



$$B_k = \left(\delta^2 \mu_k^2 - \frac{1-\nu}{2} m^2 + \lambda \right) \left(1 + \tilde{h}^2 (\mu_k^2 - \delta^{-2} m^2)^2 - \lambda \right) - (\nu \delta \mu_k)^2,$$

$$C_k = m \left(\frac{1+\nu}{2} \nu \delta^2 \mu_k^2 - \left(\delta^2 \mu_k^2 - \frac{1-\nu}{2} m^2 + \lambda \right) \right),$$

причем μ_k являются корнями характеристического уравнения:

$$b_0 \mu^8 + b_1 \mu^6 + b_2 \mu^4 + b_3 \mu^2 + b_4 = 0, \quad (16)$$

коэффициенты которого определяются равенствами $b_0 = \delta^4 \tilde{h}^2 (1-\nu)/2$, $b_1 = \delta^2 \tilde{h}^2 (\lambda(3-\nu) - 4m^2(1-\nu))/2$, $b_2 = (\tilde{h}^2(2\lambda^2 - 3m^2\lambda(3-\nu) + 6m^4(1-\nu)) + \delta^4(1-\nu)(1-\nu^2-\lambda))/2$, $b_3 = \delta^{-2}(-2m^2\lambda(2\tilde{h}^2\lambda - \delta^4(1-\nu)) - 3m^4\tilde{h}^2\lambda(-3+\nu) - 4m^6\tilde{h}^2(1-\nu) + \delta^4\lambda(3-\lambda(3-\nu) - \nu - 2\nu^2))/2$, $b_4 = \delta^{-4}(-m^6\tilde{h}^2 + m^2\delta^4\lambda + m^4\tilde{h}^2\lambda - \delta^4(-1+\lambda)\lambda)(2\lambda - m^2(1-\nu))/2$.

Собственные значения λ определяются численно из трансцендентного уравнения, получающегося при действии оператора \mathcal{B} на решения (15). Его можно записать следующим выражением:

$$\begin{pmatrix} A_1 e^{-\mu_1} & A_2 e^{-\mu_2} & \dots & \dots & A_8 e^{-\mu_8} \\ B_1 e^{-\mu_1} & B_2 e^{-\mu_2} & \dots & \dots & B_8 e^{-\mu_8} \\ C_1 e^{-\mu_1} & C_2 e^{-\mu_2} & \dots & \dots & C_8 e^{-\mu_8} \\ C_1 \mu_1 e^{-\mu_1} & C_2 \mu_2 e^{-\mu_2} & \dots & \dots & C_8 \mu_8 e^{-\mu_8} \\ A_1 e^{\mu_1} & A_2 e^{\mu_2} & \dots & \dots & A_8 e^{\mu_8} \\ B_1 e^{\mu_1} & B_2 e^{\mu_2} & \dots & \dots & B_8 e^{\mu_8} \\ C_1 e^{\mu_1} & C_2 e^{\mu_2} & \dots & \dots & C_8 e^{\mu_8} \\ C_1 \mu_1 e^{\mu_1} & C_2 \mu_2 e^{\mu_2} & \dots & \dots & C_8 \mu_8 e^{\mu_8} \end{pmatrix} = 0.$$

Постоянные D_k выбираются таким образом, что квадраты норм собственных функций были бы равны единице, т. е. выполнялось соотношение

$$\|\mathbf{U}\|^2 = \langle \mathbf{U}, \mathbf{U} \rangle = \pi \sum_{i,j=1}^8 \left(D_i D_j (A_i A_j + B_i B_j + C_i C_j) \frac{2 \sinh(\mu_i + \mu_j)}{\mu_i + \mu_j} \right).$$

УДК 519.68:[5/6+3]; 004.94; 544.015.4; 544.022.822

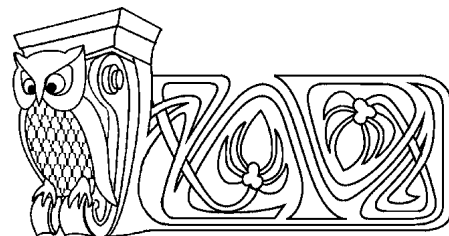
ПЕРКОЛЯЦИЯ СФЕР В КОНТИНУУМЕ

М. М. Бузмакова

Астраханский государственный университет
E-mail: mariya_nazarova@mail.ru

Предложена модель континуальной перколяции жестких сфер с проницаемыми оболочками, которая описывает фазовый переход золь-гель. Сферы имеют жесткие части радиусом r , которые не могут перекрываться друг с другом, и проницаемые оболочки шириной d , которые могут перекрываться. Такие сферы одинакового размера случайным образом помещаются в куб с линейным размером L . Вероятность возникновения связи между сферами пропорциональна объему перекрытия проницаемых оболочек. Если связь между сферами возникает, то сферы принадлежат одному кластеру. В задаче ищется перколяционный кластер, т. е. кластер, соединяющий нижний и верхний грани куба. Доля заполнения куба сферами, при которой вероятность возникновения перколяционного кластера равна 0.5, называется порогом перколяции. Порог перколяции соответствует точке геля. Получена зависимость значения порога перколяции от толщины проницаемой оболочки.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, перколяция, фазовый переход золь-гель.



