

УДК 517.9

Моделирование континуальной перколяции жестких вытянутых эллипсоидов с проницаемыми оболочками

© М. М. Бузмакова¹

Аннотация. Исследована континуальная перколяционная модель жестких вытянутых эллипсоидов вращения, которая может быть использована для описания процесса структурообразования дисперсных и композиционных материалов и изучения их физических и химических свойств. Получена зависимость порога перколяции от аспектного отношения эллипсоида и значения толщины проницаемой оболочки.

Ключевые слова: теория перколяции, композиционные и дисперсные материалы, фазовые переходы

1. Введение

В настоящее время наблюдается значительный рост использования дисперсных и композиционных материалов. Они широко используются в различных областях современной промышленности, медицине, экологии, химии. Их широкая применимость объясняется тем, что этим материалам можно придать определенные физические и механические свойства. Необходимость создания новых перспективных и совершенствование уже существующих дисперсных и композиционных материалов привела к развитию научных исследований в данном направлении. Разработка научных основ исследования структуры и способов получения дисперсных и композиционных материалов является актуальной задачей на сегодняшний день. Среди методов исследования структурообразования и способов получения дисперсных и композиционных материалов большой популярностью пользуются методы теории перколяции и теории фракталов [1].

Теория перколяции занимает немаловажное место в современной науке. Это связано с тем, что теория перколяции является междисциплинарной, то есть ее методы можно использовать и в математике, и в физике, и в химии, и в биологии, и в экономике и других науках [2]. Теория перколяции имеет множество практических приложений [3].

В настоящей работе предложена и исследована модель континуальной перколяции жестких вытянутых эллипсоидов с проницаемыми оболочками. Данная модель может быть использована для изучения процессов структурообразования и свойств дисперсных и композиционных материалов. Кроме того, данная модель может быть использована для описания фазового перехода золь–гель. Новизна нашего исследования заключается в том, что мы исследуем вытянутые жесткие эллипсоиды вращения с проницаемыми оболочками, пересечение которых обеспечивает наличие связи между эллипсоидами.

2. Постановка задачи и методика моделирования

Основной целью моделирования является выявление зависимости порога перколяции от толщины проницаемой оболочки и аспектного отношения эллипсоида.

¹ ассистент кафедры прикладной математики и информатики, Астраханский государственный университет, г. Астрахань; mariya_nazarova@mail.ru.

Создана компьютерная модель континуальной перколяции вытянутых жестких эллипсоидов вращения (далее эллипсоидов) с проницаемыми оболочками. Эллипсоиды с радиусом вращения r , аспектным отношением k и проницаемой оболочкой d случайным образом помещаются в куб с линейным размером L . В рамках нашей модели, два эллипсоида принадлежат одному кластеру только в том случае, если их проницаемые оболочки пересекаются или касаются друг друга. Далее, в системе идет поиск кластера, соединяющего верхнюю и нижнюю грани куба — перколяционного. По наличию в системе перколяционного кластера можно говорить о наступлении перколяции. Кроме наступления перколяции в системе, исследуются следующие характеристики: распределение кластеров по размерам, поведение среднего размера кластера и мощности перколяционного кластера, а также его фрактальной размерности. Помимо этого, для модели определяются критические показатели, которые доказывают достоверность полученных результатов.

Моделирование проводилось методом Монте-Карло. При упаковке элементов в систему для генерации случайных чисел применялся алгоритм «Вихрь Мерсенна» [4]. Для идентификации принадлежности элемента к кластеру используется алгоритм Хошена-Копельмана [5], который был модифицирован под континуальную задачу. Идентификация перколяционного кластера осуществляется с помощью «волнового алгоритма» [6]. При моделировании были использованы периодические граничные условия по всем трем направлениям.

Все расчеты проведены для системы конечного размера ($L = 15, 20, 25$) в связи со значительной сложностью моделируемой задачи. Но даже для таких небольших систем получены достаточно точные результаты (четыре знака после запятой).

