

Piotr FRĄCZAK*

PROGRAM OBLICZENIOWY W ZAPISIE MACIERZOWYM UJMUJĄCY MODEL ELEKTRYCZNY PERKOLACJI

W pracy przedstawiono budowę i analizę modelu perkolacji dla gałęzi na sieci utworzonego za pomocą obwodu elektrycznego. Obwód elektryczny utworzono z sieci kwadratowej składającej się z odpowiednich elementów impedancji oraz ze źródła napięcia zasilającego. Analizując model perkolacji (dla gałęzi na sieci) w aspekcie obliczeń numerycznych, strukturę obwodu elektrycznego opisano macierzowo, zgodnie z metodą prądów oczkowych Maxwella, w postaci liczb zespolonych. Opis macierzowy modelu perkolacji (dla gałęzi na sieci) dostosowany do obliczeń numerycznych zawiera losowy sposób niszczenia „zwierania” gałęzi. Obliczenia symulacyjne prądu perkolacji w sieci kwadratowej dokonano za pomocą opracowanego programu numerycznego, który napisano w oparciu o procedury obliczeniowe programu *Mathcad*.

SŁOWA KLUCZOWE: perkolacja, model elektryczny perkolacji, obliczanie modelu perkolacji w środowisku *Mathcad*

1. WSTĘP

Modele elektryczne perkolacji dla gałęzi na sieciach można budować za pomocą obwodów elektrycznych, składających się z regularnych sieci (hybrydowej – kagom e' , kwadratowej, sześciokątnej, trójkątnej i Belthego), których gałęzie są niszczone (zwierane) w sposób losowy oraz ze źródeł napięć wymuszających. Istotną cechą wymienionych modeli perkolacji jest występowanie stanów krytycznych (ostrych przejść perkolacyjnych) w progu perkolacji p_c , związane z nagłym powstawaniem (lub zanikaniem) odpowiedniej liczby połączeń w obwodach [3]. Progi perkolacji posiadają tylko te modele (perkolacji dla gałęzi na sieciach), które zbudowane są z sieci dwuwymiarowych, a mianowicie: hybrydowej (kagom e'), kwadratowej, trójkątnej, sześciokątnej i Belthego. Wartości liczbowe progów perkolacji p_c dla tych sieci wynoszą odpowiednio: 0,4500; 0,5000; 0,3473; 0,6527 i 0,5000.

„Połączone” na powierzchni łańcuchy polimerów, zgodnie z teorią de Gennesa [5], odpowiadają regularnym sieciom kwadratowym, których rozmiar oczek jest określany na podstawie wielkości monomeru. Gałęzie (wiązania) sieci

* Zachodniopomorskie Centrum Edukacji Morskiej i Politechnicznej, Szczecin.

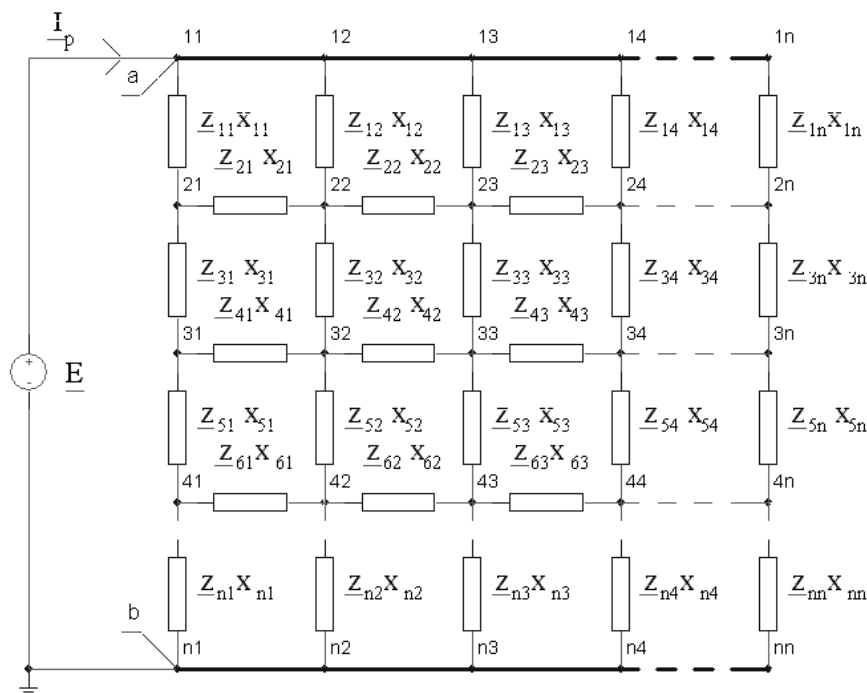
kwadratowej łańcuchów polimerowych odwzorowują dielektryki rzeczywiste, których schematy zastępcze stanowią szeregowe lub równoległe połączenia elementów R (tj. rezystorów) i C (tj. kondensatorów) (podrozdział 3.4).

