

О.В. Сопільник, М.Л. Мартинова

ІМІТАЦІЙНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ЕЛЕКТРОПРОВІДНОСТІ В КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛАХ

Анотація. Розроблено програмне забезпечення та проведено імітаційне моделювання електропровідності графітового композиту із застосуванням метода Монте-Карло для двох різновидів решітки матриці. Результатом роботи є визначення порогової концентрації складових, при якій струм провідності зникає.

Ключові слова: композитний матеріал, поріг протікання, генератор випадкових чисел, метод Монте-Карло, MATLAB, алгоритм.

Вступ. Інтенсивний розвиток мікроелектроніки, цифрової обчислювальної та вимірювальної техніки потребує все більшої кількості джерел живлення з максимальною енергоємністю, стабільністю, малими габаритами та тривалістю використання. Традиційні хімічні джерела струму на основі важких металів та їх з'єднань (цинк, свинець, ртуть, марганець тощо) мають низьку питому енергію і є екологічно небезпечними і достатньо дорогими. Перехід на літєві аноди дозволив якісно поліпшити їх енергетичні параметри, що у сполученні з неводними електролітами значно розширило температурний діапазон роботи. Подальший розвиток літєвих джерел струму пов'язаний з розробкою нових катодних матеріалів, зокрема на основі вуглецю [1].

Треба відзначити, що на даний час фізико – хімічні властивості таких композитів досліджені недостатньо; детального вивчення вимагають питання взаємозв'язку між складом композитів (вмістом і хімічною будовою компонентів) та їхніми властивостями (електропровідністю, механічними, термодформаційними характеристиками тощо).

Серед методів дослідження, які застосовуються для рішення цих проблем важливе місце займають методи імітаційного моделювання і дозволяють створювати адекватні моделі структур, що досліджуються [2].

Постанова задачі. Пошуки нових матеріалів для електродів хімічних джерел струму з високими питомими характеристиками привернули увагу до комкомпозитів з металевою матрицею, де в якості наповнювача використовують різновиди вуглецю. В цьому випадку найбільш перспективним є застосування електродних матеріалів на основі Li, Be тощо [1].

Структурні дослідження показали, що гостьові атоми металу впроваджуються у вигляді іонів, віддаючи свої електрони у графітовий шар. Графіт, таким чином, стає макроаніоном, електропровідність якого змінюється в залежності від концентрації вільних електронів [3]. Оскільки іон літія має малий розмір ($r = 0,68E$) шари графіту розсуваються незначно і зміна параметрів композиту пов'язана, головним чином, із заміщенням атомів в кристалічній решітці. Для літія характерна трикутна, а для берилія – квадратна кристалічні решітки, які і обрані у якості об'єкту дослідження розподілу струму при різній концентрації графіту.

Метою роботи є розробка імітаційних моделей і встановлення наявності порогу протікання струму в двомірних кристалічних решітках композиту при зміні концентрації компонент. Для цього необхідно: - обрати програмні засоби для реалізації поставленої задачі;- створити алгоритм імітаційного моделювання композиту із характерною для нього структурою решітки (квадратна, трикутна);- провести статистичну обробку результатів експерименту.

Рішення задачі. Теоретичним підґрунтям для рішення даної задачі обрана теорія протікання [2]. Програмне середовище - MATLAB і його розширення (Toolbox). MATLAB має добре розвинені можливості візуалізації двомірних і тривимірних даних. Функції й додатки Statistics Toolbox реалізують широкий спектр статистичних задач [4].

Процес імітаційного моделювання одношарових структур з трикутною та квадратною кристалічними решітками показаний на рис. 1.

Спочатку задають параметри для формування масиву (матриці) елементів: S - кількість рядків, B - кількість стовпців, T - початкове значення порогу протікання (у нашому випадку $S=B=50$, T – приймає різні значення залежно від структури решітки). На другому кроці визначають структуру решітки і вже в залежності від цього алгоритм виконується далі. Для квадратної решітки можна безпосередньо приступати до реалі-

зації процесу, а для трикутної необхідно спочатку виділити з масиву необхідну форму матриці. Для цього елементам, які не беруть участі в експерименті, присвоюють значення, відмінні від тих, які надаються блокованим і неблокованим вузлам, а вже потім створюється імітаційна модель. Для створеної матриці викликається функція, що імітує процес та визначає поріг протікання. Якщо протікання відбулося (значення відповідного лічильника $prot > 0$), то дана функція знову викликається і обчислює поріг протікання вже для нової матриці. Процес продовжується доти, доки фіксується протікання в матеріалі.