Percolation of Spheres in Continuum

M. M. Buzmakova

The model of the continuum percolation of hard spheres with permeable shells, which describes phase transition sol-gel, has been investigated. Spheres have hard parts in radii r , which can't be blocked with each other, and permeable shells in width d , which can be blocked. Such spheres of the equal size have been randomly packing in the cub with linear size L . The probability of joining the spheres in a cluster is proportional to the volume of overlapping of permeable shells. Spheres belong to a cluster, if a communication between spheres arises. The percolation cluster is the cluster connecting bottom and top sides of the cube. The packing fraction, at which probability of occurrence of the percolation cluster is 0.5, is called as the percolation threshold. The percolation threshold corresponds to the gel point. The dependency of the percolation threshold of the hard spheres with permeable shells from a thickness of the shell has been obtained.

Key words: computer modeling, percolation, sol-gel phase transition.



ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время активно изучаются процессы самоорганизации в высыхающих каплях биологических жидкостей и водных растворов, содержащих белок и соль в разных соотношениях [1–3]. Процессы, протекающие в каплях высыхающих биологических жидкостей, представляют огромный интерес в медицине для диагностики ряда заболеваний [1, 2]. Для получения информации о состоянии здоровья человека в медицине применяют метод клиновидной дегидратации [2]. Этот метод состоит в следующем: на обезжиренное предметное стекло, расположенное строго горизонтально, наносится дозатором капля биологической жидкости (сыворотки крови, слюны, тканевой или спинномозговой жидкости и т. п.), высушивается и по полученному внешнему виду проводят диагностику широкого круга заболеваний. В частности, одним из диагностических признаков является характер растрескивания образцов. Для здорового человека характерно образование радиальных трещин при высыхании капли сыворотки крови; для образцов, полученных от больных людей, типично хаотическое растрескивание.

В работе [4] проанализировано влияние физико-химических свойств на растрескивание пленки, сформированной в течение высыхания капли неорганического коллоидного раствора на плоской подложке. При низком содержании соли в растворе в высушенном образце наблюдаются радиальные трещины; при среднем — хаотическое растрескивание; при высоком — возникает единственная круговая трещина. Содержание солей в исходном растворе (его ионная сила) определяет скорость процесса гелеобразования. Изменение содержания соли фактически означает изменение времени гелеобразования при неизменной скорости испарения. Таким образом, было показано, что характер растрескивания зависит от относительной скорости высыхания и гелеобразования. Если рассматривать сыворотку крови человека — одну из наиболее часто используемых для целей медицинской диагностики биологическую жидкость — то содержание солей в ней (ионная сила) остается постоянной и равной 0.9% (случай простейшего физиологического раствора). Иными словами, в случае биологической жидкости характер растрескивания высушенных образцов не может определяться ионной силой раствора. Хотя объемная доля белковых молекул в биологической жидкости может испытывать заметные колебания, эти изменения обычно сказываются не на характере растрескивания образцов, а на ширине валика, образующегося вблизи края капли. Можно предположить, что характер растрескивания образца в случае биологической жидкости определяется способностью самих молекул белка образовывать агрегаты.

Биологические жидкости являются сложными коллоидными системами. При высыхании капель биологических жидкостей происходит множество физических, биологических, биофизических, биохимических и физико-химических процессов, изучение которых является актуальной задачей на сегодняшний день [5, 6]. Одним из таких процессов является фазовый переход золь-гель, т. е. переход из жидкой дисперсной среды в среду со структурой, придающей ей свойства твердого тела. Увеличение концентрации дисперсной фазы (в нашем случае молекул белка) приводит к появлению контактов между частицами и началу структурирования — гелеобразования. Возникновение контакта между частицами характеризуется таким явлением, как молекулярный докинг (от англ. docking — стыковка), т. е. молекулы белка образуют связь только на определенном расстоянии и под определенным углом. Альбумин является транспортным белком: продукты метаболизма переносятся на его поверхности в почки. Загрязнение поверхности белка меняет способность молекул образовывать агрегаты, т. е. изменяет физико-химические свойства биожидкости, что, в свою очередь, определяет тип наблюдаемых паттернов. Представляет несомненный интерес исследование того, каким образом способность частиц образовывать связи друг с другом влияет на критическую концентрацию, при которой происходит фазовый переход золь-гель.

Одним из широко распространенных подходов для описания процесса гелеобразования является теория перколяции. Она изучает образование связанных объектов в неупорядоченной среде. С помощью теории перколяции описаны многие физические, химические и другие процессы [7–10]. Известны математические модели процесса гелеобразования, основанные на методах теории перколяции [11–15]. Используются решеточные и континуальные модели. В решеточных моделях занятые узлы рассматривают в качестве молекул растворенного вещества, а пустые — в качестве молекул рас-



творителя. Однако в большинстве случаев решеточные модели оказываются слишком упрощенными для описания реальных систем, так как, во-первых, молекулы растворенного вещества, как правило, не являются точечными объектами, во-вторых, координаты молекул в реальных системах являются непрерывными, а не дискретными. Кроме того, использование решеточных моделей предполагает наличие у моделируемой системы дальнего порядка — трансляционной симметрии. В жидкостях имеется только ближний порядок, поэтому искусственная дискретизация области привносит в модель неприсущие ей свойства. Если говорить конкретно о процессе гелеобразования белковых молекул, то характерный размер молекулы человеческого сывороточного альбумина составляет величину порядка 10^{-8} м (см., например, [16]), что на два порядка превышает характерные расстояния между молекулами воды. Поэтому молекулы альбумина в водном растворе более естественно рассматривать как частицы, находящиеся в непрерывной среде. Таким образом, описание процесса гелеобразования с помощью моделирования континуальной перколяционной системы представляется более адекватным по сравнению с решеточными моделями. Под континуальной перколяционной системой понимается пространственная трехмерная система с вещественными координатами.

