



УДК 28.17.19:23

# МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ МЕТОДОМ МЕЛКОЗЕРНИСТОГО ПАРАЛЛЕЛИЗМА

Гергега А. Н., д.т.н., доцент  
Одесская государственная академия строительства  
и архитектуры, Украина

**Аннотация:** Пакет программ ОДНО предназначен для исследования моделей перколяционных кластеров вещества методом мелкозернистого параллелизма. Возможности пакета планируется использовать для исследования мезоскопической структуры широкого класса гетерогенных материалов.

**Annotation:** Software package ODNO is intended for the study of model percolation clusters substances by the method of fine-grained parallelism. Possibilities of the package are to be used for research mesoscopic structure of a wide class of heterogeneous materials.

**Ключевые слова:** фазовый переход, моделирование алгоритмов, мелкозернистый параллелизм, перколяционная система.

**Перколяционные кластеры в структуре вещества.** Раздел теории вероятностей, имеющий собственные приложения в естественных и инженерных науках, – перколяционная теория – на протяжении полувека изучает особенности генезиса и эволюции, а также свойства связанных областей [1,2].

Модели этой теории, называемой также теорией протекания, просты и наглядны; они нашли применение в широком круге научно-технических задач: исследовании композиционных материалов и белковых структур, создании фильтров и пористых тел, описании легированных полупроводников, исследованиях процессов полимеризации, изучении мировоззренческих вопросов и во многом другом [1-4].

После перколяционного бума, пришедшегося на семидесятые годы прошлого века, стало ясно, что теория протекания содержит столь широкий круг модификаций своих моделей, что «нести им числа»: в обзорах и монографиях, посвящённых перколяционной теории и смежным вопросам, описаны десятки способов генерации бесконечных кластеров [2,4,5].

В компьютерной реализации перколяционных задач для генерации модифицированных участков – элементов будущего перколяционного кластера – используют метод Монте-Карло. Изменение концентрации таких участков заметно модифицирует свойства матрицы, и в случае превышения критического значения, приводит к катастрофическому изменению свойств в результате качественного скачка в эволюции кластерной системы. Это соответствует тому, что в физическом теле возникает перколяционный кластер некоторой фазы, характерные размеры которого сравнимы с габаритами тела, корреляционная длина кластерной системы при этом расходится, меняется симметрия объекта и ряд его физико-химических и прочностных характеристик, то есть происходит структурный фазовый переход [1,2,5]. Результаты перехода могут различаться в зависимости от структуры и свойств бесконечного кластера, занимающего промежуточное положение между микро- и макрообразованиями и, по сути, определяющего новое состояние вещества.

В таких задачах одновременно изучается и кластерная система материала, и её влияние на объект в целом. Эти кластеры существенно изменяют процессы проводимости и массопереноса, определяют механическую прочность и коррозионную устойчивость, влияют на долговечность, приводят к аномальной диффузии и другим физико-химическим и механическим эффектам.

Перколяционный подход позволяет со сходных позиций изучать кинетику химических реакций и деструкцию, диффузию и осмос, передачу механических напряжений и другие явления, происходящие в материале. Теория даёт возможность пересмотреть установившиеся представления о распространении фронта различных процессов переноса: фронты оказываются «рваными», так как распространяются по перколяционному кластеру, а не в однородной матрице [6,7]. Интересно отметить, что бесконечные кластеры являются проводниками и внешних воздействий, включая агрессивные, и предопределяют взаимодействие материала с внешней средой.

Причиной аномальной диффузии являются, в частности, системы трещин и внутренних поверхностей раздела [7-10]. Это выделяет их в самостоятельный объект перколяционного анализа и позволяет рассматривать как источник изменений свойств материала.

Для исследования перколяционных структур могут быть использованы различные системы имитационного моделирования, в частности, – базирующиеся на алгоритмах мелкозернистого распараллеливания [11,12].