Celem pracy jest utworzenie programu obliczeniowego modeli perkolacji dla gałęzi na sieciach i zaimplementowanie go w środowisko *Mathcad*.

2. MODEL PERKOLACJI DLA GAŁĘZI NA SIECI

2.1. Opis macierzowy metodą Maxwella modelu perkolacji

W celu zaprezentowania opracowanego programu obliczeniowego modelu perkolacji dla gałęzi na sieci, przedstawiono obliczany model perkolacji za pomocą obwodu elektrycznego. Na Rys. 2.1 zamieszczono schemat zastępczy modelu perkolacji, stanowiącego źródło napięcia oraz regularną sieć kwadratową, której gałęzie impedancyjne są niszczone w sposób losowo za pomocą odpowiednich współczynników generowanych losowo (opis zamieszczono w podrozdziale 3.3).



Rys. 2.1. Schemat zastępczy modelu elektrycznego perkolacji dla gałęzi na sieci:
 a – elektroda górna; b – elektroda dolna; E – siła elektromotoryczna; I_p – prąd perkolacji;
 $Z_{nn}X_{nn}$ – impedancja gałęzi (Z_{nn}) ze współczynnikiem (X_{nn}), którego wartość binarna (0,1)
 jest generowana w sposób losowy

Strukturę modelu perkolacji zamieszczoną na Rysunku 2.1 ujmuje równanie macierzowe [1]:

$$\mathbf{Z} \cdot \mathbf{I} = \mathbf{E} \quad (2.1)$$

gdzie: \mathbf{Z} – macierz impedancji oczkowej, \mathbf{E} – wektor jednokolumnowy sił elektromotorycznych oczkowych, \mathbf{I} – wektor jednokolumnowy prądów oczkowych. Macierz \mathbf{Z} oraz wektory \mathbf{E} i \mathbf{I} są zdefiniowane następująco:

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \underline{Z}_{1,1} & -\underline{Z}_{1,2} & -\underline{Z}_{1,3} & \dots & -\underline{Z}_{1,n} \\ -\underline{Z}_{2,1} & \underline{Z}_{2,2} & -\underline{Z}_{2,3} & \dots & -\underline{Z}_{2,n} \\ -\underline{Z}_{3,1} & -\underline{Z}_{3,2} & \underline{Z}_{3,3} & \dots & -\underline{Z}_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ -\underline{Z}_{n,1} & -\underline{Z}_{n,2} & -\underline{Z}_{n,3} & \dots & \underline{Z}_{n,n} \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \underline{E}_{1,1} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} \underline{I}_{1,1} \\ \underline{I}_{2,2} \\ \underline{I}_{3,3} \\ \vdots \\ \underline{I}_{n,n} \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

gdzie:

$\underline{Z}_{1,1} = \underline{z}_{1,1} x_{1,1} + \underline{z}_{3,1} x_{3,1} + \underline{z}_{5,1} x_{5,1} \dots \underline{z}_{n,1} x_{n,1}$ – impedancja własna oczka I-ego;