Для каждого значения $k = 1, \dots, 5$, $h = 0.1, \dots, 1$ произведено 100 испытаний и определено значение порога перколяции по стандартной методике: определена вероятность возникновения перколяционного кластера $P(p)$; полученные результаты компьютерного эксперимента аппроксимируются функцией вида $P(p) = (1 + \exp(-(p - p_c(L))a))^{-1}$ (например, рис. 2.1). Значение доли заполнения, при которой вероятность возникновения перколяционного кластера равна 0.5 принимается за оценку значения порога перколяции для конечной системы.

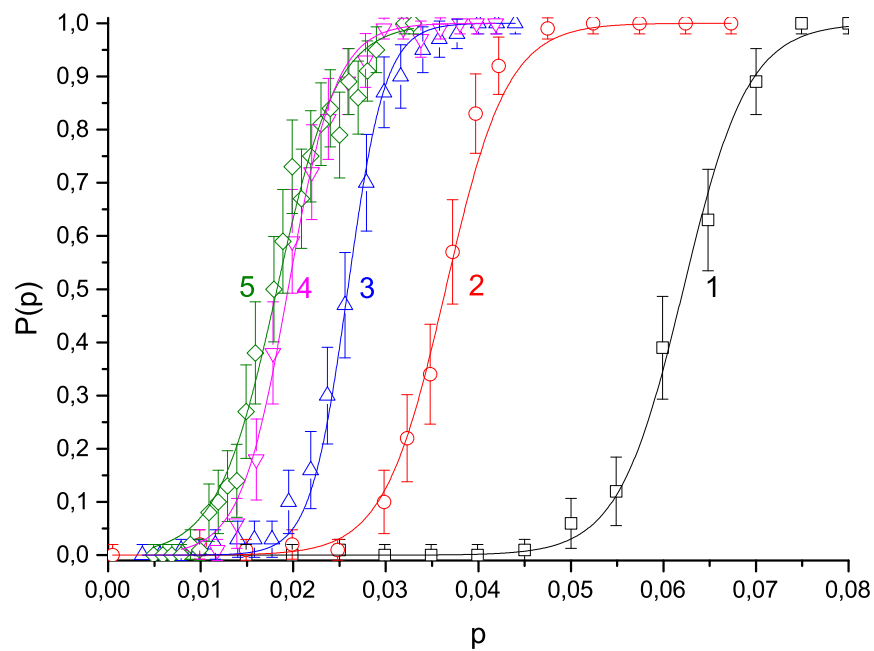
3. Результаты моделирования

Для данной перколяционной задачи произведены расчеты для системы со следующими параметрами: $L = 15$, $r = 0.5$, $k = 1, 2, 3$, $h = 0.1, 0.2, \dots, 1$; $L = 20$, $r = 0.5$, $k = 4$, $h = 0.1, 0.2, \dots, 1$ и для $L = 25$, $r = 0.5$, $k = 5$, $h = 0.1, 0.2, \dots, 1$.

Основным результатом исследования является получение зависимости значения порога перколяции от аспектного отношения эллипсоида при различных значениях толщины проницаемой оболочки (рис. 3.1).

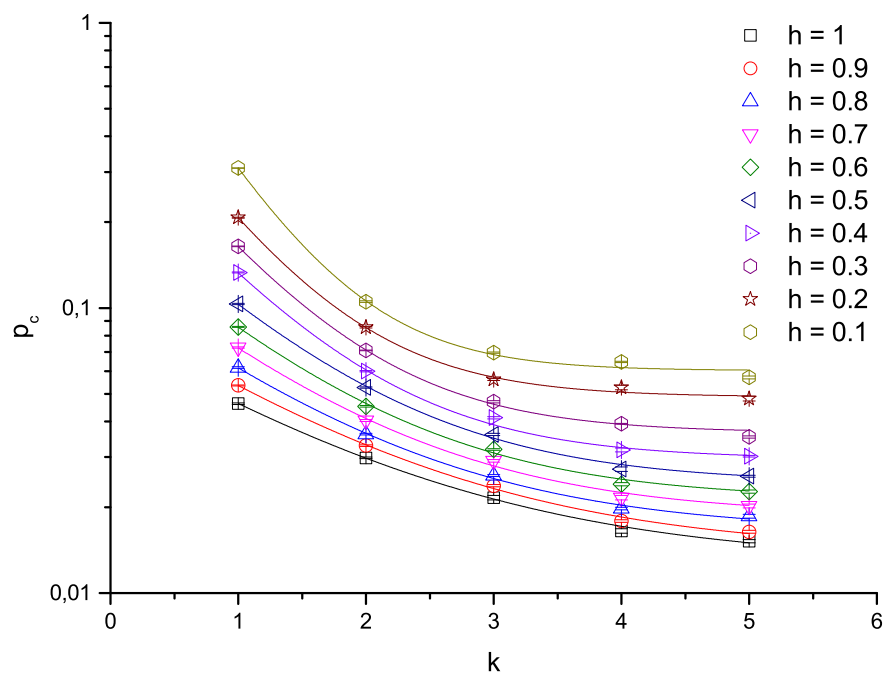
Полученные результаты компьютерного эксперимента аппроксимируются функциями вида $p_c(k) = A \exp(-k/t) + b$, коэффициенты A , t , b представлены в таблице 2.