Данная работа посвящена моделированию процесса гелеобразования. При моделировании используются методы теории перколяции. Предложена модель континуальной перколяции жестких сфер с проницаемыми оболочками. Континуальная перколяция сфер изучалась и ранее [17, 18], однако новизна нашего исследования заключается в том, что мы учитываем вероятность возникновения связи между сферами, которая пропорциональна объему перекрытия проницаемых оболочек. Жесткие сферы выступают в роли молекул, вероятность докинга молекул характеризуется толщиной проницаемой оболочки и вероятностью возникновения связи, которая пропорциональна объему перекрытия проницаемых оболочек. Точка образования геля (критическая концентрация молекул в водном растворе) соответствует порогу перколяции.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Основной целью моделирования является выявление зависимости порога перколяции от толщины проницаемой оболочки сферы. Для достижения цели была поставлена перколяционная задача жестких сфер с проницаемыми оболочками. Была создана компьютерная модель континуальной перколяции жестких сфер с проницаемыми оболочками. Сферы имеют жесткие части радиусом r , которые не могут перекрываться друг с другом, и проницаемые оболочки шириной d , которые могут перекрываться. Такие сферы одинакового размера случайным образом упакованы в куб с линейным размером L . Две сферы принадлежат одному кластеру в том случае, если их проницаемые оболочки пересекаются и выполняется условие существования связи:

$$p_{\text{bond}} = \frac{V_{\text{per}}(l)}{V_{\text{per}}^{\text{max}}},$$

где $V_{\text{per}}(l) = \frac{\pi(2(r+d)-l)^2(4(r+d)+l)}{12}$, l — расстояние между центрами двух сфер, $V_{\text{per}}^{\text{max}} = V_{\text{per}}(2r) = 2\pi d^2((r+d) - d/3)$.

Используются следующие обозначения: $p = Vn/L^3$ — доля упаковки, V — объем сферы, n — количество упакованных сфер.

В задаче ищется перколяционный кластер, т.е. кластер, соединяющий нижний и верхний грани куба. Доля заполнения куба сферами, при которой вероятность возникновения перколяционного кластера равна 0.5, называется порогом перколяции.

В отличие от работ [17, 18], в нашем исследовании вероятность возникновения связи между сферами пропорциональна объему перекрытий их проницаемых оболочек.

2. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для моделирования перколяции жестких сфер с проницаемыми оболочками была создана программа на языке программирования C++. Входными данными программы являются: L — линейный размер куба, r — радиус сферы, d/r — отношение толщины проницаемой оболочки к радиусу сферы, p_{min} — минимальное значение доли заполнения куба сферами, p_{max} — максимальное значение доли



заполнения куба сферами, step — шаг изменения доли заполнения, k_i — количество испытаний. При моделировании были использованы периодические граничные условия по всем трем направлениям. Моделирование проводилось методом Монте–Карло. Для генерации случайных чисел применялся алгоритм «Вихрь Мерсенна» [19]. Для идентификации принадлежности сферы к кластеру используется алгоритм Хошена–Копельмана [20], который был модифицирован под континуальную задачу. Идентификация перколяционного кластера осуществляется с помощью волнового алгоритма [21].

Рассмотрим все используемые алгоритмы подробнее. Для заданной доли упаковки рассчитывается количество сфер n , которые необходимо разместить в кубе. Генерируются координаты центра первой сферы (x_1, y_1, z_1) . Для каждой следующей сферы генерируются координаты центра (x_i, y_i, z_i) и проверяется, не пересекается ли ее жесткая часть с ранее упакованными сферами. Если не пересекается, она принимается, иначе — отвергается. И так далее, до тех пор пока не будет достигнута необходимая доля упаковки. После выполнения процедуры упаковки имеется n упакованных в куб сфер, каждая из которых имеет свой порядковый номер i , где $1 \leq i \leq n$. Эти номера в дальнейшем используются в модифицированном алгоритме Хошена–Копельмана для распределения сфер по кластерам.

Далее в программе используется модифицированный алгоритм Хошена–Копельмана, который за один проход идентифицирует все кластеры и дает распределение сфер по кластерам. Рассмотрим его более подробно, так как он несколько отличается от классического метода. Используются следующие обозначения: k — номер кластера, $\text{пек}[i]$ — кластерная метка i -й сферы, $\text{кк}[k]$ — размер k -го кластера. Алгоритм работает по следующей схеме:

