УДК 538.91

© 2020 г. **И.Е. Еремин**, д-р техн. наук,
Д.В. Фомин

(Амурский государственный университет, Благовещенск)

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ СТРУКТУРНОГО КОМПАКТНО-МАТРИЧНОГО МЕТОДА РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТА КОМПАКТНОСТИ

Рассматривается эффективность структурного компактно-матричного численного метода по сравнению с классическим прямым численным методом расчета плотности пространственной упаковки простейшей гексагональной решетки. Представлены теоретические результаты сравнительного анализа рассматриваемых численных методов, а также вычислительного эксперимента, проведенного с целью количественных оценок их эффективности.

Ключевые слова: модель решетки, гексагональная решетка, структурный компактно-матричный численный метод, прямой численный метод.

DOI: 10.22250/isu.2021.67.44-54

Введение

Задачи описания и упаковки различных пространственных структур представляют большой теоретический и практический интерес в различных областях современной науки и техники [1 – 7]. Задачи такого типа находят свое применение в физике конденсированного состояния и физике плазмы. Например, современные исследования трехмерного строения плазменно-пылевых структур выявили существование пространственных структур с объемными упаковками, аналогичными кристаллическим решеткам твердых тел: объемно-центрированной, гранецентрированной кубической и гексагональной, представляющими собой, соответственно, плотнейшие и другие плотные способы упаковки [8 – 10].

Для пространственных структур кубической сингонии были разработаны эффективные математические модели и численные методы расчета структурных и энергетических параметров [11 – 14], в частности, метод компактно-матричного описания и основанные на построенных с его помощью математических моделях

численные методы расчета коэффициента компактности и постоянной Маделунга. Но для веществ с гексагональной структурой они в данный момент не применяются в силу фундаментальных особенностей данных методов.

В качестве вещества с кристаллической решеткой исследуемого типа, для которого известны значения структурных параметров, был выбран гексагональный алмаз, так как он обладает монослоевым составом и сравнительно простой структурой [15, 16]. Для решетки данного структурного типа был разработан двухкомпонентный кубический способ описания, представленный в работе [17]. На основе этой модели были проведены мыслительный и вычислительный эксперименты, описанные в работах [18, 19], по результатам которых сделан вывод о существовании у гексагональной пространственной решетки исследуемого типа кубического периода и куба-генератора – фрагмента структуры кубической формы, обладающего главным свойством элементарной ячейки – возможностью восстановить сколь угодно большой кристалл путем трансляции.

Выявление куба-генератора показало возможность применения к простейшей гексагональной кристаллической решетке метода компактного матричного описания. В работе [20] показан процесс формирования соответствующего матричного описания исследуемой структуры. Исследование полученного матричного описания выявило наличие четкой периодической повторяемости структур компактных матриц, описывающих координационные слои исследуемой структуры, находящиеся за пределами куба-генератора. Это позволило разработать структурный компактно-матричный численный метод расчета коэффициента компактности исследуемой структуры.

Для определения эффективности и точности авторского численного метода по сравнению с уже существующими численными методами решения аналогичной задачи следует выполнить теоретическую оценку методов на основе их сравнительного анализа, а также провести серию вычислительных экспериментов по расчету коэффициента компактности, сравнивая значения ключевых показателей эффективности – точности и времени выполнения расчетов.

Классический прямой численный метод

Прямой численный метод использует в качестве исходных данных классическое матричное описание исследуемой структуры. Модели такого типа представляют информацию о расположении частиц (атомов, ионов или молекул), составляющих исследуемый фрагмент решетки, в некоторой трехмерной системе координат в виде двумерных матриц, каждая строка которых содержит координаты отдельной частицы.

В самом общем случае такие модели могут быть двух типов: 1) базисная –

матрица содержит описание только некоторого фрагмента структуры, позволяющего правильно построить сколь угодно большой кристалл; 2) полная – матрица содержит полное описание всего исследуемого объема решетки.

Достоинствами классических матричных моделей являются их простота и очевидность. Такие матрицы позволяют легко моделировать различные дефекты в исследуемой структуре. Если нужно учитывать тип, заряд или другие параметры частиц, соответствующая информация включается в состав модели путем введения дополнительных столбцов.

