Boundary Field Problems and Computer Simulation
doi: 10.7250/bfpcs.2017.004
2017 / 56

Obtaining an Experiment Design Based on the Interaction of Charged Particle
Lādētu daļiņu mijiedarbības modelēšanā sakņota eksperimenta plāna iegūšana

Normunds Kante
Rīgas Tehniskā universitāte, Latvija

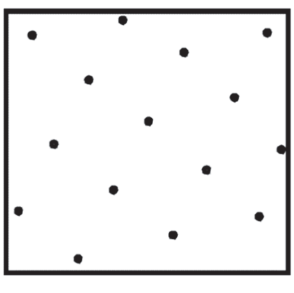
Kopsavilkums **– Rakstā tiek analizēta telpas aizpildes plāna metode *n*-dimensiju ierobežotā telpā. Metodes pamatā ir pieņēmums, ka ierobežotā aprēķinu apgabalā ar uzdotu eksperimentālo punktu blīvumu, savstarpēji iedarbojoties viens uz otru šie punkti izvietosies vienmērīgi. Telpas aizpildes plāna iegūšanai *n*-dimensiju ārējās telpas robežas aizstāj ar joslu, kas imitē ārējās telpas iedarbību. Ir izstrādāta programmatūra un iegūti praktiski rezultāti telpas aizpildes plāna iegūšanai divdimensiju telpā. Divdimensiju telpa dod iespēju izstrādāt metodiku un algoritmus telpas aizpildes plāna iegūšanai, vienlaicīgi nodrošinot vienkāršu risinājuma procesa vizualizāciju. Iegūtie pētījumu rezultāti divdimensiju telpā dod iespēju veidot metodes telpas aizpildes plāna iegūšanai daudzdimensiju telpas hiperkubā.**

Atslēgas vārdi **– Hiperkubs, latīņu kubs, telpas aizpildes plāns, vienmērīgs sadalījums.**

I. Ievads

Eksperimenta plānošana ir zinātnes nozare, kas pēta eksperimentu veikšanas tehnoloģiju un likumsakarības, analizē un izstrādā dažādas metodes, kas ļauj eksperimentētājam korekti un pēc iespējas efektīvāk veikt eksperimentus, kā arī ievērojami samazina nepieciešamo eksperimentu skaitu (dažkārt pat vairākas reizes). Eksperimenta plānošana ietver sevī stratēģijas izvēli (respektīvi, kādā veidā eksperiments tiks realizēts), pašus eksperimentus un to analīzi, kas sniedz objektīvu ainu par iegūtajiem rezultātiem.

Viens no eksperimenta plānošanas virzieniem ir telpas aizpildes plāni (*space-filling design*), kura mērķis ir eksperimentālajā apgabalā izvietot eksperimentālos punktus tā, lai tie visā aprēķinu apgabalā būtu izvietoti pēc iespējas vienmērīgāk (1. att.). Katru punktu nosaka telpas koordinātes.



1. att. Vienmērīgs punktu izvietojums eksperimentālajā apgabalā.

Tā kā mūsdienās eksperimenti paliek arvien sarežģītāki, palielinās arī tajos iesaistīto faktoru skaits. Tāpēc, lai veiktu daudzfaktoru eksperimentus, ir nepieciešams lietot statiskās eksperimenta plānošanas metodes [2]. Lai varētu samazināt iespējamo eksperimentu skaitu, ir nepieciešami algoritmi un dažādas matemātiskās metodes, formalizējot pētījuma rīcību un stratēģijas izvēli, kas dod iespēju pieņemt svarīgus lēmumus pēc katras eksperimentu virknes.

Eksperimenta plāna iegūšana parasti tiek sakņota Latīņu kvadrāta metodēs [3] un [4]. Parasti to pielieto eksperimenta plāna iegūšanai no 2 līdz 4 neatkarīgu parametru gadījumā. Tehnoloģijām strauji attīstoties, ar vien biežāk paradās nepieciešamība iegūt eksperimenta plānu ar 8–10 un pat vēl vairāk neatkarīgu mainīgo, kur Latīņu kvadrātu metodes kļūst neefektīvas. Līdz ar to nepieciešams meklēt un attīstīt citas pieejas telpas aizpildes plāna iegūšanai.

Pagājušā gadsimta beigās Rīgas Politehniskā institūta zinātnieks V. Eglājs izteica domu, ka par telpas aizpildes plānu varētu ņemt gāzu molekulas, kuras jebkurā ierobežotā telpā izvietosies vienmērīgi [1].

