

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ВСП «ОДЕСЬКИЙ ТЕХНІЧНИЙ ФАХОВИЙ КОЛЕДЖ ОНТУ»

Спеціальність: 123 «Комп'ютерна інженерія»

Освітня програма: «Комп'ютерна інженерія»

Група: 2БКС-28

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА БАКАЛАВРА

здобувача освіти денної форми навчання
БКС.28.12.000.КРБ

***КЛЕЩОВА ІЛІІ
МАКСИМОВИЧА***

м. Одеса
2024 р.

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ВСП «ОДЕСЬКИЙ ТЕХНІЧНИЙ ФАХОВИЙ КОЛЕДЖ ОНТУ»

Спеціальність: **123 «Комп'ютерна інженерія»**

Освітньо-професійна програма: **«Комп'ютерна інженерія»**

Група: **2БКС-28**

ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА

До кваліфікаційної роботи бакалавра на тему: **«Дослідження кластероутворення у теорії протікання засобами комп'ютерного моделювання»**

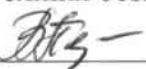
Проектний матеріал складається з пояснювальної записки на 80 сторінках та графічного (презентаційного) матеріалу на 18 аркушах (слайдах)

Виконавець  (Клещов І.М.)

Керівник проекту  (Кривченко Ю.В.)

Консультанти:

з розділу охорони праці та техніки безпеки  (Чорновол Н.І.)

з нормоконтролю  (Петрашова В.І.)

старший консультант  (Кривченко Ю.В.)

До захисту допущений

Завідувач кафедри  (Іванова Л.В.)

Завідувач відділення  (Скорнякова О.В.)

Захист «24» 06 2024 р. Протокол ЕК № 1

Оцінка ЕК 5 (відмінно) 958.

Секретар ЕК 

АНОТАЦІЯ

Метою даної роботи є дослідження різних стадій утворення кластерів у теорії протікання, зокрема – нескінчених кластерів, та оцінка їх параметрів за допомогою методів комп'ютерного моделювання.

Особливі фізичні властивості кластерів, процеси їх генерації і еволюції, прогнозування і модифікація властивостей представляють значний науковий і прикладний інтерес. У роботі розглядаються мезоскопічні кластери, що володіють оболонковою структурою. Вони є проміжним випадком між мікроскопічними кластерами, що складаються з однієї оболонки, і макроскопічними кластерами, в яких велика частина часток утворює "об'ємну" фазу.

Створено комп'ютерну імітаційно-статистичну модель для вивчення процесів кластероутворення. Програмна реалізація моделі дозволяє уявити кластери у вигляді тривимірних об'єктів, а також розглядати їх з різним кольоровим забарвленням, зафіксувати момент утворення нескінченного кластеру, що з'єднує протилежні грані заповненого частками об'єму.

Вивчено закономірності процесів коагуляції модельних кластерів часток, показана можливість цілеспрямованого впливу на їх параметри.

Отримані кількісні методи прогнозування структури і властивостей модельних кластерів, утворення нескінченного кластеру.

Створено програмне забезпечення для моделювання кластерної системи, формування малих та нескінченного кластерів та оцінки їх параметрів і проведені комп'ютерні експерименти.

Розглянуто питання з охорони праці та техніки безпеки.

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

ВСП «ОДЕСЬКИЙ ТЕХНІЧНИЙ ФАХОВИЙ КОЛЕДЖ ОНТУ»

Відділення Комп'ютерних систем Кафедра Комп'ютерної інженерії
Спеціальність 123 «Комп'ютерна інженерія»
Освітньо-професійна програма «Комп'ютерна інженерія»

ЗАТВЕРДЖУЮ:

Заст. дир. з НВР

Беркань І.В.

« 18 » 01 20 24 р.

ЗАВДАННЯ

на кваліфікаційну роботу бакалавра

здобувачеві освіти Клецову Іллі Максимовичу
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема кваліфікаційної роботи Дослідження кластероутворення у теорії протікання засобами комп'ютерного моделювання

затверджена наказом по коледжу від « 02 » листопада 20 23 р. № 244-А2-03

2. Термін здачі студентом кваліфікаційної роботи 13.06.24 р.

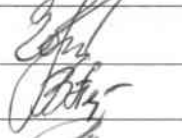
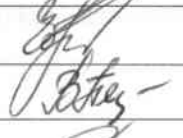
3. Вихідні дані до роботи 1. Математична модель кластероутворення, формули для підрахунку його параметрів; 2. Частки мають бути модельовані у вигляді шарів діаметром 1-10 одиниць; 3. Реалізувати кластероутворення та появу нескінченного кластеру у плоскому та об'ємному середовищі; 4. Передбачити пошук нескінченного кластеру та аналіз його фрактальної розмірності; 5. Використовувати програмний графічний інтерфейс OpenGL

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, що їх належить розробити)

1. Аналітична частина;
2. Моделювання кластероутворення та розрахунок параметрів кластерів;
3. Розробка алгоритмів імітаційної моделі;
4. Програмна реалізація комп'ютерної моделі
5. Питання охорони праці та техніки безпеки

5. Перелік графічного матеріалу (слайдів мультимедійної презентації) Послідовність етапів побудови математичної моделі; Система ітераційних рівнянь для опису динамічної системи; Інтерфейс програми для моделювання динамічної системи; Схема обчислювального процесу в програмі; Діаграма взаємодії об'єктів АТД у програмі; БСА функцій у класах; Інтерфейс програми у покроковому режимі і етапи побудови динамічної системи; Інтерфейс програми у процесі формування перетину з 4-вимірної множини; Візуалізація динамічної системи у хаотичному, квазіперіодичному та дивному режимах

6. Консультанти по кваліфікаційній роботі, із зазначенням розділів, що їх стосуються

Розділ	Консультант	ПІДПИС	
		Завдання видав	Завдання прийняв
Основний розділ	Кривченко Ю.В.		
Розділ охорони праці	Чорновол Н.І.		
Нормоконтроль	Петрашова В.І.		
Старший консультант	Кривченко Ю.В.		

7. Дата видачі завдання 15.01.2024

Керівник роботи Кривченко Ю.В.


(підпис)

Завдання прийняв до виконання


(підпис)

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

Пор. №	Назва етапів кваліфікаційної роботи	Термін виконання етапів роботи	Примітка
1.	Аналіз технічного завдання та пошук літератури	8.05.24	Виконав
2.	Огляд моделей кластероутворення	9.05.24	Виконав
3.	Вивчення методів визначення розмірності кластерів	15.05.24	Виконав
4.	Обґрунтування створення моделі кластероутворення	18.05.24	Виконав
5.	Моделювання кластероутворення у середовищі	19.05.24	Виконав
6.	Аналіз результатів роботи моделі	21.05.24	Виконав
7.	Визначення розмірностей кластерів часток	22.05.24	Виконав
8.	Реалізація алгоритму виділення та взаємодії кластерів	23.05.24	Виконав
9.	Реалізація алгоритму коагуляції часток	26.05.24	Виконав
10.	Програмна реалізація моделі кластероутворення	28.05.24	Виконав
11.	Реалізація алгоритмів розрахунку параметрів КЧ	30.05.24	Виконав
12.	Реалізація взаємодії функціональних компонент моделі	2.06.24	Виконав
13.	Розробка інтерфейсу ПЗ, тестування моделі	4.06.24	Виконав
14.	Аналіз результатів, зняття характеристик	6.06.24	Виконав
15.	Розробка питань з охорони праці	8.06.24	Виконав
16.	Підготовка роботи до захисту та тестування ПЗ	9.06.24	Виконав
17.	Оформлення слайдів мультимедійної презентації	13.06.24	Виконав

Здобувач освіти


(підпис)

Керівник роботи


(підпис)

ЗМІСТ

Вступ.....	7
1 Основний розділ.....	8
1.1 Теоретичні дослідження кластероутворення	9
1.2 Експериментальні моделі кластероутворення	11
1.3 Агрегаційні моделі кластер-кластер	13
1.4 Визначення розмірності кластерів	14
1.5 Обґрунтування створення імітаційно-статистичної моделі	18
1.6 Постановка задачі дослідження кластероутворення	19
1.7 Побудова моделі кластероутворення.....	20
1.8 Визначення розмірностей кластерів.....	23
1.9 Побудова комп'ютерної імітаційної моделі.....	29
1.10 Реалізація алгоритму виділення кластеру.....	29
1.11 Реалізація алгоритму об'єднання і взаємодії кластерів.....	32
1.12 Реалізація алгоритму коагуляції часток.....	34
1.13 Реалізація алгоритму роботи моделі по тактам.....	36
1.14 Програмна реалізація моделі кластероутворення.....	38
1.15 Реалізація алгоритмів розрахунку розмірностей.....	40
1.16 Реалізація запису статистичних показників.....	45
1.17 Взаємодія функціональних компонент у застосунку.....	46
1.18 Реалізація алгоритмів обробки помилок.....	48
1.19 Виконання експериментів з кластероутворення за допомогою розробленого застосунку.....	50
2 Розділ охорони праці та техніки безпеки.....	59
2.1 Аналіз небезпечних та шкідливих чинників, що впливають на працівника.....	59
2.2 Розробка заходів з охорони праці.....	59
2.3.1 Ергономіка та організація робочого місця.....	60
2.3.2 Гігієнічне нормування параметрів повітря робочої зони.....	61
2.3.3 Освітлення виробничих приміщень.....	62

2.3.4 Захист від дії виробничого шуму та вібрації.....	62
2.4 Пожежна безпека.....	63
Висновки.....	64
Перелік використаних інформаційних джерел.....	65
Додаток А. Фрагмент вихідного коду головного модуля (Umain) кластоутворення.....	66
Додаток Б. Слайди мультимедійної презентації.....	72

					БКС 28. 12 000. 00 КРБ ПЗ	Арк.
Зм.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		6

ВСТУП

У останні роки широко розвивається наука про к-утворення. К-утворення стали називати п'ятим видом існування матерії поряд із твердим тілом, рідиною, газом і плазмою. К-утворення – це невеликі агрегації часток, володіють власною сукупністю властивостей і ще не набули, у силу своїх малих розмірів, властивостей кристалів. Кластероутворення – широко поширене природне явище, викликає великий інтерес в фахівців у несхожих областях знань. Ці явища вивчають фізики, хіміки, інженери: проводяться експериментальні і теоретичні вивчення. Кожен напрямок має свої переваги і недоліки, доповнює один одного і провокує удосконалення підходів і методик вивчення.

Виявляється, к-утворення із різними законами співдії при невеликому числі часток володіють багатьма загальними властивостями, зокрема, оболонковою структурою, яка конкурує із виникненням всередині к-утворення зародка зі структурою "об'ємної фази" (тобто трикутної решітки задля двовимірних систем). Теорія протікання чи теорія перколяції являться математичною теорією, яка описує властивості зв'язаних к-утворень на випадковому графі. Теорія знайшла застосування у описі явища перколяції у статистичній фізиці й матеріалознавстві.

Експериментальне вивчення формування к-утворення в теорії протікання досить складне: дослідники стикаються із неможливістю отримання досить широкого діапазону структурних властивостей, але разом з цим із відсутністю надійної методики їх діагностики. Сучасні відомості про формування к-утворення в теорії протікання багато у чому базуються на теоретичних моделях і не завжди узгоджуються із експериментом. Одна із причин такого становища у саме тому, у аналітичних і чисельних вивченнях заздалегідь фіксуються характер процесу агрегації, тип співдії к-утворень і часток, ймовірність коагуляції при співдії. В зв'язку із необхідністю вивчення самих ранніх стадій зародження і зростання к-утворень, і труднощами, із якими стикаються дослідники у своїй роботі, великі надії покладаються на теоретичні вивчення, у саме тому числі, імітаційне імітування. Темою даної роботи являється саме вивчення формування к-утворення в теорії протікання засобами комп'ютерного імітування.

1 ОСНОВНИЙ РОЗДІЛ

Підвищений інтерес до вивчення властивостей к-утворень часток обумовлений тим, к-утворення являться досить поширеним природним об'єктом. Уявлення про К-утворення розширюють знання про ряд систем і явищ, сприяє більше детальному аналізу реальних дій і явищ. Ці вивчення дають спроможність розвиватися експериментальним вивченням к-утворень і динаміки їх утворення. В зв'язку із цим різко зріс інтерес до опису їх несхожих властивостей і характеристик, визначають, зокрема, ступінь участі аерозолів у атмосферних процесах. К-утворення являються основним структуроутворюючим елементом ряду макроскопічних систем, виникають у результаті протікання фізико-хімічних дій і явищ, котрі схожі із процесами зростання К-утворення.

К-утворення, як система пов'язаних атомів, принципово відрізняється з макроскопічних часток. Характерним задля к-утворень являється наявність магічних чисел, при яких відповідні властивості мають екстремуми. Розподіл мас к-утворень показує наявність бажаних розмірів к-утворень. Таким чином, магічні числа відповідають заповненим структурам к-утворень чи заповненим шарам і оболонкам, але оболонкова структура – кластерам, як металевим, так і із парною взаємодією атомів. К-утворення із магічним числом атомів спостерігаються задля досить великих к-утворень і характеризуються більше високою енергією зв'язку, ніж к-утворення із сусідніми числами атомів.

У [1-2] відзначається, к-утворення являються зручним об'єктом задля побудови чисельних моделей, котрі дають спроможність досліджувати вплив умов зростання на структуру утворення к-утворення, підтверджено комп'ютерним моделюванням. По моделях зростання к-утворень зроблено досить багато робіт оглядового характеру. Автор [6] показує, складність і багатостадійність процесу коагуляції к-утворень, коли на несхожих етапах процесу проявляються фізичні властивості, у певній мірі дозволяють вибрати методику аналізу К-утворення.

В разі якщо К-утворення були нескінченно великі чи ж зроблені із нескінченно малих окремих часток, то не було б обмежень на їх властивості [1-2].

Практично існують два природних види обрізання масштабу: розмір самих часток (а) і розмір самого к-утворення (L). Зазвичай властивість $n(r) \sim r^D$ справедлива лише при $a \ll r \ll L$. Це показує відмінність поміж математичними об'єктами (без обмежень) і фізичними об'єктами (із певними обмеженнями) [6]. Імітування реальних к-утворень такими структурами виправдано у разі, якщо обидва масштабу обрізання досить добре розділені (к-утворення повинен бути досить великий, відношення L / a має бути більше 10).

1.1 Теоретичні вивчення формування к-утворення

Асоціація твердих часток у обсязі і на поверхні – це найбільше поширений випадок утворення К-утворення [1,2,6]. К-утворення спроможні ефективно утворюватися при асоціації аерозолів у обсязі і на поверхні при певних умовах процесу. Надалі к-утворення злипаються. Це призводить до руйнування їх структури. Саме тому, слід зазначити, К-утворення не спостерігаються там, де вони спроможні бути виявлені.

У [1,2,6] представлена інформація по теоретичному дослідженню К-утворення і динаміці їх утворення, але разом з цим проведений аналіз отриманих експериментальних результатів по утворенню таких структур у реальних системах.

Автор [2] вважає, к-утворення мають пряме відношення до дій асоціації твердих часток: утворення к-утворень в хмарах, коагуляція часток у димах і т.д. У [2,6] показано, основні вивчення таких структур були проведені лише теоретично на базі наявних уявлень. Основною ж причиною невідповідності теоретичних моделей реальному агрегаційному експерименту полягає у саме тому, у моделях зростання к-утворень заздалегідь фіксуються характер процесу агрегації (к-утворення-к-утворення чи к-утворення-частка), характер руху часток чи к-утворень (прямолінійний чи броунівський), ймовірність коагуляції при співдії, у той час, як у дослідях по генерації к-утворень перераховані характеристики росту постійно змінюються. Поряд із самою структурою К-утворення не маловажним являться і уявлення про динаміку їх утворення [1]. Виходячи із того, к-утворення

утворюються при склеюванні окремих елементів, то стає інформативним розподіл к-утворень поза розмірами у кожен момент часу і характер зміни цього розподілу із часом.

Досліджені раніше к-утворення виростали із окремих часток. Основою задля асоціації твердих часток спроможні служити нитка і волокно, але разом з цим підкладка. У цьому випадку утворюваний к-утворення має іншу, ніж при вирощуванні на окремих частках структуру, описано в [2]. Відповідно до загальних властивостей к-утворень, зі збільшенням розміру вони стають все більше пухкими. Радіус гірації задля к-утворення, утвореного на нитці чи на волокні, пов'язаний із числом часток у ньому. В разі проростання к-утворення на нитці, його довжина значно перевищує поперечний розмір к-утворення, тобто початкові умови істотно впливають на характер проростання к-утворення.

У процесі еволюції дисперсної структури початкова взаємодія має тип к-утворення-частка. На пропоміжних етапах росту взаємодія часток носить змішаний характер, причому через флуктуації щільності співвідношень цих механізмів у несхожих точках простору спроможні бути неоднаковими.

Цей процес ще більше ускладнюється тим, у результаті дій, відбуваються на поверхні асоційованих часток, особливо якщо вони несуть який-небудь заряд, діється деяка взаємодія. Різноманіттям дій, протікають у реальному середовищі, являться помітна відмінність структурних властивостей к-утворення з імітованих, одержуваних експериментально [6].

Процес к-утворення-кластерної агрегації призводить не лише до утворення самоподібних структур, але й формує скейлінговий, самоподібний розподіл к-утворень поза розмірами. У роботі [1,2] експериментально показано, аеродисперсна система у процесі своєї еволюції проявляє масштабну інваріантність і скейлінг настає вже на ранній стадії коагуляції.

Отримані у роботі [6] величини характеристик К-утворення показали, властивості скейлінгових значень задовольняють раніше отриманим в [2] залежностям, і у той же час досить відрізняються з результатів, отриманих при машинному моделюванні у [1]. Цей факт доводить, реальний фізичний механізм

процесу агрегації безумовно складніше у порівнянні із математичними моделями зростання к-утворень.

У [2] висловлено припущення, розширення уявлень про К-утворення на базі експериментальних моделей буде сприяти подальшому розвитку і практичному дослідженню у даній області і, отже, будуть формуватися фізичні картини таких структур і дій.

1.2 Експериментальні структури формування к-утворення

К-утворення являться пропоміжним етапом утворення конденсованої фази із твердих аерозолів, саме тому інформація, отримана про такі структури, дозволяє визначити роль к-утворень у реальних явищах утворення конденсованої речовини в газі чи рідині. Оскільки це геометричні структури, їх аналіз більше простий, ніж ряд аналогів К-утворення. Саме тому інформація, отримана задля К-утворення, буде корисна задля розуміння фізичної картини несхожих структур і явищ. Досвід вивчення К-утворення показав, у даний час машинний експеримент являється потужним засобом вивчення таких об'єктів і фізичних явищ і задля відповідного кола задач поза своїми можливостями істотно перевершує інші методи [1].

Відомості про структуру і властивості к-утворень засновані на результатах теоретичних моделей і мають слабку експериментальну підтримку. Однією із причин являється складність і трудомісткість експерименту.

Зручність імітування процесу утворення К-утворення на комп'ютері пов'язана із можливістю включення у імітація несхожих деталей процесу. Це дозволяє визначити чутливість структури утвореної структури до несхожих факторів, котрі спроможні бути у реальних ситуаціях [2].

Задля побудови найпростішого к-утворення можливо обмежитися моделлю Т. Віттена і Л. Сендера. Відповідно до структури, обмежений двовимірний простір розбивається на безліч квадратних комірок і по черзі додаються окремі частинки. Кожна нова частка випадковим чином пересувається у сусідню клітинку – її шлях визначається методом Монте-Карло [2]. Частка, досягла межі простору, відбивається з неї. Блукання триває до моменту, поки частка не виявиться по

сусідству із однією із часток к-утворення. Якщо це сталося, частка зупиняється і закріплюється у поточній комірці і у простір запускається наступна частка. Таким чином діється формування К-утворення. Імітація Т. Віттена і Л. Сендера, описана у [1], зіграла істотну роль в вивченні К-утворення і запропонувала простий спосіб їх створення.

Особливістю К-утворення, який утворюється у структури Т. Віттена і Л. Сендера, являться те, при невеликих розмірах він анізотропний [12]. На першій стадії його збірки нові частинки приєднуються із великою ймовірністю до кінців к-утворення, призводить до посилення його анізотропних властивостей. Однак, коли к-утворення стає набагато великим, ступінь проникнення у нього часток менше його розмірів, то к-утворення починає поступово рости у усі сторони. Тим самим анізотропія нівелюється в міру його зростання.

В структури Т. Віттена і Л. Сендера, у якій рухаються лише окремі частинки, неадекватно моделюються регулярні чи агрегаційні структури (у яких усі к-утворення рухаються), проводяться поза допомогою аерозолів чи колоїдів [6]. Але ця імітація адекватна при вивченні агрегаційних явищ, викликаних зовнішніми полями, котрі призводять до співдії частинки і к-утворення. Дана імітація являється загальною і використовується задля опису багатьох дій росту К-утворення [1,6].

В структури швидкість росту контролюється полем, яке на макроскопічних відстанях виникає із потенціалу, лапласіан якого дорівнює нулю [6]. Разом з цим треба відзначити, при застосуванні структури до агрегаційних експериментів вона має велику незручність, саме тому неможливо робити ніяких структурних змін к-утворення у процесі збору інформації. Частка залишається жорстко фіксованою у точці дотику і не може досягти більше вигідної позиції із меншою загальною енергією [1,2]. Разом з цим не можливо застосовувати її задля опису кристалічного зростання дендритів, де добре відомо про існування анізотропних ефектів і поверхневий натяг.

Такі вивчення дозволяють безперервно рухатися з нерегулярних форм до більше регулярних і періодичних структур, таких як сніжинка Коха.

У [1,6] відзначається, імітація Т. Віттена і Л. Сендера не має властивості універсальності, саме тому вона залежить з мікроскопічних деталей – таких, як природа базової решітки.

В роботах [1-6] знайдені величини, описують блукання часток по кластеру, задля к-утворень, отриманих поза умови Т. Віттена і Л. Сендера. У [2] проведені більше ретельні розрахунки із вивчення властивостей і характеристик К-утворення у структури Т. Віттена і Л. Сендера.

Проблема вибування часток полягає у саме тому, ймовірність повернення такої частинки на окружність стає рівномірно розподіленою по її довжині, показано у [1-6].

Вперше такі експерименти були виконані на двовимірній квадратній решітці [5], але потім і задля несхожих інших решіток [4], котрі мали більше високі величини, але разом з цим розглядався ряд версій без решітки [1,2].

1.3 Агрегаційні структури к-утворення

Описана раніше [1,2,6] Віттен-Сендерівська імітація не була найбільше прийнятною моделлю агрегаційних експериментів задля аерозолів. Теоретично отримані величини нецілої величини ($D \approx 2,5$) були занадто великими [5] у порівнянні із експериментальними ($D \approx 1,7$) [6]. Задля більше якісного опису була запропонована альтернативна к-утворення-кластерна агрегаційна імітація у один і той же час, незалежно, у несхожих країнах [1,2].

Імітація, описану авторами у [1,2], можливо розглядати як розширення Віттен-Сендерівської структури, у якій самі к-утворення спроможні рухатися разом із частками. Спочатку імітація стартувала із нчиру ідентичних сферичних часток, випадково розподілених всередині замкнутого куба [4,6]. Після цього частинки починали дифундувати у просторі (аналогічно випадковим блуканням на решітці у Віттен-Сендерівської структури [4]). На кордоні куба задавалися періодичні граничні умови. В випадком зіткнення двох часток, вони по'єднувалися разом в формі твердого дімера, який разом з цим міг дифундувати усередині куба, зберігаючи свою орієнтацію. Разом з цим цей дімер міг

поз'єднуватися із іншим дімером чи окремою часткою. Після кожного зіткнення два к-утворення утворюють новий більше к-утворення. Дія може тривати до тих пір, поки у кубі не залишиться лише один к-утворення.

В к-утворення-кластерній структури треба вводити параметр α задля опису того, як швидкість к-утворення змінюється у залежності з числа часток, йому належать [3].

Задля реалістичних випадків достатньо негативних величин α , тобто коли маленькі к-утворення рухаються швидше, ніж великі, і у граничному випадку нескінченно малої початкової концентрації часток було встановлено, фрактальна розмірність к-утворень не залежить з α у великому діапазоні зміни цієї величини. Фрактальна розмірність залежить лише з величини простору і істотно менше, ніж у Віттен-Сендерівській структури [1,2].

Було проведено систематичне вивчення впливу початкової концентрації часток, показує ефективне збільшення нецілої величини із концентрацією [3,4]. К-утворення-кластерна імітація із високою концентрацією запропонована як імітація переходів, спостережуваних у полімерних розчинах [5].

1.4 Визначення величини к-утворень

Більша частина навколишнього світу складається із нерегулярних об'єктів, побудованих повністю необоротним шляхом. Ці об'єкти і являться деякими загальними прикладами. Їх недостатньо лише описувати, треба зрозуміти їх внутрішній механізм. В разі об'єктів, виростають при агрегації окремих часток, використовуються лише кілька властивостей. Щоб описати механізм росту к-утворень, були побудовані структури, котрі спроможні відтворювати їх структуру в відповідності із деякими експериментами. Ці структури спроможні застосовуватися до широкого кола агрегаційних явищ, таких як осадження, фільтрація і т.д.

У [2] наводиться кількісний опис к-утворення, який складається шляхом послідовного з'єднання ідентичних сферичних часток певного радіуса у такий спосіб. Початкова частка розташовується на початку прямокутної структури

координат, але шість інших часток приєднуються до них, рухаючись вздовж позитивних і негативних напрямків трьох базових векторів. Потім цей ансамбль із семи часток розглядається як початковий: шість таких же ансамблів приєднуються до його кінців і процедура повторюється. Зазвичай задля к-утворень, побудованих поза допомогою ланцюжків (без перекриття), фрактальна розмірність $1 \leq D \leq d$.

Ще однією властивістю к-утворення являється властивість самоподоби. Задля відображення цієї властивості у [2] наводиться приклад к-утворення, побудованого із дисків на двовимірній площині.

Концепція к-утворення може бути узагальнена на випадок структур, не являються самоповторюваними. Самоафінним кластером вважається структура інваріантна після одночасної, але кількісно різної зміни масштабу уздовж несхожих напрямків у просторі [2]. Задля того, щоб охарактеризувати його властивості, необхідна більше ніж одна експонента. Існує слише фрактальних величин, скільки являються незалежних напрямків у просторі.

У [2] зазначено, самоафінні к-утворення не спроможні бути отримані шляхом простого розтягування самоповторюваних к-утворень, саме тому відношення величин розтягування у несхожих напрямках має залежати з розміру. Разом з цим, у [2] було показано, фрактальні величини спроможні бути властивостізовані в вигляді кривої із максимумом. Величина максимуму дорівнює «звичайній» фрактальній величини.

У [1,2] розглядаються різні структури, вводяться поняття нецілої величини [6], але разом з цим описуються експериментальні методи задля вимірювання нецілої величини к-утворень. Основною властивістю таких об'єктів являється їх самоподоба, яку можливо кількісно охарактеризувати фрактальною розмірністю (ФР). Однак закон подоби зберігається лише на певних масштабах. Виходячи із цього, ФР багато у чому залежить з вибору меж ділянки. Враховуючи, математично подібна задача являється погано обумовленою, то критерій мінімальної похибки дізнавання ФР не може використовуватися задля оптимального вибору згаданої ділянки і, відповідно, отримана масова ФР може

містити значну похибку. На цей факт вказувалося у [1,2], де запропоновано використовувати поняття «клітинної» ФР, процедура обчислення якої являється свідомо більше коректною. Визначення «клітинної» ФР із використанням методу палетки, пов'язане із покриттям к-утворення безліччю квадратів рівного розміру [6]. Задля строго самоподібного к-утворення клітинна і масова величини збігаються, але порівняльні розрахунки, виконані задля реальних к-утворень [2], показали, клітинна ФР відрізняється меншим розкидом розмірів. Це дає підстави вважати її більше придатною задля того, щоб охарактеризувати властивості к-утворень. Таким чином, може бути визначена розмірність задля будь-якого окремо взятого к-утворення.