**ПИТАНИЯ ТЕОРИИ, МЕТОДИ І АЛГОРИТМИ ЕФЕКТИВНОГО АВТОМАТИЧНОГО  
УПРАВЛІННЯ ОБ'ЄКТАМИ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНОГО ТИПУ**

**Алгоритмы мелкозернистого параллелизма.** Формирование теории параллелизма шло одновременно с развитием последовательных вычислений, и связано в первую очередь с именем Дж. фон Неймана. Суть мелкозернистого распараллеливания составляет отыскание таких трансформаций исходной задачи, ее содержательного или аналитического описания (а иногда и постановки), которые превращают алгоритм решения в совокупность пространственно распределенных, параллельно выполняемых, достаточно примитивных массовых вычислительных процессов. Примеры таких трансформаций – ассоциативные алгоритмы решения числовых и логических задач, конструирование клеточных автоматов, конвейерных (систолических) и нейронных алгоритмов и другие. Привлекательность подхода объясняется возможностью отыскания оптимальных (например, по временным характеристикам) алгоритмов решения сложных, а также громоздких и трудоемких задач.

Имитационные модели исполнения алгоритмов и работы вычислителей с мелкозернистым параллелизмом (МЗП) используются для исследования физико-химических, биологических, информационных и социальных процессов, структур вычислительных систем [13,14]. К таким задачам относятся, в частности, задачи обработки сигналов и изображений, задачи математической физики, задачи на графах и другие. Более того, для некоторых задач решение возможно только в рамках некоторой модели мелкозернистых вычислений, например, решение трудно формализуемых задач на нейронных сетях с использованием методов обучения. Практическая важность МЗП определяется тем, что он служит источником методов распараллеливания алгоритмов решения задач на современных многопроцессорных вычислительных системах, что многие и реальные, и гипотетические компьютерные спецпроцессоры являются устройствами с мелкозернистым (клеточным) параллелизмом.

Существует более двадцати систем имитационного моделирования МЗП-алгоритмов, характерной чертой которых является ориентация на работу клеточного автомата и его модификаций, и ни одна из них не дает возможности композиционных построений сложных моделей. Вместе с тем к МЗП-структурам относятся не только клеточные автоматы и их расширения, но и матричные и конвейерные (включая систолические) архитектуры, мультимикропроцессорные архитектуры, ассоциативные процессоры, клеточно-нейронные сети, однородные перестраиваемые вычислители и т.п. [15].

**Моделирование алгоритмов формирования перколяционных кластеров. Система WinALT.** Развитием реализации МЗП-алгоритмов является система WinALT [16], ключевые достоинства которой – возможность конструирования алгоритмов и структур с разнообразными видами МЗП, и визуальный подход в описании правил преобразований данных в моделях. Графическая оболочка системы позволяет исследователю пройти всю цепочку работы с моделью, от ее создания и наполнения данными, через отладку, до исполнения и получения конечных результатов. Оболочка дает возможность:

- создавать проект, представляющий модель;
- создавать в проекте произвольное количество окон с моделирующими программами и полотнами для работы с клеточными массивами;
- создавать и размещать на полотне любое количество произвольно расположенных клеточных массивов;
- загружать в проект существующее полотно;
- просматривать дерево всех объектов, добавленных в проект (окон, полотен и клеточных массивов), переходить к окну или полотну или редактированию при нажатии на соответствующее имя объекта;
- загружать и сохранять клеточный объект как файл в некотором формате, обеспечивая совместную работу с различными приложениями и системами моделирования;
- менять состояние отдельной клетки или состояния клеток в группах, инициализировать состояния клеток в группах псевдослучайными числами, копировать и перемещать состояния клеток группы как внутри одного клеточного объекта, так и между разными клеточными объектами;
- менять размер клеточного массива по всем осям, вставлять или удалять слой клеток по выбранной оси;
- менять режим отображения клеточного объекта, поворачивать, задавать положение клеточного объекта или группы клеточных объектов на полотне;
- давать имя части клеточного объекта, обеспечивая возможность работы с ней, как с полноценным клеточным объектом (создавать виртуальный клеточный массив);
- редактировать тексты программ, производить их синтаксическую раскраску, переходить от идентификатора в программе к редактированию соответствующего объекта данных;
- запускать и останавливать исполнение или отладку модели;
- вводить данные с помощью диалоговых окон, показывать содержимое объектов данных, осуществлять консольный вывод в любой момент исполнения модели;
- выводить сообщения об ошибках при компиляции программ в окне вывода компилятора, переходить от этих сообщений к соответствующим местам в программе;
- приостанавливать и возобновлять исполнение, производить пошаговое исполнение, наблюдать за стеком вызовов процедур, состояниями переменных и клеток в процессе отладки модели [16].