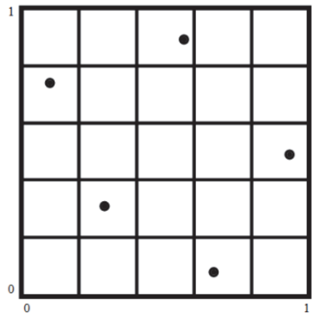
Šo ideju var idealizēt citā pieejā, kur var pieņemt, ka eksperimentālajā apgabalā gāzes molekulu vietā ir lādētas daļiņas, kuras savstarpēji iedarbojoties ieņem līdzsvara stāvokli. Šīs idejas realizācijai nepieciešams nodrošināt tādu ārējās vides iedarbību, lai daļiņas nepiespiestos aprēķinu apgabala malām.

II. Eksistējošā situācija

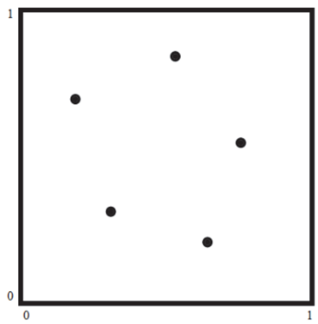
Pastāv divas iespējamās pieejas telpas aizpildes plānu veidošanā. Tās ir:

- diskrēts gadījums – izmantojot kaut kādus kritērijus, eksperimentālos punktus izvieto vienmērīgi aprēķinu apgabalā iepriekš definētās vietās (2. a att. 5 punkti izvietoti 25 iespējamajās vietās);
- nepārtraukts gadījums – eksperimentālos punktus izvieto brīvi jebkurā eksperimenta apgabala daļā (2. b att. 5 punkti izvietoti brīvi).

Darbā [1] ir aprakstīts, kā eksperimenta plānu var iegūt, balstoties uz šāda fizikas principa – sistēma, kas sastāv no punktiem, kuri veidos savstarpējus pretspēkus, rada sistēmu ar potenciālo enerģiju. Kad punktus atbrīvo no sākotnējā stāvokļa, tie sāk pārvietoties. Tie cenšas sasniegt līdzsvara stāvokli, ja potenciālā enerģija starp spēkiem ir minimāla.



a



b

2. att. Vienmērīgs punktu izvietojums eksperimentālajā pagabalā (a – diskrēts gadījums; b – nepārtraukts gadījums).

Šis uzdevums tiek risināts, pārmeklējot visas iespējamās eksperimentālo punktu pozīcijas. Līdz ar to, izpētot šo pieeju, tika izvirzīta hipotēze, ka šāda veida uzdevumu var risināt modelējot eksperimentālo punktu mijiedarbību n-dimensiju telpas hiperkubā, izveidojot joslu ap aprēķinu apgabalu, kas imitēs ārējās vides iedarbību, tādā veidā meklējot eksperimentālo punktu līdzsvara stāvokli aprēķinu apgabalā. Šāda veida pieeja ir nepārtraukts gadījums, jo eksperimentālos punktus var izvietot brīvi jebkurā aprēķinu apgabala vietā. Līdz ar to, atkarībā no sākuma datiem, šāda veida pieejai ir bezgalīgi daudz iespējamo risinājumu.

III. Galvenie pieņēmumi

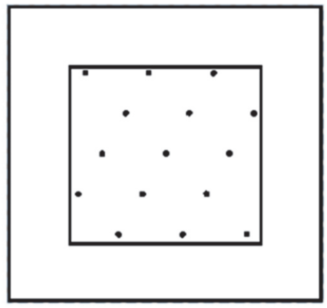
Paņemot iepriekšminēto ideju par pamatu, eksperimentālajā apgabalā var ievietot vienādi (pozitīvi vai negatīvi) lādētas daļiņas (tālāk – eksperimentālie punkti), kuras, savstarpēji iedarbojoties vienai uz otru, ieņem savstarpējo līdzsvara stāvokli.

Savstarpēji atgrūžoties vienam no otra, tie piespiedīsies pie aprēķinu apgabala malām. Līdz ar to nepieciešams izveidot joslu ap šo aprēķinu apgabalu, kas imitēs ārējās vides iedarbību un neļaus eksperimentāliem punktiem piespiesties pie apgabala malām, un nodrošinās eksperimentālo punktu vienmērīgu izvietojumu visā aprēķinu apgabalā. 3. attēlā parādīta pētījumu shēma divdimensiju (kvadrāta) gadījumam.