Существенным недостатком классических матричных моделей является размер описания: для получения достаточно точных результатов вычислений необходимо исследовать относительно крупные фрагменты структуры, состоящие из сотен тысяч частиц. Классические матричные представления таких фрагментов будут громоздки, что, как правило, усугубляется дробными значениями координат частиц.

Классический прямой численный метод расчета коэффициента плотности пространственной упаковки в общем случае подразумевает формирование полного матричного описания фрагмента исследуемого кристалла, после чего выполняется непосредственный перебор всех частиц, включенных в описание, и подсчет их количества, с учетом расположения относительно границ кристалла. Очевидными достоинствами данного метода являются его простота, понятность и легкость реализации, недостатками – высокие требования к вычислительным ресурсам и низкая скорость, обусловленные необходимостью хранить и обрабатывать большое количество элементов матричного описания.

Структурный компактноматричный численный метод

Описанный в работе [20] численный метод расчета плотности пространственной упаковки простейшей гексагональной решетки использует компактное матричное описание кристаллической структуры. Модели данного типа представляют собой набор плоских треугольных матриц, описывающих соответствующую последовательность кубических координационных слоев, минимально необходимую для полного и однозначного описания моделируемой структуры.

Особенностью метода компактного матричного описания является уменьшение объема получаемого описания по сравнению с классическим матричным методом в 48 раз благодаря использованию свойств симметрии куба и квадрата, а также устранению информационной избыточности. Последнее возможно из-за отсутствия необходимости в точной информации о значениях координат частиц для расчетов ряда скалярных параметров решетки: достаточно знать расстояние между конкретной частицей или группой частиц и точкой, выбранной в качестве

центра исследуемого фрагмента решетки. Недостатками метода компактного матричного описания можно назвать его более высокую сложность для понимания, реализации и применения к решеткам не кубических сингоний.

Меньший размер описания и выявленная периодическая повторяемость структур компактных матриц позволяют разрабатывать численные методы, обладающие высоким быстродействием и точностью, а также сравнительно низкими требованиями к вычислительным ресурсам.

Сравнительный теоретический анализ

Структурный компактно-матричный численный метод расчета коэффициента плотности пространственной упаковки позволяет сделать затрачиваемое на вычисления время практически не зависящим от объема исследуемой структуры. Так, чтобы подсчитать количество частиц в компактной матрице координационного слоя l посредством обхода всех ее элементов, нужно обработать $(1+2l)^2$ элементов. Таким образом, общее количество элементов T , необходимое для исследования объема структуры, ограниченного кубическим координационным слоем

L , может быть рассчитано следующим образом:
$$T = \sum_{l=0}^L (1+2l)^2.$$

С учетом свойства периодической повторяемости структур компактных матриц при использовании компактных матриц первого шага сжатия выполняется расчет для координационных слоев базового набора и первого периода.

Одновременно с этим выполняется расчет количества частиц во всех матрицах с той же структурой. Поэтому в случае включения в исследование слоев второго и последующих периодов обрабатывать их элементы отдельно уже нет необходимости. На рис. 1 приведен общий вид графика зависимости количества значений, обрабатываемых при подсчете количества частиц, от объема исследуемой структуры.

Рис. 1. Общий вид зависимости количества обрабатываемых значений T от максимального номера координационного слоя L (описывающего исследуемую структуру) и максимального номера слоя N , входящего в базовый набор, для матриц первого шага сжатия.

Таким образом, сравнительный теоретический анализ эффективности классического прямого и авторского структурного компактно-матричного численных методов свидетельствует о большем быстроедействии последнего без потери точности получаемых результатов.

Вычислительный эксперимент

Приведенные теоретические выводы об эффективности структурного компактно-матричного метода по сравнению с классическим подходом могут быть проверены в ходе соответствующего вычислительного эксперимента. Такой эксперимент предполагает выполнение вычислений коэффициента компактности для некоторого объема исследуемой структуры, последовательно изменяющегося в заданном диапазоне, с помощью классического прямого и структурного компактно-матричного численных методов. При этом нужно накапливать необходимую информацию об объеме, по которому проводилось вычисление, количеству обработанных частиц структуры, рассчитанному значению коэффициента и времени, затраченному на вычисления.

