

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

### МОДЕЛИРОВАНИЕ КONTИНУАЛЬНОЙ ПЕРКОЛЯЦИИ СФЕР И ЭЛЛИПСОИДОВ

*Мария Михайловна Бузмакова*, аспирант

Астраханский государственный университет  
Российская Федерация, 414056, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а  
тел. 8 (8512) 61-08-19, e-mail: mariya\_nazarova@mail.ru

В данной работе описаны алгоритмы и методы, использованные при моделировании континуальной перколяции сфер и эллипсоидов. Сферы и эллипсоиды имеют жёсткую часть и проницаемую оболочку. Соответственно, жёсткие части элементов не могут пересекаться, а проницаемые оболочки могут пересекаться. Пересечение проницаемых оболочек двух элементов характеризует наличие контакта между ними и указывает на то, что элементы принадлежат одному кластеру. Перколяция в системе наступает в том случае, если существует кластер, простирающийся всю систему (перколяционный). Для перколяции сфер рассмотрены два случая: в первом случае связь между сферами наступает при перекрытии проницаемых оболочек; во втором случае вероятность связи между сферами пропорциональна объёму перекрытия проницаемых оболочек. В случае эллипсоидов связь между ними наступает при перекрытии проницаемых оболочек.

**Ключевые слова:** моделирование, перколяция.

### MODELING OF THE CONTINUUM PERCOLATION OF SPHERES AND ELLIPSOIDS

*Buzmakova Mariya M.*, post-graduated student

Astrakhan State University  
20a Tatischev Str., Astrakhan, 414056, Russian Federation  
phone 8 (8512) 61-08-19, e-mail: mariya\_nazarova@mail.ru

The research work describes the algorithms and methods used for modeling the continuum percolation of spheres and ellipsoids. Both of these – spheres and ellipsoids – have hard parts and soft shells. The hard parts of the elements cannot be crossed, while the soft shells can. Crossing of the soft shells of two elements characterizes contact existence between them, and specifies that the two elements belong to one cluster. The system percolates when there is a cluster, stretching all the system (the percolation cluster). For the percolation of spheres, the paper considers two cases: in the first case, the bond between the spheres comes when the soft shells overlap; in the second case, the probability of a bond forming between the spheres is proportional to the volume of the soft shells' overlapping. In case of ellipsoids, the bond would only come if the soft shells were to overlap.

**Key words:** modeling, percolation.

Перколяция (percolation – англ.) – протекание. Первые работы в этом направлении были посвящены процессам протекания жидкостей или газов через пористую среду и процессам гелеобразования [14]. В дальнейшем методы теории перколяции начали использовать при моделировании электропроводности в композитах, прыжковой проводимости в полупроводниках и др. В настоящее время теория перколяции широко применяется в нанотехнологиях при создании наноматериалов, содержащих углеродные нанотрубки и нановолокна.

Задачи теории перколяции делятся на решёточные и континуальные. Решёточные задачи хорошо изучены, а вот с континуальными дело обстоит иначе. Во-первых, континуальные задачи тяжело моделируемые. Во-вторых, континуальные задачи имеют огромную вычислительную трудоемкость. В связи с этим в большинстве исследований в данном направлении используют идеализированные или слиш-

ком упрощённые модели, далекие от реальных процессов. В некоторых работах можно встретить алгоритм заполнения системы элементами по какому-либо правилу, а не по случайности: например, заполнение элементов по какому-либо закону распределения (нормальное распределение, распределение Пуассона) или же корректировка расположения элемента в случае его пересечения с другими элементами [12]. Встречаются также какие-либо ограничения на ориентацию частицы в системе для облегчения моделирования, там самым отдаляя модель от реальной системы. Или же после процедуры упаковки производится дискретизация системы и модель опять уходит от реальности [16]. Кроме того, в большинстве случаев алгоритмы, применяемые для решёточных задач, оказываются неприменимыми для континуальных задач. Вследствие этого актуальной задачей на сегодняшний день является изучение и модификация существующих алгоритмов и методов, а также создание новых, подходящих для решения континуальных перколяционных задач.

