

Юрій Кривченко

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ САМООРГАНІЗАЦІЇ КЛАСТЕРНИХ СИСТЕМ: ЗАЛЕЖНІСТЬ СТРУКТУРИ ВІД ОСОБЛИВОСТЕЙ ГЕНЕЗИСУ

Актуальність теми дослідження. Перколяційні методи показують високу ефективність під час дослідження речовини, генезису й еволюції зв'язкових областей у матеріалах. У таких задачах вивчається і кластерна система фізичного тіла, і її вплив на об'єкт загалом. Вивчення структури та властивостей перколяційних кластерів дозволить досліджувати і прогнозувати поведінку об'єктів (твердих тіл) у різних умовах зовнішнього середовища, генезис їх утворень у часі.

Постановка проблеми. Практичне дослідження кластерних систем у твердих тілах пов'язано зі складністю і трудомісткістю експериментів. Основні проблеми полягають у тому, що для отримання достовірної інформації про структуру і властивості необхідно синтезувати кластери із широким діапазоном параметрів і створити надійну систему їх діагностики.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. У статті наведено огляд останніх публікацій в українських і закордонних журналах, включаючи експериментальні й теоретичні роботи, що містять дослідження самоорганізованої критичності.

Виділення недосліджених частин загальної проблеми. У наведених дослідженнях розширюються можливості опису процесів генерації та еволюції кластерних систем у твердих тілах; міститься гіпотеза, що дозволяє істотно збільшити кількість варіантів кластероутворення.

Постановка завдання. Провести імітаційне моделювання кластероутворення із взаємодіючими елементами за допомогою методу Монте-Карло. Визначити залежності параметрів перколяційних систем, що самоорганізуються, від ступеня самоорганізації, довжини кореляції, швидкості генерації системи та інших параметрів. Отримати аналітичні вирази залежностей та значення відносної похибки.

Виклад основного матеріалу. Для вирішення задач, пов'язаних із практичним дослідженням кластерних систем, розроблено програмний комплекс моделювання кластероутворення, у якому імітується взаємодія кластер-кластер і кластер-частка. У моделі вирішується багатовимірною перколяційною задачею. Як алгоритм зростання кластерів використовується шлях послідовного нарощування заданої кількості часток.

Висновки відповідно до статті. Комп'ютерні розрахунки, проведені, зокрема, методом Монте-Карло, дають найбільш надійні передбачення властивостей перколяційних систем. У роботі отримані аналітичні вирази для залежностей потужності нескінченного кластера, радіус-вектора центра мас, ступеня анізотропії та фрактальної розмірності від відстані агрегації, від кількості часток, генерованих на кожній ітерації, та від кількості актів взаємодії між елементами кластерної системи.

Ключові слова: самоорганізована критичність; перколяційні задачі із самоорганізацією; структура кластера; взаємодія часток; кластероутворення; комп'ютерне моделювання.

Рис.: 2. Бібл.: 14.

Актуальність теми дослідження. Неминуча актуальність перколяційних методів дослідження речовини протягом останніх майже п'ятдесяти років пов'язана з ефективністю теорії протікання при розгляді великого спектра питань, що відносяться до генезису й еволюції зв'язкових областей у матеріалах. У таких задачах зазвичай вивчається і кластерна система фізичного тіла, і її вплив на об'єкт загалом.

Як добре відомо, для перколяційних явищ характерно існування якогось порогу, нижче якого зв'язність у системі обмежується розмірами малих кластерів, і лише при досягненні потужністю кластерної системи критичного значення, виникає область, що пронизує всю систему – нескінченний (перколяційний) кластер [1; 2].

Поблизу порога протікання нескінченний кластер – це фрактальна безліч, великомаштабна геометрія якого не залежить від властивостей середовища [1; 2]. Такий кластер містить різномасштабні лакуни, може бути вписаний у дробовий евклідовий простір, характеризується спектром розмірностей Реньї, зокрема, фрактальною розмірністю; володіє статистичною самоподібністю й іншими властивостями.

Перколяційні задачі із самоорганізацією (СОП) (англ. SOP – self-organized percolation) – невід'ємна складова теорії самоорганізованої критичності [3]. Поняття самоорганізованої критичності (СОК) (англ. SOC – self-organized critically), як відомо, введено в [4; 5], насамперед для осмислення зв'язку між локальною організацією та механізмом розвитку критичності, для дослідження взаємної обумовленості локальних динамічних правил і глобального еволюційного механізму, для можливого пояснення тенденції великих і складних систем спонтанно досягати критичних станів і реалізації в таких станах ступеневих кореляцій у часі та просторі.