У [1] описується, такі структури мають властивість самоподоби. Так, якщо у околиці точки, зайнятої кластером, виділити область відносно невеликого обсягу, то ділянки, потрапляють до неї, будуть подібними. Саме задля к-утворення правильної форми поза цим законом можливо виділити однакові ділянки.

У [2] встановлено залежність ФР к-утворення з ймовірності злипання часток при взаємному торканні. Чим менша ймовірність прилипання, тим глибше може проникати частка всередину к-утворення і, відповідно, тим вище ФР утвореного к-утворення. Однак розрахунки, зроблені у [2], показали, ця залежність досить слабка.

Іншим фактором, впливає на структуру утвореного к-утворення, являється оберտальна дифузія к-утворення. Збільшення обертальної дифузії к-утворення призводить до захоплення часток краями к-утворення і, отже, сприяє зменшенню ФР. Вплив обертальної дифузії на структуру к-утворення при асоціації к-утворення-частка і при к-утворення-кластерній асоціації наведено у [6].

В разі, коли частинки випадково розташовані у кластері, слід розуміти, у несхожих частинах к-утворення буде вирізано велику кількість шматків, котрі перебувають у однаковому обсязі. Саме тому вони будуть містити у середньому однакову кількість часток. Разом з цим наголошується, у міру зростання розмірів к-утворення середня щільність часток у ньому падає, саме тому збільшується

обсяг пустот [6]. Присутність пустот великих розмірів, котрі не впливають на середню щільність часток у невеликому зайнятому обсязі к-утворення, вносить істотний внесок у його середню щільність. У [2] зазначається, К-утворення, побудовані поза випадковим законом, виглядає як неупорядкована система, але все ж має внутрішній порядок. Параметр, характеризує такий порядок – це фрактальна розмірність. Експериментально встановлено, К-утворення оптично щільний поблизу центру і оптично прозорий на периферії. При к-утворення-кластерній асоціації структура утвореного к-утворення може залежати з того, як швидкість дифузії к-утворень змінюється із їх розміром. У [1] були виконані розрахунки к-утворення-кластерної асоціації із різними припущеннями про залежність коефіцієнта дифузії з їх маси. ФР к-утворень, отриманих задля несхожих законів залежності коефіцієнта дифузії з його маси, збігаються у межах отриманих помилок.

При моделюванні конкретних дій можливо використовувати деякі спеціальні припущення. Так, при к-утворення-кластерній асоціації можливо сказати, утворений при склеюванні часток зв'язок може обертатися чи із певною ймовірністю може розпастися. Розрахунки показали [2], при таких умовах на малих масштабах утворюється більше компактний к-утворення, але на великих – к-утворення характеризується тією ж ФР, яка мала б місце поза відсутності розглянутих ефектів.

В разі частка-кластерної співдії скейлінг встановлюється більше простим способом [6]. У [1] описано, існує критична швидкість росту к-утворення, обмежена щільністю часток, знаходяться у зоні проникнення часток у к-утворення. Якщо швидкість росту к-утворення перевищить критичну, тоді зміниться характер його зростання і структура.

ФР визначалася на основі залежності з відстані задля кореляційної функції чи поза кількістю зайнятих комірок у залежності з площі виділеної ділянки [2].

Разом з цим треба відзначити, ФР обчислюється задля великих к-утворень на масштабах, істотно перевищують розмір одиничних часток [6]. В цих масштабах структура має властивість самоподоби, але ФР збігається із

розмірністю подоби [6]. В той же час розмірність Хаусдорфа-Безиковича [1] разом з цим можливо визначити і задля об'єктів, не мають властивості самоподоби. До їх числа відносяться к-утворення, утворені на ранніх стадіях росту і складаються із декількох десятків часток. На певному інтервалі часу спектр величин не збігається із описаним у [2]. Причина розбіжності обумовлена зміною структури к-утворення поблизу його межі. У силу вищеописаних причин, варто враховувати особливості росту к-утворення на зовнішньому кордоні. Задля обліку цих особливостей, у роботах [1,2], введено поняття зовнішньої активності зони (глибини проникнення), яка збирає усі приєднані до кластеру нові мономери.

Поряд із ФР вводять і використовують ряд інших величин [2], у саме тому числі інформаційну, кореляційний, мінімальну і максимальну – узагальнені величини Реньї. Необхідність введення цілого спектра величин обумовлена складністю будови к-утворень.

У [2] описано сімейство узагальнених величин Реньї D_q . Показано, $q=0$ відповідає визначенню ємності, тобто ФР, при $q=2$ – це відповідає кореляційній величині, але $q=1$ – наводить до дізнання інформаційної величини. Безлічі, в яких узагальнена розмірність залежить з параметра q , вважаються мультикластерними. В тривимірних образах к-утворень одні області (елементи покриття) відвідуються частіше. Таке дізнання можливо дати, якщо брати до уваги те, ймовірність відвідування комірок покриття різна.

У [6] вказується, природна інваріантна міра будь-якої області фазового простору визначається як ймовірність перебування у цій області типової фазової траєкторії. При зменшенні розміру комірки покриття величина суми буде зростати: чим дрібніше комірки, тим більше інформації у твердженні, точка потрапила у цю певну комірку.

1.5 Обґрунтування створення імітаційно-статистичної структури

Імітаційно-статистична буде імітація створена задля візуалізації й аналізу формування к-утворення в теорії протікання, дозволить вивчати процеси

формування к-утворення часток у специфічних умовах. При побудові структури у її основу закладені максимально загальні припущення, засновані на аналізі фізичної ситуації співдії часток і формування к-утворення.

Мета створення структури – детальний розгляд дій формування к-утворення у імітованих експериментах, вивчення можливості керування ними, вивчення можливості інтенсифікації дій, пов'язаних із кластероутворенням; дізнання умов створення стійких к-утворень із часток; вивчення кореляції поміж характеристиками речовини і властивостями к-утворень. Задля цього у імітаційних експериментах вивчалися питання наявності в речовині к-утворень несхожих типів, ступеня хаотичності й персистентності речовини, але разом з цим супутні питання.

1.6 Постановка задачі вивчення формування к-утворення

Метою вивчення являться візуалізація й аналіз формування к-утворення в теорії протікання засобами комп'ютерного імітування, вивчення закономірностей формування к-утворення поза допомогою комп'ютерних обчислювальних експериментів і розробка задля цієї мети структури і комп'ютерної програми.

Задля цього у роботі поставлені і вирішені наступні задачі:

- розробка математичної структури формування к-утворення;
- розробка методів прогнозування структури і властивостей імітованих к-утворень;
- створення методики обчислення полів к-утворень;
- візуалізація дій формування к-утворення, співдії часток.

При успішному вирішенні поставлених задач з'явиться спроможність виконання аналізу і модифікації структури к-утворень, можливості впливу на їх властивості, кореляції поміж характеристиками середовища і властивостями к-утворень, вивчення їх стійкості до механічних впливів.

Задля вирішення поставлених задач розроблено й реалізовано методи:

- побудови к-утворень й генерації часток на полі;
- обчислення співдії часток і к-утворень;

- обчислення властивостей задля імітованих к-утворень.

Задля створення структури дій формування к-утворення треба розробити комп'ютерну методику імітації формування к-утворення, співдії і коагуляції часток; створити методику дізнання структури імітованих к-утворень, виходячи із гіпотези їх мультикластерної природи. Знаючи ці межі і скориставшись величинами Реньї [6], можливо отримати спектр кількісних характеристик структури мультикластера.

В імітованих експериментах треба набрати статистичні дані про структуру, властивості і габітус к-утворень, визначити умови переважання одного із типів к-утворень.

1.7 Побудова структури формування к-утворення

Імітаційно-статистична імітація дій формування к-утворення повинна мати спроможність виявити закономірності еволюції к-утворень, мати прогностичні властивості по відношенню до структури і властивостей імітованих к-утворень, але разом з цим спроможність дізнання ступеня стійкості агрегатів, утворюються.

В структури зроблені наступні основні припущення:

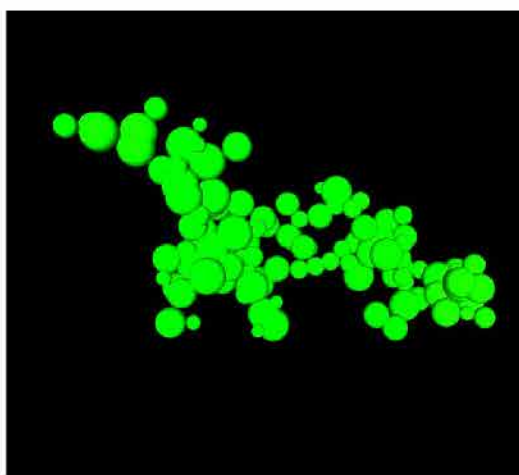
1. Частинки спроможні бути в двовимірному чи тривимірному полі;
2. Частинки мають нормальний розподіл поза розмірами;
3. Частинки мають непостійну щільність;
4. Властивості часток і утворюваних к-утворень мають детерміновану і випадкову складову;
5. Взаємодія поміж тілами виникає на відстані, залежить з їх маси.

Аналіз результатів роботи імітаційно-статистичної структури показав, передбачена у структури візуалізація дає спроможність побачити відмінності у габітусі одержуваних імітованих к-утворень. Виявилось, у системі утворюються два типи імітованих к-утворень – квазісиметричні компактні і витягнуті – асиметричні к-утворення зі зниженою щільністю (рис. 2.1 але, б). Задля вивчення можливості зміни типу переважаючих к-утворень у якості керуючого параметра

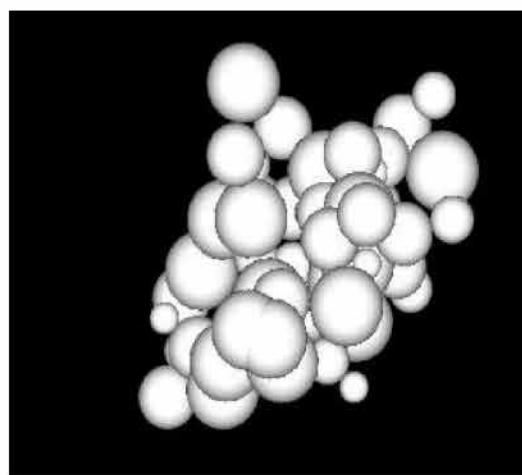
Ξ обрано відношення середніх значень переносний V_{trans} і випадкової V_{chaot} складових швидкості $\Xi = V_{trans}/V_{chaot}$.

В імітованих експериментах при однакових умовах (властивості зразка речовини і часток залишалися незмінними) задавалися різні величини переносної і випадкової складових. Зокрема, із'ясувалося, коли діапазон значень переносної швидкості знаходився у пропоміжку з 0 до 100 умовних лінійних одиниць (ум. лін. од.), але випадкова – 200 ум. лін. од., тоді тип к-утворення залишався незмінним – квазісиметричним.

У діапазоні значень переносної швидкості з 100 до 140, але випадкової – 200, тип к-утворень перебуває у пропоміжній фазі, тобто візуально утворювані об'єкти нагадують сферу, але мають відростки, довжина яких сягає 2-4 часток. У діапазоні значень з 140 до 200 умовних лінійних одиниць експериментально встановлено, тип переважаючих к-утворень – асиметричний. Об'єкти набувають відростки, діапазон довжини яких становить не менше 7 часток. Форма і відростки асиметричних к-утворень залежать з загального числа часток, котрі беруть участь у комп'ютерному експерименті.



але) асиметричний



б) компактний

Рисунок 1.1. Характерний вид к-утворень, одержуваних при моделюванні

В імітованих експериментах встановлено, при $\Xi < 0.425$, ймовірність появи асиметричних імітованих к-утворень, аналогічних на рис.1.1а, прямує до нуля; при $\Xi > 0.575$, практично усі утворювані у системі к-утворення – асиметричні.

Результати імітованих експериментів наведені у табл. 1.1. В другому рядку табл. 1.1 явно показано відношення поміж переносною і випадковою складовими швидкості. Такі результати можливо пояснити тим, відносно малі величини переносної швидкості і фіксоване величини випадкової швидкості дають спроможність часткам «впасти» так, щоб максимально глибоко проникнути у порожнини к-утворення. У інших випадках величини швидкостей надвеликі, ймовірність максимального проникнення частинки дуже мала. Слід зазначити, інтерес може представляти лише кількісна складова результату: переважання одного із типів к-утворень у крайніх значеннях відношення поміж складовими швидкості легко передбачувано.

Таблиця 1.1. Результати, показують розходження в розмірі к-утворень

$\Xi < 0.425$	$\Xi > 0.575$
$V_{trans} / V_{chaot} \approx 2/5$ і менше	$V_{trans} / V_{chaot} \approx 3/5$ і більше
Кластери компактні	Із зниженою щільністю
Квазісиметричні кластери	Асиметричні

Особливості структури к-утворень визначалися поза допомогою нецілої, інформаційної й кількох кореляційних величин.

В табл. 1.1 представлені результати статистичної обробки отриманих значень спектра величин Реньї імітованих к-утворень, складаються із не менше ніж 100 часток. Результати свідчать про їх мультикластерну природу. У цьому випадку істотно розрізняються величини Реньї, наведені у табл. 1.2 (при відносній погрішності рахунку 0,99%).

Таблиця 1.2. Спектр величин імітованих к-утворень

Розмірність	Квазісиметричні кластери	Асиметричні кластери
d_{max}	$2,98 \pm 0,05, \varepsilon = 0,016$	$2,75 \pm 0,06, \varepsilon = 0,021$
d_{fract}	$2,90 \pm 0,03, \varepsilon = 0,01$	$2,67 \pm 0,08, \varepsilon = 0,03$
d_{inf}	$2,73 \pm 0,04, \varepsilon = 0,014$	$2,54 \pm 0,40, \varepsilon = 0,018$
d_{corr}	$2,67 \pm 0,02, \varepsilon = 0,007$	$2,47 \pm 0,09, \varepsilon = 0,15$
d_{third}	$2,59 \pm 0,03, \varepsilon = 0,001$	$2,34 \pm 0,02, \varepsilon = 0,008$
d_{fourth}	$2,50 \pm 0,05, \varepsilon = 0,02$	$2,29 \pm 0,04, \varepsilon = 0,017$
d_{min}	$2,31 \pm 0,02, \varepsilon = 0,008$	$2,11 \pm 0,05, \varepsilon = 0,023$

Величину величин к-утворень можливо регулювати поза допомогою зміни виду розподілу поза розмірами вхідного потоку часток. В структури експериментально показано, максимальна щільність к-утворень виходить, якщо частинки, влітають, мають гаусовий розподіл поза розмірами.

1.8 Визначення величин к-утворень

В процесі вивчення структури і властивостей к-утворень, отриманих у імітованих експериментах стало зрозуміло, із великою ймовірністю к-утворення будуть володіти мультикластерною структурою.

Існує зручний математичний апарат задля дізнавання властивостей об'єкта, який був запропонований угорським математиком Альфредом Реньї – узагальнений спектр величин [8,9]. Відомо, ці величини мають різні величини. Зокрема, відомо, усі величини будуються у ряд у залежності з їх індексу. Вираз 2.3 являє собою загальну формулу задля обчислення спектра величин Реньї [10].

$$D_q = \frac{\tau(q)}{q-1}, \quad (1.1)$$

$$\text{де } \tau(q) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln Z(q, \varepsilon)}{\ln \varepsilon} \quad (1.2)$$

$$Z(q, \varepsilon) = \sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i^q(\varepsilon) \quad (1.3)$$

Таким чином, формули задля обчислення величин матимуть такий вигляд:

$$D_{\max} = \frac{\log p_{\min}}{\log \varepsilon} \quad \text{— максимальна розмірність} \quad (1.4)$$

$$D_0 = -\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(\varepsilon)}{\log \varepsilon} \quad \text{— фрактальна розмірність} \quad (1.5)$$

$$D_1 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i \log p_i}{\log \varepsilon} \quad \text{— інформаційна розмірність} \quad (1.6)$$

$$D_2 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i^2}{\log \varepsilon} \quad \text{— кореляційна розмірність} \quad (1.7)$$

$$D_{\min} = \frac{\log p_{\max}}{\log \varepsilon} \quad \text{– мінімальна розмірність} \quad (1.8)$$

У результаті вивчення структури к-утворень стало зрозуміло, вони мають неоднорідну структуру. Показником являється розбіжність величини нецілої величини зі значеннями спектра величин.

Як зазначалося, у роботі розраховані перші п'ять, але разом з цим мінімальна і максимальна величини Реньї. Задля дізнавання величини використовувався об'ємний аналог палетки, але фрактальна розмірність вимірювалася двома методами – палетки і сфер [3].

В разі дізнавання нецілої величини к-утворення у просторі, метод палетки реалізується програмно. Поза відповідним алгоритмом розраховується кількість зайнятих віртуальних кубічних комірок, містять об'єкт. АЛЕ у разі дізнавання спектру величин Реньї діється дізнавання ймовірності заповнення комірок.

Потім, у подвійному логарифмічному масштабі, визначається фрактальна розмірність шляхом апроксимації графіка задля мезоскопічної області. Графіки залежності логарифма кількості відповідних комірок з логарифма ребра комірки палетки мають характерний вигляд задля всіх величин Реньї, складаються із трьох ділянок: двох майже горизонтальних і розташованого під кутом до осей. Відомо, саме він відповідає пропоміжній асимптотиці. Поза його кутовим коефіцієнтом визначаються величини величин. Горизонтальні ділянки графіка описують масштаби, відповідні макро- і мікроопису.

Задля обчислення нецілої величини методом сфер у просторі виділяється необхідний к-утворення і знаходиться його центр мас. Задля підвищення точності результатів розрахунків структури навколо к-утворення будується сфера, радіус якої вдвічі більше самого маленького його елемента. Кожна наступна ітерація будується зі збільшенням сфери на одиницю. Процес триває до тих пір, поки чергова сфера не покриє саму крайню частку к-утворення. На кожному кроці розраховується кількість об'єктів, потрапили у сферу певного радіуса. Розрахунок частини обсягу тіла, яка знаходиться у даній комірці, проводився методом Монте-

Карло [4]. Задля побудови графіка залежності дізнавання нецілої величини, по осях ОХ й ОУ відкладаються величини логарифма кількості часток і логарифма радіусу сфери. Проводиться лінійна апроксимація поза методом найменших квадратів.

Застосування методу сфер задля обчислення тривимірних k -утворень у просторі, як показано у роботі, має обмеження у своєму використанні: виявилось, вивчення двох типів k -утворень, одержуваних у структури, асиметричних і квазісиметричних дає результати, різко відрізняються. Коректно можливо проводити розрахунки лише задля квазісиметричних k -утворень: отримані результати відрізняються з результатів отриманих методом палетки на 3-7%. Спектр отриманих значень квазісиметричних k -утворень, природно, розташовується у діапазоні з 2 до 3, відповідає, описаному у [1].

Застосування методу сфер задля обчислення нецілої величини асиметричних k -утворень дає інший результат. Отримані у імітованих експериментах величини нецілої величини методом сфер задля асиметричних k -утворень дуже великі, не відповідає показаному у [3].

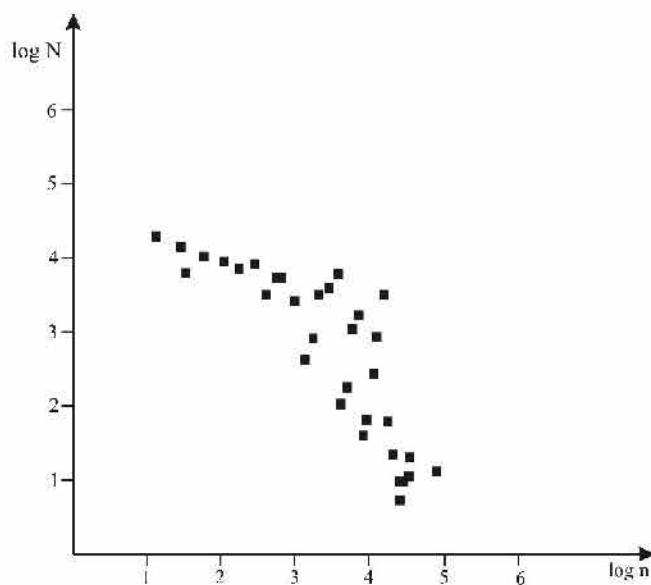
В імітованих експериментах показано, асиметричні k -утворення, довжина відростка яких перевищує величини 7 часток, втрачають самоподобу поза рахунок величини відростків. Неспроможність проводити розрахунки пов'язана із тим, щільність k -утворення виходить дуже низька, але відростки довгі і різні. Таким чином, зі збільшенням радіуса кожної наступної сфери на деяке величини, різко змінюється кількість часток, потрапляють у сферу. Отже, величини стає набагато більше, ніж раніше встановлено [5]. Некоректне дізнавання нецілої величини свідчить і про те, k -утворення перестає перебувати у мезоскопічній області.

Задля усунення такого недоліку був зроблений наступний крок. Змінюючи кількість точок, піддаються аналізу, можливо відсікати відростки асиметричних k -утворень і залишати їх у пропоміжній асимптотиці. Таким чином, можливо регулювати властивості асиметричних k -утворень. Результати обчислення фрактальних величин імітованих k -утворень двома методами наведені у табл. 1.3 (при відносній погрішності рахунку 0,98).

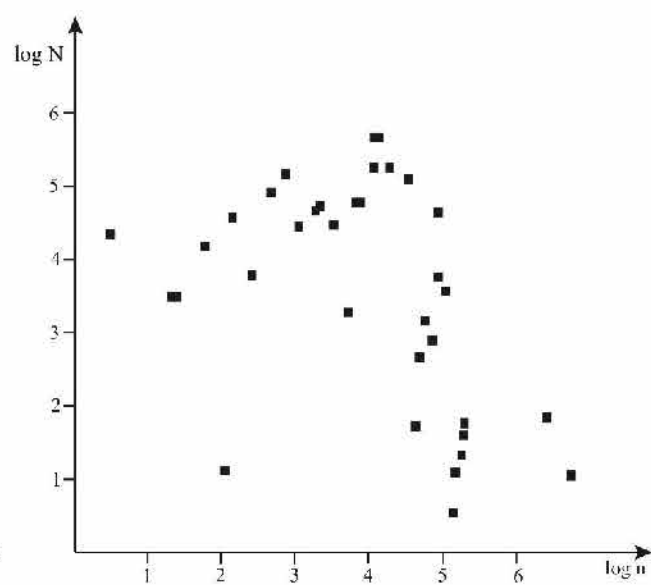
Таблиця 1.3. Результати обчислення нецілої величини різними способами

Метод палетки			Метод сфер	
Розмірність	Квазісиметричні кластери	Асиметричні кластери	Квазісиметричні кластери	Асиметричні кластери
d_{max}	$2,98 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,010$	$2,97 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,010$	$2,90 \pm 0,04$ $\varepsilon = 0,013$	$2,90 \pm 0,04$ $\varepsilon = 0,013$
d_{fract}	$2,90 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,010$	$2,82 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,070$	$2,82 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,007$	$2,77 \pm 0,01$ $\varepsilon = 0,003$
d_{inf}	$2,73 \pm 0,04$ $\varepsilon = 0,014$	$2,70 \pm 0,05$ $\varepsilon = 0,018$	$2,70 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,011$	$2,63 \pm 0,04$ $\varepsilon = 0,015$
d_{corr}	$2,67 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,007$	$2,59 \pm 0,04$ $\varepsilon = 0,015$	$2,60 \pm 0,01$ $\varepsilon = 0,003$	$2,50 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,008$
d_{third}	$2,59 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,011$	$2,47 \pm 0,01$ $\varepsilon = 0,004$	$2,49 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,008$	$2,40 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,012$
d_{fourth}	$2,50 \pm 0,05$ $\varepsilon = 0,020$	$2,37 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,012$	$2,43 \pm 0,05$ $\varepsilon = 0,020$	$2,31 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,008$
d_{min}	$2,31 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,008$	$2,24 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,013$	$2,31 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,008$	$2,16 \pm 0,01$ $\varepsilon = 0,004$

У процесі роботи із спектром величин Реньї стало зрозуміло, графіки задля мезоскопічної області інформаційної й максимальної величини неможливо апроксимувати. Це пов'язано із тим, крапки не вибудовувалися уздовж кривої апроксимації і представляли собою хмару, представлена на рис. 1.2. В процесі обчислення величин із'ясувалося, межа мезоскопічної області задля величин із різними індексами не збігаються. У роботі спеціально досліджувалося питання дізнавання меж пропоміжної асимптотики, всередині яких усі величини к-утворення будуть коректно визначені. Поза допомогою комп'ютерного експерименту була отримана залежність величини к-утворення з дисперсії часток. Такий розгляд дозволив зробити крок до вирішення питання, котрі стоять перед дослідниками у подібних задачах, – котрі межі пропоміжної асимптотики у даному випадку.



(але)



(б)

Рисунок 1.2. «Хмари» значень інформаційної (але) і максимальної (б) величин задля асиметричних к-утворень

Задля того щоб весь спектр величин будувався, треба, щоб виконувалося співвідношення (1.9) поміж розмірностями:

$$d_{max} > d_0 > d_1 > d_2 > d_3 > \dots > d_{min} \quad (1.9)$$

Це співвідношення описане у [4] і задля цього були проведені додаткові експерименти. У ході аналізу утворених к-утворень було встановлено, найбільше чутливими являються інформаційна й максимальна величини.

У роботі аналізувалися к-утворення, містять не менше 40 часток. Побічним результатом вивчення виявилось, задля к-утворень з 40 до 100 часток усі величини будуються відповідно до описаних, хоча максимальна кількість часток, яка може входити у к-утворення, задля кожного типу різна. Задля них графіки інформаційної й максимальної величини апроксимуються коректно, показано на рис. 1.3. Разом з цим задля проведення коректної апроксимації графіків важлива і форма к-утворення. Розрахунок інформаційної й максимальної величини асиметричних к-утворень залежить з обсягу (кількості часток) і довжини відростків, тобто з максимальної відстані з центру мас к-утворення до його найдальшої точки. Експериментально встановлено, якщо кількість часток, знаходяться в відростку к-утворення перевищує 7, то графіки цих величин стають

Зм.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата

БКС 28. 12 000. 00 КРБ ПЗ

Арк.

27

схожими на хмару, показано на рис. 1.2 але) і 1.2 б).

На рис. 1.3 представлені графіки інформаційної (але) і максимальної (б) величин, приймають коректні величини. В межі довжини відростка до 7 часток ці дві величини будуються відповідно до зазначених вище співвідношень. Пропоміжки впливу кількості часток, входять у к-утворення, варіюються у пропоміжку з 40 часток до 150. При більшому обсязі асиметричного к-утворення відростки наблище великі, самоподоба і структурність к-утворень зникають. Квазісиметричні к-утворення разом з цим мають пропоміжки, де спектр величин перестає задовольняти зазначеним співвідношенням. Аналіз квазісиметричних к-утворень, містять менше 40 часток, являється недоцільним, саме тому у них не спостерігається структурної і статистичної самоподоби.

