

УДК 624.016, 519.876.5: 004.358

ОСОБЕННОСТИ КОМПЬЮТЕРНОЙ РЕАЛИЗАЦИИ МОДЕЛИ КЛАСТЕРООБРАЗОВАНИЯ В ЦИРКУЛИРУЮЩИХ ПОТОКАХ

А. М. Асланов, А. Н. Герсга

Одесская государственная академия строительства и архитектуры

Описаны отличительные черты моделирования процессов кластерообразования с помощью программного продукта ChemKit. Пакет программ является реализацией компьютерной модели, разработанной для изучения функционирования технологических устройств, общей чертой которых является действие на двухфазный поток центробежной силы.

В работах [1,2] описана имитационная компьютерная модель коагуляции твёрдых частиц газового потока. Моделью является алгоритм движения и взаимодействия частиц и кластеров между собой и со стенками конструкции в открытой динамической системе в условиях действия центробежной силы.

В модели описаны типы генерируемых кластеров, изучены их структурные характеристики и габитус, предложен критерий преобладания в воздушном потоке кластеров определённого типа, а также способ определения границ промежуточной асимптотики кластеров, и разработана методика описания взаимодействия тел неправильной формы на конечных расстояниях.

Компьютерной реализацией модели является программный продукт ChemKit.

Базовые классы пакета ChemKit

Пакет программ создан с помощью объектно-ориентированной технологии. Основные составляющие пакета – это классы, которые описывают частицы, канал, в котором происходит взаимодействие, и образующиеся кластеры, а также классы, содержащие факторы воздействия на частицы и кластеры.

Класс, описывающий положение частиц в канале, содержит координаты центров частиц, величины их радиусов, значения углов между проекциями вектор скорости на плоскость XOY и положительным направлением оси X , между вектором скорости частиц и осью Z , а также величину случайной и центробежной составляющих скорости каждой частицы. Класс, относящийся к описанию взаимодействия, содержит параметры: наибольшее расстояние, при котором возникает взаимодействие между частицами, максимально возможное значение переносной и случайной составляющих скорости частицы и другие.

Алгоритм коагуляции частиц

Процесс коагуляции одиночных частиц в имитационной модели происходит по следующему алгоритму:

1. Каждая i -я частица проверяется на возможность коагуляции с j -ми частицами, где $j > i$.

Для этого рассчитывается расстояние между одиночными ними. Если расстояние больше заданного, то рассматриваются следующие пары частиц, иначе в ячейки $[i,j]$ и $[j,i]$ заносится величина веса связи, равная единице.

2. Выделяется кластер, образованный из существующих кластеров и частиц; условием возникновения нового кластера является наличие частиц с весом связи большим, чем ноль.

3. Определяются частицы, которые имеют вновь образованные связи.
4. Определяется наименьшее расстояние между образовавшимся и существующим кластерами.
5. Изменяется положение нового кластера относительно старого по прямой, соединяющей частицы, находящиеся на кратчайшем расстоянии друг от друга.
6. Определяются новые значения параметров кластеров, определяющих скорость передвижения.
7. В таблице связей (см. ниже) изменяется вес всех единичных связей нового и старого кластеров; он становится равным двум.

Пункты 5-7 повторяются циклически, пока не исчезнут все «единичные» связи в таблице.

Для имитации «склеивания» частиц разработан алгоритм, который присваивает одинаковые параметры движения взаимодействующим частицам одинаковые параметры движения.

Таблица связей

Для программной реализации кластеров как структур использованы динамические массивы данных (ClusterParameters: array of TClusterParameters). Структура данных частицы (TClusterParameters) содержит следующее: r – радиус частицы, dx , dy , dz – смещение частицы относительно центра масс кластера. Массив представлен в виде матрицы размера n

Движение и взаимодействие модельных кластеров

Алгоритм перемещения кластера состоит из 5 пунктов:

1. поиск частицы в кластере с максимальным расстоянием от оси канала;
2. расчёт следующего положения частицы;
3. проверка: если новое положение находится за пределами конструкции, то необходимо перейти к п. 4, иначе – к п. 5;
4. фиксация координаты удара частицы о стенку конструкции;