До найбільш загальних закономірностей еволюції перколяційних систем зі взаємодіючими елементами відноситься існування в них нерівноважних квазістаціонарних станів, що виникають за рахунок багатомасштабних кореляцій у просторі й часі [6].

Достатньо різні за своєю фізичною природою, але споріднені за генезисом та структурою кластерні системи провокують явища і процеси, що значно впливають на властивості матеріалу. При зростанні концентрації елементів деякої з підсистем матеріалу може виникнути перколяційний кластер, що призводить до структурного фазового переходу, коли в матеріалі стрибкоподібно змінюється кореляційна довжина, з'являється виділений напрям, знижується симетрія об'єкта.

Залежно від фізичної природи перколяційного кластера це може призвести до виникнення аномальної дифузії, до ефектів зміцнення або до деструкції матеріалу, до появи спонтанної намагніченості у феромагнетиках, до переходу Мотта в домішкових напівпровідниках, зміни тепло- і вологемності тіла та ін. Вивчення структури та властивостей перколяційних кластерів дасть змогу досліджувати і прогнозувати поведінку об'єктів (твердих тіл) у різних умовах зовнішнього середовища, генезис їх утворень у часі, структуру композиційних матеріалів у проміжній асимптотиці.

Постановка проблеми. Практичне дослідження кластерних систем у твердих тілах пов'язано зі складністю і трудомісткістю експериментів. Основні проблеми полягають у тому, що для отримання достовірної інформації про структуру і властивості необхідно синтезувати кластери із широким діапазоном параметрів і створити надійну систему їх діагностики. У зв'язку з цим має сенс використовувати імітаційне і статистичне моделювання, причому найбільш надійні передбачення властивостей таких систем дають комп'ютерні розрахунки, проведені, зокрема, методом Монте-Карло.

Для вирішення задач, пов'язаних із практичним дослідженням кластерних систем, має бути створена надійна та точна комп'ютерна модель кластероутворення, у якій імітується взаємодія кластер-кластер і кластер-частка, і саме така система характерна для структури різних утворень у твердих тілах – сукупності часток, тріщин, структурних неоднорідностей, пустот, пор, меж розділу та ін.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Розглянемо декілька цікавих експериментальних і теоретичних робіт, що містять дослідження SOP.

У [7] методом чисельного моделювання досліджена геометрична структура мікроемульсій на площині. Встановлено, що взаємодія між частками призводить до утворення динамічної однорідної фрактальної структури мікроемульсії; за відсутності взаємодії між частками структура емульсії – однорідна. Показано також, що розмір неоднорідностей (радіус кореляції) залежить від концентрації часток у системі й максимальний при концентрації перколяційного переходу.

У [8] введено поняття килима Серпінського з гібридною (звичайно-нескінченною) розгалуженістю. Модифікація цього фракталу передбачає, що з'єднаними вважаються клітини або дотичні сторонами, або ті, які мають загальну вершину. У [8] для гібридного килима Серпінського Ренорм-перетворенням визначено поріг протікання, розраховані показники параметра порядку і довжини кореляції; крім того, із системи рівностей двопоказникового скейлінгу [9] отримано індекс, що визначає максимальний обсяг кінцевих кластерів, показники аналога теплоємності й середньої довжини кінцевого кластера.

На базі уявлення про килим Серпінського з гібридною розгалуженістю в [8; 10; 11] розроблена модель генезису й еволюції мереж взаємодіючих тріщин на поверхні твердих тіл. У припущенні, що створювані поля – визначальний фактор руху до критичності, у моделі аналітично, спираючись на уявлення про систему тріщин як автономну розподілену неконсервативну коливальну систему, а також чисельно – вирішуючи запропоновану в моделі систему рекурентних білінійних рівнянь, визначено силові поля, створювані полімасштабною мережею внутрішніх кордонів квадрата Серпінського на довільному кроці розбиття [8; 10].

Виділення недосліджених частин загальної проблеми. У [12] досліджено механізм росту перколяційних кластерів, в якому самоорганізація істотно впливає на кількість вузлів або зв'язків у фронті зростання агрегату, що моделюється. У процесі еволюції система спонтанно спадає на стаціонарний стан, який відповідає виникненню перколяційного кластера в завданні вузлів і зв'язків. Автори [12] припускають, що узагальнення цього підходу на інші основні правила і геометрії решітки можуть пояснити властивості перколяційних структур у ряді невпорядкованих систем, наприклад, у полімерах, а також описувати стан кровоносних судин біологічних об'єктів.

Описані в [13] експериментальні результати для ковалентного скла свідчать про існування проміжної фази, виникнення якої пов'язують із самоорганізацією матеріалу при протіканні процесів, що мінімізують її внутрішнє напруження. У запропонованій авторами [13] перколяційній моделі пружності випадкової сітки показано, що проміжна фаза може виникати в системах поблизу перколяційного порога. Природа фази залишається неясною.