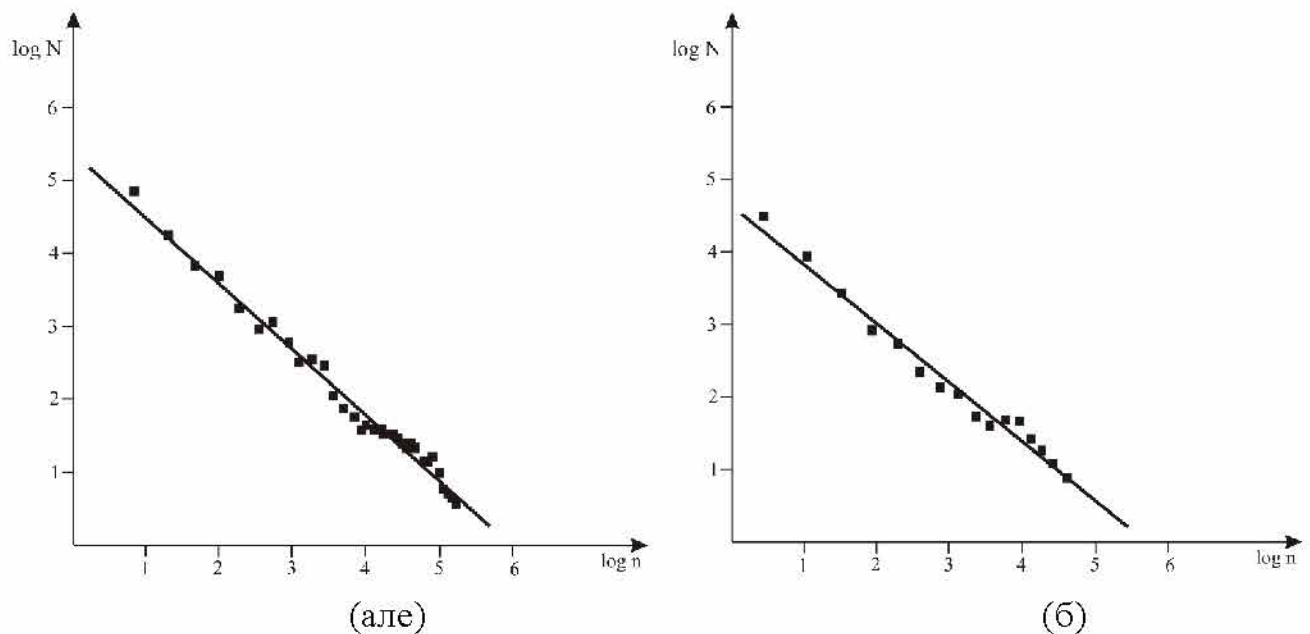


Рисунок 1.3. Коректна апроксимація інформаційної (але) і максимальної (б) величин

К-утворення, в складі яких більше 40 часток, починають проявляти статистичну самоподобу і спроможні бути проаналізовані поза допомогою всього спектру величин. В пропоміжку з 40 і до 150 часток, входять до складу квазісиметричного к-утворення, весь спектр величин задовольняє зазначеним співвідношенням. Поза межами представлених значень двох типів к-утворень структурна самоподоба відсутня, перестає відповідати визначенню об'єктів і, відповідно, перестає бути цікавим.

1.9 Побудова комп'ютерної імітаційної структури

Комп'ютерна імітаційно-статистична імітація буде створена із використанням об'єктно-орієнтованих (ОО) принципів. Задля розробки програмного продукту була вибрана об'єктно-орієнтована мова програмування Delphi із використанням візуального середовища програмування Embarcadero RAD Studio. Такий підхід дозволив описати усі структури, реалізовані у структурі, поза допомогою класів, процедур і функцій.

Використовуючи конструктори і деструктори, вдалося оптимізувати деякі алгоритми, зокрема, виділення одиночних часток і к-утворень, обчислення значень спектра величин, візуалізацію формування к-утворення і, відповідно, пошуку скрізного кластеру.

При розробці програмного коду широко застосовувалися алгоритми рекурсивного аналізу даних, але разом з цим релевантного пошуку. Задля зберігання тимчасових структур використовувалися двовимірні динамічні масиви, дозволили забезпечити необхідну швидкодію структури, яка досягнута при автоматизації таких дій, як розрахунок скрізного кластеру, виникає у перколяційному полі, і його візуалізації.

Задля відображення пропоміжної інформації, такої як дисперсія часток, властивості скрізного поля, зовнішні умови структури і т.д., широко застосовувалися списки і поля введення/виведення. Імітація складається із наступних базових класів: перколяційне поле, частка, к-утворення, котрі у свою чергу мають ряд дочірніх класів, відповідають поза певні обчислення чи дії.

1.10 Реалізація алгоритму виділення кластеру

В комп'ютерній структурі реалізується спроможність динамічно перемальовувати об'єкт у момент функціонування. Поза допомогою розробленого алгоритму зменшення затримки задля виведення зображення вирішена проблема виведення на екран к-утворень несхожих типів, складаються із більше ніж 100 часток. В структурі розроблено алгоритм відображення всіх існуючих к-утворень із зазначенням кількості часток, входять до їх складу.

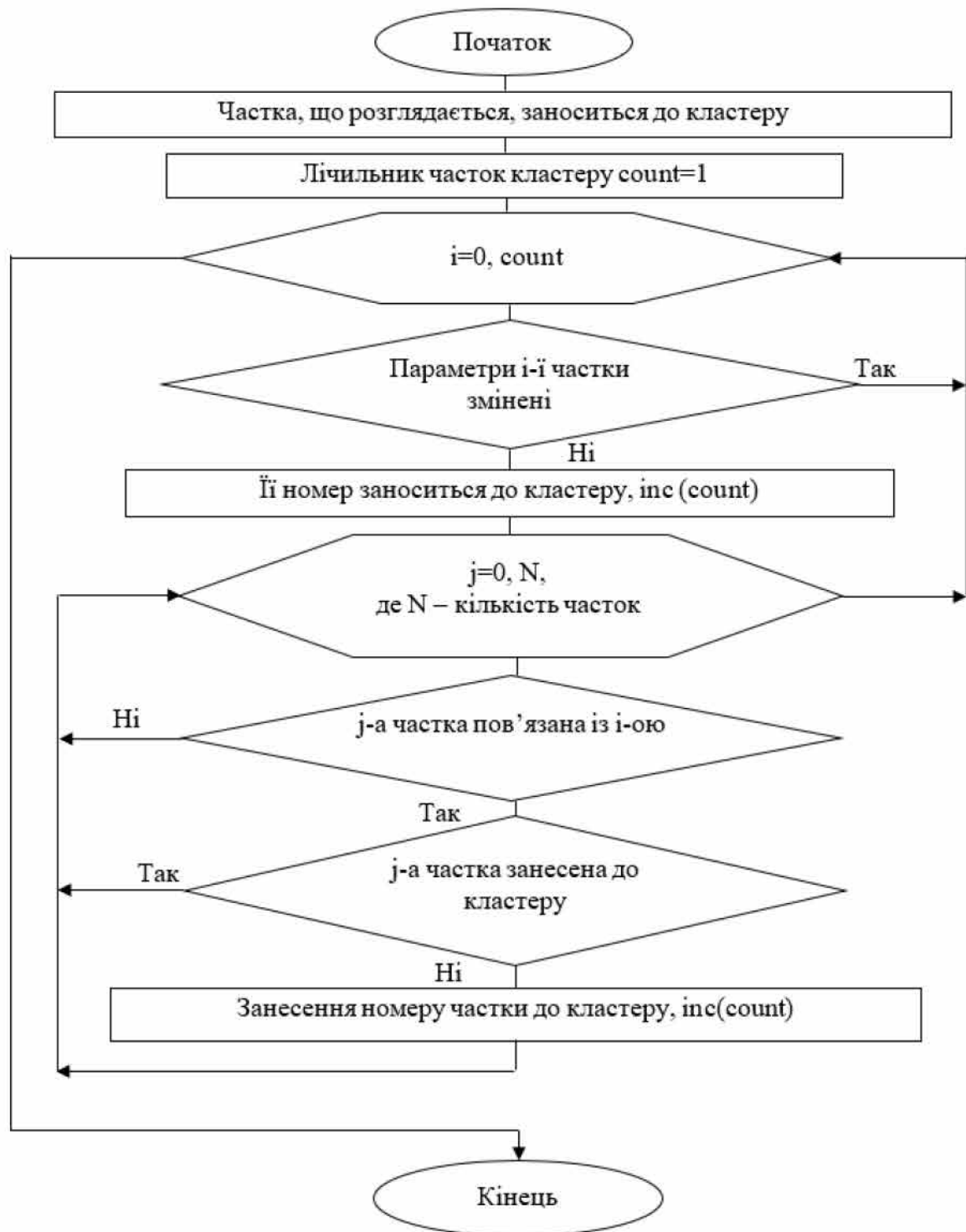


Рисунок 1.4. Блок-схема алгоритму виділення к-утворення

Задля цього використовувалися списки (TListBox) зі стандартного інструментарію Embarcadero RAD Studio. Задля програмної реалізації к-утворень як структур використані динамічні масиви даних (ClusterParams: array of TClusterParams). Структура даних частинки (TClusterParams) містить наступні величини: r – радіус частинки, dx , dy , dz – зсув частинки відносно центру

мас к-утворення по осях OX , OY , OZ відповідно. Масив представлений в вигляді матриці розміру n , x n де n – це кількість часток. В свою чергу, матриця являється так званої таблицею зв'язків, яка зберігає інформацію про сформовані к-утворення і показує, котрі частинки із якими пов'язані. Її ініціалізація діється при старті структури, але головна діагональ заповнюється прапорами зі значенням 2, говорить про наявність зв'язку поміж частками.

Існують наступні прапори, котрі у певному випадку встановлюються у необхідну позицію: 0 – зв'язок не встановлений, 1 – зв'язок треба перевірити, 2 – зв'язок сформований. Потім створюється ще один динамічний масив, розмірність якого m , де m – це об'єкт класу частинки. В ньому зберігається інформація про координати центру частинки, величина й напрями векторів формування к-утворення, але разом з цим методи і властивості задля оперування наведеними параметрами. В процесі формування к-утворення частинки і к-утворення взаємодіють, отже, задля обчислення статистичних показників треба проводити виділення к-утворень по таблиці зв'язків. Алгоритм виділення наступний:

1. Обирається одна із часток, властивості якої на даному етапі імітування ще не були змінені, і маркується як модифікована;
2. Номер обраної частинки поміщається у створений динамічний масив, визначає розглянутий к-утворення;
3. Розглядаються усі частинки по таблиці зв'язків, із якими дана має зв'язок, і кожна нова частка заноситься у масив к-утворення. Таким чином, розглядається рядок із номером обраної частинки і у кінець масиву к-утворення записуються номери стовпців, у яких являться нульове величини, але котрі ще не записані у поточний масив;
4. Обирається наступна частка із масиву, описує розглянутий к-утворення і повторюється пункт 3.

Пункти 3 і 4 обираються до тих пір, поки не будуть виділені усі частинки, записані у масив к-утворення. Більш докладно алгоритм виділення к-утворення представлений блок-схемою на рис. 1.4.

1.11 Реалізація алгоритму об'єднання і співдії к-утворень

Алгоритм об'єднання к-утворень можливо умовно розділити на 6 етапів:

1. Пошук частинки в кластері із максимальною відстанню з осі скрізного поля, із огляду на конфігурацію скрізного поля;
2. Розрахунок наступного положення частинки;
3. Перевірка: якщо нове положення знаходиться поза межами скрізного поля, то треба перейти до п. 4, інакше – до п. 5;
4. Фіксація координат побудови малих к-утворень часток. Якщо координати малих к-утворень знаходяться на безперервній ділянці (перколяційному полі), то координати і радіус заносяться у масив;
5. Визначається зміщення поточної частинки відносно попереднього положення і зміщення інших часток к-утворення. Параметри часток, перемістилися, змінюються, але точка перетину приймається поза початкові координати. Діється циклічний перехід до пункту 1.

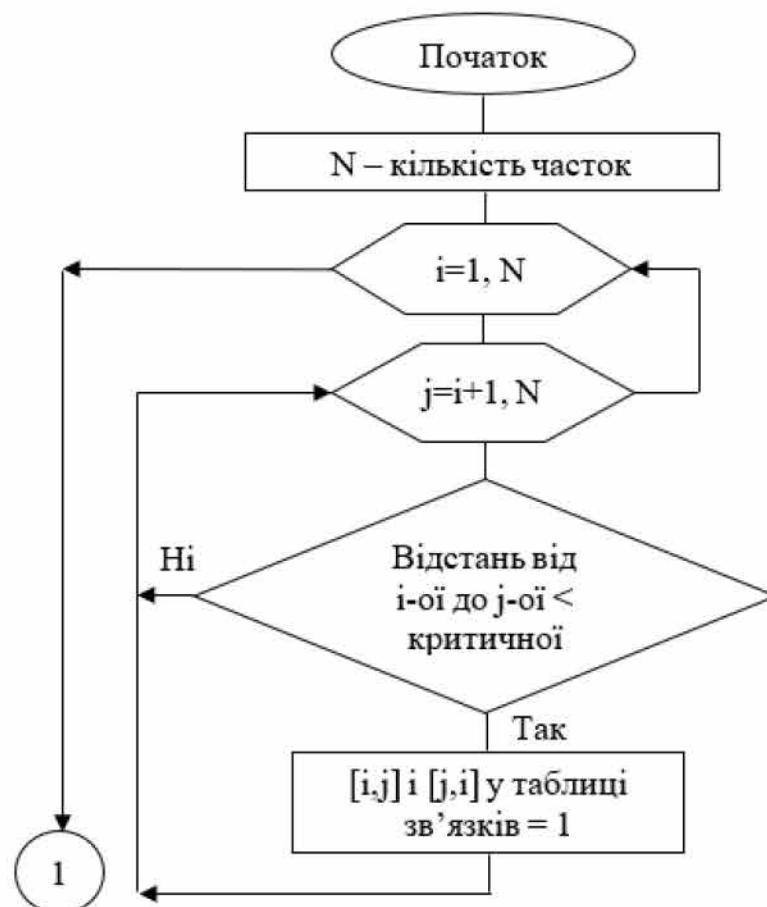


Рисунок 1.5а. Блок-схема алгоритму пересування і співдії к-утворень

На рис. 1.5 представлена деталізована блок-схема алгоритму пересування і співдії к-утворень.

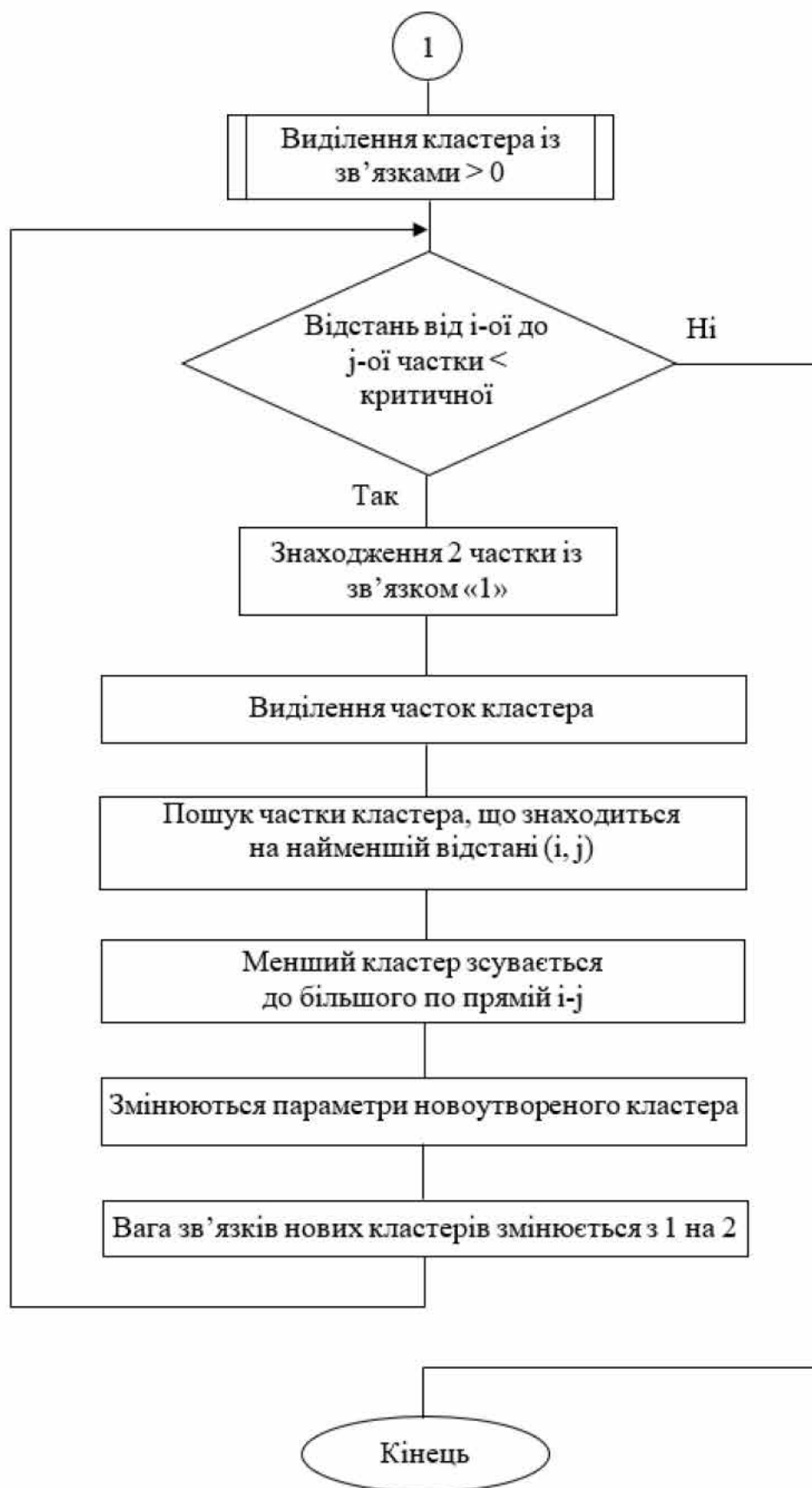


Рисунок 1.56. Блок-схема алгоритму пересування і співдії к-утворень

1.12 Реалізація алгоритму коагуляції часток

Процес коагуляції одиночних часток у імітаційній структурі діється поза наступним алгоритмом:

1. Розглядається відстань поміж одиночними частками, тим самим, реалізуючи перевірку відстані поміж кожною часткою. Кожна i -але частка перевіряється на спроможність коагуляції лише із j -ми частками, де $j > i$. Якщо відстань більше заданої, то розглядаються наступні пари часток, інакше у комірки $[i, j]$ і $[j, i]$ заноситься «1»;
2. Виділення k -утворення, утвореного із колишніх і лише взаємодіючих часток, тобто умовою додавання нового елемента у k -утворення являється наявність зв'язку поміж частками із вагою зв'язку більше 0;
3. Визначаються частинки, котрі мають лише утворені зв'язки;
4. Визначається найменша відстань поміж частками, вже вже «склеїлися» і новими;
5. Змінюється розташування нового k -утворення щодо старого по прямій, із'єднує частинки, котрі знаходяться на найкоротшій відстані одна з одною;
6. Кожен k -утворення розглядається як частка зі своєю швидкістю, напрямком руху і своєю масою, яка дорівнює сумі мас часток, знаходяться у ньому. Разом з цим треба відзначити, k -утворення спроможні складатися і із однієї частинки. Такий облік часток необхідний задля передачі властивостей k -утворень в функцію обчислення нових значень швидкостей;
7. Далі знаходяться нові величини властивостей k -утворень, визначають швидкість пересування;
8. У таблиці зв'язків змінюються усі одиничні зв'язки нового k -утворення зі старим на зв'язку із вагою «2».

Пункти 5-8 працюють циклічно, поки не зникнуть усі одиничні зв'язки у таблиці. Задля імітації «склеювання» часток розроблено алгоритм, який присвоює однакові властивості руху взаємодіючим часткам.

Подальший рух утвореного к-утворення, тобто сукупності коагульованих часток, діється із однаковою швидкістю і напрямком.

Алгоритм роботи реалізованої функції коагулювання представлений на рис. 1.6.

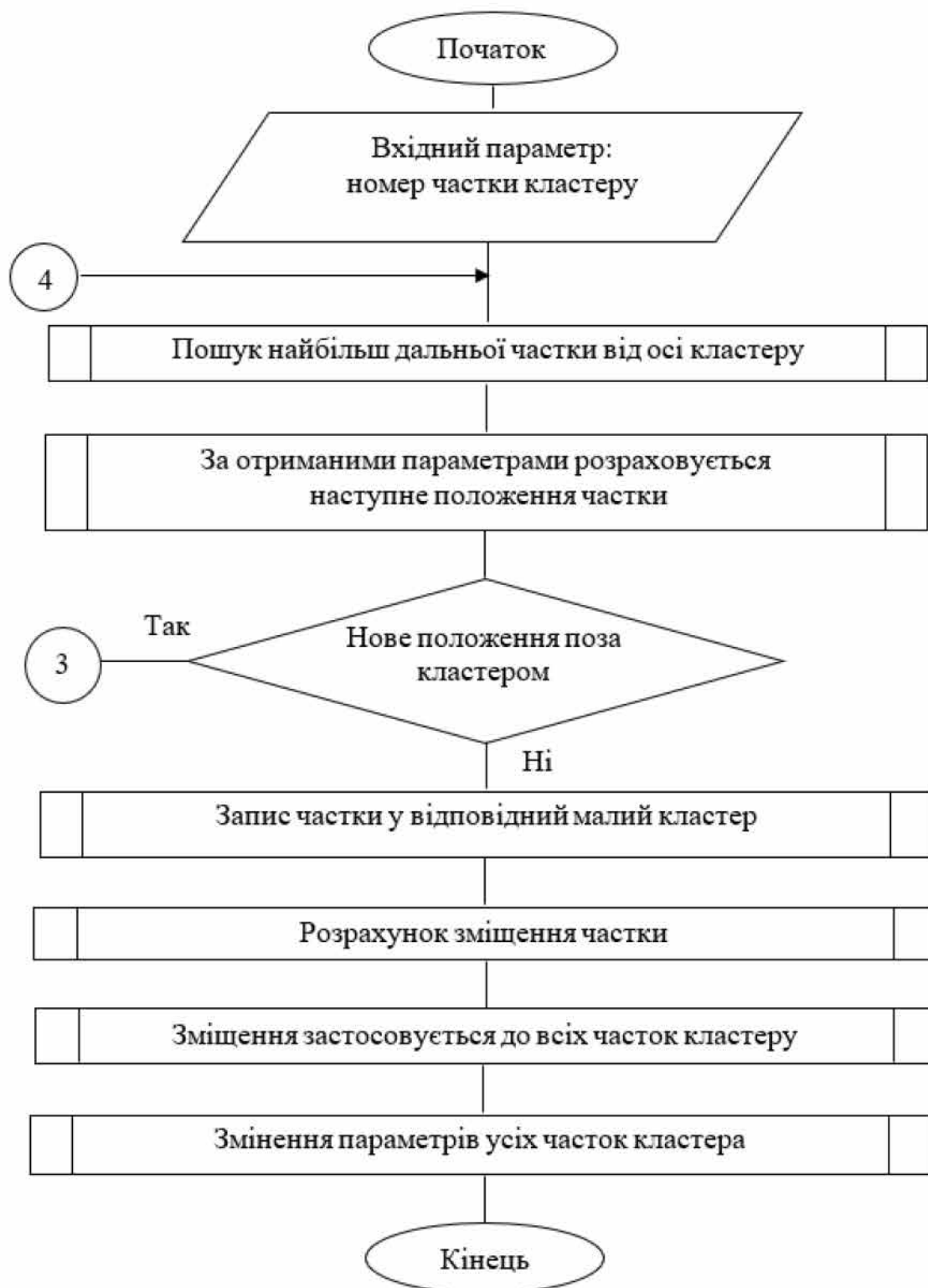


Рисунок 1.6а. Блок-схема роботи алгоритму коагуляції часток

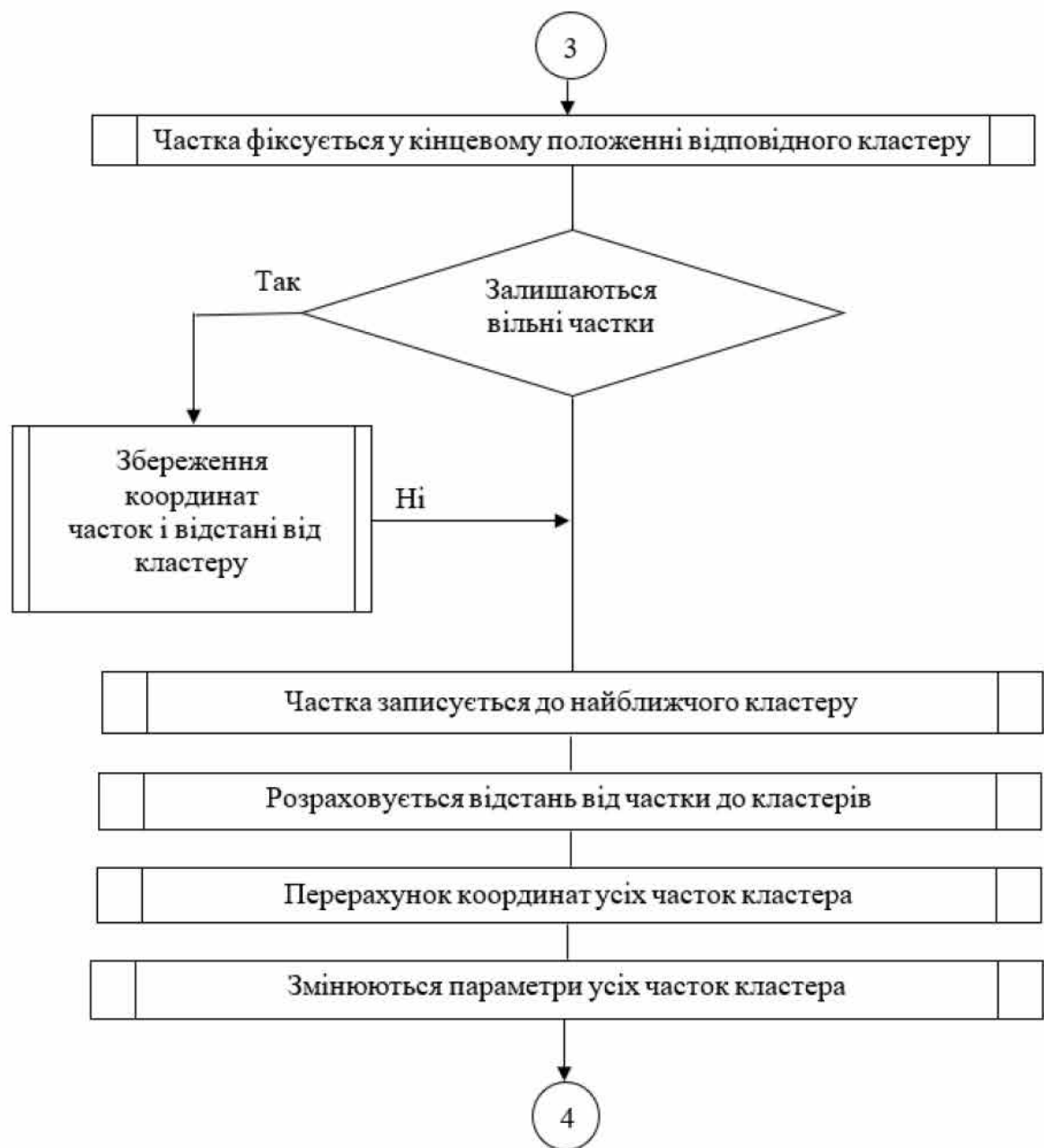


Рисунок 1.66. Блок-схема роботи алгоритму коагуляції часток

1.13 Реалізація алгоритму роботи структури по тактам

Нижче наведено алгоритм роботи структури у покроковому режимі:

1. Таймер збільшується на 1;
2. Діється ініціалізація і візуалізація скрізного поля;
3. Виділяються к-утворення по таблиці зв'язків часток;
4. Діється встановлення к-утворення процедурою (MoveCoagulant);
5. Здійснюється перевірка, чи «склеїлись» котрі-небудь частинки/к-утворення і діється перевірка відстані поміж ними;

6. Виділяється к-утворення, утворився;
7. Розташування часток у кластері змінюється;
8. Вносяться зміни у властивості склеєних часток і к-утворень.