1. Первой сфере присваивается кластерная метка 1 и размеру первого кластера также присваивается значение 1.
2. Для каждой следующей сферы i , где $2 \leq i \leq n$, проверяется, существуют ли среди ранее проверенных сфер (уже имеющих кластерную метку) ее соседи (соседями являются сферы, центры которых находятся на расстоянии, равном или меньшим $2(r+d)$ и выполняется условие наличия связи между ними $p_{\text{gen}} \leq p_{\text{bond}}$, где p_{gen} — случайно сгенерированное число от 0 до 1).
3. Если соседей не нашлось, то сфера i предположительно принадлежит новому кластеру. В этом случае k увеличивается на 1, сфере i присваивается k -е значение кластерной метки и значению размера k -го кластера присваивается 1.
4. Если встречается один сосед, то две сферы принадлежат одному кластеру. В этом случае сфере i присваивается кластерная метка соседа и размер кластера с данной меткой увеличивается на 1.
5. Если соседей нашлось несколько, то все сферы принадлежат одному кластеру. В этом случае соседи могут иметь как одинаковые, так и разные кластерные метки. Если все кластерные метки соседей одинаковые, то сфере i присваивается кластерная метка соседа и размер кластера с данной меткой увеличивается на 1. Если среди соседей есть такие, которые имеют разные кластерные метки, то возникает конфликт кластерных меток. В этом случае:
 - a) находим среди кластерных меток наименьшую, она является правильной кластерной меткой, остальные метки являются неправильными;
 - b) сфере i и всем соседям присваивается значение правильной кластерной метки, размер кластера с правильной меткой увеличивается на $(1+(\text{количество соседей}-1))$;
 - c) среди ранее рассмотренных сфер находятся те, которые имеют неправильные кластерные метки. Для каждой такой сферы меняем кластерную метку на правильную, размер кластера с правильной меткой увеличивается на количество таких сфер, а размеры кластеров с неправильными кластерными метками обнуляются.

Таким образом, при выполнении модифицированного алгоритма Хошена–Копельмана каждой сфере присваивается кластерная метка. Известно распределение сфер по кластерам, т. е. мы знаем сколько существует кластеров и размер каждого кластера. Это необходимо для определения среднего размера кластера. Кроме того, при выполнении данного алгоритма определяется, какие сферы являются соседями, известно сколько соседей имеет каждая сфера. Эта информация в дальнейшем используется в волновом алгоритме для идентификации перколяционного кластера и для нахождения распределения количества соседей по сферам, что необходимо для определения значения среднего количества соседей сферы B_c .



Для нахождения вероятности возникновения перколяции в системе необходимо проверить на каждом испытании, существует ли кластер, пронизывающий всю систему, — перколяционный кластер. Перколяционный кластер ищется по направлению снизу вверх, т. е. от сферы, находящейся в нижнем слое системы, к сфере, находящейся в верхнем слое системы. Таких сфер может оказаться несколько, необходимо рассмотреть все. Для этого создаются два массива, в первый $\min z$ записываются все номера сфер, для которых вертикальная координата z удовлетворяет условию $0 \leq z \leq (r + d)$, во второй $\max z$ — номера сфер, для которых $L - (r + d) \leq z \leq L$. Далее для каждой пары сфер из первого и второго массивов, которые имеют одинаковые кластерные метки, определяется, существует ли непрерывный путь между ними с помощью волнового алгоритма [21]. Если такая пара сфер находится, то дальнейшие сферы уже не проверяются. Данный алгоритм находит кратчайший путь по перколяционному кластеру, определяет длину этого пути. Также после нахождения перколяционного кластера нам известен его размер, т. е. сколько сфер принадлежит перколяционному кластеру. Это необходимо для определения его мощности и фрактальной размерности.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Произведены расчеты для системы со следующими размерами: $L = 10, 12, 15, 20, r = 0.5, d = 0.2, 0.3, \dots, 1$. Для каждого L, d произведено 100 испытаний и определено значение порога перколяции по следующей методике. Определена вероятность возникновения перколяционного кластера $P(p)$; далее полученные результаты компьютерного эксперимента аппроксимируются функцией $P(p) = (1 + \exp(-(p - p_c(L))a))^{-1}$ (рис. 1). Имеются различные подходы в выборе аппроксимирующей функции, в частности использование полиномов или прямых. Ни один из этих способов не имеет строго теоретического обоснования, однако применение различных аппроксимирующих функций приводит к одним и тем же значениям порога перколяции с ошибкой, не превышающей ошибки компьютерного эксперимента. При аппроксимации учитываются ошибки проведенных измерений следующим образом [22]. Для каждого значения вероятности возникновения перколяционного кластера найдено стандартное отклонение среднего $\sigma_{\bar{P}} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum (P_i - \bar{P})^2} / \sqrt{N}$. Далее, используя критерий Стьюдента, найден доверительный интервал $\bar{P} \pm t\sigma_{\bar{P}}$, в который с вероятностью 95% попадает наше значение вероятности возникновения перколяционного кластера, где $t = 1,98$ — это квантиль t -распределения Стьюдента на уровне $(1 + 0.95)/2$. Значение параметра p , при котором вероятность возникновения кластера равна 0.5, принимается за значение порога перколяции. При аппроксимации данных, полученных при компьютерном моделировании, получается значение порога перколяции с ошибкой

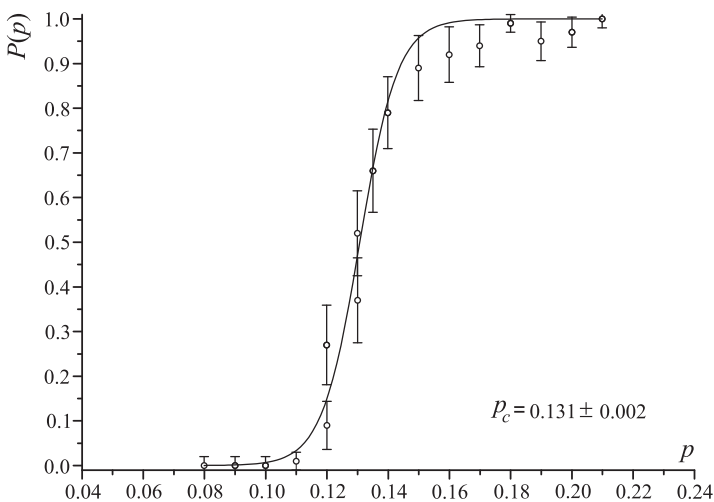


Рис. 1. Вероятность возникновения перколяционного кластера при линейном размере куба $L = 15$, в котором проводилось моделирование, и отношении толщины пронизываемой оболочки к радиусу сферы $d/r = 1$

