2. *Leslie F.M.* Some constitutive equations for liquid crystals // Arch. Ration. Mech. Anal. 1968. V. 28. P. 265-283.

3. *Аэро Э.Л., Булыгин А.Н.* Уравнения движения нематических жидких кристаллов // Прикл. матем. и механ. 1971. Т. 35. Вып. 5. С. 879-891.

4. *Садовский В.М., Садовская О.В.* Об акустическом приближении термомеханической модели жидкого кристалла // Физическая мезомеханика. 2013. Т. 16. № 3. С. 55-62.

5. *Sadovskii V.M.* Equations of the dynamics of a liquid crystal under the influence of weak mechanical and thermal perturbations // AIP Conf. Proc. 2014. V. 1629. P. 311-318.

6. Sadovskaya O.V. Numerical simulation of the dynamics of a liquid crystal in the case of plane strain using GPUs // AIP Conf. Proc. 2014. V. 1629. P. 303-310.

7. *Смолехо И.В.* Параллельная реализация алгоритма для описания термоупругих волн в жидких кристаллах // Молодой ученый. 2015. № 11 (96). Часть I. С. 107-112.

Analysis of the equations of a liquid crystal taking into account moment interaction

Irina Vladimirovna Smolekho, *Post-graduate Student,*
Oxana Victorovna Sadovskaya, *Ph.D., Senior Scientific Researcher,*
Institute of computational model SB RAS

Based on the mathematical model of a liquid crystal in the acoustic approximation, the system of two equations of second-order was obtained for tangential stress and angular velocity. Computational algorithm for numerical solution of boundary-value problems is worked out, implemented as a parallel program in the C language using the CUDA technology.

Keywords – liquid crystal, moment medium, dynamics, finite-difference scheme, parallel computational algorithm, CUDA technology.

УДК 51-72

МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ СИСТЕМЫ К ПОВРЕЖДЕНИЮ МЕТОДАМИ ТЕОРИИ ОДНОМЕРНОЙ ПЕРКОЛЯЦИИ

Марина Геннадьевна Усатова, *аспирант*
E-mail: UsatovaMarina555@yandex.ru
Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова
http://www.khsu.ru
Роман Анатольевич Козлитин, *к.ф.м.н.*
E-mail: kran80@mail.ru
Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова
http://www.khsu.ru
Владимир Николаевич Удодов, *д.ф.м.н.*
E-mail: udodovv@hotmail.com
Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова
http://www.khsu.ru

Рассмотрена математическая модель устойчивости системы к повреждению. Предложен новый алгоритм исследования устойчивости системы к повреждению в рамках квазиодномерной модели перколяции. Модель может быть использована для интерпретации результатов в квазиодномерных нанометровых системах.

Ключевые слова: теория перколяции, композитный материал, устойчивость системы.

В современном производстве все чаще используются композитные материалы [1-7]. Это обусловлено тем, что в чистом виде материалы экономически не выгодны и не всегда имеются те свойства, которые есть у композитов [2].


М.Г. Усатова

Свойства таких материалов могут быть улучшены за счет использования наноструктур, таких как, например, наночастицы, нанопровода [2,5]. Квазиодномерные наноструктуры [6] будут обладать большей чувствительностью, чем объемные материалы, по нескольким причинам. Во-первых, они имеют большее соотношение поверхности и объема, так как значительную долю в таких системах составляют поверхностные атомы, которые принимают участие в поверхностных реакциях. Во-вторых, радиус нанопроводов сравним с дебаевской длиной экранирования в широком температурном интервале, что транслирует сильную зависимость их электронных свойств от поверхностных процессов [7]. В-третьих, состав полупроводниковых оксидных нанопроводов обычно ближе к стехиометрическому, а они имеют большую степень кристалличности по сравнению материалов с зернистой структурой. В-четвертых, процессы электронного транспорта в массивах 1D наноструктур протекают лучше, поскольку в нанопроводах обеспечивается прямой путь протекания для носителей заряда, и число межзеренных границ в них значительно меньше [7].


Р.А. Козлитин

В данной работе устойчивость системы к повреждению исследована методами теории перколяции (задача связей и задача узлов) [8, 9]. Теория перколяции – теория, описывающая возникновение бесконечных связных структур (кластеров), состоящих из отдельных элементов [8]. Выделяют следующие области применения теории перколяции: моделирование политипных превращений [10], аномальная диффузия в квазиодномерных дефектных структурах [11], ядерные реакции [9], образование галактических структур [9], распространение лесных пожаров и эпидемий [8, 9].