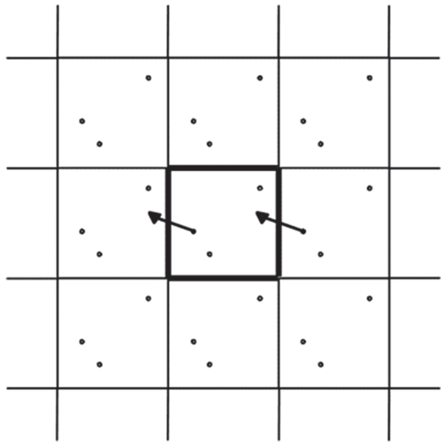
Divdimensiju telpas aizstāšana ar kvadrātu, kura virsma imitē ārējās telpas iedarbību, izraisa metodes kļūdu, kuru būs nepieciešams minimizēt. Darbā tiek piedāvāti divi ārējās vides iedarbības varianti [6], [7].

Tapetes – telpas fragments, kas nepārtraukti atkārtojas. (skat. 4. a att.).

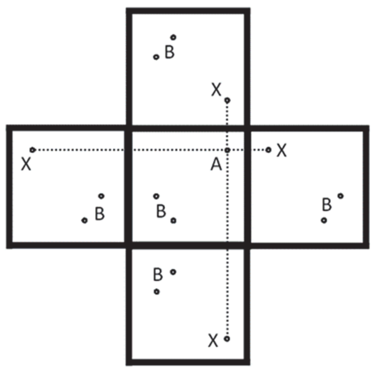
Spogulis – telpas fragments, kas neļauj lādētām daļiņām izkļūt no telpas, daļiņām redzot savu spoguļattēlu (skat. 4. b att.).



3. att. Pētījumu shēma – kvadrāts un kvadrāta virsma, kas nodrošina robežnoteikumus [5].



a



b

4. att. Divi ārējās telpas iedarbības aizstāšanas veidi (a – aizstāšanas veids *tapetes*; b – aizstāšanas veids *spogulis*).

IV. Ārējās vides iedarbības realizācija

Tiek ņemts aprēķinu apgabals ar noteiktu daļiņu skaitu, kuram pa perimetru tiek piekārtotas tādas pašas telpas ar tādu pašu daļiņu (fantomu) izvietojumu. Var ņemt vienu, divus vai vairākus fantomu riņķus ap aprēķinu apgabalu. Daļiņai pārvietojoties aprēķinu apgabalā, vienlaicīgi tajā pašā virzienā pārvietojas arī tās fantomu daļiņas. 4. a attēlā var redzēt, ka, ja aprēķinu rezultātā kāda no daļiņām tiek izstumta ārpus aprēķinu apgabala, tā pārvēršas par fantomu, savukārt aprēķinu apgabalā tiek iestumta cita daļiņa (fantoms), kas aizstāj izstumto daļiņu.

Pieejā 4. b robežnosacījums ir daļiņas *A* spoguļattēls. Jo tuvāk daļiņa tiek piespiesta aprēķinu apgabala malai, jo tuvāk ir tās fantoms, un spēka iedarbībā daļiņa tiek atspiesta no apgabala malas.

V. Eksperimentālā punkta pārvietojuma un virziena noteikšana

Eksperimentālo punktu savstarpējo iedarbību nosaka Kulona likums [3], kas tiek izteikts ar formulu:

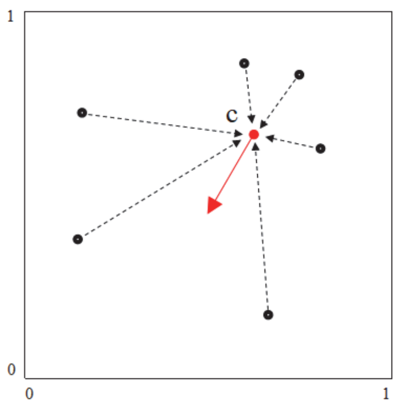
$$F = k\frac{q_1 q_2}{r^2}, \tag{1}$$

kur F – Kulona spēks;
q_1 – pirmā lādiņa lielums;
q_2 – otrā lādiņa lielums;
r – rādiuss starp lādiņiem;
k – proporcionalitātes koeficients.