на порядок ниже ошибки исходных данных, потому что при вычислении ошибки результата учитываются не только ошибки исходных данных, как веса, но и близость полученной кривой к экспериментальным данным. При этом используется критерий χ -квадрат: $\chi^2 = \sum_{i=1}^n \sigma_i (y_i - \bar{y}_i)^2$, где σ_i — ошибки исходных данных, y_i — значение аппроксимирующей функции в точке x_i и \bar{y}_i — значение, полученное в результате компьютерного эксперимента. Ошибка результата вычисляется, при использовании стандартного отклонения среднего $s = \sqrt{\frac{\chi^2}{n-1}}$, по формуле $\pm t \frac{s}{\sqrt{n}}$, где t — коэффициент Стьюдента.



Далее с помощью скейлингового отношения $|p(L) - p(\infty)| \propto L^{-1/\nu}$, где $\nu = 0.875 \pm 0.008$ — универсальный критический показатель [23], производится экстраполяция на случай бесконечной системы (термодинамический предел).

Получена зависимость значения порога перколяции от толщины проникаемой оболочки, которая аппроксимируется функцией (рис. 2): $p_c(\varepsilon) = b + A \exp(-\varepsilon/t)$, где $b = 0.05 \pm 0.01$, $A = 0.471 \pm 0.009$ и $t = 0.57 \pm 0.05$, $\varepsilon = d/r$. На графике представлены значения порогов перколяции для различных отношений толщины проникаемой оболочки к жесткому радиусу сферы от 0.3 до 1 (см. табл. 1). При отношении, равном 0.2, перколяция не наступает вследствие джамминга (явления, возникающего при случайном заполнении системы неточечными объектами в случае, когда пустоты в системе еще существуют, но их размера недостаточно для размещения объекта). Таким образом, разместить сферы уже не удастся, но и связи между ними возникают крайне редко из-за того, что проникаемая оболочка слишком тонкая, вследствие чего перколяционного кластера не существует.

Кроме порога перколяции получена зависимость вероятности возникновения связи между сферами от доли заполнения при различных значениях толщины оболочки (рис. 3). На рис. 3 наблюдается определенная закономерность: вероятность связи между сферами увеличивается при увеличении доли упаковки, причем чем тоньше толщина проникаемой оболочки, тем значения вероятности связи больше. Из этого можно сделать вывод, что чем ближе находятся частицы друг к другу, тем сильнее между ними взаимодействие, а вероятность того, что они принадлежат одному кластеру, возрастает. Полученные данные компьютерного моделирования хорошо аппроксимируются параллельными парабололами вида $p_{\text{bond}}(p) = a + bp^2$ при различных d/r (в пределах погрешности вычислений). Параметры аппроксимирующих функций приведены в табл. 2. При $d/r = 0.4, 0.3$ параллелизм нарушается вследствие плохой статистики, так как при малых значениях толщины проникаемой оболочки связь между сферами возникает редко.

Кроме определения порога перколяции рассчитаны другие характеристики системы: средний размер кластера, мощность перколяционного кластера. Приведены формулы для характеристик [23], где

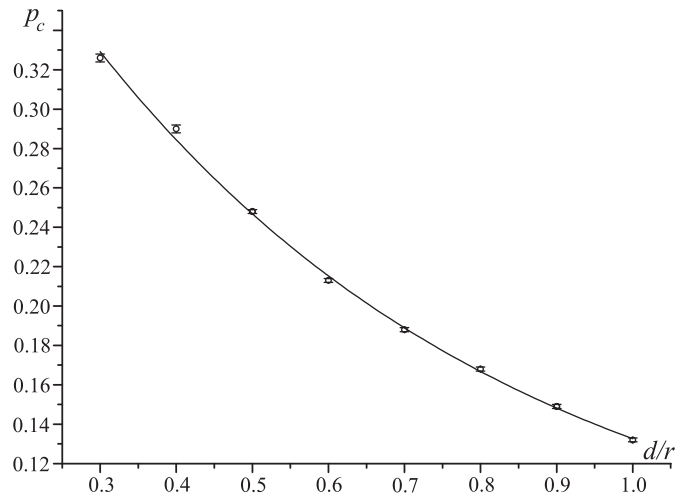


Рис. 2. Зависимость порога перколяции от толщины проникаемой оболочки в случае вероятности возникновения связи между

$$\text{сферами } p_{\text{bond}} = V_{\text{per}}/V_{\text{per}}^{\text{max}}$$

Таблица 1

Значения порогов перколяции p_c при различных d/r

d/r	p_c	d/r	p_c
1	0.132 ± 0.001	0.6	0.213 ± 0.001
0.9	0.149 ± 0.001	0.5	0.248 ± 0.001
0.8	0.168 ± 0.001	0.4	0.290 ± 0.002
0.7	0.188 ± 0.001	0.3	0.326 ± 0.002