В.Н. Удодов

При рассмотрении квазиодномерных цепочек использовалась задача связей и определялось наличие или отсутствие протекания в одномерной цепочке. При рассмотрении системы состоящей из элементарных объемов использовалась задача узлов [8, 9, 12].

В данной работе предложен алгоритм исследования устойчивости системы к повреждению методами теории одномерной и двумерной перколяции, с использованием теории графов [13] при произвольном радиусе протекания. Представлены результаты математического и компьютерного моделирования методом Монте-Карло процесса протекания в тонких пленках.

Математическая модель устойчивости системы к повреждению

Для моделируемого композиционного материала «точной» характеристикой является элементарный объем композита с возможностью образования перколяционного кластера. Множество параметров, включая длины и массы макромолекул, степень кристалличности, наличие полимер-изомерных структур, свободный объем, плотность, проводимость и др. - зависят как от способа получения композита, так и от многих других параметров подготовки изделия или образца [1]. В силу сильной нано и микро неоднородностей композиционного материала возникают неоднородности полей и токов и могут проявляться нелинейные эффекты [1, 2].

В данной работе модель представляет собой композиционный материал [2, 3], состоящий из элементарных объемов с «одномерным поведением» (возникновение соединяющей цепочки в элементарном объеме). Исследование такой модели проведем на двух уровнях.

1 уровень. Элементарный объем является основной «точечной» характеристикой образца. В элементарном объеме моделировалось протекание по целым связям цепочки длинной N, с заданной вероятностью образования целой связи P_{bond} и различным радиусом протекания ($R = 2$ и $R = 3$). Описываемая модель состоит из ста элементарных объемов для одного слоя. Таким образом, моделировалась задача связей для одномерной цепочки. На рисунках 1 и 2 представлены цепочки узлов с радиусами протекания от 2 до 3. Если возникает перколяционный кластер, то принимаем элементарный объем равный 1, иначе 0. Информация, полученная на этом уровне, позволит изучить модель на следующем уровне (тонкие пленки).

2 уровень. Рассматривая тонкие пленки, получим задачу узлов на квадратной решетке, где перколяционный кластер определяли с помощью алгоритма Хошена-Копельмана [13 14]. Модель сводится к задаче узлов для квадратной решетки, где каждый узел представляет собой элементарный объем. Свойства элементарного объема композита зависят в модели от радиуса протекания, длины цепочки и вероятности образования целой связи.

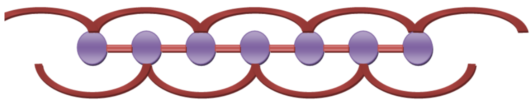

Рис. 1. Цепочка узлов с $R = 2$

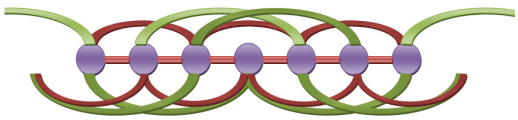

Рис. 2. Цепочка узлов с $R = 3$

Считалось, что возникает перколяция в элементарном объеме, если соединены две любые противоположные стороны элементарного объема. Количество опытов в исследуемой модели бралось равным $Q = 10000$. В каждом опыте рассматривалось протекание по цепочке в элементарном объеме на первом уровне, а затем на втором уровне определялось протекание по элементарным объемам (задача узлов на квадратной решетке).

Под параметром устойчивости P будем понимать вероятность возникновения протекания в системе, как отношения числа успешных опытов Q_+, в которых возникает протекание ко всем опытам Q

$$P = \frac{Q_+}{Q}. \quad (1)$$

Результаты исследований математической модели устойчивости системы к повреждению

По результатам исследования построенной модели на рис. 3 и 2 была выявлена зависимость параметра устойчивости композита от вероятности образования целой связи P_{bond} в элементарном объеме, при различных размерах цепочки. Количество исследуемых элементарных объемов $V = 100$, количество опытов $Q = 10000$.

Из рис. 3 и 4 следует, что параметр устойчивости P зависит от размеров цепочки N и радиуса протекания. При определенных значениях вероятности образования целой связи P_{bond} в элементарном объеме, наблюдается резкий скачок параметра устойчивости системы, ширина «перехода» зависит от размеров исследуемой цепочки в элементарном объеме. Получается, что чем больше узлов в цепочке, тем уже скачок параметра устойчивости P системы.

