

Міністерство освіти і науки України

Державний вищий навчальний заклад
«Донецький національний технічний університет»



«ТАК»

Телекомунікації, автоматика,
комп'ютерно-інтегровані технології

Збірка доповідей Всеукраїнської науково-практичної
конференції молодих учених
(Покровськ, 29-30 листопада 2016 р.)

Покровськ
ДВНЗ «ДонНТУ»
2016

УДК 621.39+681+004
Т 15

Рекомендовано до видання Вченою радою ДВНЗ «Донецький національний технічний університет» (протокол № ____ від _____)

Редакційна колегія:

ст. викл. Г.В. Ступак (відповідальний редактор);
д-р техн. наук О.В. Вовна (відповідальний секретар);
д-р техн. наук А.А. Зорі;
канд. техн. наук В.В. Поцєпаєв;
канд. техн. наук В.М. Ставицький;
канд. техн. наук В.Я. Воропаєва;
канд. техн. наук В.П. Тарасюк;

Відповідальність за зміст, новизну та оригінальність наданого матеріалу несуть автори.

Т 15 **«ТАК»:** телекомунікації, автоматика, комп'ютерно-інтегровані технології: зб. доповідей Всеукр. наук.-практ. конф. молодих вчених, 29-30 листопада 2016 р. / ДВНЗ «ДонНТУ»; відп. ред. Г.В. Ступак. – Покровськ: ДВНЗ «ДонНТУ», 2016. – 288 с.

ISBN 978-966-377-193-9

До збірника увійшли матеріали доповідей, представлених на Всеукраїнській науково-практичній конференції молодих учених «ТАК»: телекомунікації, автоматика, комп'ютерно-інтегровані технології. Конференція проводилася факультетом комп'ютерних інформаційних технологій, автоматики, електроніки і радіотехніки (КІТАЕР) ДВНЗ «Донецький національний технічний університет».

У збірнику представлені результати досліджень та розробок молодих вчених із технічних вузів та наукових закладів України.

Збірник призначений для викладачів, аспірантів і студентів вищих технічних навчальних закладів, а також фахівців з телекомунікацій, автоматизації, інформаційних та комп'ютерно-інтегрованих технологій, електротехніки та електромеханіки.

УДК 621.39+681+004

© ДВНЗ «ДонНТУ», 2016

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕДІНКИ МОЛЕКУЛ ПОЛІМЕРІВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

*Колесник Аліна Геннадіївна, магістрант, kolesnikalina2756@gmail.com;
Донецький Національний Технічний Університет, Покровськ, Україна*

Полімери мають складну (комплексну) структуру і динамічну поведінку в широкому часовому діапазоні. Полімерні з'єднання можуть проявляти свої унікальні властивості тільки в конденсованому стані (розчин, сплав, скло або кристал), що впорядковує рух молекул згідно кореляційної міжмолекулярної залежності.

Запропонована модель базується на положеннях динамічного моделювання Монте-Карло. Спроби руху молекул задані одиничними векторами поля в результаті присвоєння кожній молекулі випадкового вектору відповідно до напрямку руху, а рух всіх частинок аналізується одночасно.

Розташування кожної молекули зіставлено вузлам решітки в припущенні, що всі вузли решітки зайняті (коефіцієнт щільності $\rho = 1$). Між кожною молекулою є деякий надлишковий об'єм і молекули мають достатньо місця для вібрування навколо своєї позиції, визначеної вузлами решітки. Більшість спроб поступального руху будуть невдалими, що слідує з припущення про постійну квазібезперервність всієї системи:

- Система не може мати місце для вільного простору, зіставленого з розміром молекул;
- Вузол не може бути одночасно зайнятий більш ніж однією молекулою.

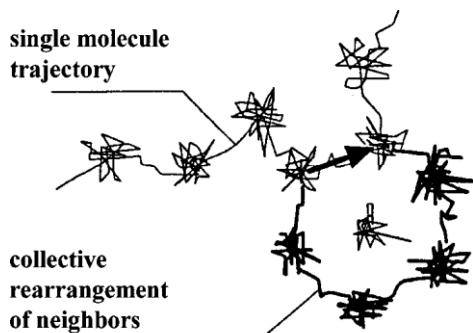


Рисунок 1. Ілюстрація корельованих переміщень (товста лінія), пов'язана з поступальним кроком (стрілка) в траєкторії однієї молекули (тонка лінія)

Умова безперервності векторного поля, утвореного одиничними векторами, відповідних молекул, які намагаються рухатися, можна записати наступним чином:

$$\nabla J + \frac{\partial p}{\partial t} = \varepsilon \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad (1)$$

де: J — поточна рухома частинка, ρ — щільність частинок в мережевому вузлі, t — час, ε — число, відповідне до коливань молекул навколо вузла тимчасового розташування.