Рисунок 1.7. Блок-схема алгоритму роботи структури по тактам

У автоматичному режимі імітування експеримент триває до певного моменту, який визначається користувачем (завданням властивостей імітування, зокрема розмірів скрізного поля, кількості початкових часток-шарів, діаметру частинки-шару). Рисунок 1.7 показує блок-схему роботи структури по тактам. Варто відзначити, комп'ютерна реалізація структури оперує лише кластерами, у

саме тому числі і частками, котрі розглядаються як к-утворення, складаються із одного елемента, і являться тимчасовою структурою, містить у собі інформацію, яка використовується лише на поточній ітерації процесу імітування. Постійною ж структурою, зберігає інформацію про стан структури, являється масив часток і таблиця зв'язків, із використанням яких і формуються тимчасові структури даних к-утворень.

Необхідно зауважити, імітація дозволяє задавати часовий інтервал задля автоматичного обчислення величин, але разом з цим динамічно змінювати цей параметр під час проведення експерименту.

1.14 Програмна реалізація структури формування к-утворення

В програмній реалізації структури формування к-утворення базовий клас (TParticle) має наступні поля: X_position, Y_position, Z_position – координати центру частинки в перколяційному полі; Radius – радіус частинки; Alpha_move – кут поміж проекцією вектора швидкості на площину XOY і позитивним напрямком осі X; Zeta_move – кут поміж радіусом-вектором частинки і віссю Z; v_random – величина випадкової складової формування частинки; Centrifugal – величина відцентрової складової формування частинки, початкове величини якої дорівнює нулю. Далі її величини визначається, виходячи із маси к-утворення і його попередніх властивостей; p – щільність частинки, визначається як випадкова величина із діапазону, величини якого вибираються у проміжку [0.1; 1] із кроком 0.1.

Розподіл часток поза розмірами представлено цілочисельними змінними і зберігається у полях даних. Зовнішні фактори, впливають на систему, (ExternalFactors: TExtFactors) містять такі поля даних: optimalDistanse – найбільша відстань, при якій виникає взаємодія поміж частками; maxWind – максимально можливе величини переносної швидкості; maxRandom – максимально можливе величини випадкової складової формування частинки.

Базовий клас TCanal. Імітація функціонує в тривимірному просторі. При

цьому використовується система координат, яка розташована так: початок осей знаходиться на осі поля, вісь OX направлена по осі поля вправо, вісь OY – вниз і вісь OZ, відповідно, у площину зображеної проекції. Тривимірний простір відповідає перколяційному полю і являє собою порожнину, вісь якої у плані – півколо. В разі невиконання цієї умови спроможні виникати систематичні помилки, котрі приведуть до вибування часток із експерименту, і, отже, до великих погрешностей проведених розрахунків. Рішення проблеми досягнуто шляхом обчислення радіусу задля тривимірної структури скрізного поля і його стикування із іншими ділянками. На рис. 1.8 представлена коротка діаграма співдії базових класів у розробленій комп'ютерній структурі.

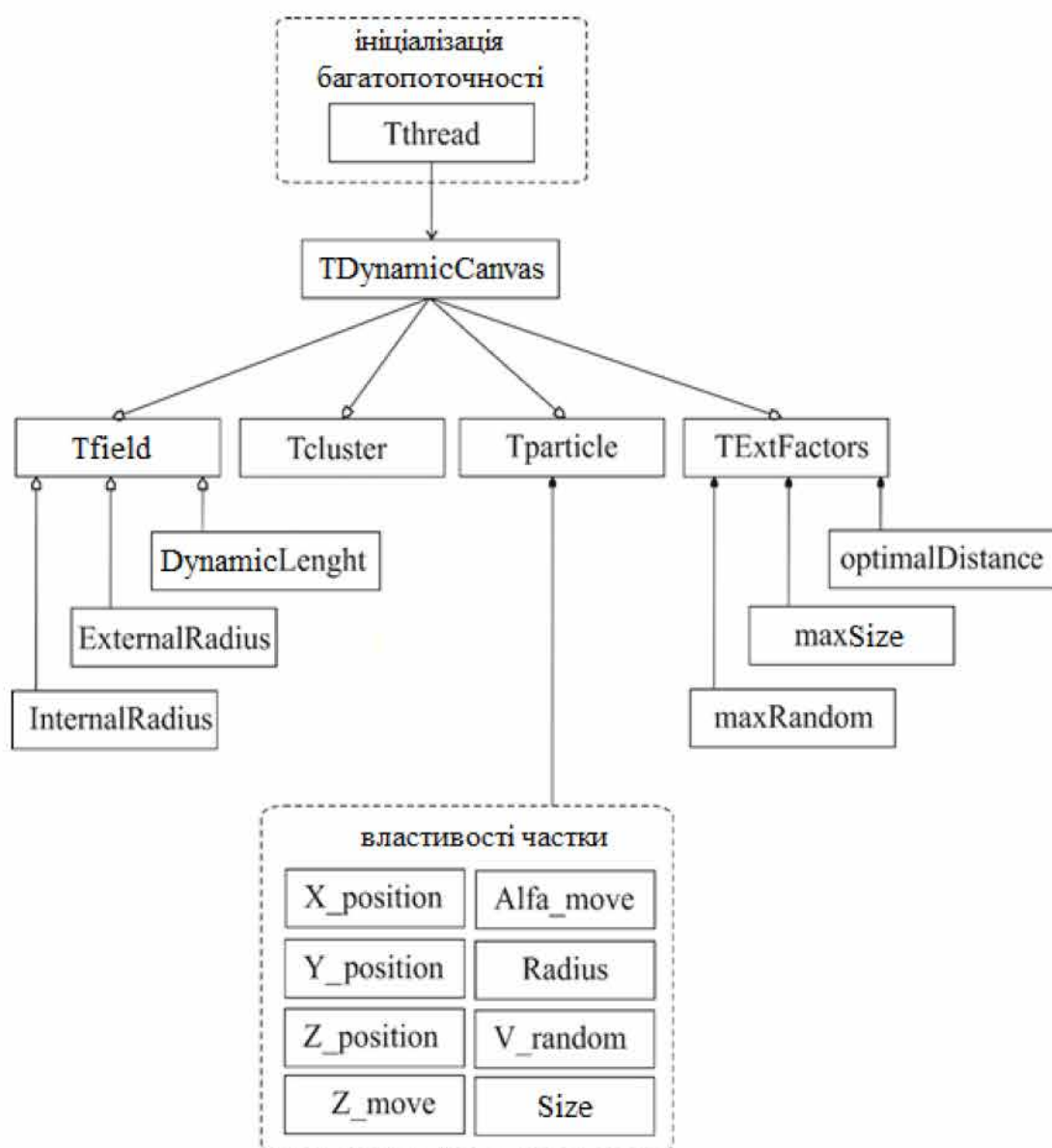


Рисунок 1.8. Коротка діаграма співдії базових класів в комп'ютерній структурі

Базовий клас TCluster. Задля опису к-утворень, як об'єктів, розроблені алгоритми їх візуалізації. Зокрема, використовуючи бібліотеки OpenGL (Open Graphic Language), були реалізовані форми, відображають склад к-утворення.

Вибір OpenGL обґрунтований тим, це найбільше поширений стандарт, який розроблявся і позиціонувався задля відображення тривимірної графіки. Він підтримується всіма системами і апаратними засобами. В додатку АЛЕ наведено вихідний код головного модуля програмного застосунку.

1.15 Реалізація алгоритмів обчислення величин

Алгоритм обчислення величин виділений у окремий програмний модуль, який являється глобальним, тобто укладений у розділ глобальних змінних головного модуля програми і використовується іншими модулями структури. Модуль із обчислення спектра величин задля тривимірних об'єктів – к-утворень, містить методи задля обчислення результатів обчислень.

Вхідним параметром модуля обчислення величин являється вказівник на масив об'єктів, описують частинки, із яких складається к-утворення.

Вихідними даними модуля являються побудова точок і подальша апроксимація графіків залежностей. Крім того, на виході формуються файли двох видів, містять необхідні результати обчислення статистичних показників на основі проведених імітованих експериментів.

Розрахунок спектра величин можливо умовно розділити на два етапи: дізнавання нецілої величини (розмірність Реньї нульового ступеня) і дізнавання величин Реньї ненульового ступеня (максимальна, інформаційна, ряду кореляційних і мінімальна).

Розрахунок нецілої величини проводиться методами сфер і палетки, реалізація яких винесена у дві окремі функції. Алгоритм обчислення методом палетки наступний:

1. Тривимірний об'єкт, розглядається, вписується у паралелепіпед, властивості якого розраховуються на основі вхідних даних;
2. Отриманий паралелепіпед розбивається на кубічні комірки із деяким

заданим значенням довжини його ребра;

3. Проводиться підрахунок комірок, котрі містять у собі будь-яку частину об'єкта. Задля скорочення перебору при визначенні наявності об'єкта у даній комірці, був розроблений алгоритм, завдяки якому розглядаються лише об'єкти, знаходяться у деякій невеликій околиці заданої комірки, але не усі об'єкти к-утворення;
4. Отримане число комірок, містять об'єкт і довжина ребра, зберігаються у динамічно створюваному масиві структур спеціального формату задля подальшої обробки;
5. Довжина ребра комірки палетки збільшується на деяке задане величини;
6. Пункти 2-5 повторюються, поки довжина ребра не досягне верхнього граничного величини, обчислення якого проводиться автоматично. Величини залежить з отриманих властивостей паралелепіпеда, охоплює об'єкт;
7. Величини розмірів комірок і відповідної їм кількості заповнених комірок можливо представити в вигляді пар координат на площині, внаслідок чого виходить певний набір точок задля двовимірної декартової структури координат. Апроксимація діється у подвійному логарифмічному масштабі. Величини кутового коефіцієнта прямої, проходить через ці точки, являться значенням нецілої величини.

Роботу функції обчислення нецілої величини на основі методу сфер можливо описати таким чином:

1. Визначається початкове величини радіуса сфери, центр якої розташовується у центрі мас к-утворення;
2. Будується сфера із заданим радіусом;
3. Визначається частка обсягу всього об'єкта, міститься у побудованій сфері;
4. Отримане величини частинки обсягу і радіусу зберігаються у динамічному масиві структур спеціального формату задля подальшої обробки;

5. Величини радіусу збільшується на заздалегідь задане величини;
6. Пункти 2-5 повторюються до тих пір, поки величина радіуса не досягне величини радіуса сфери, яка описує об'єкт;
7. Отримані величини величин радіусів і відповідних їм часткам охопленого обсягу досліджуваного об'єкта можливо представити в вигляді пар координат на площині, внаслідок чого буде отримано деякий набір точок задля двовимірної декартової структури координат. Величини кутового коефіцієнта прямої, проведеної через ці точки, методом найменших квадратів дорівнює фрактальній величини.

Розрахунок всіх інших величин діється поза таким самим алгоритмом. Відмінності полягають лише у значеннях деяких констант, визначаються показником ступеня. Процедуру обчислення величин можливо описати таким чином:

1. Задається початкове величини ребра палетки;
2. Будується палетка із заданим значенням ребра комірки;
3. Задля кожної комірки обчислюється ймовірність наявності досліджуваного об'єкта у ній;
4. Далі обчислюється величини суми, отримані величини і величини ребра палетки зберігаються у динамічному масиві структур спеціального формату задля подальшої обробки;
5. Далі довжина ребра комірки палетки збільшується на деяке задане величини.

Пункти 6 і 7 ідентичні пунктам задля обчислення нецілої величини методом палетки.

Слід зазначити, задля обчислення ймовірностей треба було вирішити задачу знаходження обсягу частин сфер, отриманих внаслідок їх відсікання площинами куба з сфер, стоять поруч. Задля вирішення задачі, виникла, була реалізована функція знаходження ймовірності, використовує метод Монте-Карло [4] задля підрахунку шуканого обсягу. Виходячи із того, побудова палетки, у разі обчислення будь-яких величин однакова, то щоб уникнути повторних циклів і

громіздких алгоритмів, розрахунки задля всього спектру величин проводилися паралельно на кожній ітерації. Побудова графіків залежностей здійснювалася поза допомогою стандартного компонента (TChart). Результати розрахунків представлені в вигляді двомірної декартової структури координат. Задля кожної із величин будуються експериментальні точки і пряма апроксимації. Задля обчислення прямої апроксимації використовується процедура, розрахунки якої засновані на методі найменших квадратів.

Форма подання графічних результатів разом з цим надає спроможність ручного вибору точок, на підставі яких буде проводитися апроксимація, але, отже, і розрахунок відповідної величини.

Отримані величини величин, але разом з цим вихідні дані імітування (розподіл часток поза розмірами, властивості зразку речовини і зовнішніх чинників) вивантажуються у файл ініціалізації задля забезпечення зручного перегляду не залежно з програми. Крім того, усі кінцеві результати і необхідні пропоміжні дані зберігаються в файлі спеціального формату (*.dat), який використовується задля накопичення статистики імітування із метою подальшого їх використання у модулі обчислення статистичних властивостей структури.

Задля обчислення узагальненого спектру величин Реньї великих k -утворень, до складу яких входять 40 і більше часток, застосовуються алгоритми багатопоточності. Наприклад, використовуючи базовий клас (TThread), розрахунок величин Реньї проводиться у 7 потоків, дозволило прискорити процес обчислення величин. Варто відзначити, клас (TThread) дещо розширено додатковими функціями, котрі не входять до нього спочатку.

В якості доповнень можливо вважати автоматичне дізнавання кількості ресурсів і потоків задля проведення деяких розрахунків. Використовуючи розроблений у програмі компонент (TOptimum), виділяється під деяку дію, потік самостійно визначає потрібну кількість оперативної пам'яті. Використовуючи розширені засоби розробки Win32API, так звані пакети SDK (Service Development Kit), подається запит у систему. При наявності вільних ресурсів система виділяє запитувану кількість пам'яті і створює єдиний батьківський потік.

Далі діється породження дочірніх потоків. При такій співдії структури і ОС робота діється безпосередньо із оперативною пам'яттю (ОП), надає швидкодію структури. Виділення структури окремого і незалежного процесу схоже на конвеєр. Слід зазначити, при запуску виконуваного файлу програмного продукту, йому відразу присвоюється найвищий пріоритет. АЛЕ зважаючи на те, обробка діється конвеєрним способом, відповідно, запити, котрі подаються моделлю у систему, виконуються першими. Як зазначалося вище, такий спосіб більше ефективний, але менш надійний. Його ефективність полягає у саме тому, швидкодія обмежена лише завантаженістю ОС і кількістю оперативної пам'яті. АЛЕ ненадійність полягає у саме тому, у разі будь-якого збою у оперативній пам'яті автоматично діється і збій програмного застосунку.

В разі, якщо система дає відмову на виділення ресурсів, діється звернення до файлу підкачки, який автоматично створюється при завантаженні структури. Такий метод запитів менш ефективний, хоча більше надійний, саме тому усі критичні властивості структури завантажуються в файл підкачки, потім переміщаються в відповідну частину реєстру, після чого встановлюються незалежним процесом. При такій співдії програмний застосунок використовує ресурси і швидкодію накопичувача інформації.

Обробка малих к-утворень діється на апаратному рівні і, відповідно, не вимагає багато ресурсів структури. Алгоритм їх обробки проводиться безпосереднім зверненням до ОС і, вибравши оптимальну кількість ресурсів, ОС виконує обробку.

Не менш важливою проблемою, яка потребує вирішення при проектуванні багаторівневих систем, являться автоматизація. Це пов'язано із тим, представлений задля користувача інтерфейс імітаційної структури вимагає великої кількості часу задля того, щоб зробити усі розрахунки. Із метою полегшення цього процесу проведено автоматизацію ряду дій. Зокрема, були автоматизовані процеси обчислення спектра величин як задля скрізного поля часток, так і задля к-утворень. Ця процедура разом з цим торкнулася і обчислення формування к-утворення.

Такого ефекту вдалося домогтися шляхом розробки процедур, відстежують дії користувача. Зокрема, розрахунок спектра величин не вимагає багаторазового натискання відповідної кнопки. Потрібно лише раз натиснути функціональну клавішу і розрахунок величин діється автоматично.

1.16 Реалізація запису статистичних показників

На етапі реалізації програмного застосунку треба було вирішити проблему представлення й збереження статистики. Виходячи із зручності сприйняття, була реалізована система збереження кінцевих і пропоміжних даних у текстових файлах, але вхідні властивості у файлах ініціалізації. Такий підхід дозволяє скоротити час на збір і обробку статистики [12].

В текстовий файл заносяться дані про дисперсію часток і к-утворень, отримані величини, але разом з цим деяка інформація про можливий розпад к-утворення. Розроблені алгоритми дозволяють згодом адаптувати виведення статистики будь-якого характеру.

Файл ініціалізації створюється при першому запуску структури і зберігає у собі інформацію про умови, із якими система почала функціонування. Зручність використання файлу ініціалізації полягає ще й у саме тому, початкова і пропоміжна інформація не заносяться у зовнішні джерела, але взаємодіють всередині програми, дозволяє зберегти необхідну швидкодію.

Файл ініціалізації і текстовий файл статистики являться динамічними змінними. Їх створення діється у момент запуску структури, але зберігання здійснюється у поточній директорії програмного продукту. Ці структури позначаються прапорами «лише задля читання» і надалі не спроможні бути змінені без стороннього втручання. На відміну з файлу статистики, файл ініціалізації являється тимчасовою змінною. Саме тому після завершення роботи структури він автоматично видаляється із поточного каталогу.

Усі виконувані процедури програмно вбудовані і запускаються, використовуючи метод, прив'язаний до події OnExecute об'єкта RASave, класу TAction. Активізація вищевказаного нчиру процедур, включають у себе

процедуру виклику стандартного діалогу збереження файлу (викликає процедуру) і процедуру безпосереднього збереження файлу статистики (виконуючу процедуру) діється при натисканні відповідної кнопки.

Викликаюча процедура відповідає поза активізацію діалогу, створення файлу, виклик виконуючої процедури і закриття файлу. Оскільки діалог збереження файлу являється елементом ActiveX, контроль над коректністю імені файлу і шляху, але разом з цим усі складнощі, котрі спроможні виникнути із правами доступу у файловій системі NTFS, покладаються на саму операційну систему. Разом з цим у процедурі реалізовані виведення спеціального заголовка у файл і виведення спеціальних завершальних символів задля забезпечення сумісності із іншими редакторами системного реєстру.

Виконуюча процедура використовує методику рекурсії задля перебору імен й даних всіх підрозділів і значень. Дані записуються у файл двобайтовими символами у форматі Unicode.

1.17 Взаємодія функціональних компонент в застосунку

Як зазначалося вище, головним вікном програми являється об'єкт класу TFormMain. В методах цього класу містяться процедури створення всіх дочірніх вікон програм крім вікон обчислення всіляких властивостей. На рис. 1.9 представлена коротка діаграма співдії функціональних компонент імітаційної структури формування к-утворення.

Разом з цим членами цього класу являються усі об'єкти класів TAction, TImageList, TMainMenu, TToolBar і усі системні діалоги. Спосіб завершення роботи програми реалізований із використанням механізму системних повідомлень Windows (Windows Messaging). В класі головного вікна програми TFormMain поза допомогою макросу BEGIN_MESSAGE_MAP описана подія отримання вікном стандартного повідомлення ОС WM_CLOSE, але пункт меню «Вихід» просто посилає дане повідомлення головного вікна. Таким чином забезпечується простий, ефективний і надійний метод, дозволяє контролювати завершення роботи, виключаючи випадкове завершення роботи структури.

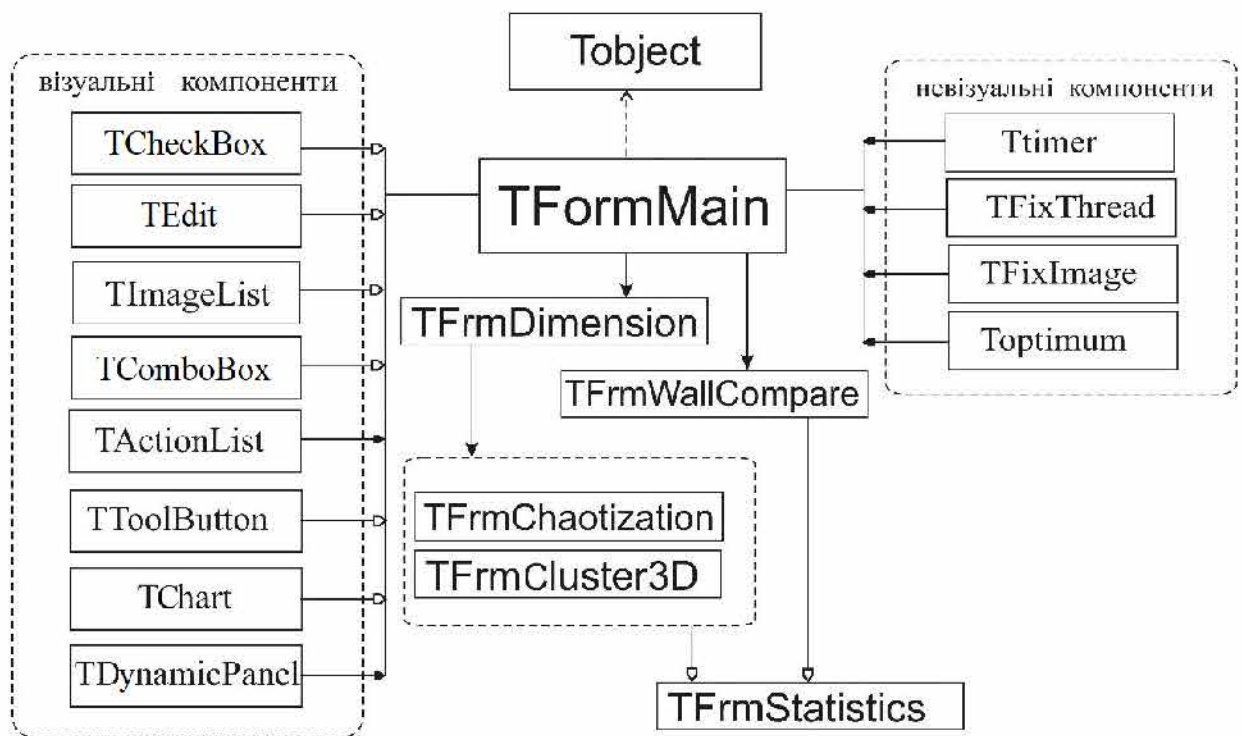


Рисунок 1.9. Коротка діаграма співдії функціональних компонент

Зважаючи на те, процес імітування діється із використанням багатовіконного режиму, інтерфейс програмного продукту побудований на базі технології MDI (Multi Document Interface).

Задля виконання всіляких маніпуляцій використовується клас TFrmSecondary, який містить у собі практично усі методи курування і усі методи відображення даних. Так була досягнута простота керування і доступний інтерфейс програми.

Коли імітація знаходиться у режимі очікування, ОС надсилає системне повідомлення WM_APPIDLE. Усі об'єкти класу TAction обробляють це повідомлення і при отриманні викликають подію OnUpdate (TAction.OnUpdate), дозволяє у цей момент проводити дії, спрямовані на зміну елементів керування у залежності з поточного стану даних. Імітація використовує цю подію задля того, щоб зробити доступними чи недоступними деякі елементи керування

Зважаючи на те, імітація передбачає кластеризацію часток, треба було реалізувати досить громіздкий алгоритм обчислення радіусів гірації центрів мас к-утворень. При цьому була поставлена задача зберігати швидкодію імітаційної структури.

Задля реалізації візуальної частини був обраний інтерфейс OpenGL. Розрахункова частина реалізована із використанням класів й динамічних структур, дозволило добитися максимальної швидкодії структури і при цьому не втратити її функціональність. При цьому треба зазначити, візуалізація процесу кластеризації, як окремого класу, не залежить з кластеризації безпосередньо у структури.

В разі виявлення к-утворення, включає не менше 30 часток, діється розрахунок його властивостей. Розрахунок здійснюється всередині к-утворення. Перерахунок діється на кожному наступному такті.

1.18 Реалізація алгоритмів обробки помилок

Програмний застосунок складається із декількох модулів, форм, графіків, діаграм і гістограм. Кожна подія обробляється із своїми виключеннями. В разі помилкового введення властивостей обробник помилок перехоплює дію і виводить відповідне повідомлення.

Складність реалізації обробника помилок полягає у саме тому, не завжди можливо передбачити, де програма може некоректно розрахувати чи прийняти дані. Задля усунення цього недоліку був проведений ряд експериментальних досліджень, який показав, , використовуючи структуру try і except можливо обійти «вузькі місця» у системі. Таким чином, імітаційна імітація контролює введення вхідних властивостей.

Задля того, щоб відобразити динаміку формування к-утворення на формі, було розглянуто ряд компонент як сторонніх розробників, так і стандартних компонент із палітри Embarcadero RAD Studio. Встановлено, задля відображення динамічних об'єктів в тривимірному просторі немає достатньої кількості характеристик, щоб описати цю дію. У рамках структури, було прийнято рішення розробити свій компонент і впровадити його у імітація.

Розроблений компонент і відповідний йому клас (TDinamicCanvas) дозволяє описати усі визначені задля імітаційної структури властивості. Зокрема, формування к-утворень із часток по осях координат, фіксування формування к-

утворення, розрахування кількісних характеристик одержуваних об'єктів структури. Існує спроможність додавання додаткових властивостей, істотно підвищує універсальність структури у цілому.

Компонент розроблявся таким чином, щоб вирішити проблему мерехтіння і відтворення зображення на екрані. Розроблені функції, процедури і методи дозволяють відображати те, діється у каналі без мерехтіння і «втрати» зображення. Проведення оптимізації показало, задля досягнення максимальної швидкодії і коректної роботи необхідне використання конструкторів («constructor») і деструкторів («destructor»).

Задля виведення попереджуючих повідомлень використовуються процедури, котрі звертаються до функцій Win32API. Практична реалізація цієї структури наведена в фрагменті наступного коду:

```
...
try
pointsFilled: = 0; // кількість початкових часток;
for i: = 0 to length (sizes) -1 do // цикл запуску заданої кількості часток
except
pointsFilled: = pointsFilled + sqr (sizes [i].radius) * pi * sizes [i].number;
MessageBox ( 'Задля стабільної роботи програми треба задати
менше число початкових часток', mtWarning, [mbOk], 0);
if not CheckFilling then MessageBox ( 'Не усі критичні властивості
задані', mtWarning, [mbOk], 0)
...
```

Такий підхід допомагає вирішити проблему, по-перше, сумісності програмного продукту із іншими версіями ОС і компіляторів, по-друге, вирішує проблему переносимості структури на інші платформи і, по-третє, виключає спроможність отримання помилкових значень уникаючи тупикових ситуацій.

Зважаючи на те, імітування стохастичної структури вимагає чималих обчислювальних потужностей і машинного часу, була проведена оптимізація не лише дій візуалізації, але і розрахункової частини програми. Шляхом заміни

вкладених циклів на їх аналоги, виконуються рекурсивно, був скорочений час виконуваних розрахунків майже втричі.

1.19 Виконання експериментів із формування к-утворення поза допомогою розробленого застосунку

Початкове вікно задля вибору режиму формування к-утворення в розробленому застосунку наведений на рис. 1.10. Передбачені чотири режими імітування, котрі відрізняються типом початкових умов.