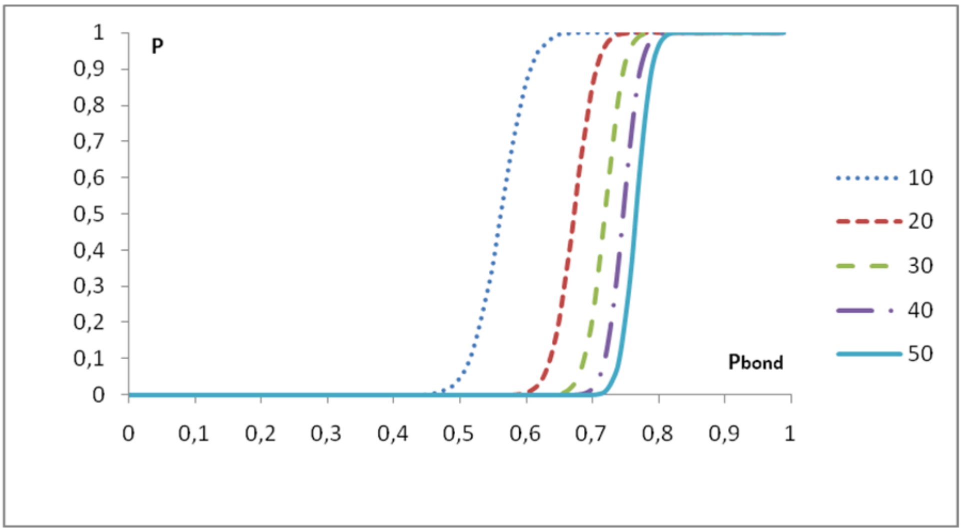

Рис. 3. Зависимость параметра устойчивости композита, при различных размерах цепочки от 10 до 50 узлов, $R = 2$

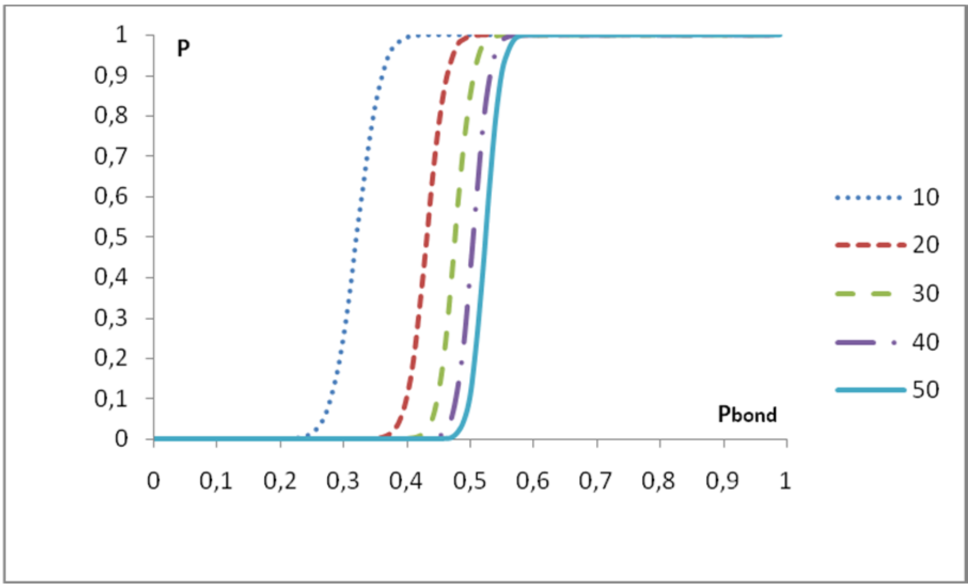

Рис.4. Зависимость параметра устойчивости композита, при различных размерах цепочки от 10 до 50 узлов, $R = 3$

Заключение

Таким образом, в работе предложена модель исследования устойчивости системы на двух уровнях. На первом уровне исследовали протекание по элементарному объему, моделировалось протекание по целым связям, то есть решалась задача связей. На втором уровне каждый элементарный объем представлял собой узлы и, следовательно, решалась задача узлов. Последний этап работы заключался в расчете параметра устойчивости системы.

