

УДК 519.6

СПЛАЙН-ИНТЕРПОЛЯЦИЯ В ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ МОДЕЛЯХ

© 2012

Н.И. Лиманова, доктор технических наук,
профессор кафедры «Прикладная математика и информатика»

М.А. Тренина, старший преподаватель кафедры «Прикладная математика и информатика»
Тольяттинский государственный университет, Тольятти (Россия)

Ключевые слова: математическое моделирование; численные методы; сплайн-интерполяция; модели ячеечной перколяции.

Аннотация: В работе предложено использовать сплайн-интерполяцию для аппроксимации зависимостей вероятности перколяции от вероятности заполнения решетки для различных малых конечных систем. Полученные авторами сплайн-функции с погрешностью менее 15 % описывают поведение системы в области фазового перехода. Использование подобных функций позволяет увеличивать в 30 – 35 раз шаг изменения вероятности заполнения решетки в процессе проведения вычислительного эксперимента при той же допустимой погрешности вычислений. Предложенный подход дает возможность сократить объем вычислений более чем в 20 раз.

Математическое моделирование процессов фазообразования в малых металлических частицах (ММЧ), получаемых путем осаждения из газовой фазы или на начальных этапах процесса электрокристаллизации, представляет собой актуальную задачу. Моделирование фазообразования ММЧ является важным инструментом в исследовании структуры частиц, образующихся в таких процессах. В основу моделирования в данной работе положена теория перколяции [1, 2]. С использованием методов теории перколяции изучаются свойства микро-частиц на квадратной решетке. На рис. 1 представлены графики зависимостей вероятностей перколяции от вероятности случайного заполнения решеток, полученные

на основе вычислительного эксперимента. Значения вероятностей перколяции рассчитывались с помощью разработанного комплекса программ для перколяционных моделей на плоской квадратной решетке для полей размером 10×10 , 50×50 , 100×100 , 500×500 , 1000×1000 . В рамках вычислительного эксперимента каждое значение вероятности перколяции определялось на основе 1000 запусков программы для соответствующей вероятности случайного заполнения решетки с различными условными линейными размерами. Размер поля моделирования выбирался в зависимости от реализуемой модели: с размера 10×10 начинается нанометровая область, а размер 1000×1000 соответствует микродиапазону.

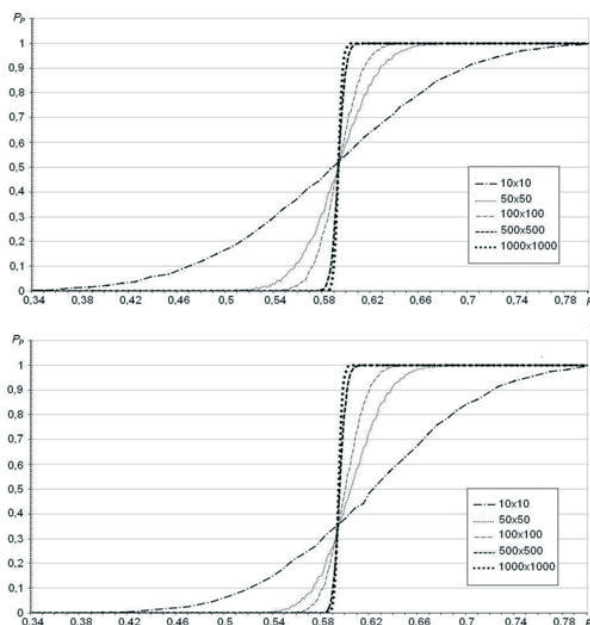


Рис. 1. Зависимости вероятностей перколяции от вероятности случайного заполнения для полей размером 10×10 , 50×50 , 100×100 , 500×500 , 1000×1000 для квадратной решетки.

На графиках зависимостей вероятностей перколяции для конечных решеток точка пересечения графиков соответствует пределу перколяции для бесконечной решетки. Полученное таким образом значение предела перколяции для квадратной решетки хорошо согласуется с теоретическими данными [1, 2]. Как видно из рис. 1, перколяция для конечных малых систем с разной вероятностью наблюдается в некотором диапазоне вероятностей заполнения соответствующих решеток. С физической точки зрения область вероятностной перколяции соответствует метастабильной области фазового перехода, которая тем шире, чем меньше размер рассматриваемой системы. Поведение системы во многом определяется зависимостью вероятности перколяции от вероятности случайного заполнения решетки. Для определения вида данной зависимости авторы предлагают использовать интерполяцию.