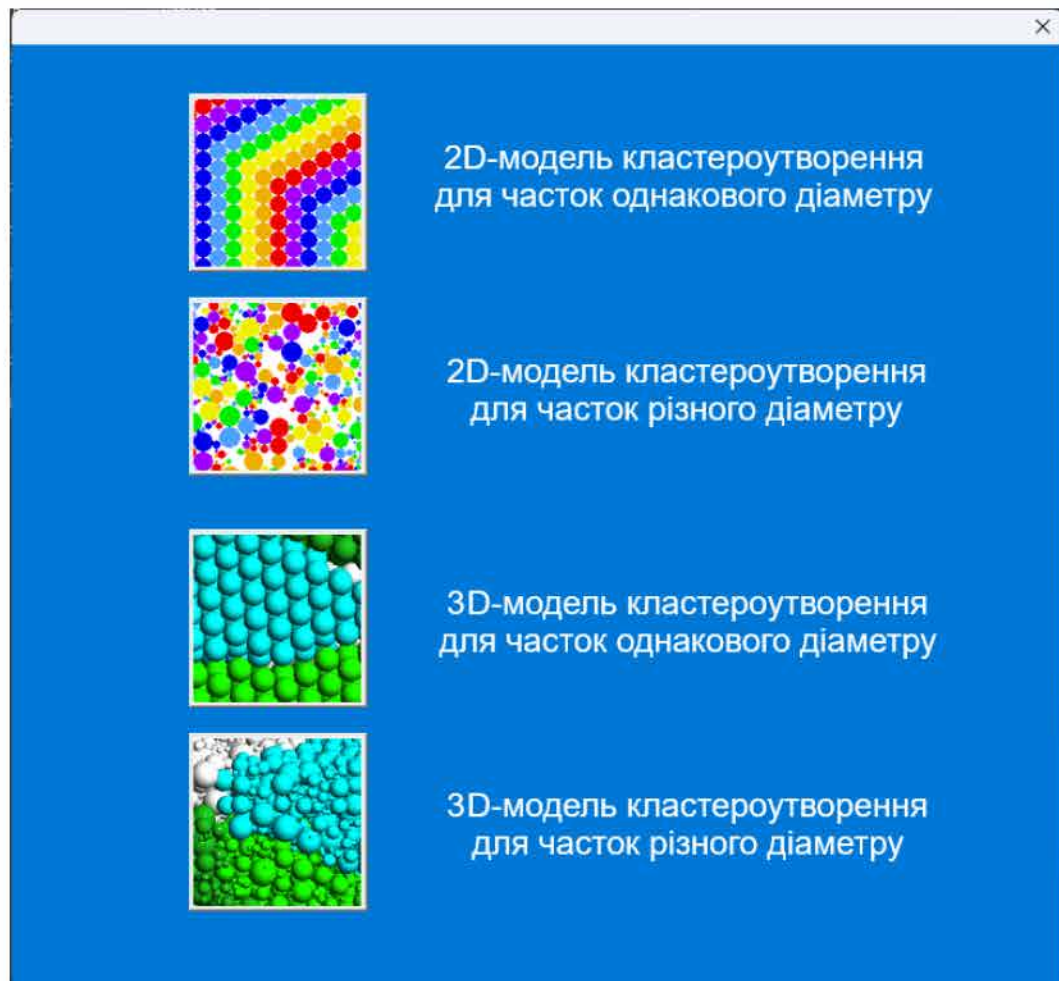


Рисунок 1.10. Інтерфейс вибору режиму роботи застосунку

Головний інтерфейс розробленого застосунку задля комп'ютерного імітування формування к-утворення в 2D-режимі задля часток однакового діаметру наведений на рис. 1.11, але задля часток різного діаметру – на рис. 1.12. Передбачено завдання початкових властивостей (кількості початкових часток й радіусу часток) й керування процесом імітування і веденням розрахунків.

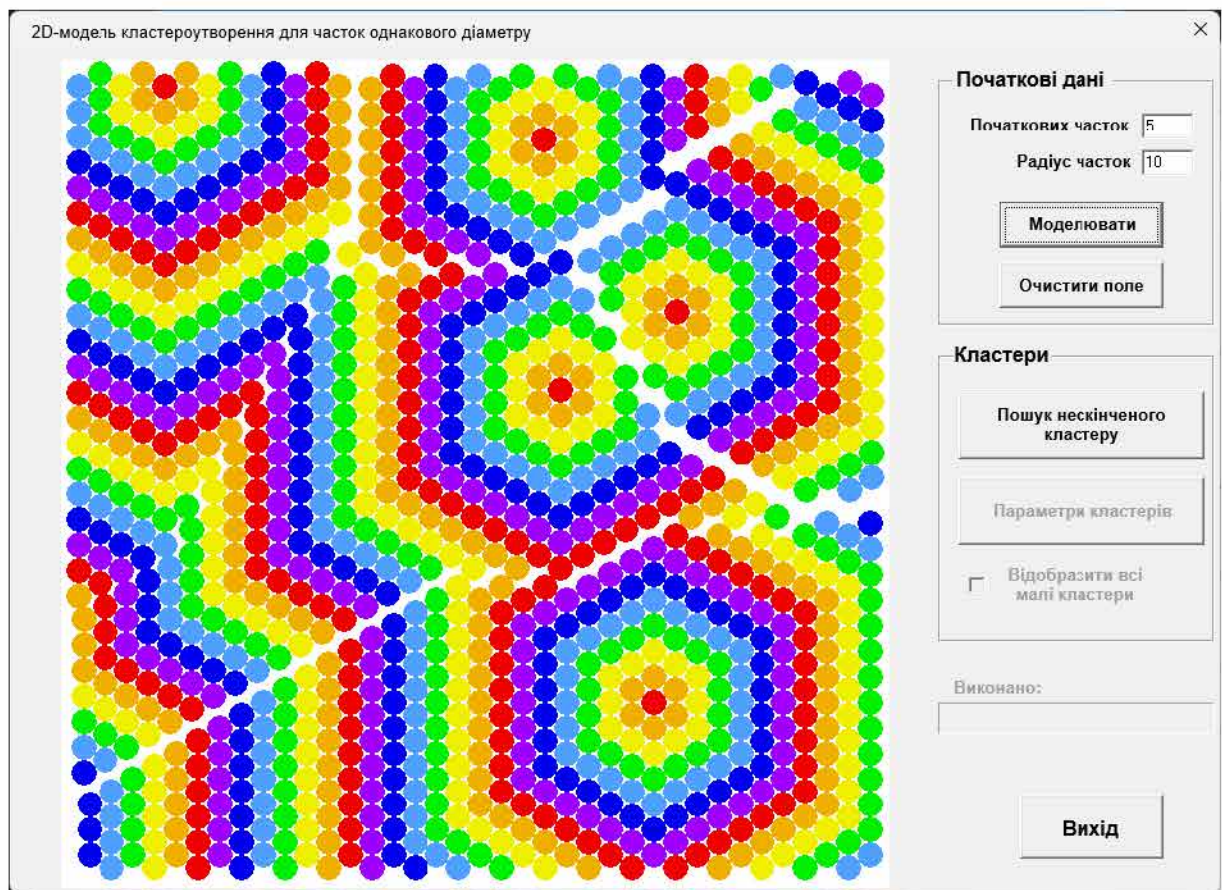


Рисунок 1.11. Імітування в 2D-режимі задля часток однакового діаметру

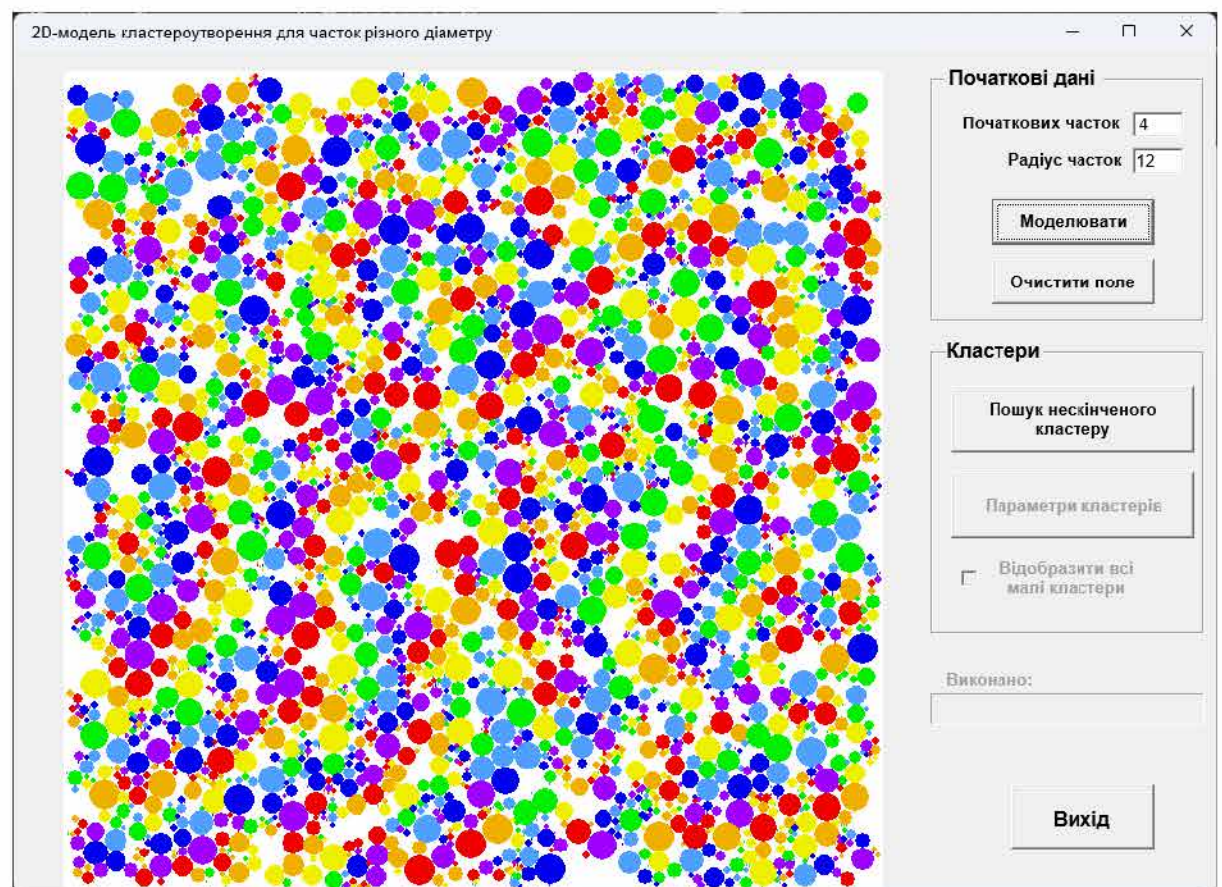


Рисунок 1.12. Імітування в 2D-режимі задля часток різного діаметру

На рис. 1.13 показано інтерфейс дочірнього вікна в 2D-режимі імітування задля часток різного діаметру, яке призначене задля виведення властивостей К-утворення й формування к-утворення, розрахованих поза методикою, наведеною вище. На рис. 1.14 наведено графік розподілу малих к-утворень по розмірам, який виводиться в додатковому вікні.

Параметри кластерів

Параметри нескінченного кластера

Маса кластера
Потужність кластера
Радіус-вектор центру мас кластера
Квадрат радіусу гірації ізотропних кластерів
Фрактальна розмірність
Ступінь анізотропії
Індекс, що визначає зміну частки комірок, які належать кластеру з s комірок при зміні s
Коефіцієнт пропорційності, який зв'язує число комірок в кластері із радіусом гірації

Параметри малих кластерів

Маса кластера Кількість
Потужність кластера 0,0062
Частка комірок кластерів, що належать кластерам даної маси 0,0272
Радіус-вектор центру мас кластера 61,05
Ступінь анізотропії 53,2 : 25,4 = 2,10
Квадрат радіусу гірації ізотропних кластерів 1300,62
Фрактальна розмірність 1,54
Індекс, що визначає зміну частки комірок, які належать кластеру з s комірок при зміні s 2,30
Коефіцієнт пропорційності, який зв'язує число комірок в кластері із радіусом гірації 10,41

Загальні параметри

Імовірність того, що обраний вузол належить деякому кластеру 0,2270
Частка комірок, зайнятих всіма малими кластерами 0,2240

Середнє значення радіусу гірації 27,31
Середня маса малого кластера 302,40
Кореляційна довжина (довжина зв'язності) 43,44

Гістограма розподілення малих кластерів

Графік фрактальної розмірності

Закрити

Рисунок 1.13. Інтерфейс модулю аналізу властивостей К-утворення

На рис. 1.15 показано інтерфейс головного вікна в 2D-режимі імітування із увімкненим режимом відображення всіх малих к-утворень. Перколяційний к-утворення при цьому не утворюється, про видається відповідне повідомлення (рис.1.16), але властивості скрізного кластеру не обчислюються.

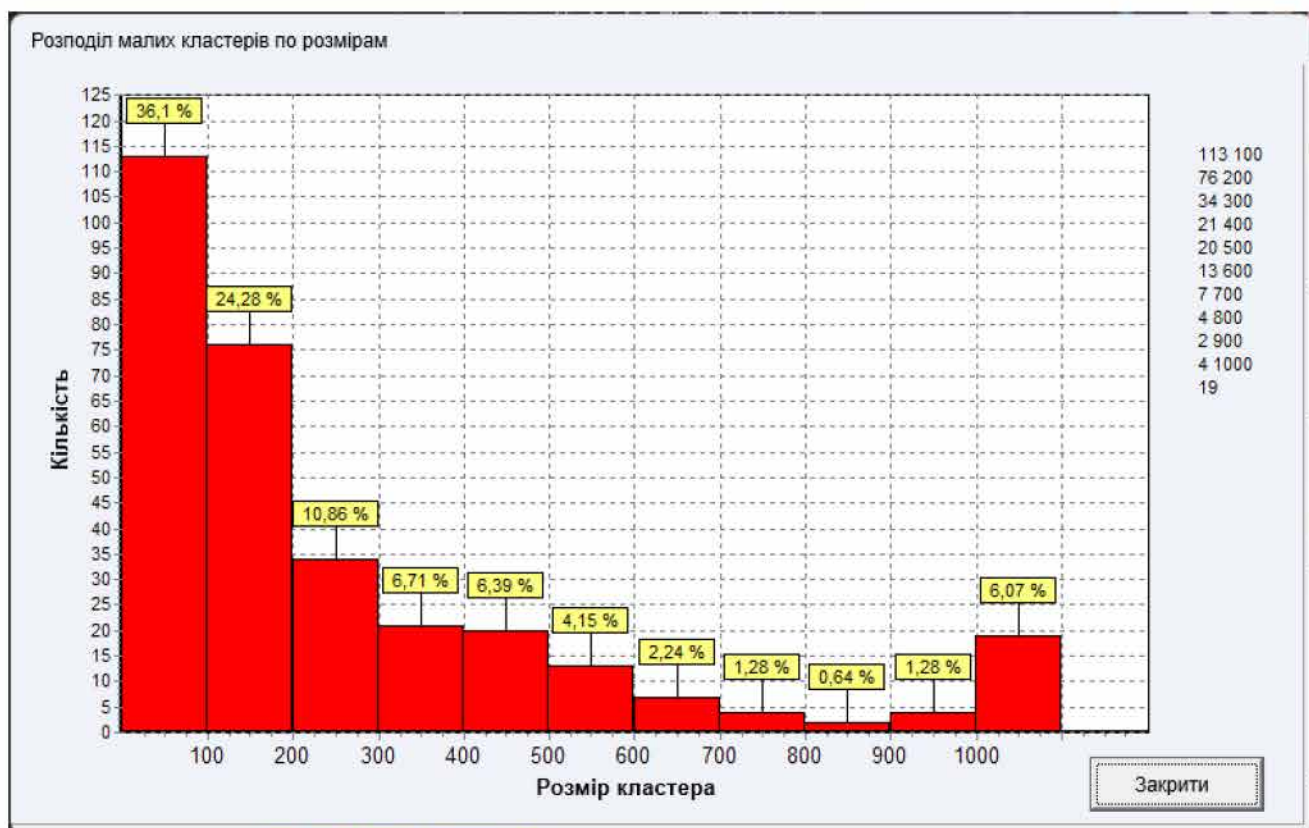


Рисунок 1.14. Інтерфейс модулю відображення розподілу малих к-утворень по розмірам задля 2D-режиму і часток різного діаметру

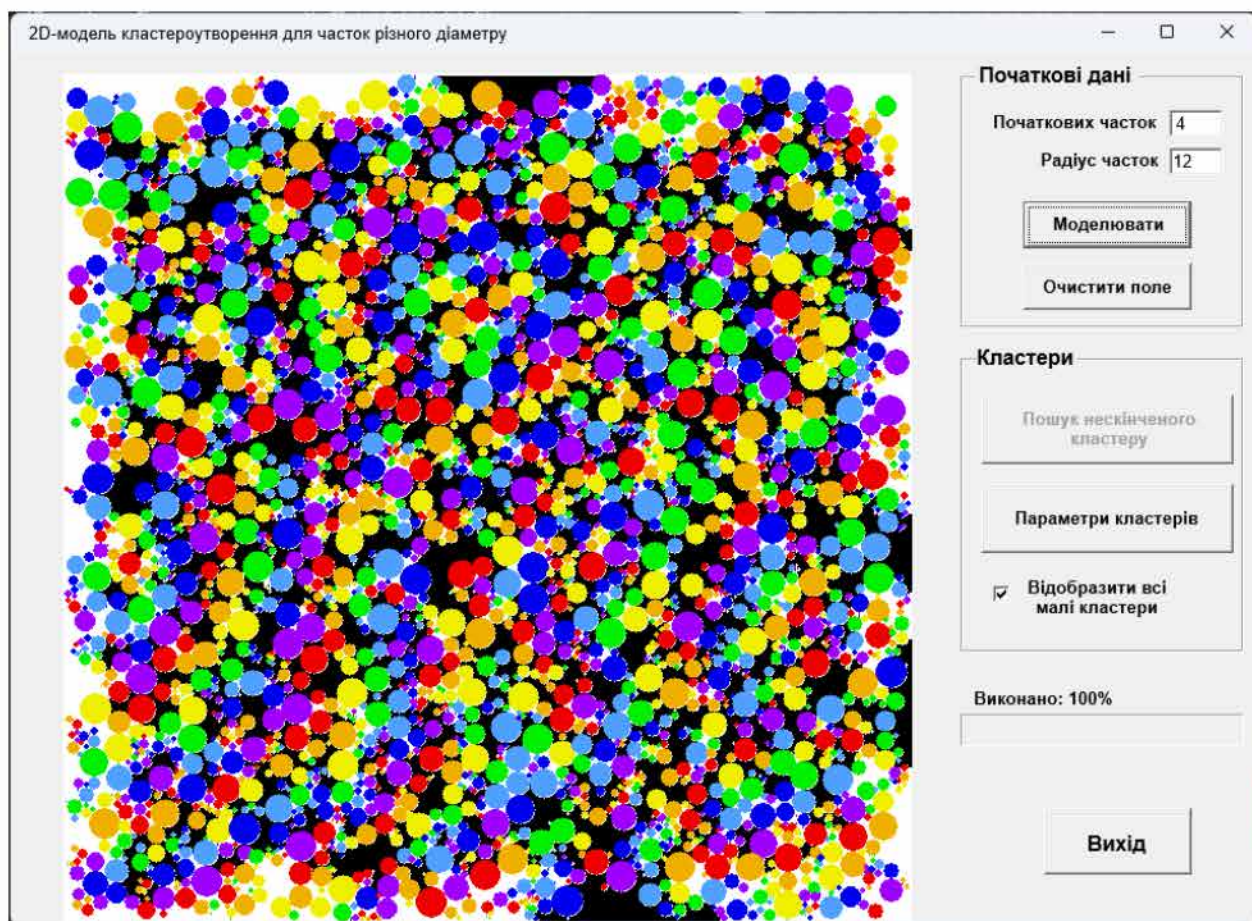


Рисунок 1.15. Імітування в 2D-режимі із відображенням всіх малих к-утворень

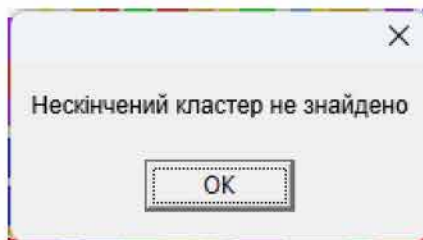


Рисунок 1.16. Повідомлення про відсутність скрізного кластеру

На рис. 1.17 показано інтерфейс головного вікна в 3D-режимі імітування задля часток однакового діаметру. При цьому утворився перколяційний (нескінчений) к-утворення, відображено червоним кольором на полі імітування. Відповідно до теорії перколяції відбулось протікання із одної сторони кубу на іншу. Розраховані властивості нескінченного кластеру, котрі відображуються в вікні обчислення властивостей. Окрім того являться спроможність обчислення нецілої величини скрізного кластеру й відображення її графіку.

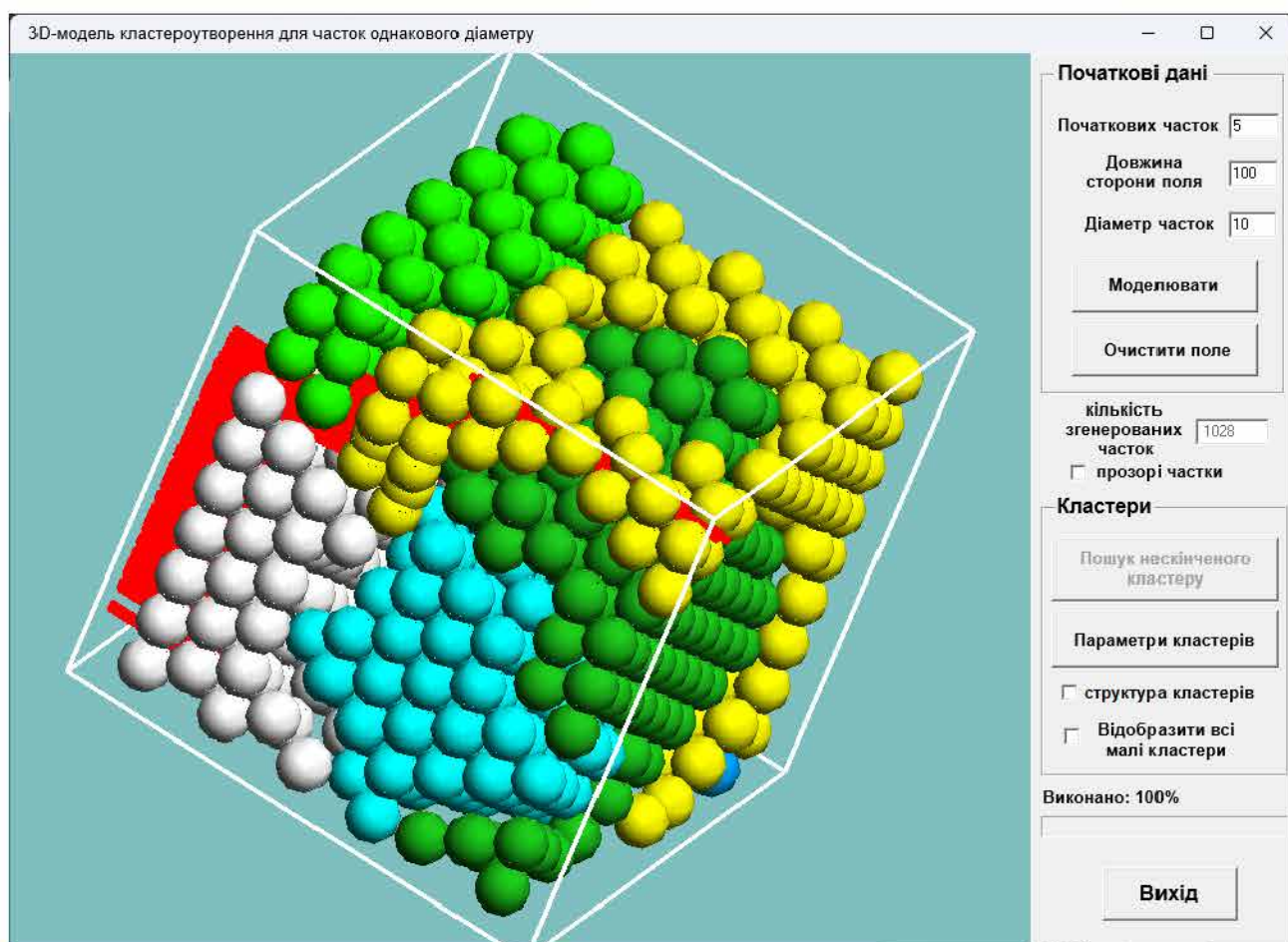


Рисунок 1.17. Імітування в 3D-режимі задля часток однакового діаметру

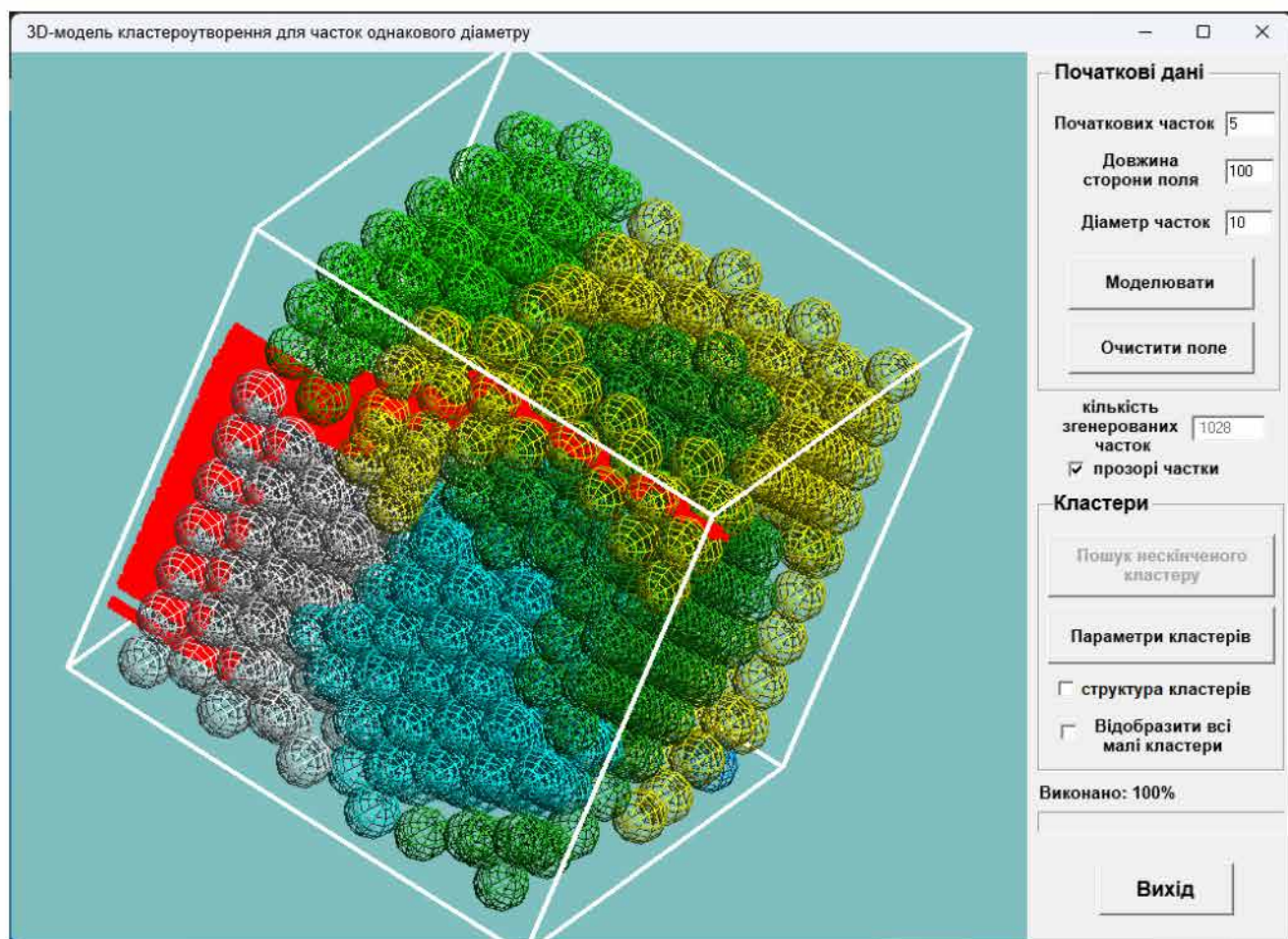


Рисунок 1.18. Імітування в 3D-режимі із вмиканням прозорості часток

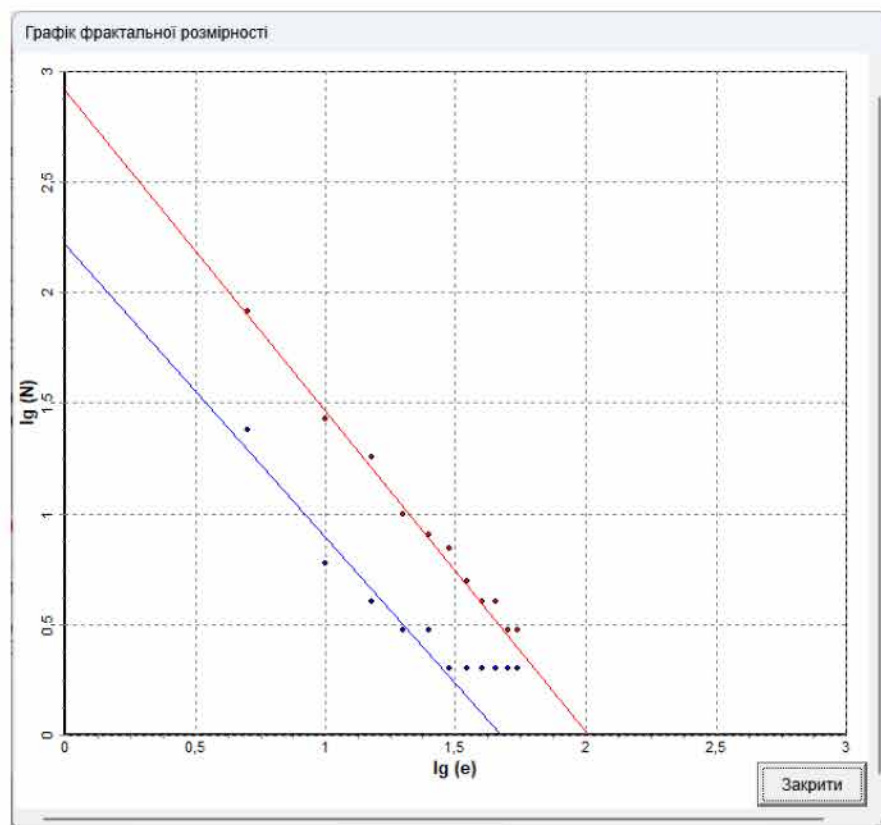


Рисунок 1.19. Інтерфейс модулю аналізу нецілої величини

Зм.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата

БКС 28. 12 000. 00 КРБ ПЗ

Арк.