Pielietotajā modelī lādiņa lielums un proporcionalitātes koeficients tiek pieņemts ar vērtību viens. Līdz ar to Kulona likums reducējās un pieņem formu:

$$F = \frac{1}{r^2}. \tag{2}$$

Šī izteiksme nosaka izstrādātās metodes darbības principus un ir galvenais kritērijs rezultāta sasniegšanai. Jo mazāki spēki iedarbojas uz visiem eksperimentālajiem punktiem, jo vienmērīgāks ir to sadalījums visā aprēķinu apgabalā.



5. att. Eksperimentālā punkta pārvietošanas virzienta noteikšana.

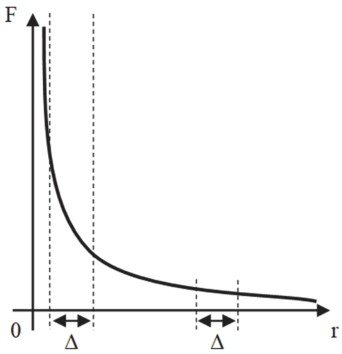
Eksperimentālā punkta pārvietojuma virziens tiek noteikts atkarībā no ietekmējošo punktu atrašanās vietas aprēķinu apgabalā (jo tālāk eksperimentālie punkti atrodas viens no otra, jo mazāks spēks uz tiem iedarbojas). Katru eksperimentālā punkta spēku sadala $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ komponentēs (atkarībā no dimensiju skaita) un nosaka ietekmējošā spēka vērtību un eksperimentālā punkta pārvietošanas virzienu. Pārvietojums tiek noteikts, summējot katra ietekmējošā punkta komponenti, kas arī ir summārais spēka virziens.

5. attēlā parādīts pārvietojamā punkta c summārā spēka virziens (atzīmēts ar sarkano krāsu).

Pēc ietekmējošā spēka lieluma un virziena noteikšanas nepieciešams pieņemt lēmumu par to, kā šo spēku sasaistīt ar eksperimentālā punkta pārvietojumu.

VI. Punktu savstarpējās iedarbības principi

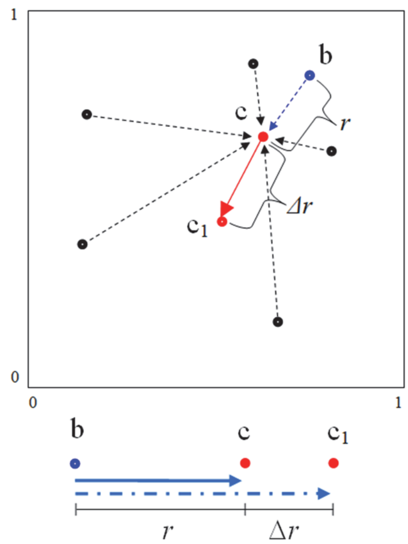
Izstrādātā modeļa būtība balstās uz fizikālajiem principiem, kurus izsaka formula (2). Spēki starp eksperimentālajiem punktiem nav lineāri (skat. 6. att.). Jo tuvāk eksperimentālie punkti atrodas viens otram, jo lielāki spēki uz tiem iedarbojas.



6. att. Spēka vērtība atkarībā no attāluma starp eksperimentāliem punktiem.

VII. Iespējamās pārvietojuma aprēķinu metodikas

Viens no iespējamiem risinājumiem ir pārvietot vajadzīgo eksperimentālo punktu c uz punktu c_1, aizstājot visu ietekmējošo spēku iedarbību ar vienu iedomātu punktu b (skat. 7. att.). Tā kā spēks un virziens ir zināmi, tad pārvietojumu varētu veikt, samazinot summāro spēku uz pusi un palielinot attālumu r starp punktiem par Δr (7. att.), tādā veidā mazinot spēku F, kas iedarbojas uz punktu c.



7. att. Iespējamā daļiņas pārvietojuma noteikšana.