## ПИТАНИЯ ТЕОРИИ, МЕТОДИ І АЛГОРИТМИ ЕФЕКТИВНОГО АВТОМАТИЧНОГО УПРАВЛІННЯ ОБ'ЄКТАМИ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНОГО ТИПУ

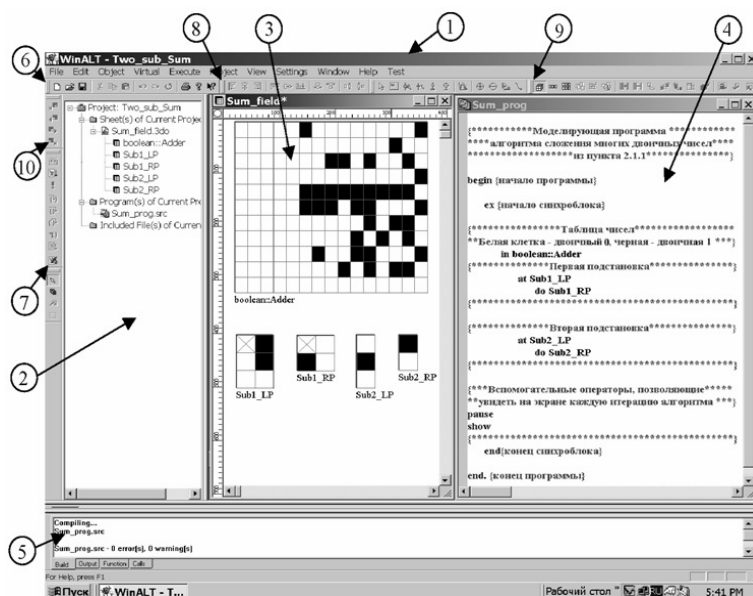
В настоящее время решается задача создания на базе системы WinALT программного комплекса ОДНО, который обеспечит конструирование и получение характеристик алгоритмов и структур с мелкозернистым параллелизмом в самой широкой трактовке этого термина, и в первую очередь, для исследования перколяционных задач [17].

В программном комплексе намечены многообразные возможности работы с массивами: при необходимости каждый из них будет содержать иерархию подмассивов, и одновременно являться частью супермассива. Между массивами будут действовать разные типы отношений; планируется, что любая клетка массива сама может быть массивом, и для нее будет определяться радиус взаимовлияния с соседними, направления действия, спектр свойств и другое. Кроме того, размерность массивов будет произвольной, а ее величина – одним из параметров исследования.

Комплекс предназначен для исследования перколяционных задач как таковых, а также для изучения кластерных систем в физических телах. При описании структуры и свойств перколяционных систем используется, примерно, два десятка атрибутивных параметров – статистических, геометрических и физических. К последним относятся, в частности, радиус гирации и степень анизотропии кластера, размерности Реньи, длина связности, кластерная мощность и индекс ее роста, лакуарность, энтропия и другие [18-21]. В качестве простейших примеров взаимосвязи характерных параметров материала со структурой перколяционной системы можно привести связь пористости тела с концентрацией так называемых «мертвых концов» перколяционных кластеров фаз, а также среднюю плотность тела и объем лакун в кластерах.

На рисунке представлен интерфейс базовой версии программы.

Комплекс ОДНО расширит возможности перколяционных моделей в задачах исследования строения и свойств материалов в мезоскопической асимптотике как вследствие реализации мультидисциплинарного подхода, так и за счет детального изучения больших массивов



- 1 – главное окно
- 2 – дерево проекта
- 3 – поле графических объектов
- 4 – текстовое окно
- 5 – информация об ошибках
- 6 – управление приложением
- 7 – создание графических объектов
- 8 – совместное редактирование нескольких объектов
- 9 – изменение размеров и размерности графических объектов
- 10 – управление процессами отладки и моделирования

**Рис.1. Интерфейс программного комплекса**

данных, полученных в физико-химических и компьютерных экспериментах; возможно, результаты работы комплекса будут иметь и эвристическую ценность.