Для проведения данного эксперимента были разработаны программы «Азалия» и «Лилия», входящие в состав пакета прикладных программ «Оранжерея». На одном и том же компьютере (его параметры представлены в табл. 1) последовательно была проведена серия расчетов коэффициента компактности согласно описанной методике эксперимента. Для классического прямого численного метода в диапазоне объемов, ограниченных координационными слоями [1; 2000]; для структурного компактно-матричного метода – в диапазоне [1; 10000].

Таблица 1

Параметр	Значение
Операционная система	MS Windows 8.1 Professional x64
Объем оперативной памяти	8 ГБ
Центральный процессор	Intel Core i7 2.80 GHz

Некоторые экспериментальные данные приведены в табл. 2 и 3, где представлены избранные результаты расчетов соответственно классическим численным и компактно-матричным методами.

Анализ полученных данных в целом подтверждает результаты сравнительного теоретического анализа рассматриваемых численных методов. В частности, время, затрачиваемое на выполнение расчета классическим прямым численным методом, действительно увеличивается с увеличением исследуемого объема структуры (рис. 2).

Данная зависимость носит степенной характер. Продолжительность вычисления растет медленнее, чем предполагалось, но достигает заметных значений

уже при исследовании объема, ограниченного тысячным координационным слоем.

Таблица 2

Слой	Значение коэффициента компактности	Количество обнаруженных частиц	Затраченное время, мс
1	9,18235928143573	1	0
2	1,14779491017947	1	0
3	0,340087380793916	1	0
4	0,143474363772433	1	0
5	0,293835497005943	4	0
6	0,212554612996197	5	0
...	...	...	...
36	0,331427748412589	1684	0
...	...	...	...
100	0,320344968251448	34887	9
...	...	...	...
1000	0,316591936001221	34478278	4376
...	...	...	...
2000	0,315825647458877	275158606	31545

Таблица 3

Слой	Значение коэффициента компактности	Количество обнаруженных частиц	Затраченное время, мс
1	9,18235928143573	1	0
2	1,14779491017947	1	0
3	0,510131071190874	5	0
4	0,717371818862166	5	0
5	0,376476730538865	6	0
6	0,350715111443726	15	0
...	...	...	...
36	0,340087380793916	1806	0
...	...	...	...
100	0,34018345547899	37616	0
...	...	...	...
1000	0,340088679757667	37092873	10
...	...	...	...
2000	0,340087701836403	296518844	10
...	...	...	...
10000	0,340087393570829	37042595373	10

Рис. 2. График зависимости времени расчета коэффициента компактности классическим прямым численным методом от исследуемого объема структуры.

Также анализ полученных экспериментальных данных показывает, что время вычислений коэффициента компактности структурным компактно-матричным методом действительно почти не зависит от объема исследуемой структуры (рис. 3). Соответствующий показатель колеблется в диапазоне от 0 до 40 мс.

Рис. 3. Диаграмма зависимости времени расчета коэффициента компактности структурным компактно-матричным численным методом от исследуемого объема структуры.

Отличие графика зависимости времени вычислений, представленного на рис. 1, от графика зависимости количества обрабатываемых элементов, представленного на рис. 3, при сохранении ключевых тенденций можно объяснить огра-

ниченной разрешающей способностью использовавшейся вычислительной техники, составляющей 1 мс.

Скачки на графиках зависимостей времени вычислений (рис. 2, 3) можно объяснить двумя факторами: 1) частицы исследуемой структуры неравномерно распределены в пространстве, поэтому увеличение размеров исследуемого фрагмента не всегда однозначно приводит к такому же увеличению количества затрагиваемых частиц; 2) специфика работы вычислительной техники, проявляющаяся в присутствии системных и фоновых процессов, деятельность которых может занимать ресурсы компьютера в некоторые моменты времени, а также необходимость выполнения операций, связанных с выделением и освобождением оперативной памяти, буферизацией и записью накопленных данных в постоянную память, что тоже оказывает влияние на оценку затраченного времени.