У [14] розроблена перколяційна модель вузлів на регулярній решітці з поглиненими анклавами. На відміну від класичної перколяції в розглянутій моделі анклави-кластери, повністю оточені нескінченним кластером, у результаті взаємодії поглинаються ним. Автори показали, що таке розширення моделі одночасно має особливості фазових переходів першого і другого роду, включаючи аномальну критичну поведінку, яка узгоджується з експериментами. Генеровані в моделі кластери належать до нового класу універсальності, який відрізняється від звичайної перколяції всіма критичними показниками, за винятком індексу кореляційної довжини.

Мультимасштабна структура, яка характеризує перколяційний кластер, спроможна значно розширити можливості опису процесів генерації та еволюції кластерних систем у твердих тілах, зокрема, дозволить істотно збільшити варіативність умов об'єднання їхніх елементів у процесі утворення. Але дослідження цих процесів ускладнене необхідністю синтезу кластерів із широким діапазоном параметрів.

Постановка завдання (цілей статті). Імітаційне моделювання кластероутворення дозволить вирішити такі задачі:

- розраховувати параметри модельних кластерів, статистику розподілу кластерів у перколяційному полі, апроксимувати експериментальні дані, будувати графіки та отримувати аналітичні формули залежностей характеристик кластерів від параметрів кластероутворення;

- досліджувати синергетичні й фізичні механізми генезису структури кластерів і можливостей впливу на них із візуалізацією процесів коагуляції часток, об'єднання часток у кластери, появи перколяційного кластера;

- вивчати вплив хаотичності на типи модельних кластерів, їхню структуру і властивості, виявити роль факторів упорядкування й міжчасткової взаємодії при концентраційних фазових переходах; досліджувати, таким чином, структуру твердих тіл у проміжній асимптотиці.

Як уже зазначалося, перколяційний кластер – фрактальний об'єкт, який характеризується лакунарністю, ступенем анізотропії, спектром розмірностей Реньї, кореляційною довжиною, радіусом гірації, потужністю та ін., але конкретні значення параметрів, що характеризують ці та інші властивості, залежать зокрема й від мікроструктури. Необхідно визначити залежності параметрів перколяційних систем, що самоорганізуються, від ступеня самоорганізації, довжини кореляції, швидкості генерації системи та інших параметрів.

В імітаційній моделі повинні бути отримані перколяційні системи, властивості яких будуть обумовлені як їхньою структурою, так і історією генезису. Для таких систем будуть досліджені залежності їх структури і властивостей від ступеня самоорганізації, характерних значень довжини кореляції і швидкості генерації системи; для цього необхідно досліджувати залежності відповідно від кількості актів взаємодії часток, від

довжини агрегації (мінімальної відстані, на якій елементи системи можуть об'єднуватися в кластер), а також від кількості часток, що генеруються на перколяційному полі на кожному кроці створення нескінченного кластера.

Виклад основного матеріалу. І в модельних, і у фізичних системах значення параметрів перколяційних кластерів, як відомо, варіюються в досить широких межах. Вони визначаються фізико-хімічними властивостями часток, інтенсивністю їх взаємодії, розмірністю й агрегатним станом матриці, в якій перебувають кластери, перколяційним класом, до якого належить система, і іншим.

У статті розглядаються перколяційні 3-вимірні задачі із самоорганізацією, в яких властивості перколяційного кластера зумовлені також історією розвитку системи. Отримано аналітичні вирази для залежності від цих параметрів потужності нескінченного кластера, його радіуса гірації, ступеня анізотропії та фрактальної розмірності.

Для вирішення задач, пов'язаних із практичним дослідженням кластерних систем, розроблено програмний комплекс моделювання кластероутворення (ПКМК), у якому імітується взаємодія кластер-кластер і кластер-частка.

Алгоритм моделювання поділяється на дві частини. Перша сформована конструкціями загального призначення. Вони служать для опису обчислень, керуючих структур, підпрограм, модульної структури складної моделі й бібліотек підпрограм і фрагментів моделей, імпорту зовнішніх модулів у модель або в саму систему. Друга частина алгоритму відображає специфіку проблемної області – дослідження кластерних систем. Основні типи об'єктів спеціалізованої семантики програмного комплексу в цій частині служать для опису кластерних структур, їх частин, елементів, композицій і станів. У ПКМК реалізуються конструктори об'єктів: Main, Cluster, Cells, Dimension, Model, Particle, Anisotropy, Stats, Settings, Distribution та ін.; і оператори для роботи з об'єктами моделі, зокрема: newCalculation, newIteration, getNewParticlePosition, percolationSearch, cellsSearch, setR2s, writeClusterCells, getClusterCenter, addCluster та ін.