Відстань між вузлами дорівнює одиниці, вузли мають координати i, j . Щоб встановити поріг протікання, необхідно задати розподіл вузлів, як блокованих, так і неблокованих, щоб мати можливість змінювати їх співвідношення за рахунок іонів металу для досягнення порогу протікання. Для цього спочатку кожному вузлу надаємо відповідну координату. Обраний масив M має всього $50 \times 50 = 2500$ елементів, і в пам'яті потрібно зарезервувати цей об'єм.

Програма починається зі створення масиву. Його елементи - випадкові числа, рівномірно розподілені від нуля до одиниці. Генератор випадкових чисел (метод Монте-Карло) видає число u , яке присвоюється елементу масиву $M(1,1)$. Наступне число, що видає генератор, присвоюється елементу $M(1,2)$ і т. д.

Надалі формуємо другий двомірний масив, який позначаємо як L . Елементи цього масиву 0 та 1, причому якщо, наприклад, $L(25,16)=0$, то вузол з координатами $i=25, j=16$ блокований, а якщо $L(25,16)=1$ - неблокований. Для формування масиву L використовують масив M і деяке число $0 \leq T \leq 1$, яке визначає відсоток блокованих вузлів, тобто концентрацію компонент.

Масив L формується так: беремо вузол з координатами i, j . Якщо $M(i,j) \leq T$, то $L(i, j)=1$, якщо $M(i,j) > T$, то $L(i,j)=0$. У першому випадку вузол неблокований, у іншому - блокований. При $T=1/2$ кількість блокованих і неблокованих вузлів буде однаковою.

Параметр T можна зв'язати з середньою часткою неблокованих вузлів x , яку маємо внаслідок описаної вище процедури так, що $T = x$. Ця тотожність коректна, якщо взяти або велику кількість вузлів решітки, або сформувані багато масивів L з одним і тим же значенням T , а потім осереднити результати.

Для квадратної матриці ніяких обмежень немає, тому після створення масиву М функцією rand формуємо масив L.

