества отвергнутых сфер от доли заполнения системы частицами. При первом алгоритме количество отвергнутых сфер растет значительно с увеличением доли заполнения и уже после 0,2 доля отвергнутых сфер превышает 90%. Для второго алгоритма, наоборот, отвергается очень мало сфер и в рассмотренном диапазоне долей заполнений не превышает 1%.

2. Для обоих алгоритмов распределения были проведены оценки равномерности с помощью пяти критериев. По четырем критериям из пяти распределения, полученные обоими алгоритмами диспергирования, эквивалентны.

3. Критерий типа Колмогорова – Смирнова показал, что предпочтительнее использовать второй алгоритм диспергирования частиц.

Таким образом, структура неупорядоченной среды, полученная вторым алгоритмом диспергирования, более однородна, чем структура, полученная первым алгоритмом.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты РФФИ-ц № 15-01-07946-а, 14-08-96011 р_урал_а, 16-31-00064 мол_а).

Список литературы

1. Акимова Г.П., Пашкина Е.В., Соловьев А.В. Методологический подход к оценке качества случайных чисел и последовательностей // Труды ИСА РАН. – 2008. – Т. 38. – С. 156–167.

2. Бузмакова М.М. Методика определения оптимального числа интервалов гистограммы при оценке равномерности распределения частиц в неупорядоченной среде с помощью критерия Пирсона // Фундаментальные и прикладные проблемы механики, математики, информатики: сборник докладов всероссийской научно-практической конференции с международным участием. – Пермь, 2015. – С. 178–182.

3. Кобзарь А.И. Прикладная математическая статистика. – М.: Физматлит, 2006. – 816 с.

4. Лемешко Б.Ю., Чимитова Е.В. О выборе числа интервалов в критериях согласия типа χ^2 // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2003. – Т. 69. – С. 61–67.

5. Орлов А.И. Прикладная статистика: учебник. – М.: Экзамен, 2004. – 656 с.

6. Орлов А.И. Состоятельные критерии проверки абсолютной однородности независимых выборок // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2012. – Т. 78, № 11. – С. 66–70.

7. Орлов А.И. Непараметрические критерии согласия Колмогорова, Смирнова, Омега-квадрат и ошибки при их применении // Научный журнал КубГАУ. – 2014. – № 97 (03). – 29 с.

8. Орлов Ю.Н. Оптимальное разбиение гистограммы для оценивания выборочной плотности функции распределения нестационарного временного ряда // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2013. – № 14. – 26 с. – URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id = 2013-14.

9. Ченцов Н.Н. Статистические решающие правила и оптимальные выводы. – М.: Наука, 1972. – 520 с.

10. Akaike H. Information Theory as an Extension of the Maximum Likelihood Principle. In B.N. Petrov & F. Csaki (Eds.) // Second International Symposium on Information Theory. – Budapest: Akademiai Kiado, 1973. – P. 267–281.

11. Heinhold I., Gaede K.W. Ingeniur Statistic. – München: Wien, Springler Verlag, 1964. – 352 p.

12. Mann H.B., Wald A. On the Choice of number of Intervals in the Application of the Chi-Square Test // AMS. – 1942. – Vol. 13. – P. 306–317.

13. Matsumoto M. Mersenne twister: A 623-dimensionally Equidistributed Uniform Pseudorandom Number Generator // ACM Trans. on Modeling and Computer Simulations. – 1998. – Vol. 8, № 1. – P. 3–30.

14. Scott D.W. On Optimal and Data-Based Histograms // Biometrika. – 1979. – Vol. 66, № 3. – P. 605–610.

15. Sturges H. The Choice of a Class-Interval // J. Amer. Statist. Assoc. – 1926. – Vol. 21. – P. 65–66.

References

1. Akimova G.P., Pashkina E.V., Solovev A.V. Metodologicheskij podhod k ocenke kachestva sluchajnyh chisel i posledovatelnostej // Trudy ISA RAN. 2008. T. 38. pp. 156–167.

2. Buzmakova M.M. Metodika opredelenija optimalnogo chisla intervalov gistogrammy pri ocenke ravnomernosti raspredelenija chastic v neuporjadochennoj srede s pomoshhju kriterija Pirsona // Fundamentalnye i prikladnye problemy mehaniki, matematiki, informatiki: sbornik dokladov vserossijskoj nauchno-prakticheskoj konferencii s mezhdunarodnym uchastiem. Perm, 2015. pp. 178–182.

3. Kobzar A.I. Prikladnaja matematicheskaja statistika. M.: Fizmatlit, 2006. 816 p.

4. Lemeshko B.Ju., Chimitova E.V. O vybore chisla intervalov v kriterijah soglasija tipa χ2 // Zavodskaja laboratorija. Diagnostika materialov. 2003. T. 69. pp. 61–67.

5. Orlov A.I. Prikladnaja statistika: uchebnik. M.: Jekzamen, 2004. 656 p.

6. Orlov A.I. Sostojatelnye kriterii proverki absoljutnoj odnorodnosti nezavisimyh vyborok // Zavodskaja laboratorija. Diagnostika materialov. 2012. T.78, no. 11. pp. 66–70.

7. Orlov A.I. Neparametricheskie kriterii soglasija Kolmogorova, Smirnova, Omega-kvadrat i oshibki pri ih primenenii // Nauchnyj zhurnal KubGAU. 2014. no. 97 (03). 29 p.

8. Orlov Ju.N. Optimalnoe razbienie gistogrammy dlja ocenivanija vyborochnoj plotnosti funkcii raspredelenija nestacionarnogo vremennogo rjada // Preprinty IPM im. M.V. Keldysha. 2013. no. 14. 26 s. URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id = 2013-14.

9. Chencov N.N. Statisticheskie reshajushhie pravila i optimalnye vyvody. M.: Nauka, 1972. 520 p.

10. Akaike H. Information Theory as an Extension of the Maximum Likelihood Principle. In B.N. Petrov & F. Csaki (Eds.) // Second International Symposium on Information Theory. Budapest: Akademiai Kiado, 1973. pp. 267–281.

11. Heinhold I., Gaede K.W. Ingeniur Statistic. München: Wien, Springler Verlag, 1964. 352 p.

12. Mann H.B., Wald A. On the Choice of number of Intervals in the Application of the Chi-Square Test // AMS. 1942. Vol. 13. pp. 306–317.

13. Matsumoto M. Mersenne twister: A 623-dimensionally Equidistributed Uniform Pseudorandom Number Generator // ACM Trans. on Modeling and Computer Simulations. 1998. Vol. 8, no. 1. pp. 3–30.

14. Scott D.W. On Optimal and Data-Based Histograms // Biometrika. 1979. Vol. 66, no. 3. pp. 605–610.

15. Sturges H. The Choice of a Class-Interval // J. Amer. Statist. Assoc. 1926. Vol. 21. pp. 65–66.