Секция «Математика и механика»

Математическое моделирование континуальной перколяции эллипсоидов.

Бузмакова Мария Михайловна
Аспирант
Астраханский Государственный Университет, Факультет математики и информационных технологий, Астрахань, Россия
E-mail: mariya_nazarova@mail.ru

Исследована перколяция жестких вытянутых эллипсоидов вращения с проницаемыми оболочками, которая может служить моделью фазового перехода золь–гель водного раствора альбумина. Эллипсоиды с радиусом вращения r , аспектным отношением k и проницаемой оболочкой d случайным образом помещаются в куб с линейным размером L. Перколяция наступает в случае, когда появляется кластер (группа соединенных эллипсоидов), пронизывающий всю систему, — перколяционный кластер. Эллипсоиды выступают в роли молекул белка, пересечение проницаемых оболочек обеспечивает молекулярный докинг, порог перколяции соответствует точке геля.

Два эллипсоида принадлежат одному кластеру в том случае, если пересекаются их проницаемые оболочки. Упаковка эллипсоидов производится случайным образом с помощью генератора "вихрь Мерсенна"[n3], распределение эллипсоидов по кластерам производится модифицированным алгоритмом Хошена–Копельмана [n2], поиск перколяционного кластера осуществляется с помощью "волнового алгоритма"[n4].

Получена зависимость порога перколяции от толщины проницаемой оболочки эллипсоида при аспектных отношениях 1, 2, 3 (см. рис.1). Кроме определения порога перколяции найдены другие характеристики системы: средний размер кластера, мощность и фрактальная размерность перколяционного кластера (2.68 ± 0.17), критические показатели ($\gamma = 1.97 \pm 0.17$ до порога перколяции и $\gamma = 1.63 \pm 0.15$ после порога перколяции, $\beta = 0.445 \pm 0.008$), среднее число и распределение соседей B_c при различных значениях толщины проницаемой оболочки.

Литература

1. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: Теория, приложения, алгоритмы. М.: Едиториал УРСС. 2002.

2. Hoshen J., Kopelman R. Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm // Phys. Rev. B. 1976. Vol. 14, No 8.

3. Matsumoto, M. Mersenne twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator // ACM Trans. on Modeling and Computer Simulations. 1998. Vol. 8.

4. Rubin F. The Lee path connection algorithm // IEEE Transactions on Computers. 1974. Vol. 23.

5. Stauffer D., Aharony A. Introduction to Percolation Theory. London: Taylor Francis. 1992.

Иллюстрации

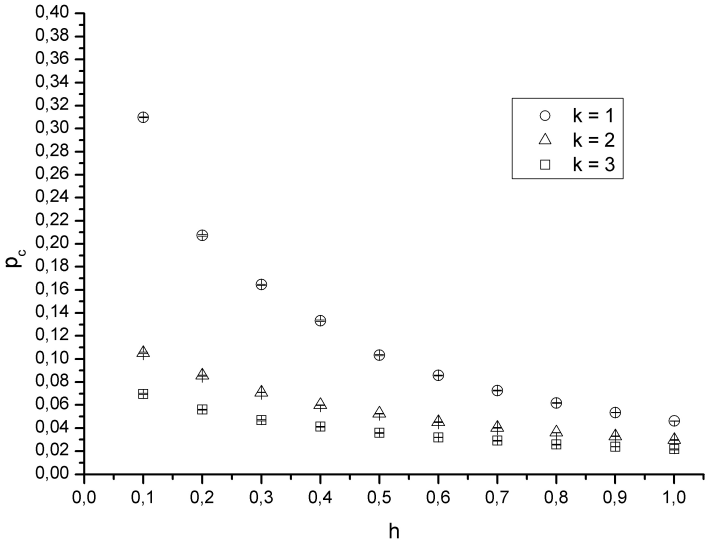

Рис. 1: Зависимость порога перколяции от тощины проницаемой оболочки при k = 1, 2, 3 и L = 15.