При розробці ПКМК вирішено такі основні задачі:

- розроблено алгоритм генерування перколяційної системи методом Монте-Карло;
- реалізовано метод багаторазового маркування кластерів Хошена-Копельмана для знаходження порогу перколяції на квадратній, кубічній та багатовимірній решітках;
- відпрацьовано алгоритми нумерації кластерів, розподілу кластерів за розмірами, розрахунку таких характеристик, як середній розмір кластерів, радіус гірації, ступень анізотропії; визначення критичних показників, таких як індекс довжини кореляції, індекс зростання потужності кластерної системи, а також розмірностей (фрактальної, кореляційних) перколяційного кластера і кластерів, маса яких перевищує 20 % його маси;
- передбачено отримання результатів аналізу властивостей кластерної системи в множині циклів моделювання з графічним та текстовим поданням даних.

У моделі вирішується багатовимірна перколяційна задача. Імітація процесів кластероутворення проводиться на полі, заповнюваному ненульовими елементами з певною ймовірністю. У міру нарощування кількості, частки коагулюють і утворюють кластери. При моделюванні у ПКМК процес об'єднання часток у кластери візуалізується та анімується в реальному часі (рис. 1). В основному вікні ПКМК передбачено обертання 3D-візуальної моделі в усіх напрямках і масштабування поля моделювання, а відповідно, і всієї кластерної системи.