$\underline{Z}_{1,2} = \underline{z}_{1,1} x_{1,1}$ – impedancja wzajemna oczka I-ego i II-ego;

$\underline{Z}_{1,3} = 0$ – impedancja wzajemna oczka I-ego i III-ego;

$\underline{Z}_{n,n} = \underline{z}_{n-1,n-1} \cdot x_{n-1,n-1} + \underline{z}_{n,n-1} \cdot x_{n,n-1} + \underline{z}_{n,n} \cdot x_{n,n}$ – impedancja własna oczka

n – tego; $\underline{E}_{1,1} = \underline{E}$ – siła elektromotoryczna (Rys. 2.1).

W celu wyznaczenia wektora prądów oczkowych \mathbf{I} z równania (2.1), mnożymy lewostronnie to równanie przez macierz odwrotną $(\mathbf{Z})^{-1}$ względem macierzy impedancji oczkowej \mathbf{Z} ($\det \mathbf{Z} \neq 0$) i uzyskuje się:

$$(\mathbf{Z})^{-1} \cdot \mathbf{Z} \cdot \mathbf{I} = (\mathbf{Z})^{-1} \cdot \mathbf{E} \quad (2.5)$$

skąd po zastosowaniu znanych właściwości macierzy:

$$(\mathbf{Z})^{-1} \cdot \mathbf{Z} = \mathbf{I} \quad \text{oraz} \quad \mathbf{I} \cdot \mathbf{I} = \mathbf{I} \quad (2.6)$$

gdzie symbol \mathbf{I} oznacza macierz jednostkową, otrzymuje się wektor jednokolumnowy prądów oczkowych w następującej postaci:

$$\mathbf{I} = (\mathbf{Z})^{-1} \cdot \mathbf{E} \quad (2.7)$$

Prąd perkolacji \underline{I}_p w omawianym modelu (Rys.2.1) jest równy prądowi oczkowemu \underline{I}_{11} . Prąd oczkowy \underline{I}_{11} odpowiada pierwszemu wierszowi wektora prądów oczkowych (2.4).

Wprowadzając macierz jedno-kolumnową \mathbf{X} typu:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

otrzymujemy następującą macierz do niej transponowaną \mathbf{X}^T :

W celu wyznaczenia prądu perkolacji mnożymy lewostronnie równanie macierzowe (2.7) przez wektor

$$\mathbf{X}^T = [1 \ 0 \ 0 \ \dots \ 0] \quad (2.9)$$

i otrzymujemy macierz jedno-elementową prądu perkolacji w postaci zespolonej:

$$\underline{I}_p = \mathbf{X}^T \cdot \mathbf{I} = \mathbf{X}^T \cdot (\mathbf{R})^{-1} \cdot \mathbf{E} \quad (3.0)$$

Natomiast moduł prądu perkolacji wyznaczamy ze wzoru:

$$\underline{I}_p = \sqrt{(\text{Re}(\underline{I}_p))^2 + (\text{Im}(\underline{I}_p))^2} \quad (3.1)$$

3. OBLICZENIA SYMULACYJNE PRĄDU UPLYWNOŚCIOWEGO POWIERZCHNIOWEGO PRÓBK POLIMEROWEJ

3.1. „Stabilizacja” macierzy impedancji oczkowej

Macierz (2.2) posiada specyficzną budowę. Na głównej przekątnej elementy macierzy zawierają po cztery lub trzy rezystory. Trzy rezystory odnoszą się do oczek sieci modelu perkolacji, które przylegają do elektrod, odpowiednio górnej

lub dolnej (Rys. 2.1). Z kolei cztery rezystory odzwierciedlają pozostałe oczka modelu perkolacji. Ponadto macierz posiada odpowiednią liczbę elementów, które zawierają pojedyncze rezystory (rezystancje wzajemne pomiędzy poszczególnymi oczkami modelu perkolacji). Pozostałe elementy rozpatrywanej macierzy są wypełnione zerami.