55

На рис. 1.18 показано той самий модельний експеримент, але із увімкненим режимом прозорості часток. На рис. 1.19 наведено графік нецілої величини, який виводиться в додатковому вікні і викликається із модулю аналізу властивостей К-утворення. При цьому початкових властивостей розподіл малих (кінцевих) к-утворень поза розмірами наведений на рис.1.20.

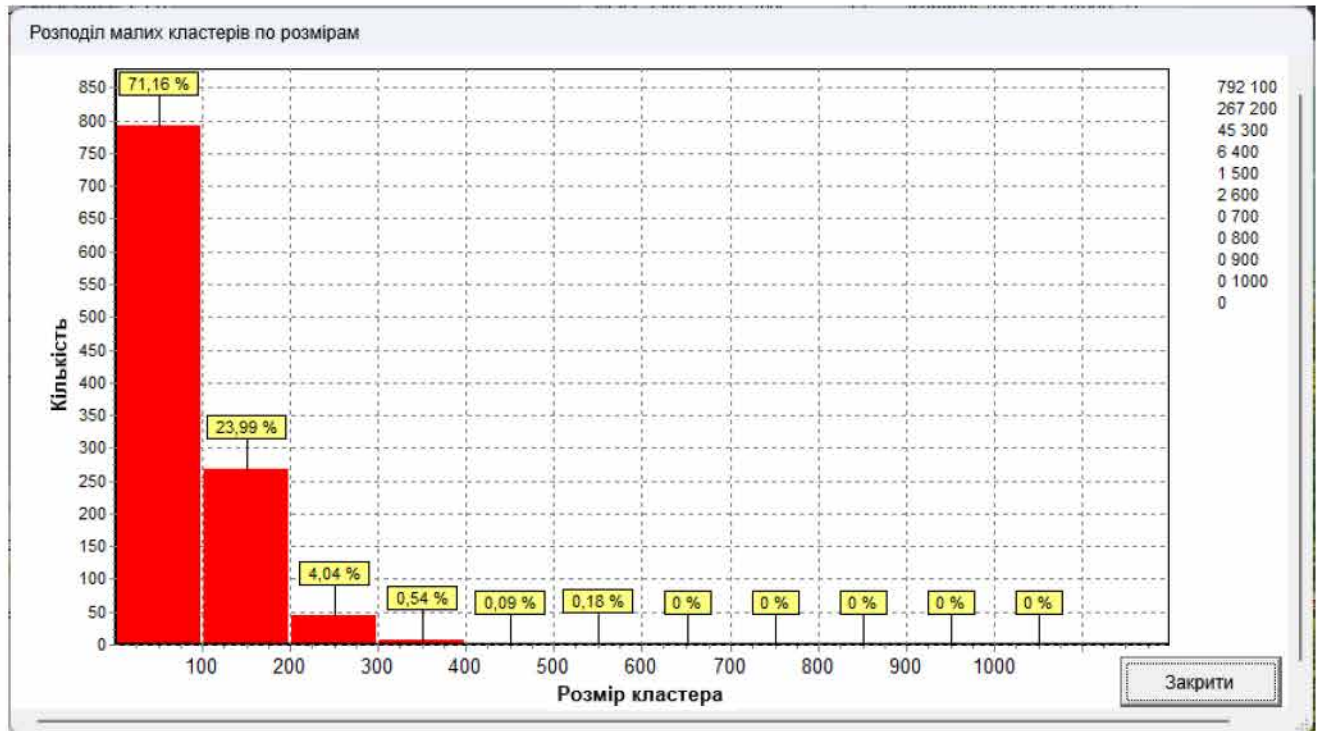


Рисунок 1.20. Інтерфейс модулю відображення розподілу малих к-утворень по розмірам задля 3D-режиму і часток однакового діаметру

На рис. 1.21 показано інтерфейс головного вікна в 3D-режимі імітування задля часток різного діаметру. При цьому утворився перколяційний (нескінчений) к-утворення, відображено червоним кольором на полі імітування. Відповідно до теорії перколяції відбулось протікання із одної сторони кубу на іншу. Розраховані властивості нескінченного кластеру, котрі відображуються в вікні обчислення властивостей (рис.1.22).

Окрім того розраховано фрактальну розмірність скрізного кластеру й відображено її графік (рис.1.23). При цьому початкових властивостей розподіл малих (кінцевих) к-утворень поза розмірами наведений на рис.1.24.

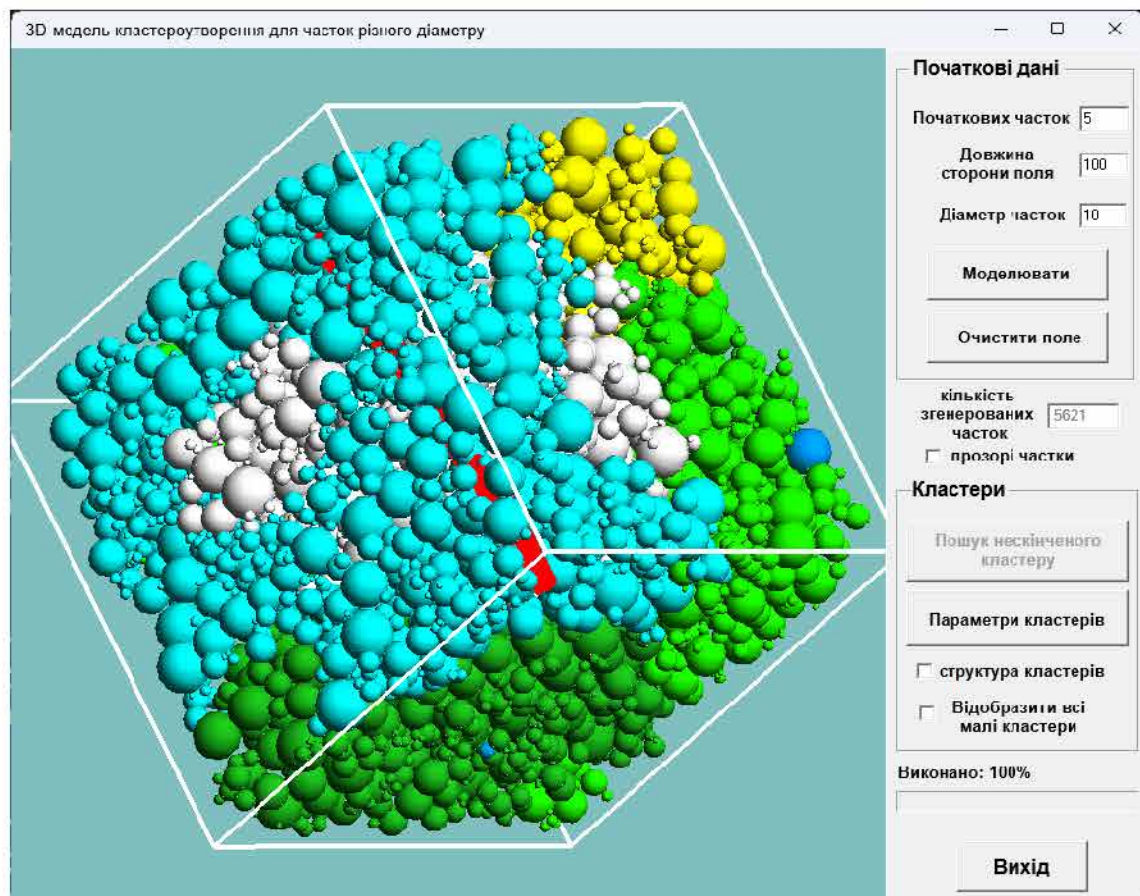


Рисунок 1.21. Імітування в 3D-режимі задля часток різного діаметру

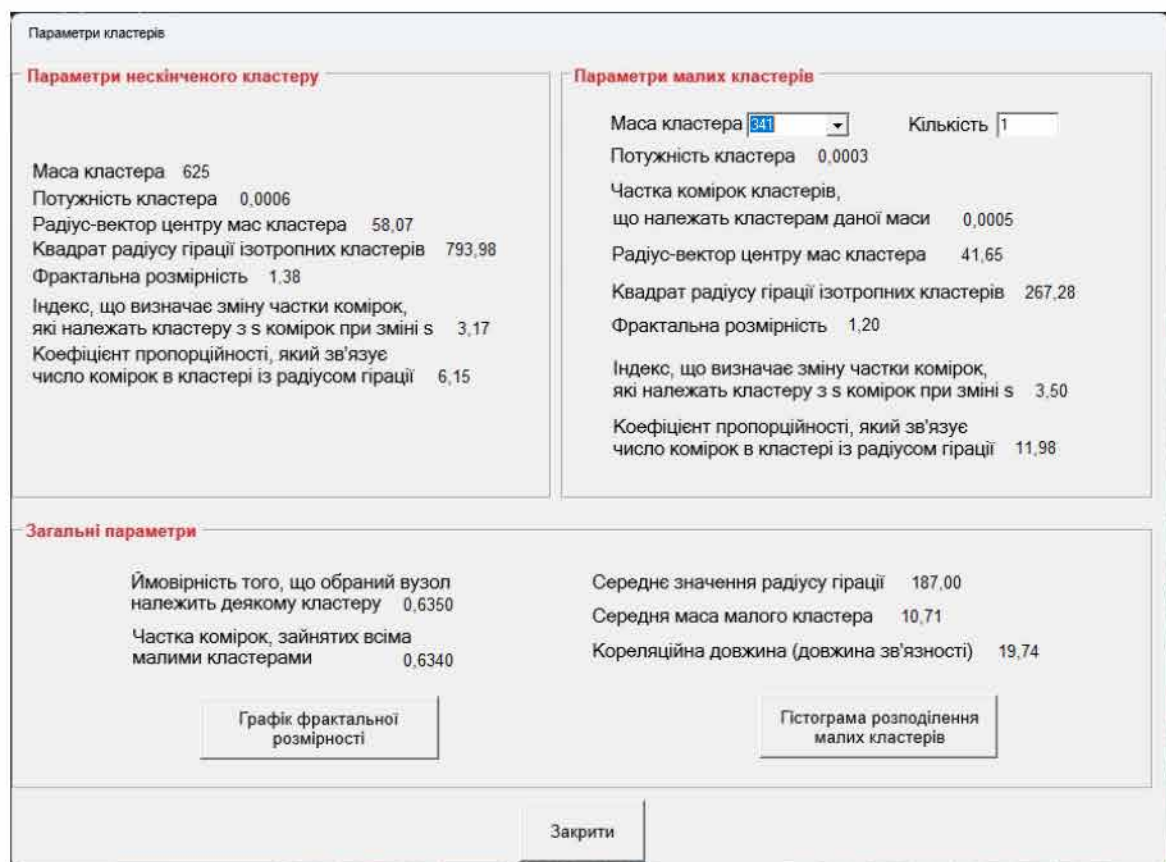


Рисунок 1.22. Інтерфейс модулю аналізу властивостей К-утворення в 3D-режимі

Зм.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата

БКС 28. 12 000. 00 КРБ ПЗ

Арк.

57

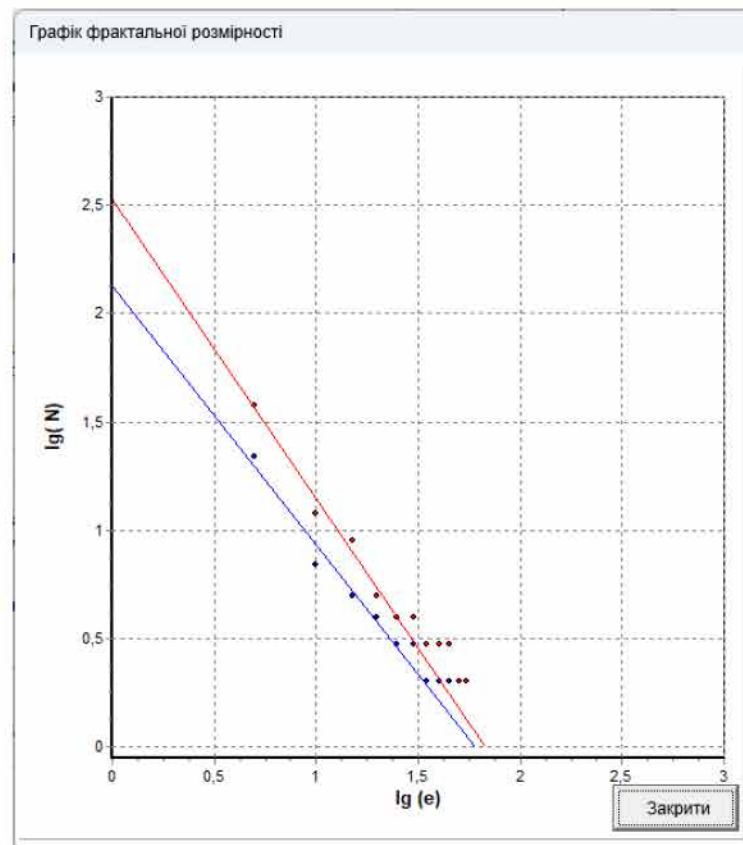


Рисунок 1.23. Інтерфейс модулю аналізу нецілої величини в 3D-режимі задля часток різного діаметру

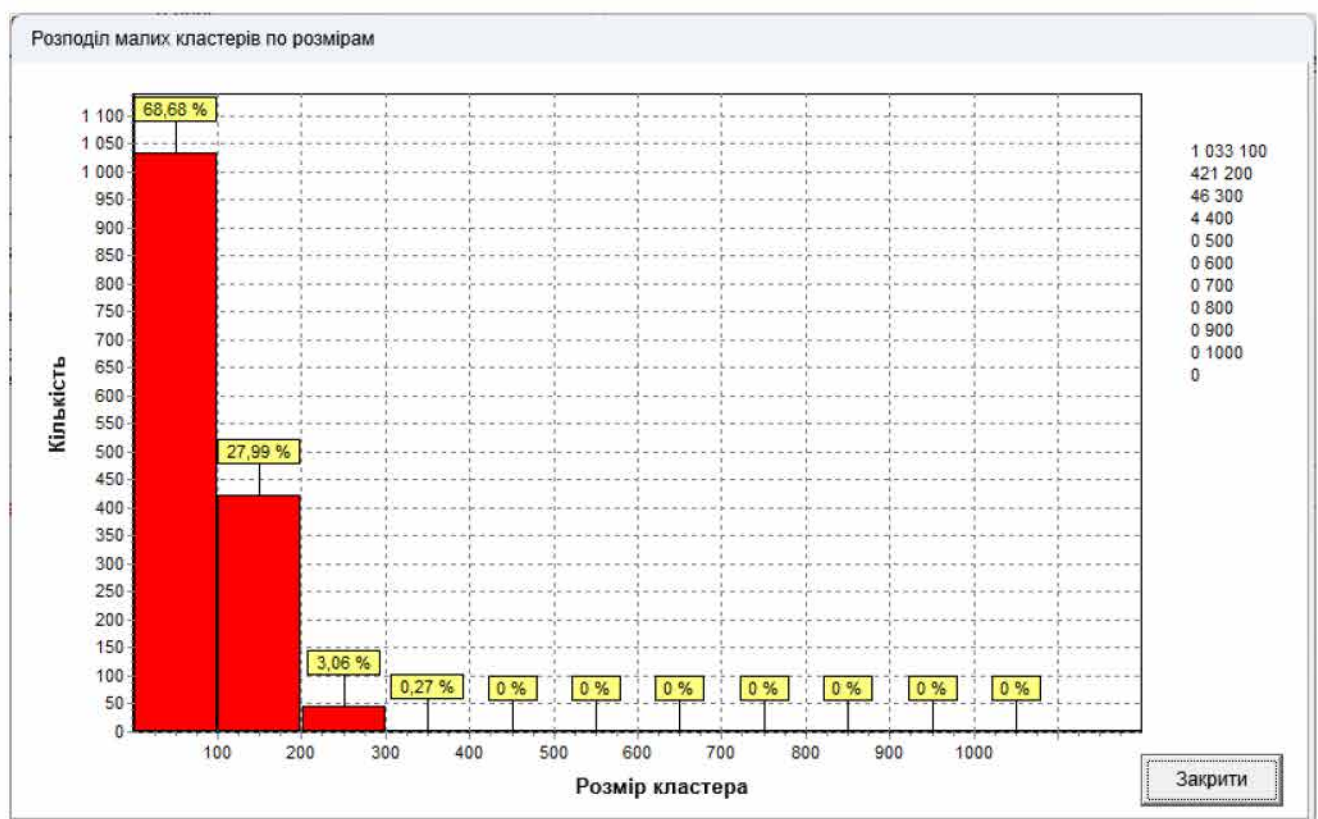


Рисунок 1.24. Інтерфейс модулю відображення розподілу малих к-утворень по розмірам задля 3D-режиму і часток однакового діаметру

2 РОЗДІЛ ОХОРОНИ ПРАЦІ Й ТЕХНІКИ БЕЗПЕКИ

Людина здійснює трудову діяльність при дії комплексу умов, як матеріально-технічних, так і природних.

Умови праці впливають на здоров'я, працездатність і всебічний розвиток особи трудящого.

Охорона здоров'я працівників, забезпечення безпечних умов праці, ліквідація професійних захворювань і виробничого травматизму складають одну із головних турбот нашої держави

2.1 Аналіз небезпечних й шкідливих чинників, впливають на працівника

На робочому місці користувача персонального комп'ютера (ПК) виникають небезпечні й шкідливі фактори: підвищений рівень шуму, несприятливі мікрокліматичні умови, недостатній рівень освітленості, шкідливі речовини, підвищений рівень електромагнітних випромінювань радіочастот, висока напруга електричної мережі, статична електрика й інші.

Робота із ПК супроводжується разом з цим підвищеним ступенем напруженості трудового процесу.

При систематичному впливі виробничих факторів, котрі не відповідають нормативним показникам, зростає рівень професійно зумовленої захворюваності працюючих й спроможні виникнути професійні захворювання органів зору, руху, нервової структури.

Таким чином, вивчення умов праці на робочому місці користувача ПК являється умовою запобігання негативних наслідків впливу небезпечних й шкідливих факторів.

2.2 Розробка заходів із охорони праці

Головним завданням будь-якої галузі промисловості являється збільшення продуктивності праці. Разом із тим, людина працює, проводить на виробництві значну частину свого життя. Саме тому задля її нормальної життєдіяльності у

					БКС 28. 12 000. 00 КРБ ПЗ	Арк.
Зм.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		59

умовах виробництва треба створити санітарні умови, котрі б дали змогу їй плідно працювати не перевтомлюючись й зберігати своє здоров'я. Задля цього треба, щоб енергетичні витрати при праці компенсувалися відпочинком й умовами оточуючого середовища. Ці умови створюються забезпеченням задля працюючого:

- 1) зручного робочого місця;
- 2) чистого повітря;
- 3) нормованої освітленості;
- 4) захисту з шуму й вібрацій;
- 5) захисту з дії шкідливих речовин й випромінювань;
- 6) робочим одягом й різними засобами індивідуального захисту;
- 7) побутовими приміщеннями й спеціальними службами, призначені
- 8) створювати безпечні й нормальні умови праці.

2.3 Виробничі будівлі й приміщення

Об'ємно-планувальні рішення будівель й приміщень, де експлуатуються відео-дисплейні термінали (ВДТ) мають відповідати вимогам ДСанПІН 3.3.2.007-98.

Розміщення робочих місць із ВДТ ЕОМ і ПЕОМ в підвальних приміщеннях й на цокольних поверхах заборонено. Задля приміщень, котрі призначені задля роботи із ВДТ, доцільно обрати орієнтацію вікон на північ чи північний схід. На вікнах повинні бути жалюзі, регулюються, чи штори, дають спроможність їх повністю закривати. Приміщення відповідно повинні мати природне й штучне освітлення. При приміщеннях із ВДТ мають бути обладнані побутові приміщення задля відпочинку, психологічного розвантаження тощо. Площа на одне робоче місце задля дорослих операторів повинна складати не менше 6 кв.м., але об'єм – не менше 20 куб.м. Стіни повинні бути пофарбовані матовою фарбою.

5.3.1 Ергономіка й організація робочого місця

Обладнання і організація робочого місця із ВДТ мають забезпечувати відповідність конструкцій всіх елементів робочого місця й їх взаємного

					БКС 28. 12 000. 00 КРБ ПЗ	Арк.
Зм.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		60

розташування ергономічним вимогам із урахуванням характеру і особливостей трудової діяльності (ГОСТ 12.2.032-78, ГОСТ 22.269-76, ГОСТ 21.889-76).

Конструкція робочого місця й взаємне розташування всіх його елементів (сидіння, органи керування, засобу відображення інформації) відповідають антропометричним, фізіологічним і психологічним вимогам, але разом з цим характеру роботи. Конструкція робочих меблів забезпечує спроможність індивідуального регулювання відповідно росту працюючих задля підтримки зручної пози.

Робочий стіл пофарбований матовою фарбою. Дисплей розташований так, його верхній край перебуває на рівні очей на відстані близько 70 см, укладається у в припустимі рамки з 60 до 90 см. Частота мерехтіння екрана $f_{\text{мер}}=100$ Гц, відповідає умові $f_{\text{мер}}>70$ Гц.

Робоче місце розташоване перпендикулярно віконним прорізам, це зроблено із тією метою, щоб виключити пряму й відбиту мерехтливність екрана з вікон і приладів штучного освітлення, якими являться лампи накаливання. Обладнання і організація робочого місця із ВДТ забезпечують відповідність конструкцій всіх елементів робочого місця й їх взаємного розташування, ергономічним вимогам із урахуванням характеру і особливостей трудової діяльності згідно правил охорони праці під час експлуатації ЕОМ.

2.3.2 Гігієнічне нормування властивостей повітря робочої зони

Мікроклімат виробничих приміщень нормується у залежності з теплових характеристик виробничих приміщення, категорії робіт по важкості і періоду року. Основні нормативні документи, де наводяться норми мікроклімату – це санітарні норми й стандарти безпеки праці. Оптимальні мікрокліматичні умови – це такі властивості температури, вологості і швидкості руху повітря, котрі при тривалому і систематичному впливі на людину забезпечують нормальний тепловий стан організму без напруги і порушення механізмів терморегуляції. Найбільше значним фактором продуктивності й безпеки праці являться виробничий мікроклімат, характеризується температурою й вологістю повітря,

швидкістю його руху, але разом з цим інтенсивністю радіації, і повинен відповідати ГОСТ 12.1.005-88 і СНиП 2.04.05-86, саме тому величини параметру мікроклімату повинно становити:

- 1) температура повітря з 18-22° С,
- 2) вологість повітря з 40%-60%,
- 3) швидкість повітря з 0,1-0,2 м/с.

Задля підтримки у приміщеннях нормального мікроклімату, відповідає гігієнічним вимогам складу повітря, видалення із нього шкідливих газів, пару і пилу використовують вентиляцію. Вентиляція - це регульований повітрообмін в приміщенні.

У дипломному проекті, рекомендовано застосування припливної вентиляції й застосування кондиціонерів у місцях установки точок доступу із доступом у Інтернет.

2.3.3 Освітлення виробничих приміщень

Задля освітлення приміщення, в якому працює програміст, використовується змішане освітлення, тобто сполучення природного й штучного освітлення. Природне освітлення - здійснюється через вікна у зовнішніх стінах будинку. Штучне освітлення - використовується при недостатньому природному освітленні й здійснюється поза допомогою двох систем: загального й місцевого освітлення. Задля загального освітлення приміщення, де перебуває робоче місце програміста, використовуються газорозрядні лампи типу ЛД.

Нормами задля даних робіт установлена необхідна освітленість робочого місця $E_H=300$ лк (задля робіт високої точності, коли найменший розмір об'єкта розрізнення дорівнює 0,3 – 0,5 мм). Вимоги до виробничого освітлення виконані.

2.3.4 Захист з дії виробничого шуму й вібрації

В робочих приміщеннях основними джерелами акустичних шумів являться шуми ПЕОМ. ЕОМ являться разом з цим джерелами шумів електромагнітного походження (коливання елементів електромеханічних пристроїв під впливом

змінних магнітних полів). Крім того, в даних приміщеннях, виникає структурний шум, тобто шум, випромінюваний поверхнями коливних конструкцій стін, перекриттів, перегородок будинку в звуковому діапазоні частот.

Систематичний шум може викликати стомлення слуху й ослаблення звукового сприйняття, але разом з цим значне стомлення всього організму.

Припустимий рівень шуму на робочих місцях у виробничих приміщеннях не повинен перевищувати вимог Державних стандартів України 12.1.003 – ССБТ.

Рівні шуму на робочих місцях користувачів персональних комп'ютерів не повинні перевищувати значень, встановлених СанПіН 2.2.4/2.1.8.562-96 і становлять не більше 50 дБА.

Знизити рівень шуму у приміщеннях можливо використанням звукопоглинальних матеріалів із максимальними коефіцієнтами звукопоглинання у області частот 63-8000 Гц задля обробки стін і стелі приміщень. Додатковий звуковбирний ефект створюють однотонні фіранки із щільної тканини, повішені у складку на відстані 15-20 см з огорожі. Ширина фіранки повинна бути у 2 рази більше ширини вікна.

2.3.5 Захист з електромагнітних полів

Задля попередження впровадження небезпечної техніки дисплеї повинні бути сертифіковані.

2.3.6 Пожежна безпека

Пожежна безпека – стан об'єкта, при якому із регламентованою ймовірністю виключається спроможність виникнення й розвиток пожежі і впливу на людей її небезпечних факторів, але разом з цим забезпечується захист матеріальних цінностей. Причинами пожеж й вибухів на підприємстві являться порушення правил і норм пожежної безпеки, невиконання Закону “Про пожежну безпеку”. Поза стан пожежної безпеки на підприємстві відповідають її керівники, начальники цехів, майстри й інші керівники.