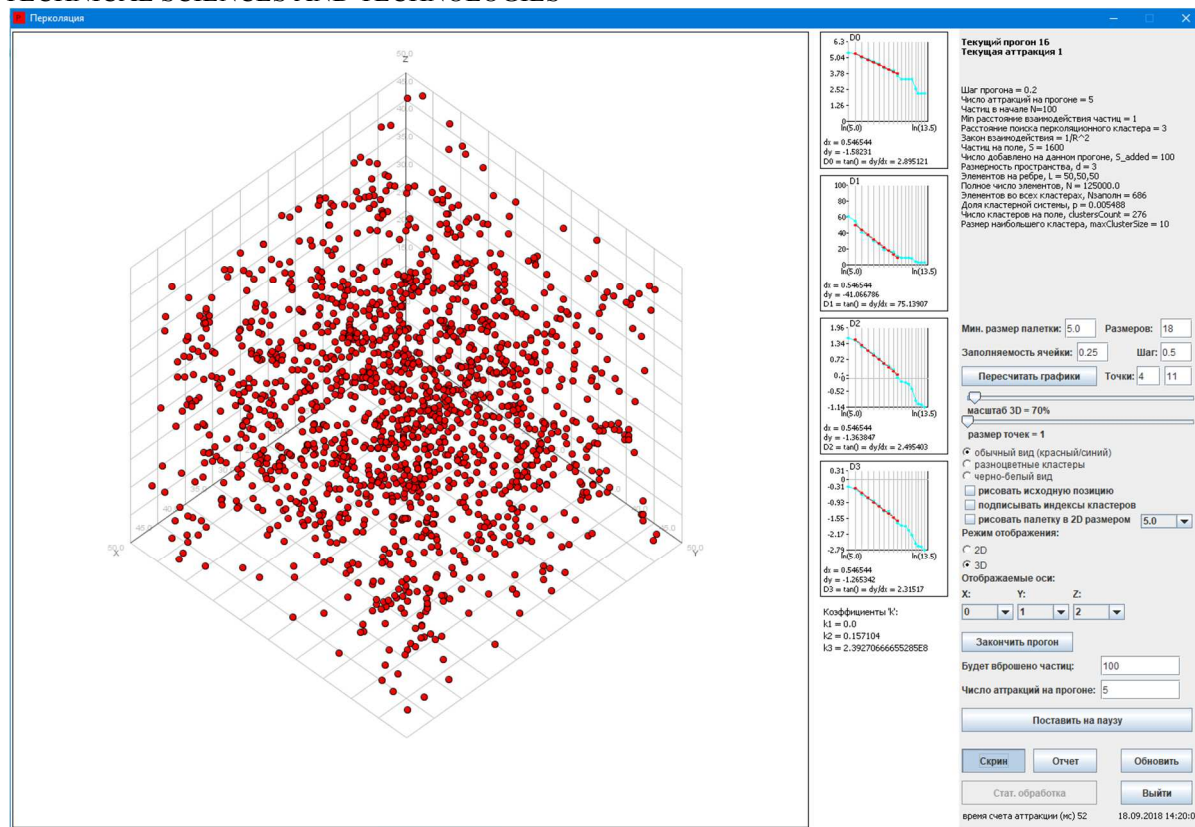


Рис. 1. Інтерфейс ПКМК під час одного з етапів коагуляції часток

Як алгоритм зростання кластерів використовується шлях послідовного нарощування заданої кількості часток. Одну з важливих ролей у цьому процесі відіграє надійний генератор випадкових чисел із рівномірним розподілом: спочатку за його допомогою обираються координати центрів кластероутворення, а потім той із центрів, у якому відбуватиметься процес заповнення, після чого генератор вказує місце, де буде розташована чергова частка зростаючого кластера. Керуваними параметрами комп'ютерної моделі кластероутворення є співвідношення між розміром часток і стороною поля, кількість актів тяжіння часток на кожному етапі генерування, мінімальна відстань взаємодії часток, довжина зв'язності перколяційного кластера, вибір закону взаємодії часток – $1/R^2$ або $1/R$. Крім того, у кожному модельному експерименті задається кількість вимірів простору на полі, розміри поля, кількість центрів кластероутворення.

Основні особливості реалізації взаємодії елементів системи в моделі:

- 1) використано ітераційний алгоритм; у кожній ітерації спочатку розраховується взаємодія між поодинокими частками; потім – між частками і кластерами, і, нарешті, – взаємодія кластерів;
- 2) реалізується два варіанти закону взаємодії: тяжіння із силами, пропорційними $1/R^2$ або $1/R$;
- 3) якщо взаємодіють об'єкти однакового розміру (маси), вони зсуваються вздовж прямої, що з'єднує їх центри, на однакову відстань інакше пройдені відстані обернено пропорційні масам;
- 4) відстань, за якої об'єкти системи вважаються з'єднаними, задається в діапазоні від 0 до 10 одиниць довжини;
- 5) при об'єднанні об'єктів кластер, що утворився, успадковує компоненти з більшою кількістю нереалізованих.

Ще одна особливість комп'ютерної реалізації моделі пов'язана з підвищенням швидкодії: в моделі реалізовано алгоритм, який дозволяє перевіряти наявність області, що з'єднує довільну пару протилежних сторін перколяційного поля. Така можливість пояснюється інваріантністю цього процесу щодо повороту осей координат. Незважаючи на витрати, пов'язані зі збільшенням кількості перевірок, у результаті це дає вигравш за часом, особливо в разі багатовимірних задач.

Ситуації, що виникають на перколяційному полі в процесі реалізації моделі, потребують деяких пояснень.

По-перше, усі частки, що потрапили до кластера, втрачають свою індивідуальність, і в подальших взаємодіях бере участь тільки кластер як ціле. У цьому випадку, як зазначалося, відстані вимірюються від центра мас кластера.

По-друге, якщо якась частка в результаті взаємодії з кластером виявилася від нього на відстані, достатній для взаємодії, то вона вважається приєднаною до кластера.

По-третє, частка і кластер, що її поглинув, мають таку ж кількість актів тяжіння, яку мали до об'єднання. При цьому спочатку реалізується взаємодія частки з іншими, розташованими всередині кластера, потім кластер як ціле взаємодіє з кластерною системою.

По-четверте, частка може приєднатися до кластера і зсередини, опинившись у результаті чергового накидання часток у лакуні кластера.

Розглянемо побудову перколяційної системи в моделі на кубічному полі розміром $50 \times 50 \times 50$ умовних одиниць довжини; частки, з яких будується кластерна система – кулі діаметром дві одиниці. Координати часток визначаються генератором випадкових чисел із рівномірним розподілом. У процесі моделювання на полі генерується фіксована для цього прогону кількість часток, кожна з яких бере участь у заданій кількості актів взаємодії. При вивченні залежності параметрів кластерної системи від цього параметра, кількість таких актів у відповідних експериментах варіюється від 5 до 100.

Отримано такі аналітичні залежності для закону взаємодії часток $1/R^2$:

- потужність нескінченного кластера залежить від відстані агрегації, як $y = 0,073x^{-1,68}$;
- потужність нескінченного кластера залежить від кількості часток, генерованих на кожній ітерації, як $y = 0,06x^{0,18}$;
- потужність нескінченного кластера залежить від кількості актів взаємодії між елементами кластерної системи, як $y = 0,07 \ln x - 0,0005$;
- радіус-вектор центра мас залежить від відстані агрегації, як $y = 0,68x + 47,2$;
- радіус-вектор центра мас залежить від кількості часток, генерованих на кожній ітерації, як $y = 0,0003x + 47,3$;
- радіус-вектор центра мас залежить від кількості актів взаємодії між елементами кластерної системи, як $y = 0,42 \ln x + 46,2$;
- ступінь анізотропії залежить від відстані агрегації, як $y = 0,98x^{-0,025}$;
- ступінь анізотропії залежить від кількості часток, генерованих на кожній ітерації, як $y = 0,004 \ln x + 0,96$;
- ступінь анізотропії залежить від кількості актів взаємодії між елементами кластерної системи, як $y = 0,003 \ln x + 0,98$;
- фрактальна розмірність залежить від відстані агрегації, як $y = 2,5x^{0,056}$;
- фрактальна розмірність залежить від кількості часток, генерованих на кожній ітерації, як $y = 2,97x^{-0,02}$;
- фрактальна розмірність залежить від кількості актів взаємодії між елементами кластерної системи, як $y = 3,15x^{-0,06}$.

На рис. 2, як приклад, представлені залежності потужності нескінченного кластера, радіус-вектора центра мас, ступеня анізотропії, фрактальної розмірності кластерів від кількості актів взаємодії часток у разі, коли в системі діють сили, пропорційні $1/R^2$.

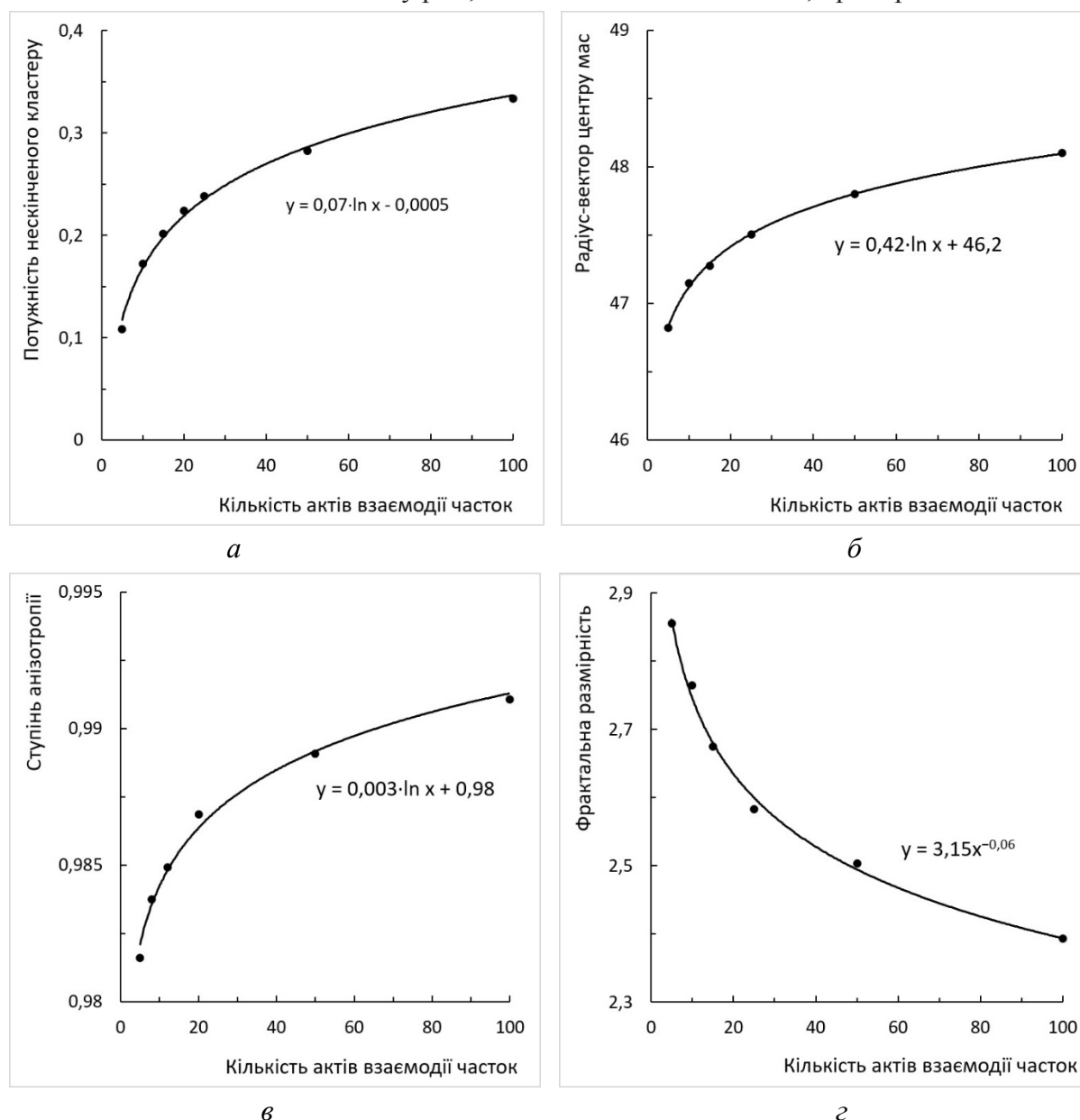


Рис. 2. Залежності потужності нескінченного кластера (а), радіус-вектора центра мас (б), ступеня анізотропії кластерів (в) та фрактальної розмірності (г) від кількості актів взаємодії між елементами кластерної системи