### Литература

1. Эфрос А.Л. Физика и геометрия беспорядка. – М.: Мир, 1982 – 176 с.
2. Соколов И.М. Размерности и другие критические показатели в теории протекания. // УФН – 1986. – Т. 150, вып. 2. – С. 221-255.
3. Берлин А.А., Вольфсон С.А., Ошмян В.Г., Ениколопов Н.С. Принципы создания композиционных материалов. – М.: Химия, 1990. – 240 с.
4. Мандельброт Б. Фрактальная геометрия природы – М.: ИКИ, 2002. – 656 с.
5. Федер Е. Фракталы. – М.: Мир, 1991. – 254 с.

**ПИТАННЯ ТЕОРІЇ, МЕТОДИ І АЛГОРИТМИ ЕФЕКТИВНОГО АВТОМАТИЧНОГО  
УПРАВЛІННЯ ОБ'ЄКТАМИ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНОГО ТИПУ**

6. Войтович Д., Герега А.Н., Муссави Х., Мазур В.А. Распространение локальных криовоздействий во фрактальных моделях биологических объектов. // Холодильная техника и технология. – 1998. – №2. – С.34-39.
7. Выровой В.Н., Герега А.Н., Бровко И.В., Дорофеев А.В. Вариативная перколяция как метод изучения структуры материала. / Труды семинара «Структура и свойства строительных материалов». – Киев, 2007. – С. 29-36.
8. Выровой В.Н., Довгань И.В., Семёнова С.В. Особенности структурообразования и формирования свойств полимерных композиционных материалов. – Одесса, 2004. – 168 с.
9. Дорофеев В.С., Выровой В.Н. Технологическая поврежденность строительных материалов и конструкций. – Одесса, 1998. – 165 с.
10. Хакен Г. Информация и самоорганизация – М.: Мир, 1991 – 240 с.
11. Achasova S.M., Bandman O.L., Markova V.P., Piskunov S.V. Parallel Substitution Algorithm. Theory and Application. – Singapore: WS, 1994. – 220 p.
12. Ostapkevich M., Piskunov S. The Construction of Simulation Models of Algorithms and Structures with Fine-Grain Parallelism in WinALT. // Lecture Notes in Computer Science. – Heidelberg: Springer-Verlag, 2011. – V. 6873. – P. 192-203.
13. Тоффоли Т., Марголус Н. Машины клеточных автоматов. – М.: Мир, 1991. – 280 с.
14. Pachinski A. Cellular Automata. A Discrete Universe. – World Scientific. – Singapore, 2001. – 808 p.
15. Ostapkevich M.B., Piskunov S.V. Imitational simulation of fine-grain algorithms and structures // Bull. Nov. Comp. Center. – 2002. – №17. – P. 89-103.
16. Пискунов С.В., Остапкевич М.Б. Сайт компьютерной системы WinALT. – <http://winalt.sccc.ru/>.
17. Герега А.Н., Остапкевич М.Б. Система имитационного моделирования алгоритмов построения и исследования перколяционных структур в материалах. // Вестник Одесской гос. академии строительства и архитектуры. – 2012. – № 47, ч. 2. – С. 31-34.
18. Божокин С.В., Паршин Д.А. Фракталы и мультифракталы. – Ижевск: РХД, 2001. – 128 с.
19. Хайкин С.Э. Физические основы механики. – М.: Наука, 1962. – 770 с.
20. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. / Теоретическая физика, т. 5. – М.: Наука, 1976. – 584 с.
21. Герега А.Н. Об одном критерии относительной степени упорядоченности изображений. // Журнал технической физики. – 2010. – Т. 80, вып. 5. – С. 149-150.

**НОВОСТИ АВТОМАТИЗАЦИИ**

**Третья межотраслевая конференция «Автоматизация производства - 2012»** состоялась 27 ноября 2012 года в ГК «ИЗМАЙЛОВО» (г. Москва). В рамках программы конференции были представлены новейшие разработки для автоматизации промышленности, информационные технологии, ИТ, АСУТП, ERP, MES-системы, автоматизированные системы мониторинга и контроля технологических процессов, газоанализаторы, расходомеры, спектрометры, реле, датчики и многое другое.

Участие в конференции приняли более 80 представителей от ведущих промышленных предприятий стран СНГ, проектных и инжиниринговых компаний, разработчиков и производителей приборов КИП и систем АСУТП.