					<i>БКС 28. 12 000. 00 КРБ ПЗ</i>	Арк.
Зм.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		63

ВИСНОВКИ

Основні теоретичні і практичні результати вивчення формування к-утворення в теорії протікання засобами комп'ютерного імітування полягають в наступному:

1. Проведено аналіз існуючих методів і засобів імітування дій формування к-утворення. Розглянуто класичні методи утворення перколяційних к-утворень. Вивчено модифікації й інтерпретації методів задля аналізу к-утворень, котрі спроможні стати основою задля подальших досліджень і імітування скрізного середовища в теорії протікання.
2. Створено комп'ютерну імітаційно-статистичну імітація дій формування к-утворення, зокрема — задля перколяційних к-утворень, дозволяє візуалізувати кластерну структуру, аналізувати її функціонування, оцінювати властивості формування к-утворення і коригувати вхідні характеристики структури.
3. Вивчено закономірності дій коагуляції імітованих к-утворень часток, показана спроможність цілеспрямованого впливу на їх властивості.
4. Отримані кількісні методи прогнозування структури і властивостей імітованих к-утворень.
5. Проаналізовані існуючі методи керування процесами формування к-утворення, описані методи вивчення комп'ютерної структури.
6. Створено програмне забезпечення задля імітування перколяційних к-утворень й оцінки їх властивостей і проведені комп'ютерні експерименти, узагальнено отримані результати.

Із практичної точки зору отримані у роботі результати дозволяють використовувати створену комп'ютерну імітація в несхожих галузях (металургія, наноелектроніка, медицина, матеріалознавство), доповнюючи створене середовище іншими налаштовуваними бібліотеками. Такий підхід значно скоротить час підготовки технічних систем, вимагають велику кількість умов і властивостей імітування.

					БКС 28. 12 000. 00 КРБ ПЗ	Арк.
Зм.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		64

ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ІНФОРМАЦІЙНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Данилов В.Я. Синергетичні методи аналізу: навч. посіб. / В.Я. Данилов, А.Ю. Зінченко. – К.: НТУУ «КПІ» ВПІ ВПК «Політехніка», 2011. — 340 с.
2. Кветний Р.Н., Комп'ютерне моделювання систем та процесів. Методи обчислень: навчальний посібник – Вінниця: ВНТУ, 2012. – 193 с.
3. Кривченко Ю.В. Комп'ютерне моделювання самоорганізації кластерних систем: залежність структури від генезису та керуючих параметрів // Науковий журнал ЧНТУ «Технічні науки та технології». – 2018. – Вип. 4 (14). – С. 166-174.
4. Герега О.М. Комп'ютерна модель багатовимірних кластерних систем / О. М. Герега, Ю. В. Кривченко // Збірник тез доповідей 77 наукової конференції викладачів академії (ОНАХТ). – 2017. – С. 235-236.
5. Герега О.М. Комп'ютерне моделювання самоорганізації перколяційних систем у композитах / О. М. Герега, Ю. В. Кривченко // Тези міжнародної конференції «Структуроутворення, міцність та руйнування композиційних матеріалів», – 2018. – С. 15-16.
6. Кривченко Ю.В. Програмне забезпечення моделювання самоорганізації кластерних систем у твердому тілі / Тези доповідей Тринадцятої міжнародної науково-практичної конференції «Математичне та імітаційне моделювання систем МОДС 2018». – 2018. – С. 236-239. // ISBN 978-617-7571-24-6
7. Кривченко Ю.В. Імітаційно-статистична модель процесів кластероутворення у двофазних потоках / Збірник доповідей XIII міжнародної науково-практичної конференції «Інформаційні технології та автоматизація – 2020». – 2020. – С. 38-40
8. Юрченко І. В. Інформатика та програмування. Частина 2. / І. В. Юрченко, В. С. Сікора. – Чернівці : Видавець Яворський С.Н., 2015. – 210 с.
9. Безменов М.І. Основи програмування у середовищі Delphi : навч. посіб. – Харків: НТУ «ХПІ», 2010. – 608 с.
10. Embarcadero RAD Studio: веб-сайт.
URL: https://uk.wikipedia.org/wiki/Embarcadero_RAD_Studio.

Фрагмент вихідного коду ГОЛОВНОГО МОДУЛЯ (Umain) кластероутворення

```
//-----

procedure tfmmain.tbfractalclick(sender: tobject);
var
mkoag:array of boolean;
tempkoag: array of integer;
i,j,k,countkoag,ck:integer;
vkl:boolean;
begin
  frmfractal.lbrasmkoag.clear;
  i:=length(connecttable);
  setlength(mkoag,i);
  for i:=0 to length(connecttable)-1 do
    mkoag[i]:=false;
  for i := 0 to length(mkoag)-1 do
    if not mkoag[i] then
      begin
        mkoag[i]:=true;
        countkoag:=1;
        setlength(tempkoag,countkoag);
        tempkoag[countkoag-1]:=i;
        ck:=0;
        while ck<length(tempkoag) do
          begin
            for j:=0 to length(connecttable)-1 do
              if connecttable[tempkoag[ck],j]=2 then
                begin
                  vkl:=false;
                  for k:=0 to countkoag-1 do
                    if tempkoag[k]=j then
                      begin
                        vkl:=true;
                        break;
                      end;
                  if not vkl then
                    begin
                      inc(countkoag);
                      setlength(tempkoag,countkoag);
                      tempkoag[countkoag-1]:=j;
                      mkoag[j]:=true;
                    end;
                end;//if connecttable[koagulant[ck],j]=2 ...
            ck:=ck+1;
          end;//while ck< ...
        vkl:=false;
        for j:=0 to frmfractal.lbrasmkoag.count-1 do
          if frmfractal.lbrasmkoag.items[j]=inttostr(length(tempkoag)) then
            begin
              vkl:=true;
              break;
            end;
          if not vkl then
            frmfractal.lbrasmkoag.items.add(inttostr(length(tempkoag)));
            countkoag:=0;
            setlength(tempkoag,countkoag);
          end;//if not maskoag[i] и for i:=0 ...
        frmfractal.visible:=true;
        frmmain.enabled:=false;
        frmfractal.show(sender);
      end;
```

```

//-----

procedure tfrmmain.findsquare;
var
  maxp,i,j:integer;
  stotal,spoints,s:double;
  x,y,z,r:double;
  covered:boolean;
  ri,rj:double;
begin
  for i:=0 to length(crosspoints)-1 do
    begin
      maxp:=i;
      x:=crosspoints[i,0];
      y:=crosspoints[i,1];
      z:=crosspoints[i,2];
      r:=crosspoints[i,3];
      for j:=i to length(crosspoints)-1 do
        if crosspoints[j,3]>r then
          begin
            x:=crosspoints[j,0];
            y:=crosspoints[j,1];
            z:=crosspoints[j,2];
            r:=crosspoints[j,3];
            maxp:=j;
          end;
      for j:=maxp-1 downto i do
        crosspoints[j+1]:=crosspoints[j];
      crosspoints[i,0]:=x;
      crosspoints[i,1]:=y;
      crosspoints[i,2]:=z;
      crosspoints[i,3]:=r;
    end;//for i
  stotal:=pi*udradius.position*udxaxis.position;
  spoints:=0;
  if length(crosspoints)>0 then
    begin
      r:=crosspoints[0,3]*(2/3)*(sqrt(5)/3);
      spoints:=pi*sqr(r);
      for i:=1 to length(crosspoints)-1 do
        begin
          covered:=false;
          ri:=crosspoints[i,3]*(2/3)*(sqrt(5)/3);
          for j:=0 to i-1 do
            begin
              rj:=crosspoints[j,3]*(2/3)*(sqrt(5)/3);
              if (ri<=rj+sqrt( sqrt(crosspoints[i,0]-crosspoints[j,0]) + sqrt(crosspoints[i,1]-crosspoints[j,1]) +
sqr(crosspoints[i,2]-crosspoints[j,2]) ) ) and
                (rj>sqrt( sqrt(crosspoints[i,0]-crosspoints[j,0]) + sqrt(crosspoints[i,1]-crosspoints[j,1]) +
sqr(crosspoints[i,2]-crosspoints[j,2]) ) ) then
                begin
                  covered:=true;
                  break
                end;//if ...
            end;//for j ...
          if not covered then
            spoints:=spoints+pi*sqr(ri);
          end;//for i
        end;//if length...
      s:=spoints/stotal;
      lbsquare.items.add(formatfloat('#,#####0.00000',s));
      spoints:=0;
      if length(crosspoints)>0 then
        begin
          r:=crosspoints[0,3]*(sqrt(7)/4);

```



```

spoints:=pi*sqr(r);
for i:=1 to length(crosspoints)-1 do
begin
coverd:=false;
ri:=crosspoints[i,3]*(sqrt(7)/4);
for j:=0 to i-1 do
begin
rj:=crosspoints[j,3]*(sqrt(7)/4);
if (ri<=rj+sqrt( sqr(crosspoints[i,0]-crosspoints[j,0]) + sqr(crosspoints[i,1]-crosspoints[j,1]) +
sqr(crosspoints[i,2]-crosspoints[j,2]) ) ) and
(rj>sqrt( sqr(crosspoints[i,0]-crosspoints[j,0]) + sqr(crosspoints[i,1]-crosspoints[j,1]) +
sqr(crosspoints[i,2]-crosspoints[j,2]) ) ) then
begin
coverd:=true;
break
end;//if ...
end;//for j ...
if not coverd then
spoints:=spoints+pi*sqr(ri);
end;//for i
end;//if length...
s:=spoints/stotal;
lbsquare_g.items.add(formatfloat('#,#####0.00000',s));
spoints:=0;
if length(crosspoints)>0 then
begin
r:=3;
spoints:=pi*sqr(r);
for i:=1 to length(crosspoints)-1 do
begin
coverd:=false;
ri:=3;
for j:=0 to i-1 do
begin
rj:=3;
if (ri<=rj+sqrt( sqr(crosspoints[i,0]-crosspoints[j,0]) + sqr(crosspoints[i,1]-crosspoints[j,1]) +
sqr(crosspoints[i,2]-crosspoints[j,2]) ) ) and
(rj>sqrt( sqr(crosspoints[i,0]-crosspoints[j,0]) + sqr(crosspoints[i,1]-crosspoints[j,1]) +
sqr(crosspoints[i,2]-crosspoints[j,2]) ) ) then
begin
coverd:=true;
break
end;//if ...
end;//for j ...
if not coverd then
spoints:=spoints+pi*sqr(ri);
end;//for i
end;//if length...
// виводимо результат
s:=spoints/stotal;
lbsquare_a.items.add(formatfloat('#,#####0.00000',s));
end;

```

//-----

```

procedure tfrmmain.movekoagulant;
var
//знайдемо центр мас
xmc:=0;
ymc:=0;
zmc:=0;
m:=0;//маса кластеру
for i:=0 to length(koagulant)-1 do
with tpointin(pointsin.objects[koagulant[i]]) do
begin
xmc:=xmc+getxpos*getm;

```

```

    ymc:=ymc+getypos*getm;
    zmc:=zmc+getzpos*getm;
    m:=m+getm;
    end;
xmc:=xmc/m;
ymc:=ymc/m;
zmc:=zmc/m;
radius:=0;
for i:=0 to length(koagulant)-1 do
    with tpointin(pointsin.objects[koagulant[i]]) do
        if radius<sqrt( sqrt(xmc-getxpos)+sqrt(ymc-getypos)+sqrt(zmc-getzpos) ) then
            radius:=sqrt( sqrt(xmc-getxpos)+sqrt(ymc-getypos)+sqrt(zmc-getzpos) );
        if radius=0 then
            radius:=tpointin(pointsin.objects[koagulant[0]]).getradius;
            maxr:=0;
            maxpoint:=0;
            for i:=0 to length(koagulant)-1 do
                with tpointin(pointsin.objects[koagulant[i]]) do
                    begin
                        x1:=getxpos+getv_res*cos(getzeta_res)*cos(getalpha_res);
                        z1:=getzpos+getv_res*sin(getzeta_res);
                        y1:=getypos+getv_res*cos(getzeta_res)*sin(getalpha_res);
                        k:=sqrt(sqrt(y1)+sqrt(z1));
                        if k>maxr then
                            begin
                                maxr:=k;
                                maxpoint:=i;
                            end;
                        end;
                    end;
                with tpointin(pointsin.objects[koagulant[maxpoint]]) do
                    begin
                        x_nach:=getxpos;
                        y_nach:=getypos;
                        z_nach:=getzpos;
                        alpha1:=getalpha_res;
                    if alpha1>pi then
                        alpha1:=alpha1;
                        zeta1:=getzeta_res;
                        x1:=x_nach+getv_res*cos(zeta1)*cos(alpha1);
                        y1:=y_nach+getv_res*sin(alpha1)*cos(zeta1);
                        if isnan(y1) then
                            y1:=y1;
                        z1:=z_nach+getv_res*sin(zeta1);
                        maxpoinradius:=getradius;
                        // count1:=0;
                    end;
                    while (sqrt(sqrt(y1)+sqrt(z1)))>(udradius.position-maxpoinradius) do
                        with
                        tpointin(pointsin.objects[koagulant[maxpoint]]) do
                            begin
                                a:=sqrt(y1-y_nach)+sqrt(z1-z_nach);
                                b:=2*(y_nach*(y1-y_nach)+z_nach*(z1-z_nach));
                                c:=sqrt(y_nach)+sqrt(z_nach)-sqrt(udradius.position-maxpoinradius);
                            if c=0 then
                                c:=c;
                                dis:=sqrt(b) - 4*a*c;
                                if isnan(dis) then
                                    dis:=dis;
                                if (alpha1<pi/2)and(alpha1>-pi/2) then
                                    if x1<x_nach then
                                        x1:=x_nach+(x_nach-x1);
                                    if dis<0 then
                                        begin
                                            messagedlg('error', mtwarning, [mbok], 0);
                                            tbclearvals.click;
                                            frmmain.close;
                                            halt;

```

```

end;
temp:=-b+sqrt(dis);
t1:=temp/(2*a);
temp:=-b-sqrt(dis);
t2:=temp/(2*a);
x_per1:= t1*(x1-x_nach)+x_nach;
x_per2:= t2*(x1-x_nach)+x_nach;
if x_per1=x_nach then
  x1:=x1;
  if (alpha1>=(-pi/2)) and (alpha1<=(pi/2)) then
    if ((x_nach<=x_per1)and(x_per1<=x1)) or
      ((x_nach<=x_per1)and(x_per1<x1)) or
      ((x_nach<x_per1)and(x_per1<=x1)) then
      begin
        x_per:=x_per1;
        y_per:=t1*(y1-y_nach)+y_nach;
        z_per:=t1*(z1-z_nach)+z_nach;
      end
    else
      begin
        x_per:=x_per2;
        y_per:=t2*(y1-y_nach)+y_nach;
        z_per:=t2*(z1-z_nach)+z_nach;
      end;
    if (alpha1<(-pi/2)) or (alpha1>(pi/2)) then
      if ((x_nach>=x_per1)and(x_per1>=x1)) or
        ((x_nach>=x_per1)and(x_per1>x1)) or
        ((x_nach>x_per1)and(x_per1>=x1)) then
        begin
          x_per:=x_per1;
          y_per:=t1*(y1-y_nach)+y_nach;
          z_per:=t1*(z1-z_nach)+z_nach;
        end
      else
        begin
          x_per:=x_per2;
          y_per:=t2*(y1-y_nach)+y_nach;
          z_per:=t2*(z1-z_nach)+z_nach;
        end;
    if (x1<x_nach)and(x_nach<x_per) then
      x1:=x1;
      if (x_per>udxaxis.position/2-pi*udkrivizna.position/2) and
        (x_per<udxaxis.position/2+pi*udkrivizna.position/2) and
        (y_per<0) then
        if (radius>=3)and(radius<50) then
        begin
          countcp:=countcp+1;
          setlength(crosspoints, countcp);
          crosspoints[countcp-1,0]:=x_per;
          crosspoints[countcp-1,1]:=y_per;
          crosspoints[countcp-1,2]:=z_per;
          crosspoints[countcp-1,3]:=radius;
        end;
      //знайдемо координати кінцевого положення частки
      t_s:=(y_per*y1+z_per*z1)/( sqrt(z_per)+sqrt(y_per) ) - 1;
      y1:=2*(y1-t_s*y_per)-y1;
      z1:=2*(z1-t_s*z_per)-z1;
      //знайдемо кути нового напрямку вектору швидкості
      temp:=sqrt(sqrt(x1-x_per)+sqrt(y1-y_per)+sqrt(z1-z_per));
      zeta1:=arcsin((z1-z_per)/temp);
      //для усіх чвертей площі
      alpha1:=arctan( abs((y1-y_per)/(x1-x_per)) );//1 чверть
      if ((x1-x_per)<0)and((y1-y_per)>0) then //2 чверть
        alpha1:=pi-alpha1;
      if ((x1-x_per)<0)and((y1-y_per)<0) then //3 чверть
        alpha1:=-pi+alpha1;

```

```

if ((x1-x_per)>0)and((y1-y_per)<0) then //4 четверть
  alpha1:=-alpha1;
if isnan(zeta1) then
  zeta1:=zeta1;
if isnan(alpha1) then
  alpha1:=alpha1;
deltax:=x_per-x_nach;
deltay:=y_per-y_nach;
deltaz:=z_per-z_nach;
for i:=0 to length(koagulant)-1 do
  begin
    with tpointin(pointsin.objects[koagulant[i]]) do
      begin
        localdx:=deltax;
        localdy:=deltay;
        localdz:=deltaz;
        while getxpos+localdx>udxaxis.position do
          begin
            t:=(udxaxis.position-getxpos)/localdx;
            y_v:=t*localdy+getypos;
            z_v:=t*localdz+getzpos;
            pbmain.canvas.pen.color := clblue;
            pbmain.canvas.moveto(round(xstart+getxpos),round(ycenter+getypos));
            if chblines.checked then
              pbmain.canvas.lineto(round(xstart+udxaxis.position),round(ycenter+y_v));
            localdx:=localdx-(udxaxis.position-getxpos);
            localdy:=localdy-(y_v-getypos);
            localdz:=localdz-(z_v-getzpos);
            setxpos(0);
            setypos(y_v);
            setzpos(z_v);
            incj;
            if x1>udxaxis.position then
              begin
                x1:=x1-udxaxis.position;
                x_per:=x_per-udxaxis.position;
              end;
            runmas[koagulant[i]]:=runmas[koagulant[i]]+1;
            end;
          while getxpos+localdx<0 do
            begin
              t:=abs(getxpos/localdx);
              y_v:=t*localdy+getypos;
              z_v:=t*localdz+getzpos;
              pbmain.canvas.pen.color := clblue;
            main.canvas.moveto(round(xstart+getxpos),round(ycenter+getypos));
            if chblines.checked then
              pbmain.canvas.lineto(round(xstart),round(ycenter+y_v));
            localdx:=localdx+getxpos;
            localdy:=localdy-(y_v-getypos);
            localdz:=localdz-(z_v-getzpos);
            setxpos(udxaxis.position);
            setypos(y_v);
            setzpos(z_v);
            decj;
            if x1<0 then
              begin
                x1:=x1+udxaxis.position;
                x_per:=x_per+udxaxis.position;
              end;
            end;
          end;
        end;
      end;
    end;
  end;
end;

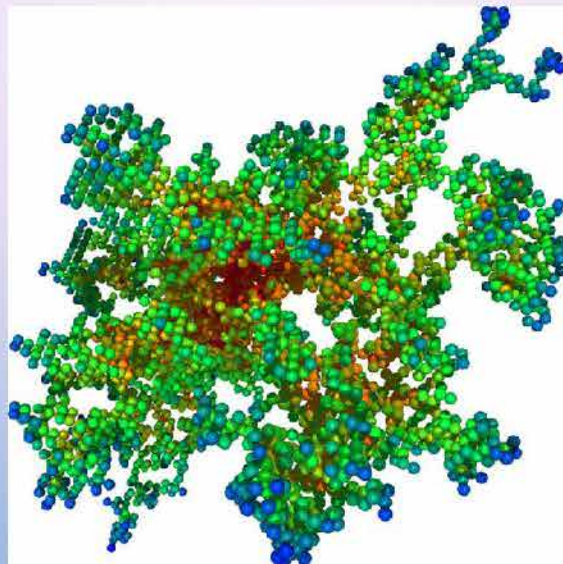
```

Слайди мультимедійної презентації

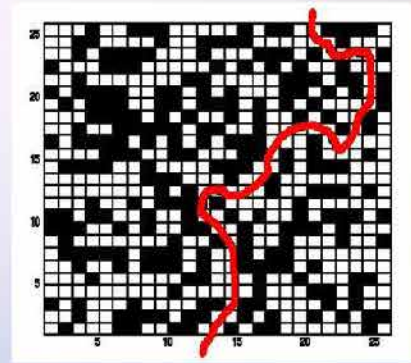
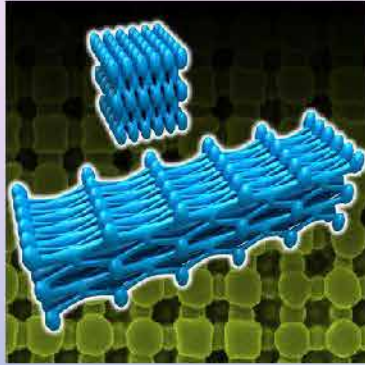
*Дослідження кластероутворення
у теорії протікання
засобами комп'ютерного
моделювання*

Клещов Ілля, ОТФК ОНТУ

Модель зв'язаних елементів кластеру



Перколяційні процеси у матеріалі



- Властивості і особливості еволюції зв'язаних областей поверхні матеріалів впливають на їх структуру і функціональність.
- Відбувається структурний фазовий перехід, швидко зростає кореляційна довжина, змінюється симетрія об'єкта і інші параметри.
- Поблизу точки фазового переходу, завдяки великим розмірам кластерів, геометрія системи фактично не залежить від виду речовини.

Зріст кластерної системи і поява зв'язування



а) мала концентрація



б) велика концентрація;
виникнення зв'язності

- Критична поведінка потужності нескінченного кластеру:
 $P \propto (x - x_c)^\beta$.
- Критична поведінка кореляційної довжини:
 $\xi \propto |t|^{-\nu}$, $t = (x - x_c)/x_c$.

Визначення параметрів кластерів

Середня маса кінцевого кластера $\langle s \rangle = \frac{\sum_s s^2 \cdot n_s}{\sum_s s \cdot n_s}$

Середнє значення радіусу гірації $\langle R^2(s) \rangle_L = \frac{\sum_s \langle R^2(s) \rangle \cdot s \cdot n_s}{\sum_s s \cdot n_s}$

Кореляційна довжина (довжина зв'язності) $\xi^2 = \frac{2 \sum_s R^2(s) s^2 n_s}{\sum_s s^2 n_s}$

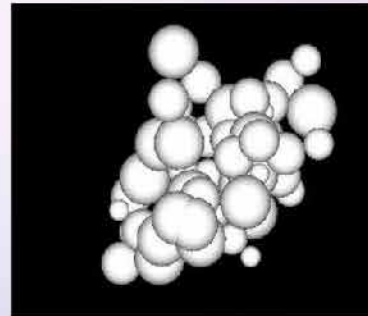
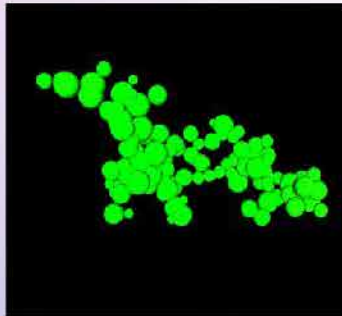
Потужність кластеру $P_\infty(p) = p \cdot \sum_s s \cdot n_s(p) = \frac{N_{беск.}}{N}$

Квадрат радіусу гірації ізоотропних кластерів $R^2(s) = \frac{1}{2 \cdot s^2} \sum_{i,j=1}^s [(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2]$

Ймовірність приналежності s-вузловому кластеру $\omega_s = \frac{s \cdot n_s}{\sum_s s \cdot n_s}$

Ступень анізотропії кластерів $A = \frac{R_{11}}{R_{22}}$

Вигляд та розмірності асиметричних і компактних кластерів

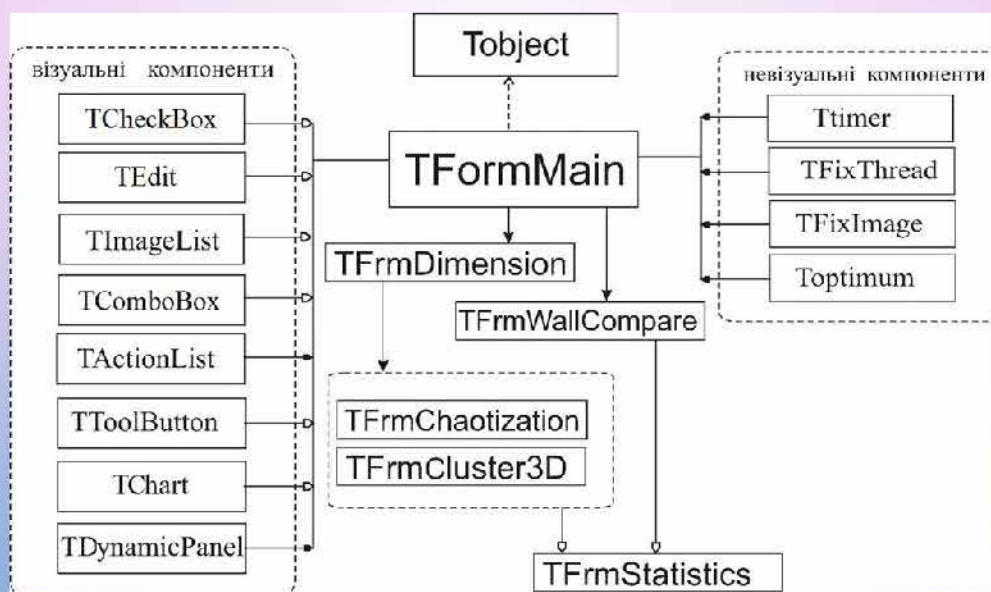


Розмірність	Квазісиметричні кластери	Асиметричні кластери
d_{max}	$2,98 \pm 0,05, \varepsilon = 0,016$	$2,75 \pm 0,06, \varepsilon = 0,021$
d_{fract}	$2,90 \pm 0,03, \varepsilon = 0,01$	$2,67 \pm 0,08, \varepsilon = 0,03$
d_{mf}	$2,73 \pm 0,04, \varepsilon = 0,014$	$2,54 \pm 0,40, \varepsilon = 0,018$
d_{cor}	$2,67 \pm 0,02, \varepsilon = 0,007$	$2,47 \pm 0,09, \varepsilon = 0,15$
d_{third}	$2,59 \pm 0,03, \varepsilon = 0,001$	$2,34 \pm 0,02, \varepsilon = 0,008$
d_{fourth}	$2,50 \pm 0,05, \varepsilon = 0,02$	$2,29 \pm 0,04, \varepsilon = 0,017$
d_{min}	$2,31 \pm 0,02, \varepsilon = 0,008$	$2,11 \pm 0,05, \varepsilon = 0,023$

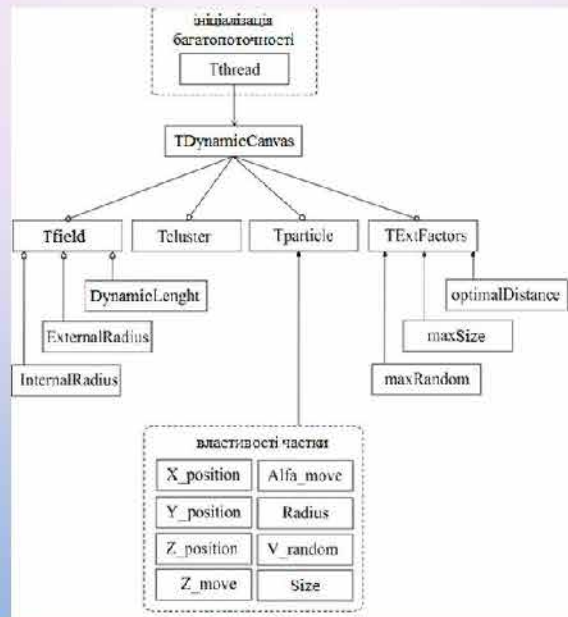
Результати розрахунку фрактальної розмірності різними способами