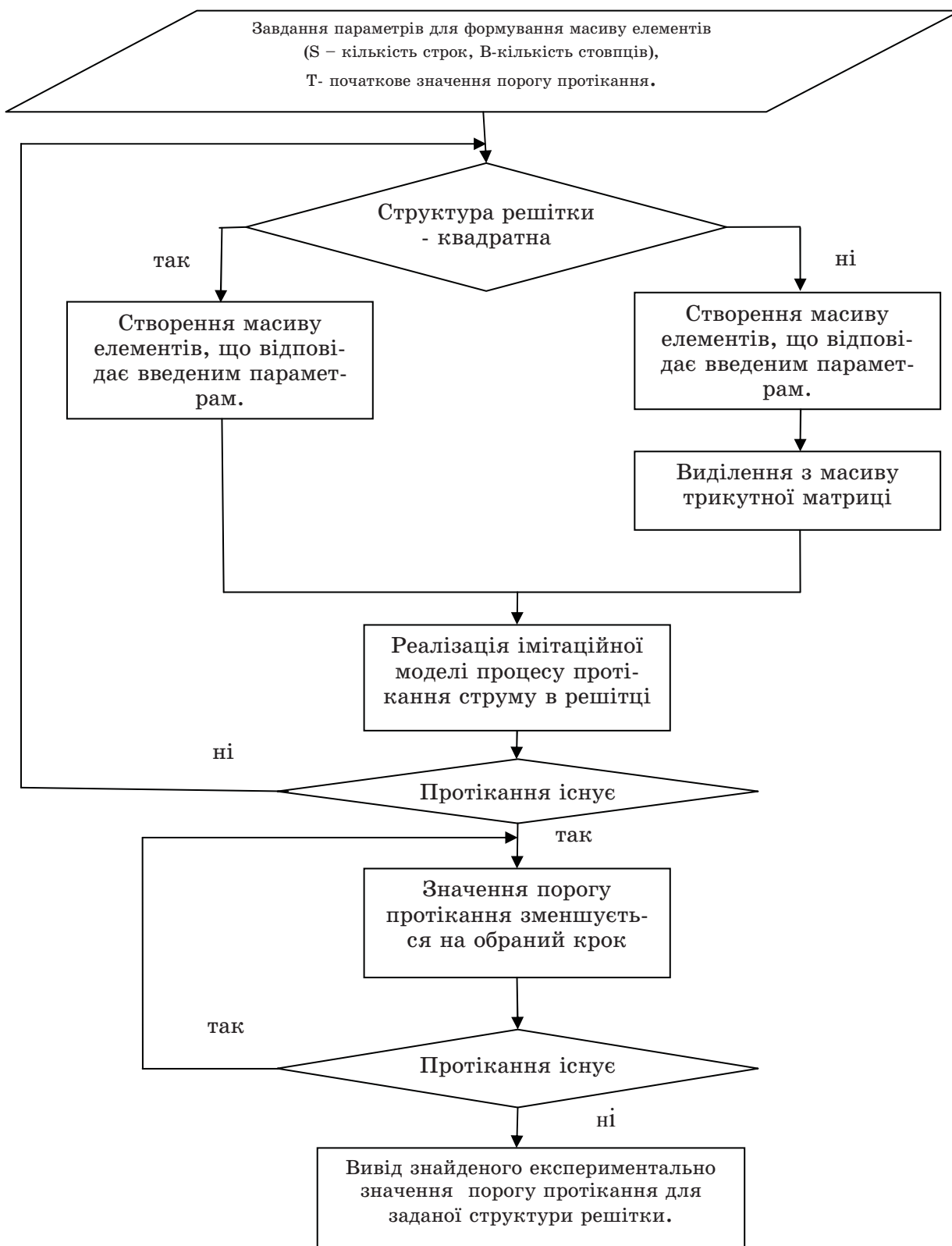


Рисунок 1- Функціональна схема експерименту

Приклад результату (з метою наочності розмірність масиву = 10x10)

```
L =  0 1 0 1 1 0 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 0
1 1 0 1 1 1 1 0 1 1
0 0 1 1 1 1 1 1 1 0
1 0 1 1 1 0 1 0 1 1
1 1 1 1 1 1 1 0 0 1
0 1 1 0 1 0 1 0 0 1
1 1 0 1 1 0 1 0 1 0
1 1 0 1 1 1 1 1 0 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
```

Для трикутної матриці створюється масив, який містить елементи, які не беруть участі в процесі і позначені, наприклад, цифрою 5.

```
M =  0 5 0 5 0 5 0 5 0 5
5 0 5 0 5 0 5 0 5 0
0 5 0 5 0 5 0 5 0 5
5 0 5 0 5 0 5 0 5 0
0 5 0 5 0 5 0 5 0 5
5 0 5 0 5 0 5 0 5 0
0 5 0 5 0 5 0 5 0 5
5 0 5 0 5 0 5 0 5 0
0 5 0 5 0 5 0 5 0 5
5 0 5 0 5 0 5 0 5 0
```

Після цього матриця заповнюється 0 і 1 – результатами дії функції rand і формується масив L.

```
L =  1 5 1 5 1 5 1 5 0 5
5 0 5 1 5 0 5 1 5 0
1 5 0 5 0 5 1 5 1 5
5 0 5 1 5 1 5 1 5 1
1 5 1 5 0 5 1 5 0 5
5 1 5 1 5 0 5 1 5 1
1 5 0 5 0 5 0 5 0 5
5 1 5 1 5 0 5 1 5 1
1 5 1 5 1 5 0 5 1 5
5 1 5 1 5 0 5 1 5 1
```

Маємо розподіл блокованих та неблокованих вузлів і починається другий етап - пошук шляхів протікання у напрямі ліворуч-праворуч. Для цього усі одиниці, що знаходяться в лівому стовпчику ($j=1$), перейменовуються у двійки. В пам'яті формується список координат вузлів, що були перейменовані (двійки "першого покоління").

Наприклад, для довільної квадратної решітки маємо

```
L =  2 1 1 1 0 0 0 1 1 1
     2 1 1 0 1 1 1 1 1 1
     2 1 1 0 1 1 1 1 0 1
     2 0 0 0 1 1 1 0 1 1
     2 1 1 1 1 1 1 0 1 0
     2 1 0 0 0 0 1 1 1 0
     2 0 1 1 0 0 1 0 1 1
     2 0 1 0 1 0 1 1 1 0
     2 1 0 0 1 1 1 0 1 1
     2 1 1 0 1 1 1 1 0 0
```