Было выявлено, что устойчивость системы зависит от размеров цепочки N и радиуса протекания. Важным результатом исследования было наблюдение за скачком системы: ширина «перехода» в системе зависит от размеров исследуемой цепочки в элементарном объеме. При увеличении длины цепочки ширина скачка сужается.

Модель может быть использована для интерпретации результатов в квазиодномерных нанометровых системах, например, структурированный композит, на основе одноостно-ориентированных непрерывных волокон. Такой композит можно разделить на элементарные объемы. Тогда одно протекание по каждому волокну, изучается на первом уровне (задача связей), и в случае протекания на втором уровне такая цепочка проецируется на целый узел (задача узлов), далее рассчитывается устойчивость системы.

В дальнейшем планируется рассчитать устойчивость системы к повреждению с произвольным радиусом протекания и влиянием примесей в системе. Для детального изучения такой системы планируется рассмотреть смешанную задачу в одномерной цепочке, где протекание определяется по целым узлам и связям [14].

Литература

1. *Vlasov D.V., Apresian L.A.* Cascade Model of Conduction Instability and Giant Fluctuations in Polymer Materials and Nanocomposites. Amer. J. Mater. Science, Advances in Materials Science and Applications. 2013. Vol. 2. Iss. 2. P. 60-65.
2. *Шевченко В.Г.* Структура полимерных КМ. Основы физики полимерных композиционных материалов: учеб. пособие. М.: МГУ имени М. В. Ломоносова, 2010. 98 с.
3. *Кривошеина М.Н., Кобенко С.В., Туч Е.В.* Усреднение свойств композиционных анизотропных материалов при численном моделировании их разрушения // Физическая мезомеханика. 2010. № 13. С. 55-60.
4. *Склярова Е.А., Малютин В.М.* Компьютерное моделирование физических явлений: учебное пособие / Томский политехнический университет. Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2012. 152 с.
5. *Советова, Ю.В. Сидоренко Ю.Н.* Анализ прочностных свойств хаотически армированного композита на основе многоуровнего подхода // Международный научно-исследовательский журнал: сб. по результатам XXIII заочной научной конференции Research Journal of International Studies. Екатеринбург. 2014. № 1. С. 41-43.
6. *Черный, А.А*. Улучшение способ получения пористых материалов и изделей на основе изобретений и моделирования / Пензенский государстенный университет: учеб. пособие. Пенза, 2010. С. 202.
7. *Пешкова Т.В., Димитров Д.Ц.* Структуры из нанопроводов с переходами Zn−ZnO : CuO для детектирования паров этанола // Журнал технической физики. 2014. Т.84. Вып. 5. С. 143-148.
8. *Эфрос А.Л.* Физика и геометрия беспорядка. М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1982. 167 с.
9. *Тарасевич Ю.Ю.* Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. М.: Едиториал УРСС, 2002. 112 с.
10. *Попов А.А., Удодов В.Н., Потекаев А.И.* Особенности политипных превращений при изменении внешнего сдвигового напряжения и температуры // Известия вузов. Физика. 1999. № 9. С. 80-86.
11. *Мартыненко М.В., Удодов В.Н., Потекаев А.И.* Аномальная диффузия в модели с переменным радиусом протекания // Известия вузов. Физика. 2000. № 10. С. 67-70.
12. *Усатова, М.Г.* Перколяция в одномерных системах // Теория и практика в физико-математических науках: Материалы IV Международной научно-практической конференции. – М.: Издательство «Спутник+», 2014. С. 23-25.
13. *Буреева М.А., Удодов В.Н.* Моделирование задачи связей одномерной теории перколяции на неориентированном графе // Математическое моделирование. 2012. Т. 24. № 11. С. 72-82.
14. *Усатова М.Г., Козлитин Р.А., Удодов В.Н.* Смешанная задача в одномерной теории перколяции для конечных систем // Математическое моделирование. 2015. Т. 27. № 12. С. 88-95.

Simulation of the stability of a system by the theory of one-dimensional percolation

***Marina Gennadievna Usatova**, PhD Student*

***Roman Anatolyevich Kozlitin**, PhD*

***Vladimir Nikilaevich Udodov**, DcS*

A mathematical model of the system resistance to damage is considered. A new algorithm to determine the stability of damage based on quasi-one-dimensional percolation theory is proposed. The model can be used for interpretation of results in quasi-one-dimensional nanometer systems.

Keywords – percolation theory, composite material, stability of the system