Tā kā kopējais ietekmējošais spēks un virziens uz punktu ir zināmi, no formulas (2) var noteikt iedomātā punkta attālumu, kas ir:

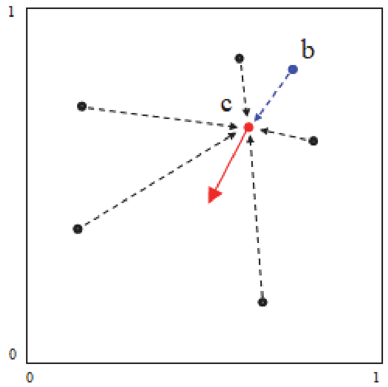
$$r = \sqrt{\frac{1}{F}}. \tag{3}$$

Līdz ar to, ja nepieciešams samazināt ietekmējošo spēku uz pusi, iegūstam:

$$r + \Delta r = \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\frac{1}{F}}. \tag{4}$$

Tādā veidā, pielietojot algoritmu katram eksperimentālajam punktam, tiek meklēts uzdevuma risinājums.

Otrs iespējamais risinājums ir, pielietojot iepriekšējos principus, tikai pārvietojot eksperimentālo punktu noteiktu laika momentu *t* (8. att.).



8. att. Iespējamā daļiņas pārvietojuma noteikšana.

Klasiskā spēka formula:

$$F = m \cdot a, \tag{5}$$

kur F – spēks starp daļiņām;
m – daļiņas masa;
a – daļiņas paātrinājums.

No formulas (5) izsakot daļiņas paātrinājumu, var noteikt daļiņas notieto ceļu laika vienībā, kas parādīta formulā (6):

$$S = \frac{a \cdot t^2}{2}, \tag{6}$$

kur t – laiks;
S – noietais ceļš.

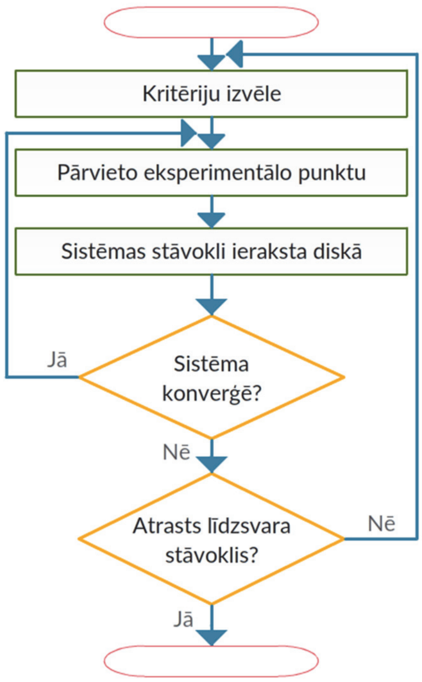
Šādā veidā tiek meklēts visu punktu līdzsvara stāvoklis sistēmā.

VIII. Eksperimentālo punktu pārvietošanas iteratīvais process

Kvalitatīva telpas aizpildes plāna iegūšanai, nepieciešams visus eksperimentālos punktus aprēķinu apgabalā izvietot pēc iespējas vienmērīgāk. Lai to paveiktu, *n*-dimensiju hiperkubā tiek veikti sekojoši aprēķini. Sākumā visi eksperimentālie punkti tiek izvietoti patvaļīgi un tiem ir koordinātes, kuras var iegūt, izmantojot patvaļīgu skaitļu ģeneratoru koordināšu noteikšanai, vai arī, izmantojot dažāda veida funkcijas kā ieejas parametru. Aprēķinu apgabalam pa perimetru tiek piekārtotas šī apgabala fantomtelpas, kas imitē ārējās vides iedarbību. Veicot jebkādu eksperimentālā punkta pārvietojumu aprēķinu apgabalā, visos fantomapgabalos atbilstošie eksperimentālo punktu fantomi arī tiek attiecīgi pārvietoti. Proti, jebkura eksperimentālā punkta aprēķinos ņem vērā arī visus šī punkta fantomus.

Visiem eksperimentālajiem punktiem izpilda sekojošu apstrādi (blokshēmas veidā parādīta 9. att.):

1. Tiek nofiksēti visi punkti.
2. Balstoties uz izvēlētajiem kritērijiem, tiek noteikts punkts, ar kuru nepieciešams veikt manipulācijas.
3. Aprēķinos, ņemot vērā visu ietekmējošo punktu iedarbību uz aprēķināmo punktu aprēķinu apgabalā un visu fantompunktu iedarbību visos fantomapgabalos, tiek aprēķinātas jaunās pārvietojamā punkta koordinātes, kur summārais spēks, kas iedarbojas uz šo eksperimentālo punktu, ir vienāds ar nulli (ideālā gadījumā), vai ir iespējami mazs.
4. Balstoties uz jaunajām koordinātēm, tiek koriģēti apskatāmā eksperimentālā punkta fantomi atbilstošajās fantomtelpās.
5. Tiek noteikts, vai punkta novietošana līdzsvara stāvoklī uzlabo visas sistēmas kvalitāti – samazinās nelīdzsvaroto spēku moduļu summa sistēmā un izlīdzinās attālumi starp daļiņām.
6. Atgriežas uz pirmo punktu.