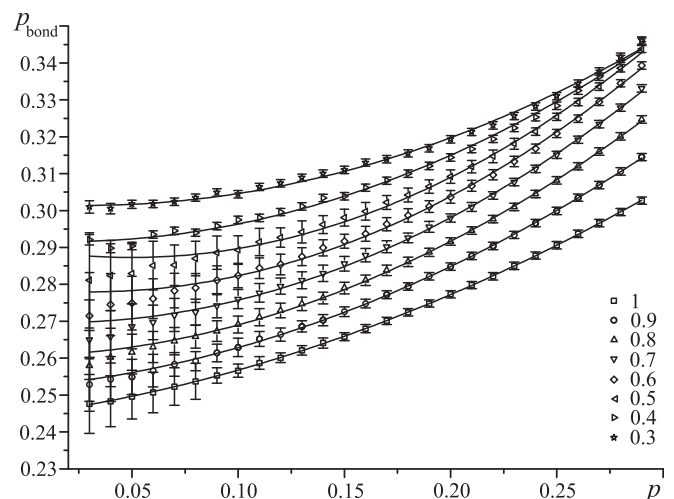


Рис. 3. Зависимость вероятности возникновения связи от доли заполнения при различных значениях толщины оболочки при линейном размере куба $L = 30$



Таблица 2

Параметры аппроксимирующих функций $p_{\text{bond}}(p) = a + bp^2$ данных компьютерного моделирования при различных d/r

d/r	a	b
1	0.2520 ± 0.0003	0.616 ± 0.006
0.9	0.2568 ± 0.0002	0.690 ± 0.005
0.8	0.2618 ± 0.0002	0.745 ± 0.003
0.7	0.2676 ± 0.0003	0.766 ± 0.005
0.6	0.2736 ± 0.0004	0.767 ± 0.007
0.5	0.2805 ± 0.0006	0.731 ± 0.009
0.4	0.2901 ± 0.0003	0.631 ± 0.008
0.3	0.2996 ± 0.0003	0.517 ± 0.008

используются обозначения $\langle N_s \rangle$ — среднее число кластеров размеров s , n — число упакованных сфер.

Распределение кластеров по размерам —

$$n_s(p) = \frac{\langle N_s \rangle}{n}; \quad (1)$$

Вероятность того, что случайно выбранная сфера принадлежит кластеру размера s —

$$w_s = \frac{sn_s(p)}{\sum_s sn_s(p)}; \quad (2)$$

Средний размер кластера —

$$S = \sum_s sw_s. \quad (3)$$

Вероятность того, что выбранная случайным образом сфера принадлежит перколяционному кластеру (мощность перколяционного кластера), представим в виде

$$P_\infty(p) = \frac{N_\infty V}{L^3}, \quad (4)$$

где N_∞ — количество сфер, принадлежащих перколяционному кластеру, V — объем сферы, L — линейный размер куба, в который сферы упаковываются.

Дополнительным подтверждением правильности полученных нами результатов можно считать характерное поведение среднего размера кластера, мощности перколяционного кластера (рис. 4).

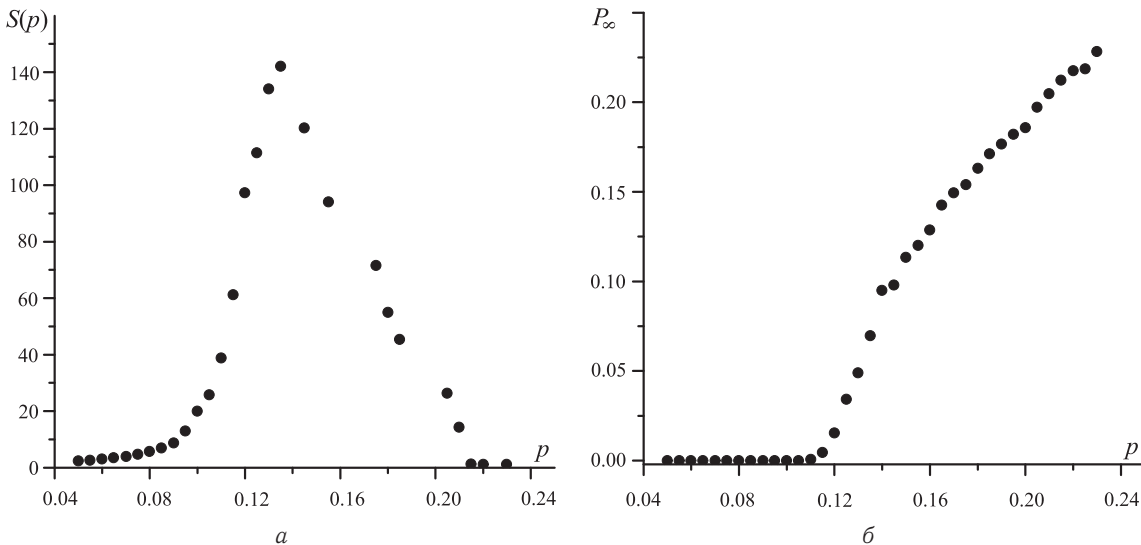


Рис. 4. Средний размер кластера $S(p)$ (а) и мощность перколяционного кластера $P_\infty(p)$ (б)

Перколяционный переход является геометрическим фазовым переходом. Порог перколяции разделяет две фазы. В первой фазе существуют только кластеры конечного размера и перколяционного кластера нет, в другой фазе существуют один бесконечный кластер и кластеры малых размеров. Многие важные характеристики кластера описаны вблизи порога перколяции показательной функции с различными критическими показателями [23]: $P_\infty(p) \propto |p - p_c|^\beta$, $S(p) \propto |p - p_c|^{-\gamma}$. Так для размерности системы $d = 3$ известны критические показатели $\gamma = 1,795 \pm 0.005$ и $\beta = 0.417 \pm 0.003$ [23]. Критические показатели являются универсальными для данного класса задач — для задач теории перколяции.