Всі молекули, вектори яких зіставлені спробам руху і які не створюють корелюючого руху (замкнуті петлі), повинні бути знерухомлені в силу умов безперервності. У підсумку залишиться тільки замкнутий контур, по якому можна переміщувати частинки (рисунок 1).

На кожному кроці алгоритму моделювання виконуються наступні дії:
– вказуються напрямки спроб руху для всіх часток в системі;

- всі елементи розміщуються відповідно до рівняння безперервності(1);
- для незнерухомих елементів перевіряється умова енергії;
- знерухомиються елементи в спільних петлях, які не відповідають умовам енергії;
- інші частки переміщуються циклічно по петлі.

Імовірність знаходження елемента, який бере участь у спільних петлях, визначатиме ймовірність великої кількості перебудовувань і маленький тимчасовий інтервал. Перетини замкнутих контурів петлі виключені, так як в межах одного тимчасового кроку елемент може заміщати тільки один напрямок і тільки до одного сусідньому вузлу решітки.

У комп'ютерній візуалізації решіткова рідина має вигляд прямокутника розмірністю 9x10 (90 вузлів). Сусіди для кожної молекули зіставляються за принципом тора, причому кожна молекула подана в гексагональній формі, забезпечена логікою і характеризується робочим циклом (рисунок 2).

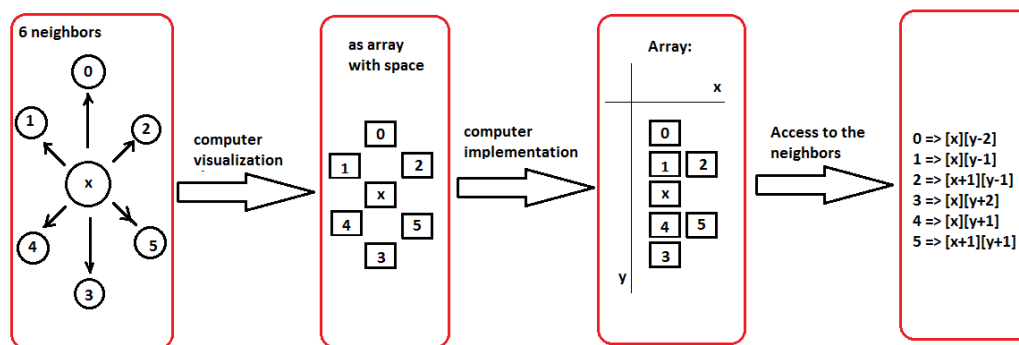


Рисунок 2. Моделювання полімерної рідини з використанням молекул гексагональної форми

При рішенні задачі кожна генерація спрацьовує тільки при впливі користувача на систему (натискання клавіші або миші) і програма має нескінченну кількість генерацій. Кожна наступна генерація взаємопов'язана з попередньою, так як попередні переміщення молекул враховуються при подальшому кроці.

Поведінка молекул в полімерній рідині є складним фізико-хімічним процесом, що є непростим в комп'ютерному поданні. Моделювання полімеру на прикладі мікроскопічної решітчастої рідини формує наочну картину динамічних властивостей аналогічних систем.

Робота була виконана на мові програмування C в середовищі розробки Visual Studio 2012. Використовувалася 64х бітна операційна система Windows 7 Professional (Microsoft Corp.), 2х ядерний процесор Intel Pentium CPU N3540 з частотою 2.16GHz.

Для підвищення швидкодії наступним кроком буде дослідження внутрішнього паралелізму за допомогою технологій OpenCL з використанням графічного процесору і виведенням результатів на екран засобами технологій OpenGL.

Література

1. Od algorytmu dynamicznej cieczy sieciowej do dedykowanego komputera równoległego I. / Piotr Polanowski, Jarosław Jung, Rafał Kielbik, Andrzej Napieralski, Krzysztof Lichy // PRZEGLĄD ELEKTROTECHNICZNY. — 2006. — с. 69—73, ISSN 0033-2097
2. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров / В. А. Иванов, А. Л. Рабинович, А. Р. Хохлов // М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009, — 696 с, цв. вкл. М.: Научный мир, 2009. — 328 с: 169 ил., ISBN 978-5-91522-133-7

Анотація

У роботі виконано комп'ютерне моделювання поведінки молекул полімерів на основі решітчастої рідини із застосуванням методу Монте-Карло для простих полімерних систем. Дана робота була виконана в рамках II етапу технологічних курсів міжнародного проекту TEMPUS на базі Лодзької Політехніки в місті Лодзь, Польща.