Висновки відповідно до статті. У роботі отримано аналітичні вирази для залежностей потужності нескінченного кластера, радіус-вектора центра мас, ступеня анізотропії та фрактальної розмірності від відстані агрегації, від кількості часток, генерованих на кожній ітерації, та від кількості актів взаємодії між елементами кластерної системи.

Кількість модельних експериментів, що проводяться з фіксованими значеннями параметрів, дозволило отримати результати зі стандартною для таких задач відносно похибкою, що не перевищує $10 \div 12 \%$.

Список використаних джерел

1. *Feder J.* Fractals / J. Feder. – Plenum Press, New York, 1988. – 283 p.
2. *Mandelbrot B.* The Fractal Geometry of Nature / B. Mandelbrot. – W.H. Freeman and Co., San Francisco, 1982. – 468 p.
3. *Bak P.* Life laws / P. Bak // *Nature*. – 1998. – Vol. 391 (6668). – P. 652–653.
4. *Bak P.* Wiesenfeld, Self-organized criticality: an explanation of 1/f noise / P. Bak, C. Tang, and K. Wiesenfeld // *Physical Review Letters*. – 1987. – Vol. 59. – P. 381–384.
5. *Bak P.* Self-organized criticality / P. Bak, C. Tang, and K. Wiesenfeld // *Physical Review*. – 1988. – Vol. A38. – P. 367–374.
6. *Zelenyi L.* Fractal topology and strange kinetics: from percolation theory to problems in cosmic electrodynamics / L. Zelenyi, A. Milovanov // *Phys. Usp.* – 2004. – Vol. 47. – P. 749–788.
7. *Zosimov V.* Dynamic fractal structure of emulsions, caused by the motion and interaction of particles. The numerical model / V. Zosimov, D. Tarasov // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 1997. – Vol. 84. – P. 725–730.
8. *Herega A.* Hybrid ramified Sierpinski carpet: percolation transition, critical exponents, and force field / A. N. Herega, N. G. Drik, A. P. Ugol'nikov // *Physics-Uspekhi*. – 2012. – Vol. 55 (5). – P. 519–521.
9. *Sokolov I. M.* Dimensionalities and Other Geometrical Critical Exponents in Percolation Theory / I. M. Sokolov // *Sov. Phys. Usp.* – 1986. – Vol. 29. – P. 924–945.
10. *Herega A.* The Selected Models of the Mesostructure of Composites: Percolation, Clusters, and Force Fields / A. Herega. – Springer, Heidelberg, 2018. – 107 p.
11. *Herega A.* Multicentric genesis of material structure: Development of the percolation model and some applications / A. Herega, V. Sukhanov, V. Vyrovoy // *AIP Conference Proceedings*. – 2016. – Vol. 1783, 020072.
12. *Alencar A. M.* Self-organized percolation / A. M. Alencar, J. S. Andrade, Jr., L. S. Lucena // *Physical Review*. – 1997. – Vol. E56 (3). – P. 2379–2383.
13. *Chubynsky M. V.* Self-organization with equilibration: A model for the intermediate phase in rigidity percolation / M. V. Chubynsky, M.-A. Brière, N. Mousseau // *Physical Review*. – 2006. – Vol. E74, 016116.
14. *Anomalous discontinuity at the percolation critical point of active gels / M. Sheinman, A. Sharma, J. Alvarado, G. H. Koenderink, F. C. MacKintosh // Physical Review Letters*. – 2015. – Vol. 114, 098104.