Интерполяционные формулы Лагранжа, Ньютона, Стирлинга и др. при использовании большого числа узлов интерполяции на всем отрезке $[a, b]$ часто приводят к плохому приближению из-за накопления погрешностей в процессе вычислений [3]. Кроме того, из-за расходимости процесса интерполяции увеличение числа узлов не обязательно приводит к повышению точности. Например, для решетки 10×10 при интерполяции с помощью формулы Стирлинга аппроксимирующая функция принимает значение, превышающее 30, около точки 0,8. Погрешность аппроксимации при этом превышает все допустимые пределы. Поэтому для снижения данной погрешности будем использовать интерполяцию сплайнами.

Сплайном называется кусочно-полиномиальная функция, определенная на отрезке $[a, b]$ и имеющая на этом отрезке некоторое количество непрерывных производных [3]. Преимущества интерполяции сплайнами по сравнению с обычными методами интерполяции – в сходимости и устойчивости вычислительного процесса.

Рассмотрим один из наиболее распространенных на практике случаев – интерполирование функции кубическим сплайном [4]. Пусть на отрезке $[0,3; 0,8]$ задана непрерывная функция $f(x)$. Введем разбиение отрезка:

$$0,3 = x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n = 0,8 \quad (1)$$

и обозначим $y_i = f(x_i)$, $i=0, 1, \dots, n$.

Сплайном, соответствующим данной функции $f(x)$ и узлам интерполяции (1) называется функция $s(x)$, удовлетворяющая следующим условиям:

- 1) на каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$, $i=0, 1, \dots, n$ функция $s(x)$, является кубическим многочленом;
- 2) функция $s(x)$, а также ее первая и вторая производные непрерывны на отрезке $[0,3, 0,8]$;
- 3) $s_i = f(x_i)$, $i=0, 1, \dots, n$.

На каждом из отрезков $[x_{i-1}, x_i]$, $i=0, 1, \dots, n$ будем искать сплайн-функцию $s(x) = s_i(x)$ в виде полинома третьей степени:

$$s_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + \frac{c_i}{2}(x - x_i)^2 + \frac{d_i}{6}(x - x_i)^3, \\ x_{i-1} \leq x \leq x_i, i = 1, 2, \dots, n.$$

Обозначив $h_i = x_i - x_{i-1}$ и опуская промежуточные выкладки, получим систему уравнений для определения коэффициентов c_i :

$$h_i c_i + 2(h_i + h_{i+1})c_i + h_{i+1}c_i = 6 \left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} \right) = 6 \left(\frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} \right), \quad (2)$$

с крайними условиями

$$c_0 = c_n = 0 \quad (3)$$

В силу трехдиагональности матрицы коэффициентов система (2) имеет единственное решение [5]. Для решения системы (2) в работе используется метод прогонки. Найдя коэффициенты c_i , остальные коэффициенты определим по явным формулам:

$$a_i = f(x_i), d_i = \frac{c_i - c_{i-1}}{h_i}, \\ b_i = \frac{h_i}{2}c_i - \frac{h_i^2}{6}d_i + \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i}, i=1, 2, \dots, n$$

При интерполяции результатов, полученных на решетках малых размеров (10×10), эффективно разбиение отрезка с равномерным шагом 0,1. При увеличении размеров решетки лучший результат достигается при применении неравномерного шага. На концах отрезка используется больший шаг, который уменьшается в середине отрезка. Для каждого размера решетки применяется различное изменение шага. Полученные сплайны для каждого вида решетки приведены в таблице 1.

На рис. 2 приведены графики сплайнов для решеток размером 10×10 , 50×50 , 100×100 , 500×500 .

Таблица 1. Сплайн-функции

Решетка 10×10			
Вероятность заполнения	Вероятность перколяции		Погрешность на отрезке, %
0,4	0,0232	$0,0,0232+0,48882(x-0,4)+3,91234(x-0,4)^2+13,0411(x-0,4)^3$	10,2
0,5	0,1604	$0,1604+2,74712(x-0,5)+18,67062(x-0,5)^2+49,19427(x-0,5)^3$	7,3
0,6	0,5516	$0,5516+4,3747(x-0,6)-2,39983(x-0,6)^2-70,21817(x-0,6)^3$	8,5
0,7	0,9084	$0,9084+2,19404(x-0,7)-19,4113(x-0,7)^2-56,7215(x-0,7)^3$	6,7
0,8	0,9984	$0,9984+0,25296(x-0,8)+64,7043(x-0,8)^3$	11,3
Решетка 50×50			
0,48	0	$0,0377(x-0,48)+0,292(x-0,48)^2+0,51349(x-0,48)^3$	
0,50	0,0012	$0,0012+0,15122(x-0,5)+10,53896(x-0,5)^2+341,51883(x-0,5)^3$	10
0,52	0,0048	$0,0048+0,64011(x-0,52)+75,238(x-0,52)^2+3122,73667(x-0,52)^3$	10
0,54	0,0272	$0,0272+2,21028(x-0,54)+166,7967(x-0,54)^2+6976,80333(x-0,54)^3$	6
0,56	0,1204	$0,1204+6,90376(x-0,56)+135,9009(x-0,56)^2+1752,50333(x-0,56)^3$	4
0,58	0,3236	$0,3236+12,00235(x-0,58)-76,1825(x-0,58)^2-10041,76667(x-0,58)^3$	3