Після аналізу першого списку в пам'яті ЕОМ створюється список двійок "другого покоління", тобто список одиниць, перейменованих в двійки, завдяки тому, що вони перебувають в безпосередньому контакті з двійками першого покоління. З метою економії пам'яті перший список можна ліквідувати. Програма переходить до вивчення другого списку і створення списку двійок "третього покоління" і т.д. Пори цьому кількість двійок в масиві L поступово збільшується. Двійки (неблоковані вузли), пов'язані шляхом протікання з якимось неблокованим вузлом крайнього лівого стовпця, тобто двійками позначаються шляхи протікання. Наприклад, для квадратної решітки в результаті маємо два шляхи протікання:

```
L =  2 2 2 2 2 2 0 0 1 0
     2 2 2 2 0 2 2 2 0 0
     2 2 2 2 2 2 2 2 0 0
     2 2 0 0 2 2 2 2 2 2
     2 2 0 0 2 2 2 2 2 0
     2 0 2 2 2 2 0 2 0 1
     2 2 2 0 2 2 2 2 2 0
     2 2 2 2 2 2 2 2 0 0
     2 2 2 2 2 0 2 2 2 2
```

2 2 2 2 0 1 2 0 0 1

Процес пошуку цих шляхів припиняється у двох випадках:

1. На правій стороні квадрата з'явилася хоча б одна двійка. Програма фіксує, що при даному значенні порогу T протікання існує.

2. На правій стороні квадрата двійок немає, і вивчення чергового списку не призвело до утворення жодної нової двійки. Це означає, що всі шляхи перервані і при цьому значенні T протікання немає.

Значення параметру T беремо більшим, ніж теоретичне (для квадратної решітки наближене значення $T = 0,59$, для трикутної – $T = 0,5$) [2] для того, щоб знайти точне значення порогу протікання.

Якщо при даному T протікання існує, тоді програма зменшує T і, використовуючи той же самий масив M , знаходить новий масив L із зменшеною кількістю заблокованих вузлів. Знову відбувається пошук шляхів протікання доти, доки при деякому T не виявиться їх відсутність.

Для квадратної решітки поріг протікання зменшується кожен раз на крок $h = 0,03$, для трикутної – на $h = 0,05$.

Метод дозволяє знайти значення T , яке відповідає порогу протікання з необхідною точністю. При цьому значенні обчислюється частка заблокованих вузлів x , яка близька до T , але не обов'язково йому дорівнює. Це значення x і оголошується порогом протікання, отриманим в даному експерименті. Середнє значення порогу $T_{cp}(N)$ для квадратної решітки обчислюється за формулою:

$$T_{cp} = \frac{\sum_{n=1}^{200} T_n}{N} = \frac{117,78}{200} = 0,5889,$$

де T_n – значення порогу протікання у кожному експерименті, N – кількість прогонів ($N=200$). Похибка вимірювань: $\sigma = (0,59 - 0,5889) * 100\% = 0,11\%$.

Для трикутної решітки маємо відповідно: $T_{cp} = 0,489$; $\sigma = (0,5 - 0,489) * 100\% = 1,1\%$.

Отримані результати для композитів з трикутною та квадратними двомірними решітками розмірністю 50×50 при проведенні 200 експериментів показують, при якому співвідношенні компонентів не буде жодного шляху протікання току.

Висновки

1. Теоретичним підґрунтям для вивчення процесів взаємодії матриці та наповнювача в композиті, які мають імовірнісний характер, доцільно обрати теорію протікання.

2. Експериментально отримані значення порогів протікання наближені до теоретичних. Це свідчить про коректність методики, репрезентативність обраної матриці.

3. Програмна реалізація імітаційної моделі розроблена в інтерактивній системі MATLAB, що дозволяє провести обчислення матриць набагато швидше, ніж при використанні інших засобів програмування.

5. Створене програмне забезпечення вирішує проблему визначення критичної точки для електропровідності в композитах різної структури та дає змогу наблизити систему до реальності при введенні конкретних параметрів компонентів без будь-яких попередніх дослідів чи обчислень.

ЛІТЕРАТУРА

1. Онищенко Д.В., Цветников А.К., Попович А.А., Курявый В.Г. Синтез новых катодных материалов для литиевых химических источников тока. <http://zhurnal.ape.relarn.ru./articles/2007/118.pdf>
2. Эфрос А. Л. Физика и геометрия беспорядка. // М.- Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982. - 176 с
3. Дядин Ю. А. Графит и его соединения. Сорровский образовательный журнал, т.6, №10, 2000 с.43-49.
4. Смоленцев Н. К. MATLAB: программирование на Visual C#, Borland JBuilder, VBA: Учебный курс (+CD).- М.: ДМК Пресс: СПб.: Питер, 2009. – 464 с.

Отримано 15.01.2011р.