References

1. Feder, J. (1988). *Fractals*. New York: Plenum Press [in English].
2. Mandelbrot, B. (1982). *The Fractal Geometry of Nature*. San Francisco: W.H. Freeman and Co [in English].
3. Bak, P. (1998). Life laws. *Nature*, 391, 652-653 [in English].
4. Bak, P., Tang, C., Wiesenfeld, K. (1987). Self-organized criticality: an explanation of 1/f noise. *Physical Review Letters*, 59, 381–384 [in English].
5. Bak, P., Tang, C., Wiesenfeld, K. (1988). Self-organized criticality. *Physical Review*, A38, 367–374 [in English].
6. Zelenyi, L., Milovanov A. (2004). Fractal topology and strange kinetics: from percolation theory to problems in cosmic electrodynamics. *Phys. Usp.*, 47, 749–788 [in English].
7. Zosimov, V., Tarasov, D. (1997). Dynamic fractal structure of emulsions, caused by the motion and interaction of particles. The numerical model. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 84, 725–730 [in English].
8. Herega, A., Drik, N.G., Ugolnikov, A.P. (2012). Hybrid ramified Sierpinski carpet: percolation transition, critical exponents, and force field. *Physics-Uspekhi*, 55, 519–521 [in English].
9. Sokolov, I. M. (1986). Dimensionalities and Other Geometrical Critical Exponents in Percolation Theory. *Sov. Phys. Usp.*, 29, 924–945 [in English].
10. Herega, A. (2018). *The Selected Models of the Mesostructure of Composites: Percolation, Clusters, and Force Fields*. Heidelberg: Springer [in English].

TECHNICAL SCIENCES AND TECHNOLOGIES

11. Herega, A., Sukhanov, V., Vyrovoy, V. (2016). Multicentric genesis of material structure: Development of the percolation model and some applications. *AIP Conference Proceedings*, 20–72 [in English].
12. Alencar, A. M., Andrade, J. S. Jr., Lucena, L. S. (1997). Self-organized percolation. *Physical Review*, E56, 2379–2383 [in English].
13. Chubynsky, M. V., Brière, M.-A., Mousseau, N. (2006). Self-organization with equilibration: A model for the intermediate phase in rigidity percolation. *Physical Review*, E74 [in English].
14. Sheinman, M., Sharma, A., Alvarado, J., Koenderink, G. H., MacKintosh, F. C. (2015). Anomalous discontinuity at the percolation critical point of active gels. *Physical Review Letters*, 114 [in English].

UDC 004.94: 538.9

Yuri Kryvchenko

COMPUTER SIMULATION OF SELF-ORGANIZATION OF CLUSTER SYSTEMS: DEPENDENCE OF STRUCTURE OF GENESIS AND CONTROL PARAMETERS

Urgency of the research. Percolation methods show high efficiency in the study of matter, genesis and evolution of connected regions in materials. In such problems, the cluster system of the physical body and its impact on the object as a whole are studied. The study of the structure and properties of percolation clusters will make it possible to investigate and predict the behavior of objects (solids) under various environmental conditions, the genesis of their formations in time.

Target setting. The practical investigation of cluster systems in solids is associated with the complexity and labor intensity of the experiments. The main problems are that to obtain reliable information about the structure and properties it is necessary to synthesize clusters with a wide range of parameters and create a reliable system for their diagnostics.

Actual scientific researches and issues analysis. The article reviews recent publications in Ukrainian and foreign journals, including experimental and theoretical papers containing studies of self-organizing criticality.

Uninvestigated parts of general matters defining. In the above studies, the possibilities of describing the processes of generation and evolution of cluster systems in solids are expanding; there is a hypothesis that allows significantly increase the number of variants of cluster formation.

The research objective. To conduct simulation of cluster formation with interacting elements using the Monte Carlo method. To determine the dependence of the parameters of self-organizing percolation systems on the degree of self-organization, the correlation length, the generation rate of the system, and other parameters. To get analytical expressions for dependencies and relative error values.

The statement of basic materials. To solve the problems associated with the practical study of cluster systems, a software complex for modeling cluster formation has been developed, in which the cluster-cluster and cluster-particle interactions are simulated. In the model, a multidimensional percolation problem is solved. As an algorithm for the growth of clusters, a path to increase sequentially a given number of particles is used.

Conclusions. Computer calculations carried out, in particular, by the Monte Carlo method, give the most reliable predictions of the properties of percolation systems. Analytic expressions are obtained for the dependences of the power of an infinite cluster, its radius, the degree of anisotropy and lacunarity from the aggregation distance, on the number of particles generated at each iteration, and on the number of acts of interaction between the elements of the cluster system, and also the first three dimensions of the Renyi spectrum are calculated.

Keywords: self-organizing criticality; percolation problems with self-organization; cluster structure; interaction of particles; cluster formation; computer modelling.

Fig.: 2. References: 14.

Кривченко Юрій Вікторович – аспірант, викладач в/к комісії КТ і ПІ ОТК, Одеська національна академія харчових технологій (вул. Канатна 112, м. Одеса, 65039, Україна).

Kryvchenko Yuri – PhD student, h/c teacher of commission CT&PI OTC, Odessa National Academy of Food Technologies (112 Kanatna Str., 65039 Odessa, Ukraine).

E-mail: taediumvit@gmail.com

ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-2726-317X>

ResearcherID: Q-5601-2016