Для удобства сравнения данные о значении коэффициента компактности полученные, путем расчетов каноническим аналитическим способом по элементарной ячейке, классическим прямым численным и авторским структурным компактно-матричным численным методами, представлены в табл. 4.

Таблица 4

№	Метод расчета	γ	Отклонение, %
1.	Канонический аналитический метод по элементарной ячейке	0,340087380793916	0
2.	Классический прямой численный метод	0,315825647458877	7,1
3.	Структурный компактно-матричный метод	0,340087393570829	$0,4 \cdot 10^{-6}$

Значения коэффициента компактности гексагонального алмаза, рассчитанные каноническим аналитическим методом по элементарной ячейке можно принять в качестве контрольного (строка №1). Значение коэффициента компактности, рассчитанное с помощью классического прямого численного метода (строка №2) отличается от контрольного значения на 7,1%. Значения коэффициента компактности, рассчитанные с помощью авторского численного метода, отличаются от контрольного на $0,4 \cdot 10^{-6}$ % (строка №3).

Большую разницу в отклонениях рассчитанных значений, по мнению авторов, можно объяснить следующими причинами:

1) в расчетах по классическому прямому методу вычисления производятся с использованием бесконечных десятичных дробей – с учетом ограничений, накладываемых компьютерной техникой, такие вычисления неизбежно выполняются с некоторой погрешностью; в расчетах по структурному компактно-матричному методу удалось перейти к вычислениям в целых числах;

2) возможно, на величину отклонения оказывает влияние взаимное расположение и ориентация границ исследуемого кубического фрагмента и базовых

элементов использованных матричных моделей.

Этими же причинами можно объяснить разницу в количестве частиц, обрабатываемых на одних и тех же объемах структуры каждым из методов.

Таким образом, можно сделать вывод, что авторский структурный компактно-матричный численный метод позволяет повысить точность расчета на 7% и увеличить скорость расчета на 99,94% относительно классического прямого численного метода.

Заключение

Большие успехи в разработке новых эффективных математических моделей, численных методов расчета структурных и энергетических параметров, а также их реализации в виде комплексов программ были сделаны в отношении решеток кубической сингонии. Однако они не затронули более сложные, не кубические сингонии. В ходе проведенных исследований были разработаны компактная матричная модель и структурный компактно-матричный численный метод расчета коэффициента плотности пространственной упаковки простейшей гексагональной решетки.

Сравнительный теоретический анализ классического прямого и авторского численных методов позволил предположить, что структурный компактно-матричный численный метод позволяет существенно повысить скорость выполнения расчета относительно классического прямого численного метода.

Данное предположение было проверено с помощью соответствующего вычислительного эксперимента, позволившего сравнить точность и скорость работы рассмотренных методов. Полученные экспериментальные данные подтвердили более высокую эффективность структурного компактно-матричного численного метода: время расчета сокращается не менее чем в пять раз, а точность возрастает на 7%.

Высокое соответствие расчетных и контрольных значений позволяет сделать вывод о точности и эффективности компактной матричной модели простейшей гексагональной структуры и авторского численного метода. И вместе с тем сделать заключение о возможности их применения для моделирования плотности упаковки различных систем, реализующих пространственную конфигурацию структурного типа вюрцит, включая гексагональные кристаллы пылевой плазмы.

Дальнейшие исследования возможностей метода компактного матричного описания и структурного компактно-матричного численного метода могут быть направлены на расширение области их применения:

- 1) для описаний решеток других сингоний и типов;
- 2) для реализации расчетов других структурных и энергетических парамет-

ров пространственных систем;