W toku obliczeń symulacyjnych wartości natężenia prądu upływnościowego próbki polimerowej w oparciu o jej model perkolacji (dla gałęzi na sieci), następuje losowe niszczenie gałęzi impedancyjnych (przyrównywanie do zera), które w odpowiednich zestawieniach zgodnie z metodą prądów oczkowych Maxwella, tworzą elementy macierzy \mathbf{Z} (2.2). Podczas obliczeń symulacyjnych prądu upływnościowego powierzchniowego próbki polimerowej musi być spełniony warunek $\det \mathbf{Z} \neq 0$. Warunek ten nie jest spełniony ($\det \mathbf{Z} = 0$) w następujących przypadkach:

- wszystkie elementy pewnego wiersza lub kolumny są zerami,
- występują jednakowe dwa wiersze lub kolumny,
- wszystkie elementy macierzy są zerami.

Aby w wymienionych przypadkach warunek ($\det \mathbf{Z} \neq 0$) był spełniony w toku obliczeń, należy wprowadzić odpowiedni współczynnik x (podrozdział 3.4) do elementów macierzy, które znajdują się na głównej przekątnej. Wielkość współczynnika należy tak dobrać, aby nie wpływał na wartość obliczanego prądu upływnościowego.

3.2. Rozmiar sieci i parametry modelu powierzchni próbki polimerowej

Do obliczeń symulacyjnych prądu upływnościowego powierzchniowego próbki polimerowej przyjęto sieć o strukturze kwadratowej [2], która zawiera 10 oczek, rozmieszczonych w 10 wierszach i 10 kolumnach. Takiej sieci odpowiada próbka walcowa polimeru o średnicy 20,0 mm i wysokości 63,0 mm, której rozwinięto powierzchnię zewnętrzną i dokonano jej dyskretyzacji kwadratami o wymiarze 6,3 mm \times 6,3 mm. Wprowadzając do struktury gałęziowej otrzymanej sieci impedancje reprezentując łańcuchy polimerów w postaci schematów zastępczych dielektryków oraz odpowiednio podłączając do niej napięcie wymuszające otrzymano model powierzchni próbki polimerowej (Rys. 2.1). Wartości liczbowe przyjętych parametrów modelu powierzchni próbki polimerowej (model perkolacji dla gałęzi na sieci) zamieszczono w podrozdziale 3.4.

3.3. Opis utworzonego programu obliczeniowego w środowisko *Mathcad* modelu perkolacji dla gałęzi na sieci

Liczbę 200 odzwierciedlającą ilość współczynników przynależnych do poszczególnych gałęzi impedancyjnych sieci modelu perkolacji usystematyzowano

w sposób losowy (liczby całkowite), odpowiednio według operacji $\text{rnd}()$ i $\text{ceil}()$ programu *Mathcad* [3]. Usystematyzowanym w sposób losowy współczynnikiem (x_n) przyporządkowano wartości równe zero ($x_n = 0$) za pomocą odpowiednio utworzonej funkcji (podrozdziale 3.4.) w oparciu o procedury obliczeniowe programu *Mathcad* [3]. W wyniku tej operacji gałęzie impedancyjne zawarte w macierzy (2.2) zostają zniszczone (przyporządkowane do zera) w kolejności zgodnej z uprzednio usystematyzowaniem losowym. Należy dodać, że indeksy dolne wszystkich współczynników zawartych w macierzy (2.2) są „aktywne” (przystosowane do obliczeń numerycznych). Natomiast indeksy dolne gałęzi impedancyjnych odnoszą się tylko do ich oznaczeń.