Розмірність	Метод палетки		Метод сфер	
	Кеазісиметричні кластери	Асиметричні кластери	Кеазісиметричні кластери	Асиметричні кластери
d_{max}	$2,98 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,010$	$2,97 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,010$	$2,90 \pm 0,04$ $\varepsilon = 0,013$	$2,90 \pm 0,04$ $\varepsilon = 0,013$
d_{fract}	$2,90 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,010$	$2,82 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,070$	$2,82 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,007$	$2,77 \pm 0,01$ $\varepsilon = 0,003$
d_{mf}	$2,73 \pm 0,04$ $\varepsilon = 0,014$	$2,70 \pm 0,05$ $\varepsilon = 0,018$	$2,70 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,011$	$2,63 \pm 0,04$ $\varepsilon = 0,015$
d_{corr}	$2,67 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,007$	$2,59 \pm 0,04$ $\varepsilon = 0,015$	$2,60 \pm 0,01$ $\varepsilon = 0,003$	$2,50 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,008$
d_{third}	$2,59 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,011$	$2,47 \pm 0,01$ $\varepsilon = 0,004$	$2,49 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,008$	$2,40 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,012$
d_{fourth}	$2,50 \pm 0,05$ $\varepsilon = 0,020$	$2,37 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,012$	$2,43 \pm 0,05$ $\varepsilon = 0,020$	$2,31 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,008$
d_{min}	$2,31 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,008$	$2,24 \pm 0,03$ $\varepsilon = 0,013$	$2,31 \pm 0,02$ $\varepsilon = 0,008$	$2,16 \pm 0,01$ $\varepsilon = 0,004$

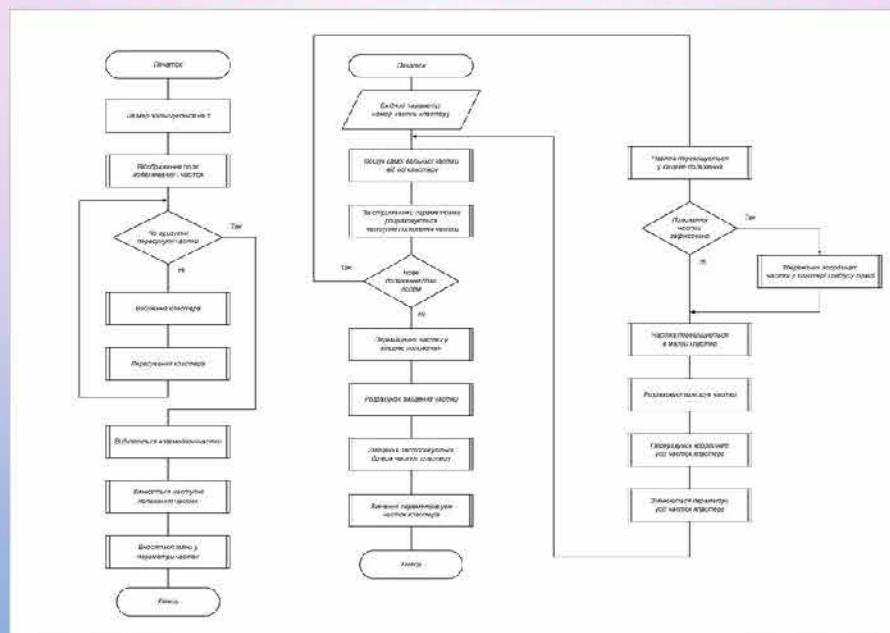
Діаграма взаємодії функціональних компонент програми



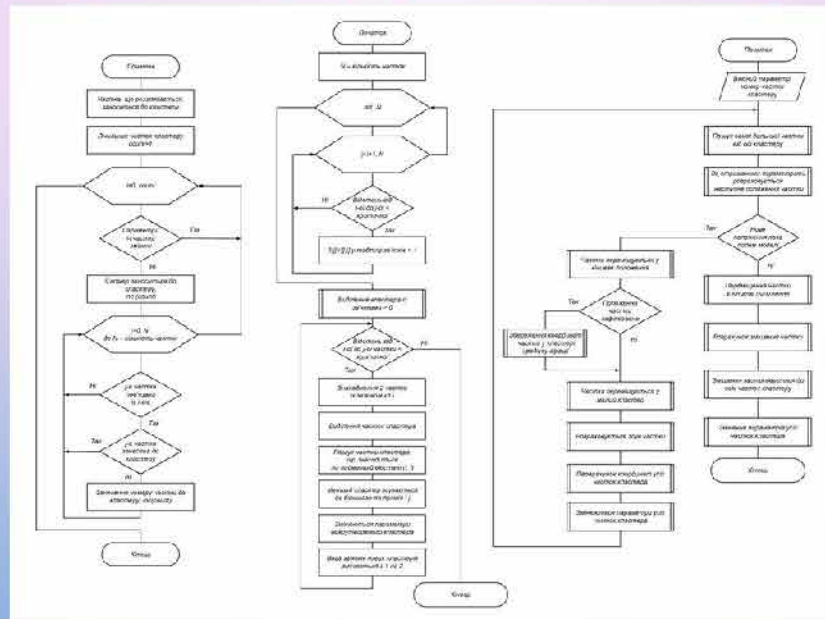
Діаграма взаємодії класів у комп'ютерній моделі



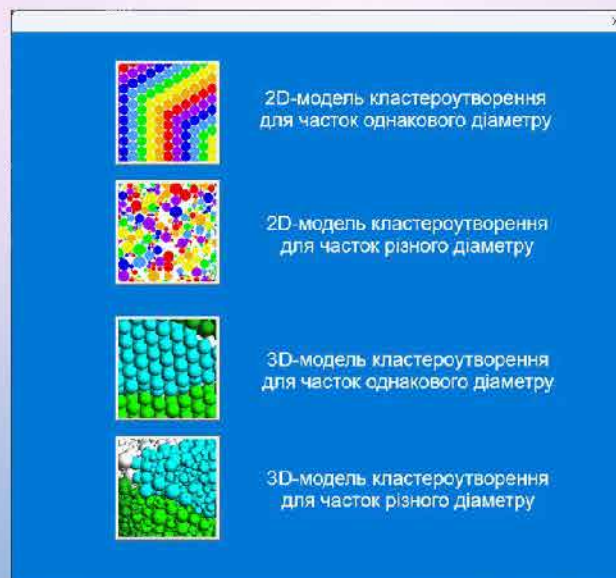
БСА роботи моделі по тактам та коагуляції часток



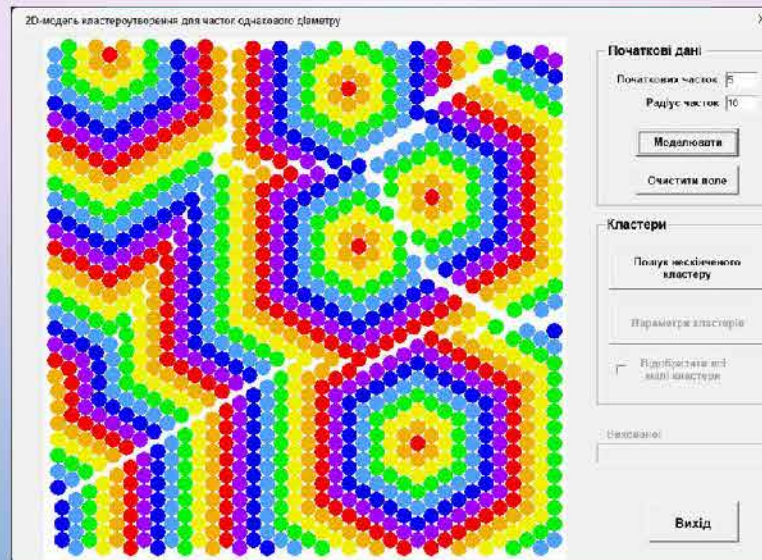
БСА виділення, пересування і взаємодії кластерів



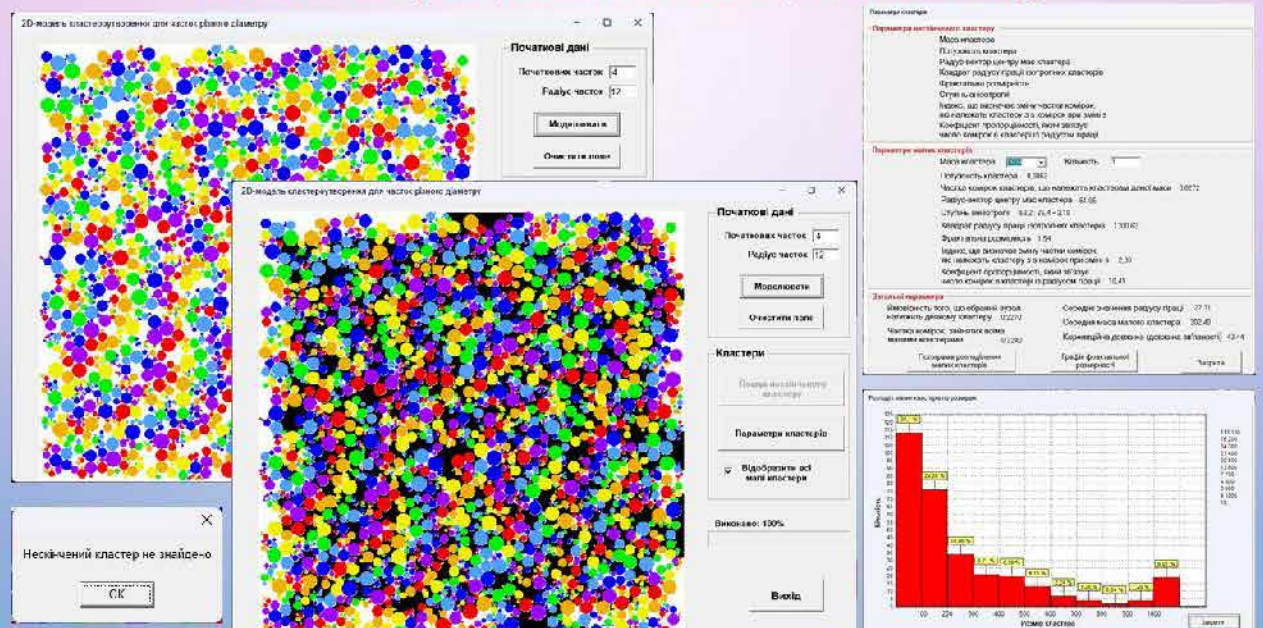
Інтерфейс вибору режиму роботи застосунку



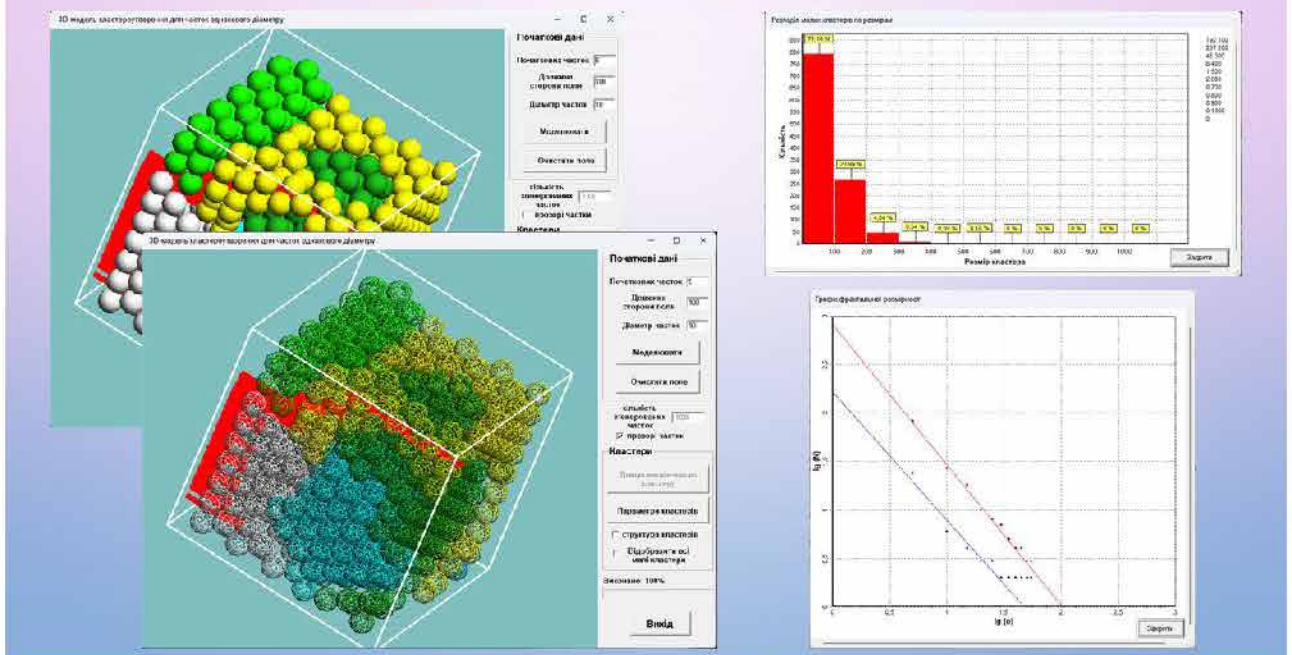
Моделювання у 2D-режимі для часток однакового діаметру



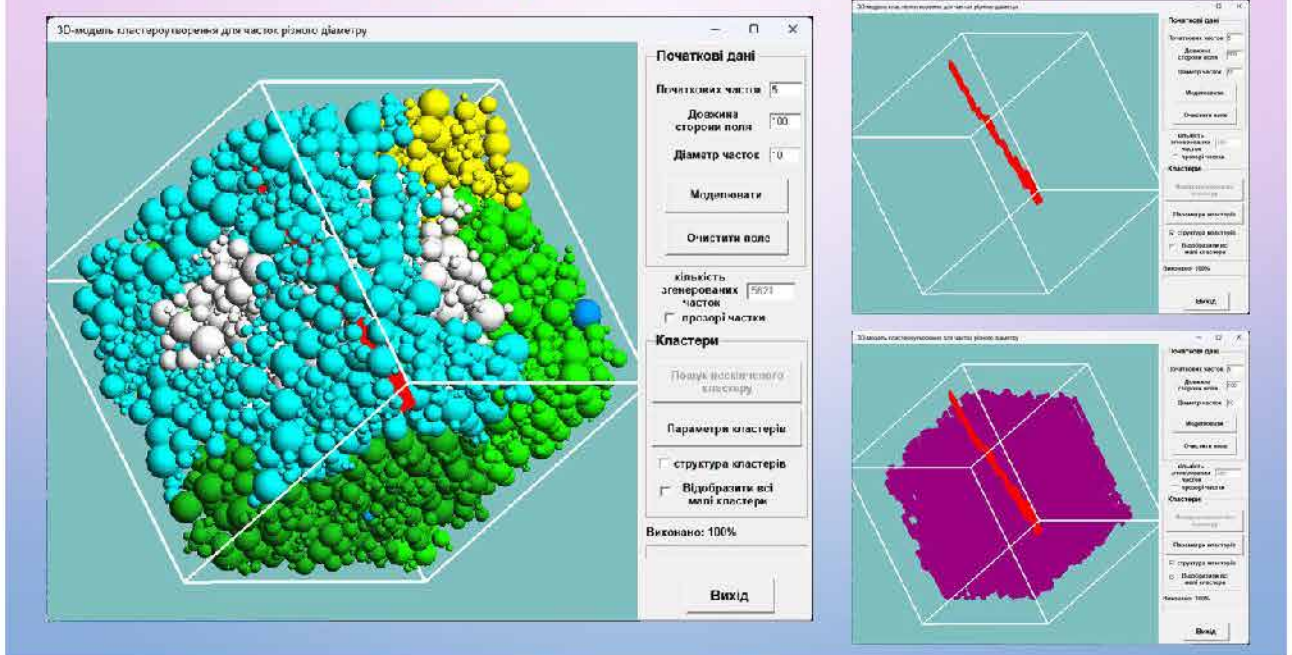
Модельювання у 2D-режимі для часток різного діаметру



Моделювання у 3D-режимі для часток однакового діаметру



Моделювання у 3D-режимі для часток різного діаметру



Результати моделювання у 3D-режимі для часток різного діаметру

Параметри нескінченного кластера

Маса кластера: 658

Потужність кластера: 0.0006

Радіус-вектор центру мас кластера: 43.67

Коефіцієнт радіусу (радіус/діаметр) кластера: 793.98

Фрактальна розмірність: 1.38

Відношення, що визначає зв'язу часток кластеру з числом комір в кластері: 1.17

Коефіцієнт пропорційності, який зв'язує число комір в кластері з радіусом праці: 6.15

Параметри малих кластерів

Маса кластера: 80

Потужність кластера: 0.0003

Частка комірок кластерів, що належать кластерам даної маси: 0.0004

Радіус-вектор центру мас кластера: 41.66

Квадрат радіусу праці втроях кластерів: 267.28

Фрактальна розмірність: 1.30

Відношення, що визначає зв'язу часток кластеру з числом комір в кластері: 3.50

Коефіцієнт пропорційності, який зв'язує число комір в кластері з радіусом праці: 11.93

Загальні параметри

Ймовірність того, що обраний атом належить даному кластеру: 0.0004

Частка комірок, зайнятих всіма малими кластерами: 0.0004

Середнє значення радіусу праці: 167.00

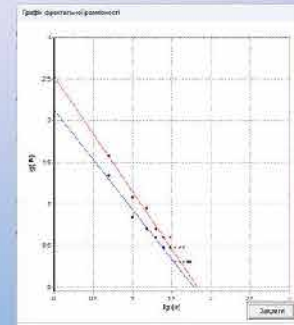
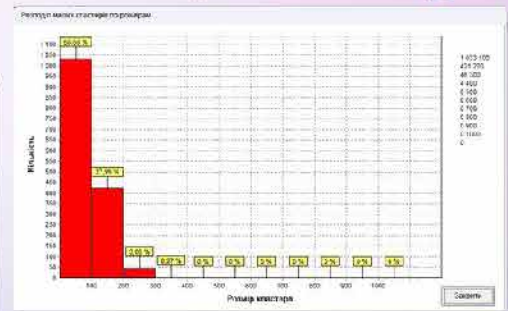
Середня маса малого кластера: 12.71

Коефіцієнт добросовісності (добросовісність): 13.74

Графік фрактальної розмірності

Гістограма розподілу малих кластерів

Закрити



ВИСНОВКИ

Основні теоретичні і практичні результати дослідження кластероутворення у теорії протікання засобами комп'ютерного моделювання полягають у наступному:

1. Проведено аналіз існуючих методів і засобів моделювання процесів кластероутворення. Розглянуто класичні методи утворення кластерів часток у теорії протікання. Вивчено модифікації та інтерпретації методів для аналізу кластерів, які можуть стати основою для подальших досліджень і моделювання середовища у теорії протікання.
2. Створено комп'ютерну імітаційно-статистичну модель процесів кластероутворення, зокрема – для нескінчених кластерів, що дозволяє візуалізувати кластерну структуру, аналізувати її функціонування, оцінювати параметри кластероутворення і коригувати вхідні характеристики моделі.
3. Вивчено закономірності процесів коагуляції модельних кластерів часток, показана можливість цілеспрямованого впливу на їх параметри.
4. Отримані кількісні методи прогнозування структури і властивостей модельних кластерів.
5. Проаналізовані існуючі методи керування процесами кластероутворення, описані методи дослідження комп'ютерної моделі.
6. Створено програмне забезпечення для моделювання малих та нескінчених кластерів та оцінки їх параметрів і проведені комп'ютерні експерименти, узагальнено отримані результати.

З практичної точки зору отримані в роботі результати дозволяють використовувати створену комп'ютерну модель у різних галузях (металургія, наноелектроніка, медицина, матеріалознавство), доповнюючи створене середовище іншими налаштовуваними бібліотеками. Такий підхід значно скоротить час підготовки технічних систем, що вимагають велику кількість умов і параметрів моделювання.

ВІДГУК

керівника про кваліфікаційну роботу бакалавра

Клещова Іллі Максимовича

(прізвище, ім'я та по батькові)

Спеціальність 123 "Комп'ютерна інженерія"

Тема кваліфікаційної роботи Дослідження кластероутворення у теорії протікання засобами комп'ютерного моделювання

ХАРАКТЕРИСТИКА КВАЛІФІКАЦІЙНОЇ РОБОТИ

а) Обсяг і якість виконання роботи (графічного матеріалу і розрахунково-пояснювальної записки) Випускна робота виконана відповідно технічному завданню. Пояснювальна записка до випускної роботи містить 80 сторінок. У пояснювальній записці описано етапи дослідження кластероутворення у теорії протікання, етапи моделювання та візуалізації кластерів часток, оцінки їх параметрів, моделювання кластероутворення. Графічна частина складається з 18 слайдів, оформлених у вигляді презентації, передбачених технічним завданням. Якість виконання пояснювальної записки та слайдів добра, розробку виконано у повному обсязі.

б) Самостійність роботи Протягом виконання випускної бакалаврської роботи Клещов Ілля поступово та послідовно виконував всі етапи, проявив ініціативу у створенні загальної концепції та реалізації випускної роботи. Всі роботи він виконував самостійно, з оглядом на рекомендації керівника.

в) Теоретична підготовка здобувача освіти

Клещов Ілля під час роботи над випускною бакалаврською роботою вивчив і опрацював достатню кількість літературних джерел за даною тематикою.

Вважаю, що теоретична підготовка здобувача освіти достатня і він готовий до захисту роботи.

г) Вміння розв'язувати виробничі і конструкторські питання на базі останніх досліджень науки і техніки, передових методів виробництва

Під час виконання роботи Клещов Ілля мав змогу самостійно приймати окремі рішення з виконання програмної частини роботи та показав вміння організовано працювати над поставленою задачею, застосовувати знання у галузі програмування та математики, розробляти, встановлювати та налаштовувати спеціалізоване програмне забезпечення, оформлювати слайди та складати презентації, користуючись сучасними комп'ютерними програмними засобами, такими як Embarcadero RAD Studio, Microsoft PowerPoint, Microsoft Visio та ін.

Оцінка розрахункової частини *Відмінно*

Оцінка графічної частини *Відмінно*

Загальна оцінка *Відмінно*

Прізвище, ім'я, по батькові *Кривченко Юрій Вікторович*

Місце роботи і посада керівника роботи *ВСП "Одеський технічний фаховий коледж ОНТУ", викладач кафедри комп'ютерної інженерії, голова циклової комісії комп'ютерних технологій та програмної інженерії*

Підпис

[Підпис]
« 13 » *березня* 2024 р.

РЕЦЕНЗІЯ

на кваліфікаційну роботу бакалавра здобувача освіти
відділення комп'ютерних систем

Клещова Іллі Максимовича

(прізвище, ім'я та по батькові)

Спеціальність 123 "Комп'ютерна інженерія"

Освітня програма «Комп'ютерна інженерія»

Керівник дипломного проекту (роботи) Кривченко Юрій Вікторович

(прізвище, ім'я та по батькові)

Тема дипломного проекту (роботи) Дослідження кластероутворення у теорії
протікання засобами комп'ютерного моделювання

Обсяг розрахунково-пояснювальної записки 80 сторінок

Обсяг графічної (презентаційної) частини 18 аркушів (слайдів)

ХАРАКТЕРИСТИКА ДИПЛОМНОГО ПРОЕКТУ (РОБОТИ)

а) заключення про ступінь відповідності виконаного дипломного проекту (роботи) завданню
Представлена на рецензію кваліфікаційна робота бакалавра повністю відповідає меті проектування та технічному завданню. Тематика кваліфікаційної роботи є актуальною для своєї галузі та присвячена дослідженню кластероутворення у теорії протікання засобами комп'ютерного моделювання.

б) характеристика виконання кожного розділу дипломного проекту (роботи)
Кваліфікаційна робота складається зі вступу, двох розділів, висновків, переліку використаних джерел. У основному розділі розглянуті питання теорії протікання, кластероутворення, реалізації алгоритмів та моделювання.

в) оцінка якості виконання пояснювальної записки та графічної частини дипломного проекту (роботи)
Графічна частина виконана на достатньо високому рівні у вигляді презентації із використанням офісного пакету Microsoft PowerPoint та Visio. Пояснювальна записка виконана охайно та у відповідності до норм оформлення документів із використанням офісного пакету Microsoft Word. Загальна якість виконання документації – добра, академічного плагіату у роботі не виявлено

г) перелік позитивних якостей дипломного проекту (роботи) _____

1. Детально описано мету та цілі аналізу;

2. Виконано комп'ютерне моделювання та реалізовано програму для дослідження кластероутворення у візуальному режимі;

3. Проведено серію експериментів для оцінки впливу початкових параметрів моделі на характеристики модельних кластерів, зокрема їх вагу.

д) основні недоліки дипломного проекту (роботи) _____

1. У деяких режимах застосунок може виконувати моделювання достатньо повільно;

2. Можливо в роботі варто було навести більше прикладів моделювання у різних режимах.

Оцінка розрахункової частини _____

Відмінно

Оцінка графічної частини _____

Відмінно

Загальна оцінка _____

Відмінно

Прізвище, ім'я, по батькові рецензента _____ Васіліу Євген Вікторович

Місце роботи і посада рецензента _____ Державний університет інтелектуальних технологій і зв'язку, д.т.н., проф. кафедри КБ та ТЗІ



Підпис: _____

[Signature]

06

2024 р.

Ім'я користувача:
Катерина Григоріївна Краснокутська

ID перевірки:
1016214880

Дата перевірки:
28.04.2024 17:53:53 EEST

Тип перевірки:
Doc vs Internet + Library

Дата звіту:
28.04.2024 18:18:35 EEST

ID користувача:
100011688

Назва документа: **2БКС-28_Ілля_Клещов**

Кількість сторінок: **58** Кількість слів: **11631** Кількість символів: **86771** Розмір файлу: **3.38 MB** ID файлу: **1015988894**

Виявлено модифікації тексту (можуть впливати на відсоток схожості)

4.34%
Схожість

Найбільша схожість: **2.32%** з Інтернет-джерелом (<https://card-file.ontu.edu.ua/server/api/core/bitstreams/da841ffe-a0b...>)

4.34% Джерела з Інтернету

298

Сторінка 60

Не знайдено джерел з Бібліотеки

0% Цитат

Вилучення цитат вимкнене

Вилучення списку бібліографічних посилань вимкнене

0%
Вилучень

Немає вилучених джерел

Модифікації

Виявлено модифікації тексту. Детальна інформація доступна в онлайн-звіті.

Замінені символи

24

Підозріле форматування

13
сторінок

**ДОЗВІЛ
НА РОЗМІЩЕННЯ
ВИПУСКНОЇ КВАЛІФІКАЦІЙНОЇ РОБОТИ
В ЕЛЕКТРОННОМУ РЕПОЗИТАРІЇ ВСП «ОТФК ОНТУ»**

Ми, що нижче підписалися,

Клещов Ілля Максимович,
здобувач освіти гр. 2БКС-28, та

Кривченко Юрій Вікторович,
керівник випускної кваліфікаційної роботи,

не заперечуємо щодо розміщення електронного варіанту пояснювальної записки до випускної кваліфікаційної роботи бакалавра на тему:

«Дослідження кластероутворення у теорії протікання засобами комп'ютерного моделювання» (автор роботи – Клещов І.М., керівник роботи – Кривченко Ю.В.)

виконаного у ВСП «Одеський технічний фаховий коледж Одеського національного технологічного університету» в 2024 році, у повному обсязі в електронному репозитарії ВСП «ОТФК ОНТУ» для вільного доступу через мережу Інтернет.

Несемо відповідальність за ідентичність електронного та друкованого варіантів випускної кваліфікаційної роботи і даємо згоду на обробку персональних даних.

Виконавець



/ Клещов І.М. /

Керівник



/ Кривченко Ю.В. /

«13» червня 2024 р.