9. att. Eksperimentālo punktu pārvietošanas iteratīvais process.

Šādā veidā iteratīvi optimizē visu eksperimentālo punktu stāvokli un kopējo sistēmas stāvokli. Izpildot galīgu iterāciju skaitu, tiek iegūts punktu izvietojums, kas ir tuvs vienmērīgam. Par eksperimentālo punktu vienmērīgā izvietojuma kvalitatīvajiem rādītājiem kalpo:

- summārais spēks, kas darbojas uz punktu, kuru neizdodas samazināt;
- attālums no izvēlētā līdz tuvākajam eksperimentālajam punktam;
- visu savstarpējās iedarbības spēku vektoru garumu summa sistēmā;
- visu savstarpējās iedarbības spēku summa pa koordinātu asīm.

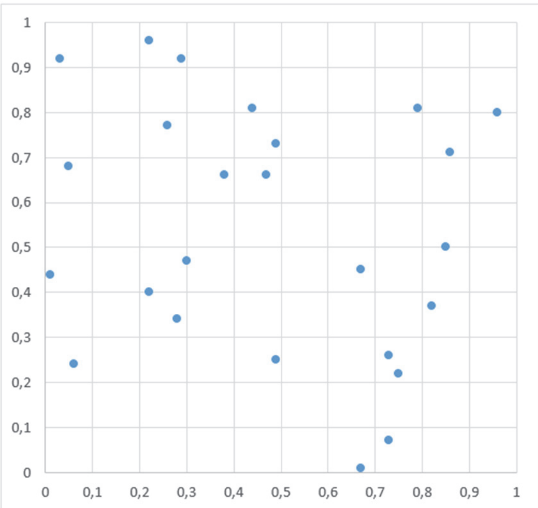
Praktiska metodikas realizācija paredz gan visu eksperimentālo koordinātu optimizāciju vienā iterācijā, gan iterācijas tikai atsevišķu punktu stāvokļa optimizāciju. Pēdējais dod iespēju, piemēram, atlasīt tos eksperimentālos punktus, kuriem attālums līdz tuvākajam punktam ir lielāks par vidējo, un veikt to koordinātu vairākkārtēju optimizāciju, šādā veidā paātrinot risinājuma konverģences procesu.

Skaitliskie aprēķini parādīja, ka atsevišķos gadījumos sistēma nonāk stāvoklī, kad optimizācijas process apstājas. Šādos gadījumos procesa konverģenci izdodas atjaunot brīvi pamainot atsevišķa eksperimentālā punkta koordinātes (izpildot mutāciju kā ģenētiskajā algoritmā).

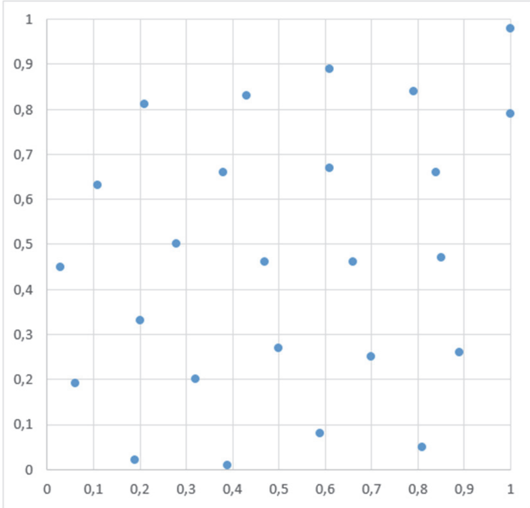
Piedāvātā metodika ir realizēta arī programmatūrā, ir veikti daudzi eksperimentāli aprēķini un ir iegūti praktiski pielietojami rezultāti.

IX. Praktiskie rezultāti

Apskatītā metodoloģija tika realizēta praktiski, implementējot to programmatūrā. Tika veikti praktiski eksperimenta plāna iegūšanas aprēķini divdimensiju telpā (skat. 6. un 7. att.).