3.4. Algorytmy obliczeniowe w środowisku *Mathcad* utworzonego programu wyznaczania prądu upływnościowego próbki polimerowej

$$n := 1..200$$

$$y_n := \text{ceil}(\text{rnd}(200))$$

$$x_n := \begin{cases} 0 & \text{if } 1 \geq y_n \leq 200 \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$R := 1.0 \cdot 10^6 \Omega, \quad C := 2,3 \cdot 10^{-9} \text{ F}, \quad \omega := 2\pi f, \quad f := 50 \text{ Hz},$$

$$\underline{E} := 5 \cdot 10^3 \text{ V}, \quad x := 10^{-9}$$

$$\underline{z}_1 := R + \frac{1}{j\omega C}, \quad \underline{z}_2 := R + \frac{1}{j\omega C}, \quad \underline{z}_3 := R + \frac{1}{j\omega C}, \quad \dots \quad \underline{z}_{200} := R + \frac{1}{j\omega C}, \quad j := \sqrt{-1},$$

$$\underline{Z}_{1,1n} := \underline{z}_1 \cdot x_1 + \underline{z}_{22} \cdot x_{22} + \underline{z}_{43} \cdot x_{43} + \dots + \underline{z}_{190} \cdot x_{190} + x,$$

$$\underline{Z}_{1,2n} := \underline{z}_1 \cdot x_1,$$

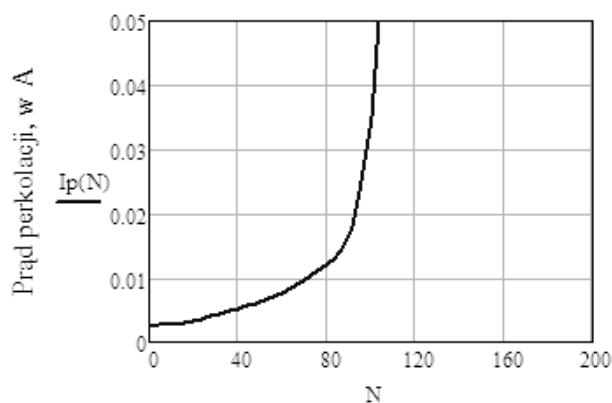
$$\underline{Z}_{1,3n} := 0,$$

$$\underline{Z}_{101,101n} := \underline{z}_{189} \cdot x_{189} + \underline{z}_{199} \cdot x_{199} + \underline{z}_{200} \cdot x_{200} + x.$$

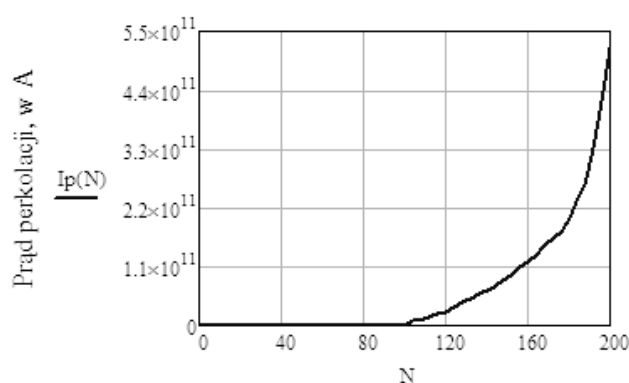
$$\mathbf{Z}_n := \begin{bmatrix} \underline{Z}_{1,1n} & -\underline{Z}_{1,2n} & -\underline{Z}_{1,3n} & \dots & -\underline{Z}_{1,101n} \\ -\underline{Z}_{2,1n} & \underline{Z}_{2,2n} & -\underline{Z}_{2,3n} & \dots & -\underline{Z}_{2,101n} \\ -\underline{Z}_{3,1n} & -\underline{Z}_{3,2n} & \underline{Z}_{3,3n} & \dots & -\underline{Z}_{3,101n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ -\underline{Z}_{101,1n} & -\underline{Z}_{101,2n} & -\underline{Z}_{101,3n} & \dots & \underline{Z}_{101,101n} \end{bmatrix} \quad \mathbf{E} := \begin{bmatrix} \underline{E}_{11} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$I_p := \begin{cases} \text{for } n \in 1..N \\ \underline{I}_p \leftarrow \mathbf{X}^T \cdot (\mathbf{Z}_n)^{-1} \mathbf{E} \text{ if } (x_n = 0 \vee 1) \\ I_p \leftarrow \sqrt{(\text{Re}(\underline{I}_p))^2 + (\text{Im}(\underline{I}_p))^2} \\ I_p \end{cases}$$