Окончание таблицы 1			
Вероятность заполнения	Вероятность перколяции		Погрешность на отрезке, %
0,60	0,612	$0,612+14,36917(x-0,6)-446,454(x-0,6)^2-27537(x-0,6)^3$	1
0,62	0,8296	$0,8296+9,76598(x-0,62)-90,1815(x-0,62)^2-4278,01667(x-0,62)^3$	1
0,64	0,9604	$0,9604+2,71465(x-0,64)-180,086(x-0,64)^2+1244,91133(x-0,64)^3$	1
0,66	0,992	$0,991+1,11912(x-0,66)-74,0255(x-0,66)^2-4293,23333(x-0,66)^3$	1
0,68	0,9992	$0,9992+0,113(x-0,68)-2,1978(x-0,68)^2+249,9215(x-0,68)^3$	1
0,70	1	$1-0,01671(x-0,7)-0,25059(x-0,7)^2+192,12633(x-0,7)^3$	1
0,80	1	$1+0,00835(x-0,8)-0,83533(x-0,8)^3$	1
Решетка 100×100			
0,52	0	$0,01611(x-0,52)-0,10986(x-0,52)^2-0,16645(x-0,52)^3$	
0,54	0,002	$0,002+0,00282(x-0,54)-32,104(x-0,54)^2-1638,58167(x-0,54)^3$	12
0,56	0,0316	$0,0316+2,18557(x-0,56)-53,346(x-0,56)^2-7890,28333(x-0,56)^3$	11
0,58	0,24	$0,24+19,61515(x-0,58)+185,2623(x-0,58)^2-19625,33333(x-0,58)^3$	8
0,60	0,678	$0,678+20,27655(x-0,6)-400,982(x-0,6)^2-18063,66667(x-0,6)^3$	2
0,62	0,9536	$0,9536+6,49658(x-0,62)-519,0015(x-0,62)^2-9667,05(x-0,62)^3$	1
0,64	0,9984	$0,9984+0,715537(x-0,64)-109,1955(x-0,64)^2-4474,91667(x-0,64)^3$	1
0,66	1	$1+0,16094(x-0,66)-1,72433(x-0,66)^2-981,76(x-0,66)^3$	1
0,80	1	$1-0,08047(x-0,8)+4,10553(x-0,8)^3$	1
Решетка 500×500			
0,380	0	$4,55 \cdot 10^{-7}(x-0,38)-3,99 \cdot 10^{-5}(x-0,38)^2-0,00083(x-0,38)^3$	
0,460	0	$8,83 \cdot 10^{-5}(x-0,46)-0,00725(x-0,46)^2-0,16177(x-0,46)^3$	
0,540	0	$0,01714(x-0,54)-2,485(x-0,54)^2-31,38287(x-0,54)^3$	
0,580	0,0092	$0,0092+2,6704(x-0,58)+163,81418(x-0,58)^2-3653,54523(x-0,58)^3$	18
0,590	0,3048	$0,3048+64,92915(x-0,59)+2707,6823(x-0,59)^2-138829,5713(x-0,59)^3$	4
0,600	0,9324	$0,9324+31,34487(x-0,6)-6066,10986(x-0,6)^2-292459,7383(x-0,6)^3$	1
0,610	0,996	$0,9996+1,13193(x-0,61)-305,06827(x-0,61)^2-36290,85367(x-0,61)^3$	1
0,620	1	$1+0,10214(x-0,62)-8,84596(x-0,62)^2-5854,96817(x-0,62)^3$	1
0,700	1	$1+0,000526(x-0,7)-0,04554(x-0,7)^2-3,59627(x-0,7)^3$	1
0,780	1	$1+2,91 \cdot 10^{-6}(x-0,78)-0,00022(x-0,78)^2-0,01818(x-0,78)^3$	1
0,800	1	$1-1,45 \cdot 10^{-6}(x-0,8)+0,00363(x-0,8)^3$	1