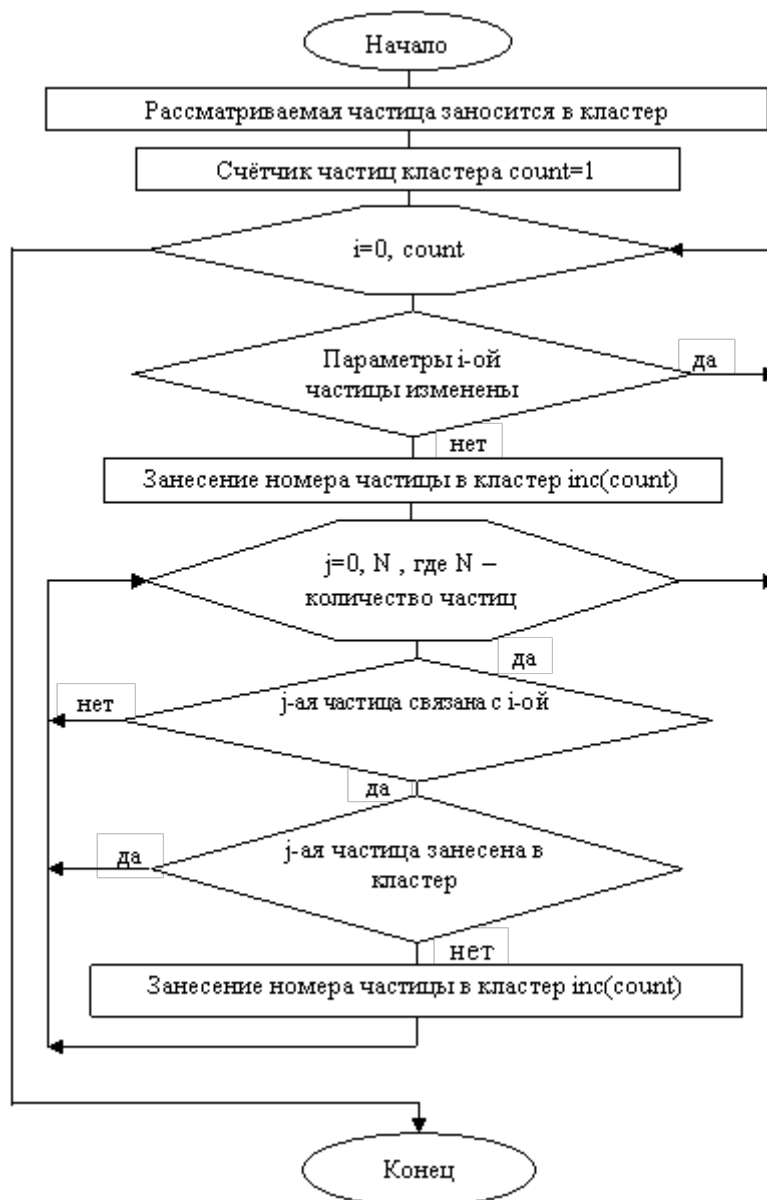


Рис.1. Блок-схема алгоритма работы таблицы связей.

5. определяется смещение текущей частицы относительно предыдущего положения и смещение остальных частиц кластера. Параметры переместившихся частиц изменяются, а точка пересечения принимается за начальные координаты. Затем происходит циклический переход к пункту 1.

Визуализация движения кластеров

При проектировании динамических объектов возникает задача корректного отображения процессов в реальном времени. Для её решения был создан компонент класса TDynamicCanvas, позволяющий визуализировать кластеры и канал. Компонент содержит опции отображения траекторий, возможности увеличения количества частиц в процессе проведения эксперимента, функцию дополнительной фильтрации изображения для получения качественных снимков экрана и создания рисунка в формате jpeg.

Основное предназначение компонента Dynamic Canvas – отображать происходящее в канале без мерцания и кратковременных потерь изображения.

Для этого создана система трёх фильтров. Первый из них TFilterInterlase выполняет проверку движения в компоненте Dynamic Canvas. Когда частицы начинают двигаться, фильтр реализует алгоритм чересстрочной обработки изображения, сканируя только нечетные строки. Одновременно начинает работать второй фильтр, сканирующий четные строки. Третий фильтр проверяет наличие помех в компоненте Dynamic Canvas.

Фильтры представлены в виде трёх дочерних классов, которые порождает класс TDCFilter. Работа фильтров изображения заметно увеличивает быстродействие программы.