В настоящей работе были определены критические показатели $\gamma = 1,92 \pm 0.09$ при $p > p_c$, $\gamma = 1,98 \pm 0.05$ при $p < p_c$ и $\beta = 0.416 \pm 0.009$. Критические показатели были найдены по следующей



методике: графически строилась зависимость $S(p)$ от $|p_c - p|$, P_∞ от $(p - p_c)$ в логарифмическом масштабе. Далее, в каждом случае полученные точки аппроксимировались прямой, наклон которой принимался за значение соответствующего критического показателя.

Фрактальная размерность перколяционного кластера на пороге перколяции должна соответствовать формуле [7]: $d_f = d - \beta/\nu$. Для $d = 3$ фрактальная размерность перколяционного кластера будет ≈ 2.531 . В настоящей работе определено значение фрактальной размерности перколяционного кластера ($d_f = 2.64 \pm 0.13$) по стандартной методике [23].

Кроме того, найдены значения среднего количества соседей сферы B_c [24–26] на пороге перколяции для каждого значения толщины оболочки (рис. 5). Сначала находим распределение количества соседей по сферам, т. е. считаем количество сфер $N_{sph}(k)$, имеющих k соседей, где $0 \leq k \leq k_{max}$. Среднее значение количества соседей сферы вычисляем по формуле $B_c = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{k_{max}} k N_{sph}(k)$, где n — количество сфер.

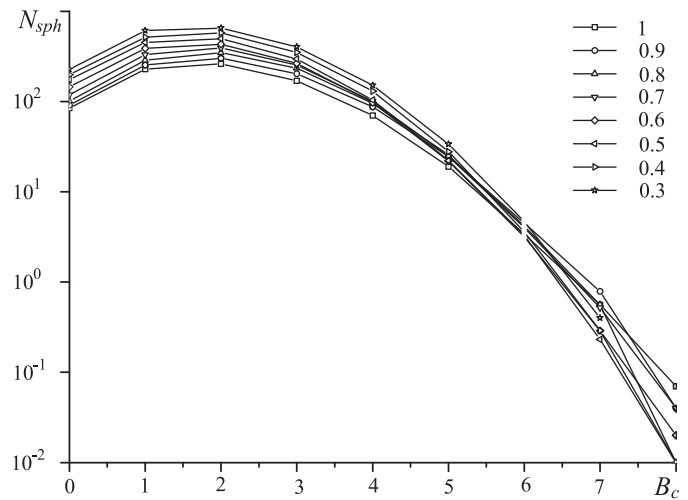


Рис. 5. Значение среднего количества соседей сферы B_c на пороге перколяции при различных значениях отношения толщины проницаемой оболочки к радиусу сферы d/r при линейном размере куба $L = 15$, в котором проводилось моделирование

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена модель континуальной перколяции жестких сфер с проницаемыми оболочками, отличающаяся от известных тем, что впервые вероятность возникновения связи между сферами зависит от объема перекрытия проницаемых оболочек.

Выявлена зависимость порога перколяции от толщины проницаемой оболочки. Кроме того, результаты исследования показали, что вероятность возникновения связи между частицами возрастает с увеличением доли заполнения системы частицами, причем чем тоньше проницаемая оболочка, тем больше значения вероятности возникновения связи. Также выявлено, что перколяция наступает только для объектов с толщиной оболочки, превышающей некоторое минимальное значение.

Полученные результаты позволяют оценить концентрацию молекул белка в водном растворе (порог перколяции), при которой начинает формироваться гелевая матрица в высыхающей капле биологической жидкости с учетом вероятности молекулярного докинга. Полученные результаты свидетельствуют о том, что в рамках нашей модели загрязнение поверхности альбумина продуктами метаболизма увеличивает толщину проницаемой оболочки, т. е. повышает способность молекул к агрегации.

Автор благодарен Ю. Ю. Тарасевичу за постановку задачи и обсуждение результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 09-01-97007-р_Поволжье_а, 09-02-90440-Укр_ф_а, 09-08-00822_а).