Кроме выявления зависимости порога перколяции от аспектного отношения эллипсоида, было исследовано распределение кластеров по размерам, поведение среднего размера кластера и мощности перколяционного кластера. Для распределения кластеров по размерам получили закономерное поведение: на малых долях заполнения до порога перколяции существуют только кластеры малых размеров, на пороге перколяции существуют как большие (в 50% случаев перколяционные), так и малые кластеры, и после порога перколяции присутствуют один-два малых кластера (размером не больше двух-трех)



Р и с у н о к 2.1

Вероятность возникновения перколяционного кластера при различных L , k , $h = 0.8$



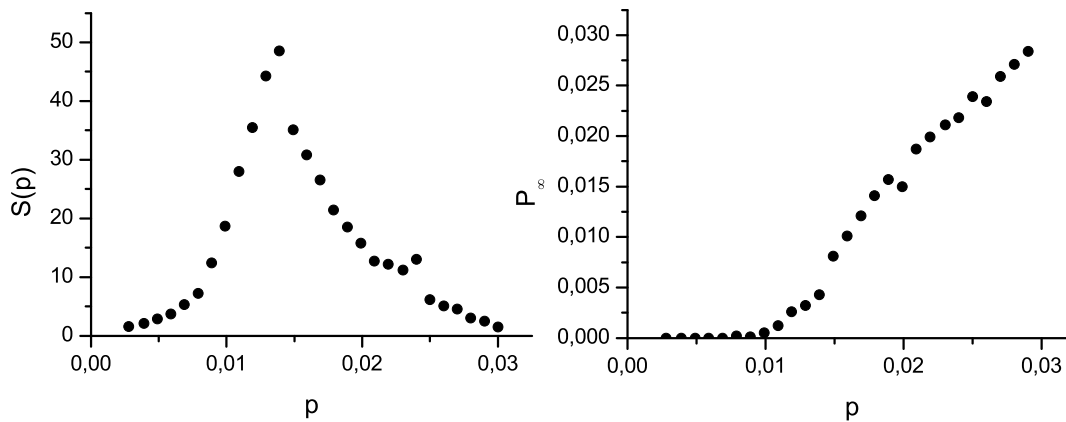
Р и с у н о к 3.1

Зависимость порога перколяции от аспектного отношения эллипсоида при различных значениях толщины проницаемой оболочки

Таблица 2: Значения коэффициентов A , t , b аппроксимирующих функций $p_c(k) = A \exp(-k/t) + b$ при различных h

h	A	t	b
1	0.066 ± 0.002	1.47 ± 0.08	0.013 ± 0.001
0.9	0.082 ± 0.002	1.38 ± 0.09	0.014 ± 0.001
0.8	0.103 ± 0.006	1.22 ± 0.08	0.017 ± 0.001
0.7	0.129 ± 0.009	1.14 ± 0.09	0.019 ± 0.001
0.6	0.166 ± 0.009	1.06 ± 0.08	0.021 ± 0.001
0.5	0.215 ± 0.009	0.99 ± 0.04	0.024 ± 0.001
0.4	0.34 ± 0.01	0.83 ± 0.04	0.029 ± 0.001
0.3	0.47 ± 0.02	0.77 ± 0.03	0.037 ± 0.001
0.2	0.69 ± 0.04	0.68 ± 0.03	0.049 ± 0.001
0.1	1.36 ± 0.09	0.59 ± 0.03	0.060 ± 0.002

и один большой кластер — перколяционный. Значение среднего размера кластера при приближении к порогу перколяции стремительно возрастает, а после порога перколяции стремительно убывает; значение мощности перколяционного кластера при приближении к порогу перколяции стремительно возрастает, после порога перколяции возрастает менее интенсивно (рис.3.2). Такое поведение также является закономерным и подтверждает правильность полученных результатов.