3) для разработки соответствующих программных инструментов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бондарева Т.П.* Компьютерное моделирование структуры случайной упаковки систем сферических частиц // Научные ведомости Белгородского государственного университета. Серия. «Экономика. Информатика». – 2013. – № 1(144). – С. 78-85.
2. *Бондарев В.Г., Мигаль Л.В., Бондарева Т.П.* Имитационное моделирование структуры плотноупакованных систем твердых дисков // Научные ведомости Белгородского государственного университета. – 2008. – № 9(49). – С. 248-260.
3. *Дик И.Г., Дьяченко Е.Н., Миньков Л.Л.* Моделирование случайной упаковки шаров // Физическая мезомеханика. – 2006. – № 4(9). – С. 63-69.
4. *Верхотуров М.А., Верхотурова Г.Н., Данилов К.В., Ягудин Р.Р.* Упаковка сложных трехмерных объектов в прямоугольный контейнер на базе дискретно-логического представления информации // Известия Самарского научного центра РАН. – 2014. – № 4-2. – С. 378-383.
5. *Чеканин В.А., Чеканин А.В.* Прикладное программное обеспечение для решения задач ортогональной упаковки объектов // Объектные системы. – 2016. – №13. – С. 10-15.
6. *Урусов, В.С.* Компьютер помогает предвидеть структуру и свойства кристаллов // Вестник РАН. – 1997. – Т. 67, №2. – С. 113-117.
7. *Sabry, A., Ayadi, M., Chowik, A.* Computational Materials Science. – 2000. – P. 345.
8. *Эйхвальд А.И., Карасев В.Ю., Дзalieва Е.С., Иванов А.Ю.* Упорядоченные плазменно-пылевые структуры в стратах тлеющего разряда // Вестник Санкт-Петербургского государственного университета. – 2008. – №1. – С. 36-47.
9. *Карасев В.Ю., Эйхвальд А.И., Дзalieва Е.С., Иванов А.Ю.* Об упорядоченных пылевых структурах, формируемых в тлеющем разряде // ЖЭТФ. – 2008. – Т. 133, Вып. 2. – С. 460–465.
10. *Дзalieва Е.С. и др.* Об особенностях объемного строения плазменно-пылевых структур // Вестник Санкт-Петербургского государственного университета. – 2013. – №2. – С. 39-45.
11. *Еремин, И.Е., Сычев, М.С.* Метод компактного описания энергетических параметров кристаллической решетки // V Международная научно-техническая конференция «Аналитические и численные методы 2010». – Пенза, 2010. – С. 103-111.
12. *Еремин И.Е., Сычев М.С.* Модифицированный алгоритм прямого расчета постоянной Маделунга // Информатика и системы управления. – 2010. – № 3(25). – С. 27-34.
13. *Сычев, М.С., Горевай А.А.* Численный расчет компактности простых кубических решеток // В мире научных открытий. Математика. Механика. Информатика. – 2012. – №2(38). – С. 140-151.
14. *Сычев, М.С.* Численный расчет компактности сложных кубических решеток // Информатика и системы управления. – 2012. – № 4(34). – С. 27-34.
15. Mindat.org: Lonsdaleite [Электронный ресурс] // База данных по минералогии. Hudson Inst. Mineralogy. URL: <https://www.mindat.org/min-2431> (Дата обращения: 25.08.2020).
16. Volume A: Space group symmetry [Электронный ресурс] // International tables for crystallography. Int. Union Crystallography, 2016. URL: <http://xrpp.iucr.org/Ac/> (Дата обращения 25.08.2020). DOI: 10.1107/97809553602060000114.

17. *Еремин И.Е., Фомин Д.В.* Кубическая модель кристаллической решетки гексагонального алмаза // Cloud of Science. – 2019. – Т. 6, №2. – С. 227-245.
18. *Фомин Ден.В., Еремин И.Е.* Мыслительный эксперимент по выявлению кубического периода гексагонального алмаза // Фундаментальные и прикладные разработки в области технических и физико-математических наук: сб. ст. VI Междунар. «круглого стола». – Казань: ООО «Конверт», 2018. – С. 99-104.
19. *Еремин И.Е., Фомин Д.В.* Вычислительный эксперимент по выявлению кубического периода гексагонального алмаза // Математические заметки СВФУ. – 2019. – Т. 26, № 2. – С. 80-93.
20. *Фомин Д.В.* Детерминированное моделирование кристаллической структуры гексагонального алмаза. II // Информатика и системы управления. – 2019. – № 3(61). – С. 32-41.

E-mail:

Еремин Илья Евгеньевич – ilya.eremin.70@mail.ru;

Фомин Денис Васильевич – gefest-uni@yandex.ru.