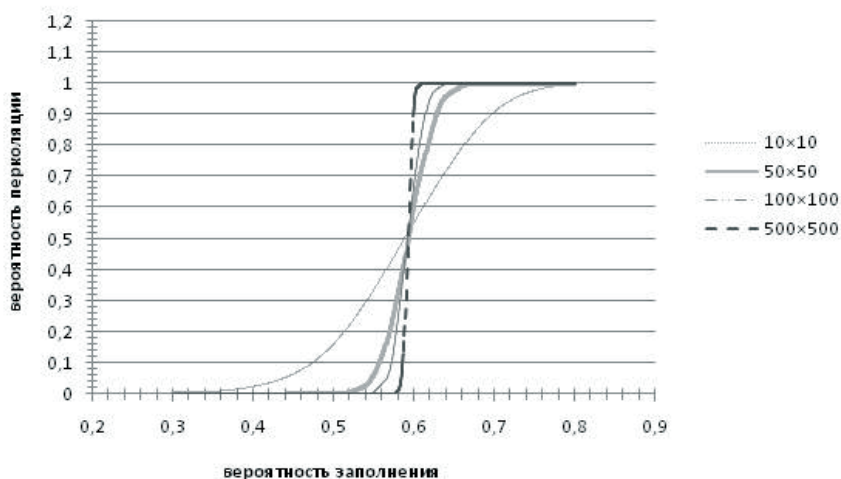


Рис. 2. Результат интерполяции сплайн-функцией полученных зависимостей вероятности перколяции от вероятности заполнения для решеток размером 10×10, 50×50, 100×100, 500×500.

Как видно из графиков, полученные в работе сплайн-функции с погрешностью менее 15% описывают поведение системы в области фазового перехода. Таким образом, использование сплайн-функций при проведении вычислительного эксперимента позволяет увеличить в 30–35 раз шаг изменения вероятности заполнения решетки при той же допустимой погрешности вычислений. Предложенный авторами подход дает возможность сократить объем вычислений более чем в 20 раз. Результаты двумерного моделирования могут быть использованы при исследовании процессов фазовых превращений в тонких пленках и жидких кристаллах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Stauffer D., Aharony A. Introduction to Percolation Theory. — London: Taylor & Francis, 1992.
2. Grimmet G. Percolation. — Berlin: Springer-Verlag, 1999.
3. Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978. — 508 с.
4. Самарский А.А. Введение в численные методы. — Изд. 3-е, стер. — СПб.: Лань, 2005. — 269 с.
5. Бахвалов Н. С. Численные методы. — Изд. 2-е. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. — 630 с.

SPLINE INTERPOLATION IN PERCOLATION MODELS

© 2012

N.I. Limanova, doctor of technical sciences, associate professor,
professor of the chair «Applied Mathematics and Computer Science»

M.A. Trenina, senior lecturer of the chair «Applied Mathematics and Computer Science»
Togliatti State University, Togliatti, (Russia)

Keywords: mathematical modeling; numerical methods; spline interpolation; models of cell percolation.

Annotation: In the paper it is proposed to approximate by spline interpolation the dependences of the percolation probability from probability of filling the lattice for a variety of small finite systems. Obtained by the authors spline-functions with an error of less than 15% describe the behavior of the system in the area of phase transition. Using these functions allows you to increase the step changes in the probability of lattice filling in the process of computing experiment in the same margin of calculations error. The proposed approach makes it possible to reduce the amount of calculations in more than 20 times.

УДК 519.688

ЕЩЁ ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К РЕШЕНИЮ ПСЕВДОГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ КОММИВОЯЖЁРА

© 2012

С.Б. Макаркин, аспирант

Тольяттинский государственный университет, Россия

Ключевые слова: задача коммивояжера; псевдогеометрический вариант задачи коммивояжера; геометрические методы решения; рандомизированные алгоритмы.

Аннотация: в настоящей работе изучаются методы восстановления координат городов на основании матрицы расстояний псевдогеометрической задачи коммивояжера и минимизации отклонения матрицы расстояний, рассчитанной на основе восстановленных координат городов от исходной матрицы расстояний. Также рассмотрены аппроксимационные методы расчёта координат городов в случаях, когда расстояния между ними не удовлетворяют условиям, необходимым для геометрической интерпретации задачи.