Obliczenia symulacyjne prądu upływnościowego powierzchniowego próbki polimerowej w oparciu o utworzony program obliczeniowy w środowisku *Mathcad* zamieszczono na Rys. 3.1 i Rys. 3.2.



Rys. 3.1. Obliczenia symulacyjne prądu upływnościowego powierzchniowego próbki polimerowej – przed wystąpieniem progu perkolacji; N – liczba zwartych gałęzi sieci o strukturze kwadratowej



Rys. 3.2. Obliczenia symulacyjne prądu upływnościowego powierzchniowego próbki polimerowej – wystąpienie progu perkolacji; N – liczba zwartych gałęzi sieci o strukturze kwadratowej

4. WNIOSKI

W wyniku przeprowadzonych obliczeń symulacyjnych wartości natężenia prądu upływnościowego powierzchniowego próbki polimerowej za pomocą modelu jej powierzchni (model perkolacji dla gałęzi na sieci) oraz opracowanego programu obliczeniowego modeli perkolacji w środowisku *Mathcad* stwierdzono:

- utworzony model powierzchni próbki polimerowej (model perkolacji dla gałęzi na sieci) zweryfikowano za pomocą wartości liczbowej proggu perkolacji ($p_c = 0,5$) [4],
- opracowany program obliczeniowy modelu perkolacji (perkolacji dla gałęzi na sieci) w środowisku programu *Mathcad*, stanowi doskonałą pomoc dydaktyczną w nauczaniu teorii perkolacji,
- na otrzymanych charakterystykach symulacyjnych wartości natężenia prądu upływnościowego powierzchniowego próbki polimerowej w funkcji liczby zwartych gałęzi widać stopniowe narastanie prądu i nagły wzrost o kilka rzędów wielkości (próg perkolacji – symulacja przebicia powierzchniowego próbki polimerowej).

LITERATURA

- [1] Bolkowski S.: *Teoria obwodów elektrycznych*, wyd. 5, Warszawa, WNT 1995, ISBN 83-204-2218-3.
- [2] Frączak P.: *Koncepcja „stycznikowa” tworzenia modeli perkolacji w programach PSpice i Mathcad*, Poznań University of Technology Academic Journals, Electrical Engineering Issue 77 Computer Applications in Electrical Engineering 2014, Publishing House of Poznan University of Technology, Poznań, ISSN 1897-0737, s. 107 – 114.
- [3] Palczewski W.: *Mathcad 12,11, 2001i, 2000 w algorytmach*, Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa 2005, ISBN 83-87674-81-8.
- [4] Zallen R.: *Fizyka ciał amorficznych*, Warszawa, WN PWN 1994, ISBN 83-01-11265-4.
- [5] Sperling L.H.: *Introduktion to physical polymer science*, 3th ed., New York, Wiley 2001, ISBN 0-471-32921-5.

THE CALCULATION PROGRAM IN MATRIX NOTATION ENDEARING PERCOLATION ELECTRIC MODEL

The paper presents an analysis and structure of the percolation model for the branch on the network created using the electrical circuit. The electrical circuit has been formed with square network consisting of the respective components of the impedance and source of the supply voltage. Analyzing the percolation model (for branch on the network) in terms of numerical calculations, the structure of the electrical circuit has been described by matrix according to the Maxwell's method of loop currents, in the form of complex numbers. The description of the matrix percolation model (for branch on the network) adapted for numerical calculations includes a random way to destroy „circuit shorting" of the branches. The simulations of the current percolation in square network has been developed using a numerical program, which was written on the basis of *Mathcad* software calculation procedures.