10. att. Eksperimentālo punktu sākuma izvietojums.



11. att. Eksperimentālo punktu beigu izvietojums.

X. Secinājumi

Jāatzīmē, ka telpas aizstāšanas shēmas *tapetes* darbības kvalitāte un ātrums ir atkarīgs no eksperimentālo punktu (eksperimentu) skaita – var būt neizdevīgs punktu skaits apgabalā. Empīriski tika konstatēts, ka gadījumā, ja rezultāts neveidojas metodes sliktas konverģences dēļ, nepieciešams palielināt fantomu riņķu skaitu ap aprēķinu apgabalu, un līdz ar to izveidosies pieņemams telpas aizpildes plāns. Empīriski tika konstatēts, ka, mainot parametrus, eksperimentālos punktus var koncentrēt aprēķinu apgabala izvēlētā vietā, vai "piespiest" tās kvadrāta malām. Kaut arī ar aprēķinu shēmu ir iegūti atsevišķi labi rezultāti, aprēķinu metodika vēl ir jāoptimizē.

Realizējot izstrādāto pieeju tika konstatēts, ka:

- praktiski realizēta telpas aizpildes plāna iegūšanas metode, kas sakņota uz lādētu daļiņu uzvedību;
- izstrādātā metode tika realizēta un aprobēta divdimensiju gadījumam. Tā ir arī viegli realizējama lielākam dimensiju skaitam;
- metode ir realizējama arī eksperimenta plānam ar nevienmērīgu daļiņu sadalījumu. Šajā gadījumā daļiņu lādiņš ir jāuzdod kā funkcija no koordinātēm;
- izstrādātā metode jāsalīdzina ar citiem risinājumiem;
- iegūti praktiski lietojami rezultāti un darbs vēl ir jāturpina.

Literatūras saraksts

[1] P. Audze and V. Eglājs, "New approach to the design of multifactor experiments," *Problems of Dynamics and Strengths*, 35 ed. Riga: Zinatne Publishing House, pp. 104–107, 1977.

[2] J. Auzins and A. Janusevskis, *Eksperimentu plānošana un analīze*. Rīga: RTU, 2007.

[3] B. Baigrie, *Electricity and Magnetism: A Historical Perspective.* Greenwood Press, pp. 7–8, 2006.

[4] N. A. Butler, "Optimal and orthogonal Latin hypercube designs for computer experiments," *Biometrika*, vol. 88, no. 3, pp. 847–857, Oct. 2001. https://doi.org/10.1093/biomet/88.3.847

[5] R. J. Iman and M. J. Shortencarier, *A FORTRAN77 Program and User's Guide for Generation of Latin Hypercube and Random Samples for Use with Computer Models*, NUREG/CR-3624, SAND83-2365, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, 1984.

[6] N. Kante, M. Kryshchuk, and J. Lavendels, "Experiment Plan as a Discreet System Equilibrium State," *Applied Computer Systems*, vol. 20, Dec. 2016. https://doi.org/10.1515/acss-2016-0015

[7] N. Kante, J. Lavendels. "Equilibrium state simulation of charged particles based experiment plan obtaining method in discrete systems" *Contemporary Information Technologies*, Penza State University, Russia, 2016.

Normunds Kante received Master's degree in 2017 from Riga Technical University (RTU), Faculty of Computer Science and Information Technology. At present, he is the first year student of the Doctor study programme "Computer Systems". His current research interests include experiment plan obtaining methods.
E-mail: normunds.kante@rtu.lv

Obtaining an Experiment Design Based on the Interaction of Charged Particle.

Normunds Kante
Riga Technical University, Latvia

In this article a method of obtaining an experiment plan in a fragment of multidimensional space is analyzed. The method is based on the assumption that in a limited computing area with the given experimental point density acting on each other, these points will be evenly distributed. In order to obtain the space-filling design, the boundaries of the outer space of the multidimensional space are replaced by a band imitating the exterior space effect. Software is developed and practical results in obtaining experiment plan in two-dimensional space are acquired. Two-dimensional space allows developing a methodology and algorithm for obtaining experiment plan while providing a simple visualization of the solution. The acquired results in two-dimensional space provide an opportunity to create methods for obtaining experiment plan in a hypercube of a multidimensional space.

Keywords **– Space-filling design, Latin Cube, hypercube, uniform distribution.**