Библиографический список

1. Савина Л. В. Кристаллоскопические структуры сывротки крови здорового и больного человека. Краснодар: Сов. Кубань, 1999. 96 с.
2. Шабалин В. Н., Шатохина С. Н. Морфология биологических жидкостей человека. М.: Хризостом, 2001. 304 с.
3. Рапис Е. Г. Белок и жизнь (самоорганизация, самосборка и симметрия наноструктур белка). Иерусалим: Филобиблон; М.: Милта-ПКП ГИТ, 2002. 257 с.
4. Pauchard L., Parisse F., Allain C. Influence of salt content on crack patterns formed through colloidal suspension desiccation // Phys. Rev. E. 1999. Vol. 59, № 3. P. 3737–3740.
5. Яхно Т. А., Яхно В. Г., Санин А. Г., Санина О. А., Пелюшенко А. С. Белок и соль: пространственные события в высыхающей капле // Журн. техн. физики. 2004. Т. 74, № 8. С. 100–108.
6. Яхно Т. А., Яхно В. Г. Основы структурной эволю-



- ции высыхающих капель биологических жидкостей // Журн. технической физики. 2009. Т. 79, № 8. С. 133–141.
7. *Stauffer D., Aharony A.* Introduction to Percolation Theory. L. : Taylor & Francis, 1992. 181 p.
8. *Sahimi M.* Application of Percolation Theory. L. : Taylor & Francis, 1994. 258 p.
9. *Займан Д.* Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем. М. : Мир, 1982. 591 с.
10. *Федер Е.* Фракталы. М. : Мир, 1991. 254 с.
11. *Ohira K., Sato M., Kohmoto M.* Fluctuations in chemical gelation // Phys. Rev. E. 2007. Vol. 75, iss. 4, 041402.
12. *Gado E., Fierro A., Arcangelis L., Coniglio A.* Slow dynamics in gelation phenomena: From chemical gels to colloidal glasses // Phys. Rev. E. 2004. Vol. 69, iss. 5, 051103.
13. *Jespersen S.* Cluster diffusion at the gelation point // Phys. Rev. E. 2002. Vol. 66, iss. 3, 031502.
14. *Vernon D., Plischke M.* Viscoelasticity near the gel point: A molecular dynamics study // Phys. Rev. E. 2001. Vol. 64, iss. 3, 031505.
15. *Vernon D.* Model for gelation with explicit solvent effects: Structure and dynamics / D. Vernon, M. Plischke // Phys. Rev. E. 2003. Vol. 67, iss. 1, 011401.
16. *Monkos K.* Determination of some hydrodynamic parameters of ovine serum albumin solutions using viscometric measurements // J. of Biological Phys. 2005. Vol. 31. P. 219–232.
17. *Rottureau M., Gimel J., Nicolai T., Durand D.* 3d Monte Carlo simulation of site-bond continuum percolation of spheres // The European Physical J. E: Soft Matter and Biological Physics. 2003. Vol. 11. P. 61–64.
18. *Johner N., Grimaldi C., Balberg I., Ryser P.* Transport exponent in a three-dimensional continuum tunneling-percolation model // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 77, iss. 17, 174204.
19. *Matsumoto M.* Mersenne twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator // ACM Trans. on Modeling and Computer Simulations. 1998. Vol. 8, № 1. P. 3–30.
20. *Hoshen J., Kopelman R.* Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm // Phys. Rev. B. 1976. Vol. 14, № 8. P. 3438–3445.
21. *Rubin F.* The Lee Path Connection Algorithm // IEEE Transactions on Computers. 1974. Vol. 23. P. 907–914.
22. *Тейлор Д.* Введение в теорию ошибок / пер. с англ. М. : Мир, 1985. 272 с.
23. *Тарасевич Ю. Ю.* Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. М. : Едиториал УРСС, 2002. 112 с.
24. *Balberg I., Binenbaum N.* Invariant properties of the percolation thresholds in the soft-core-hard-core transition // Phys. Rev. A. 1987. Vol. 35, № 12. P. 5174–5177.
25. *Эфрос А. Л.* Физика и геометрия беспорядка. М. : Наука, 1982. 260 с.
26. *Zhydkov V.* 3D continuum percolation approach and its application to lava-like fuel-containing materials behavior forecast // Condensed Matter Phys. 2009. Vol. 12, № 2. P. 193–203.

УДК 539.3

АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ ДЛЯ СЛУЧАЯ МНОГОСЛОЙНОЙ ТОНКОЙ ОБОЛОЧКИ

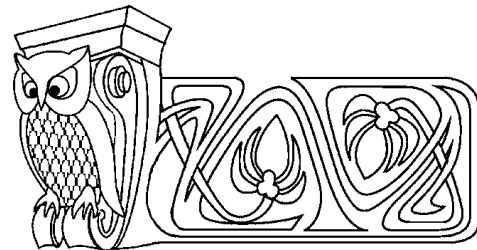
М. В. Вильде, Л. Ю. Коссович, Ю. В. Шевцова

Саратовский государственный университет
E-mail: mv_wilde@mail.ru

Производится асимптотическое интегрирование трехмерных динамических уравнений теории упругости для случая многослойных тонких оболочек произвольного очертания. Построены тангенциальное и поперечное низкочастотные длинноволновые приближения. Выведены двумерные разрешающие системы уравнений.

Ключевые слова: многослойные оболочки, низкочастотные длинноволновые приближения, асимптотические методы.

Целью данной работы является развитие асимптотических методов исследования динамических процессов в тонкостенных телах, предложенных в работах [1–5]. Метод асимптотического интегрирования трехмерных динамических уравнений теории упругости обобщается на случай многослойных



Asymptotic Integration of Dynamic Elasticity Theory Equations in the Case of Multilayered Thin Shell

M. V. Wilde, L. Yu. Kossovich, Yu. V. Shevtsova

Asymptotic integration of elasticity theory 3D equations is fulfilled for the case of multilayered arbitrary-shaped thin-walled shells. The tangential and the transverse long-wave low-frequency approximations are constructed. The governing 2D equations are derived.

Key words: multilayered shells, long-wave low-frequency approximations, asymptotic methods.