Ключові слова: комп'ютерне моделювання, полімери, решітчаста рідина, метод Монте-Карло.

Аннотация

Представлено компьютерное моделирование поведения молекул полимеров на основе решеточной жидкости с применением метода Монте-Карло для простых полимерных систем. Данная работа была выполнена в рамках II этапа технологических курсов международного проекта TEMPUS на базе Лодзкой Политехники в городе Лодзь, Польша.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, полимеры, решеточная жидкость, метод Монте-Карло.

Abstract

Computer simulations of the behavior on the basis of lattice liquid polymer molecules using the Monte Carlo method for simple polymer systems are presented. This work was performed as part of the II stage of technological courses of international project TEMPUS based on Łódzki University of Technology in Lodz, Poland.

Keywords: computer simulation, polymers, liquid lattice, Monte Carlo method.

Удовенко. С. С.	74
NFE. NETWORK FOR EVERYONE- МЕРЕЖА ДЛЯ ВСІХ І КОЖНОГО	
Харченко О.Ф.	77
ПІДВИЩЕННЯ ТОЧНОСТІ ВИМІРЮВАЛЬНОГО КОНТРОЛЮ КОНЦЕНТРАЦІЇ МЕТАНУ В РУДНИЧНІЙ АТМОСФЕРІ	
Рудковський М.М., Вовна О. В.	79
ДОСЛІДЖЕННЯ БЕЗПРОВОДОВОЇ ТЕХНОЛОГІЇ LPWAN ДЛЯ РЕАЛІЗАЦІЇ INDUSTRY 4.0 НА БАЗІ ПРОТОКОЛУ LORAWAN	
Рижов І.С.	82
ПРОГРАМНІ ЗАСОБИ ПРОЕКТУВАННЯ БЕЗДРОТОВИХ МЕРЕЖ ПЕРЕДАВАННЯ ДАНИХ	
Шапо В. Ф., Воловщиков В. Ю.	86
ОСОБЛИВОСТІ ІМІТАЦІЙНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ГЕТЕРОГЕННИХ ТЕЛЕКОМУНІКАЦІЙНИХ МЕРЕЖ	
Воропаєва В.Я., Жуковська Д.О., Несвітаєв А.А.	89
ВИБІР АЛГОРИТМУ ЛУНОКОМПЕНСАЦІЇ ДЛЯ РЕАЛІЗАЦІЇ В МЕРЕЖАХ З ПАКЕТНОЮ КОМУТАЦІЄЮ	
Арнаутов С.О., Ступак Г.В.	93
ОБОСНОВАНИЕ РАЗРАБОТКИ СИСТЕМЫ INDOOR НАВИГАЦИИ CusTr	
Елагина Е.С., Ступак Г.В.	96
СЕКЦІЯ 2	
«Інформаційні технології»	99
РЕАЛІЗАЦІЯ ВКЛАДЕНИХ МЕТОДІВ В ПАРАЛЕЛЬНИХ ОБЧИСЛЮВАЛЬНИХ СИСТЕМАХ	
Дмитрієва О. А., Дегтяр О. В.	100
МОДЕЛЮВАННЯ ДИНАМІЧНИХ ОБ'ЄКТІВ ІЗ РОЗПОДІЛЕНИМИ ПАРАМЕТРАМИ	
Святний В. А., Гуськова Н. Г.	103
РОЗРОБКА КОНЦЕПЦІЇ ПРОЕКТУ SMART UNIVERSITY ДЛЯ ЕВАКУЙОВАНИХ ВУЗІВ СХІДНОЇ УКРАЇНИ	
Ляшок Я.О., Вовна О.В., Цололо С.О.	106
КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПОВЕДІНКИ МОЛЕКУЛ ПОЛІМЕРІВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО	
Колесник А. Г.	110

НАУКОВЕ ВИДАННЯ

**«ТАК»:
телекомунікації, автоматика,
комп'ютерно-інтегровані технології**

Збірка доповідей Всеукраїнської науково-практичної
конференції молодих учених
(Покровськ, 29-30 листопада 2016 р.)

Редагування, коректура та комп'ютерна верстка *Г.В. Ступак*

Формат 60x84/16.
Ум. друк. арк. 15,4
Тираж 300 прим.



Видавець та виготовлювач: Державний вищий навчальний заклад «Донецький національний технічний університет», пл. Шибанкова, 2, м. Покровськ, 85300, Україна

Свідомство про державну реєстрацію суб'єкта видавничої справи: серія ДК №4911 від 09.06.2015

Форум «ТАК», ДонНТУ, Покровськ, 2016