Р и с у н о к 3.2

Слева средний размер кластера $S(p)$, справа мощность перколяционного кластера $P_\infty(p)$ при $L = 25$, $h = 1$, $k = 5$

Для данной перколяционной модели определены следующие критические показатели при $L = 20$, $k = 4$ и $h = 0.8$: для значения среднего размера кластера критический показатель $\gamma = 1.63 \pm 0.15$ при $p > p_c$, $\gamma = 1.97 \pm 0.17$ при $p < p_c$, для значения мощности перколяционного кластера критический показатель $\beta = 0.445 \pm 0.008$. Найденные значения критических показателей совпадают с ранее известными в пределах погрешности для размерности задачи, равной трем [2], что свидетельствует о достоверности полученных нами результатов.

Кроме определения значений критических показателей, для данной перколяционной

модели были определены следующие значения фрактальной размерности перколяционного кластера на пороге перколяции: при $L = 20$, $k = 4$ и $h = 0.8$ $D_f = 2.74 \pm 0.05$, при $L = 20$, $k = 4$ и $h = 0.6$ $D_f = 2.79 \pm 0.07$, при $L = 25$, $k = 5$ и $h = 1$ $D_f = 2.68 \pm 0.13$, при $L = 25$, $k = 5$ и $h = 0.6$ $D_f = 2.59 \pm 0.17$, которые в пределах погрешности совпадают между собой и с ранее известными [2], [7]. Это безусловно может служить подтверждением достоверности полученных нами результатов для данной задачи.

4. Заключение

Предложена и исследована модель континуальной перколяции жестких вытянутых эллипсоидов с проницаемыми оболочками, отличающаяся от известных тем, что впервые рассмотрены именно вытянутые эллипсоиды вращения. Предложенная модель является оригинальной. Выявлена зависимость значения порога перколяции от аспектного отношения эллипсоида при различных значениях толщины проницаемой оболочки. Определены такие характеристики системы как средний размер кластера, распределение кластеров по размерам, мощность и фрактальная размерность перколяционного кластера, критические показатели. Данная перколяционная модель может быть использована для описания процесса структурообразования композиционных и дисперсных материалов, а также исследования некоторых их физических и химических свойств в критической области вблизи порога перколяции. Также предложенная модель может быть использована для исследования фазового перехода золь-гель.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кулак М. И., *Фрактальная механика материалов*, Высшая школа, Минск, М., 2002, 304 с.
2. Stauffer D., Aharony A., *Introduction to Percolation Theory*, Taylor & Francis, London, 1992, 181 pp.
3. Sahimi M., *Application of Percolation Theory*, Taylor & Francis, London, 1994, 254 pp.
4. Matsumoto M., "Mersenne twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator", *ACM Trans. on Modeling and Computer Simulations*, **8:1** (1998), 3–30.
5. Hoshen J., Kopelman R., "Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm", *Physical Review B*, **14:8** (1976), 3438–3445.
6. Rubin F., "The Lee path connection algorithm", *IEEE Transactions on Computers*, **23:8** (1974), 907–914.
7. Федер Е., *Фракталы*, Мир, М., 1991, 260 с.

Modelling of the continuum percolation of the prolate hard ellipsoids with preamble shells.

© M. M. Buzmakova²

Abstract. The continuum percolation model of hard prolate ellipsoids of rotation has been investigated. The model can be used to describe the process of the structure formation of composite and dispersed materials and the study of their physical and chemical properties. Dependence of value of the percolation threshold on thickness of permeable shell and aspect ratio has been obtained.

Key Words: percolation theory, composite and dispersed materials, phase transitions

² Assistant of Applied Mathematics and Informatics Chair, Astrakhan State University, Astrakhan; mariya_nazarova@mail.ru.