Расчёт размерностей кластера

Вычисление размерностей выделено в отдельный программный модуль, который является глобальным. Основной алгоритм расчёта размерностей Реньи модельных кластеров воспроизводит метод палетки, дополнительный – метод сфер [3].

Созданные для определения размерностей динамические массивы содержат объекты, описывающие преобразованные координаты частиц относительно центра масс кластера. Инициализация необходимых динамических структур данных для частиц (TParticle) и кластеров (TCluster) происходит непосредственно перед вызовом модуля (UCalcDimension) расчёта размерностей.

Модуль определения спектра размерностей для трёхмерных фрактальных кластеров содержит методы для расчёта результатов вычислений. Входным параметром модуля является указатель на трёхмерный массив объектов, описывающих частицы (TParticles), из которых состоит кластер (TCluster).

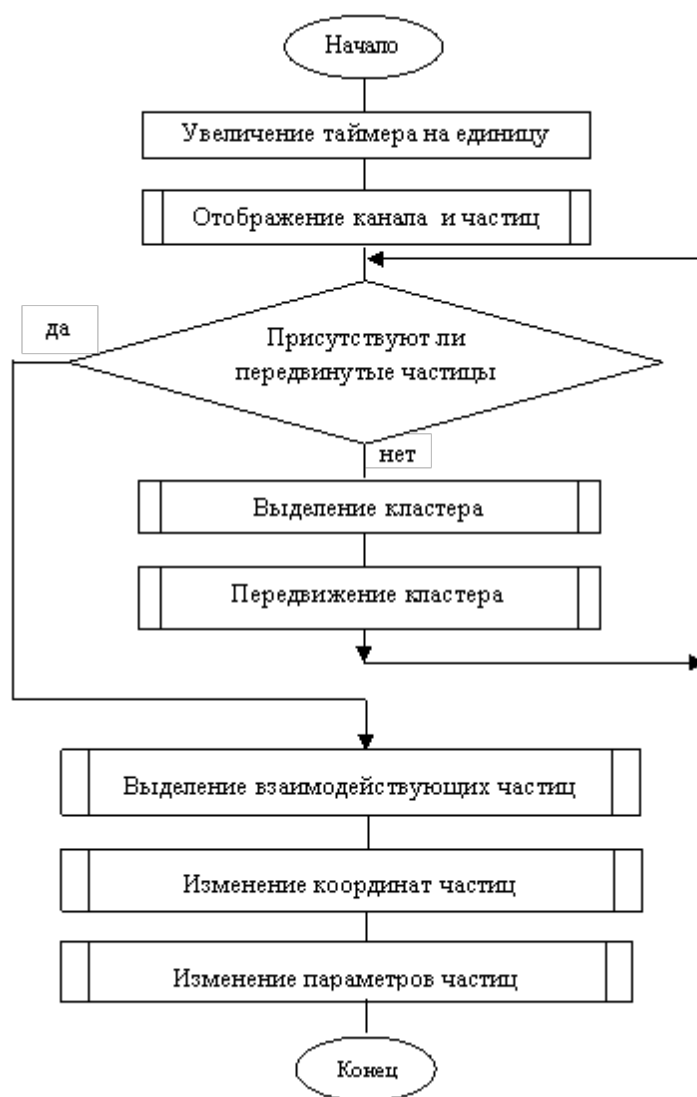


Рис.2. Блок-схема алгоритма работы пакета ChemKit.

Постоянной структурой, хранящей информацию о состоянии системы, является массив частиц и таблица связей, с использованием которых и формируются современные структуры данных кластеров.

На рис. 2 представлена блок-схема пошаговой работы пакета ChemKit.

Выводы

Программный продукт ChemKit позволяет моделировать процессы кластерообразования для класса задач, в которых существенно действие центробежной силы. Он создан как универсальный, и может быть использован в качестве плагина к программным продуктам 3D Max, AutoCad, MathLab.

Список литературы

1. Асланов А.М., Гергега А.Н., Лозовский Т.Л. Две модели стохастических процессов в центробежных фильтрах с обратными связями. //Журнал технической физики. – 2006. – №6. – С. 134-136.
2. Асланов А. М., Ботнаръ К.В., Гергега А. Н. О корреляции свойств потока и кластеров в модели агрегации частиц. //«Информационные системы и технологии». – Одесса: ОГАХ, 2006. – С.105-110.
3. Федер Е. Фракталы. – М.: Мир, 1991. – 254 с.