В данной работе предложены алгоритмы и методы, использованные для моделирования континуальной перколяции сфер и эллипсоидов. Данная перколяционная задача интересна, так как имеет весьма широкую область практического применения. С помощью таких перколяционных моделей изучают электропроводность в композитах [10; 11] процессы гелеобразования [5; 7], изготовление наноматериалов. Континуальная перколяция сфер и эллипсоидов изучалась и ранее. Были исследованы перколяция полностью проницаемых сфер [17], жёстких сфер с проницаемыми оболочками [12], жёстких сфер [8], перекрывающихся эллипсоидов [16], жёстких эллипсоидов [4], сплюснутых жёстких эллипсоидов с проницаемыми оболочками [3]. Новизна нашего исследования заключается в следующем: впервые исследована перколяционная модель жёстких сфер с проницаемыми оболочками с вероятностью возникновения связи, которая пропорциональна объему перекрытия проницаемых оболочек:

$$p_{bond} = \frac{V_{per}}{V_{per}^0},$$

где  $V_{per}$  – объем перекрытия проницаемых оболочек,  $V_{per}^0$  – объем 100-го перекрытия двух проницаемых оболочек; впервые исследована перколяционная модель вытянутых жёстких эллипсоидов с проницаемыми оболочками, связь между эллипсоидами возникает при пересечении проницаемых оболочек.

#### **Постановка задачи и методика моделирования**

Исследованы три перколяционные модели:

1. Континуальная перколяция жёстких сфер с проницаемыми оболочками для случая, когда две сферы принадлежат одному кластеру, если их проницаемые оболочки пересекаются.
2. Континуальная перколяция жёстких сфер с проницаемыми оболочками для случая, когда вероятность возникновения связи между сферами пропорциональна объёму перекрытий их проницаемых оболочек.
3. Континуальная перколяция жёстких эллипсоидов с проницаемыми оболочками для случая, когда два эллипсоида принадлежат одному кластеру, если их проницаемые оболочки пересекаются.

Элементы (сферы и эллипсоиды вращения) случайным образом помещаются в куб с линейным размером  $L$ . Элементы имеют жёсткую часть и проницаемые оболочки. Для каждого набора параметров проводится 100 испытаний. Для каждого испытания главной задачей является нахождение перколяционного кластера, который можно представить как простирающийся через всю систему и соединяющего нижнюю и верхнюю грани куба или же как оборачивающий кластер – оба варианта являются равноправными и верными. В рамках наших моделей при использовании наших алгоритмов удобнее искать перколяционный кластер именно от нижний грани куба к верхней грани, т.е. мы считаем, что если кластер имеет разрыв внутри куба, то он уже не является перколяционным. Та доля упаковки, при которой вероятность

возникновения перколяционного кластера равна 0,5, называется порогом перколяции. Кроме порога перколяции рассчитаны другие характеристики модели: распределение кластеров по размерам, средний размер кластера, мощность и фрактальная размерность перколяционного кластера, среднее значение и распределение соседей элемента, критические показатели.

Моделирование проводилось методом Монте-Карло с использованием модифицированного алгоритма Хошена – Копельмана [6] для распределения элементов по кластерам и нахождения среднего размера кластера. Для генерации случайных чисел применялся алгоритм вихрь Мерсенна [9]. В континуальной перколяции нельзя определить наличие перколяционного кластера в системе с помощью алгоритма Хошена – Копельмана, поэтому нахождение перколяционного кластера и его размера проводилось с помощью «волнового алгоритма» [13], который также находит кратчайший путь по перколяционному кластеру. При моделировании использованы периодические граничные условия по всем трем направлениям.

Рассмотрим все используемые алгоритмы более подробно. Для заданной доли упаковки (объемной доли частиц) рассчитывается количество элементов:

$$n = \frac{pL^3}{V},$$

где  $p$  – заданная доля упаковки,  $V$  – объем элемента, которые необходимо разместить в кубе.

#### **Методика заполнения системы элементами**

Упаковка сфер производится следующим образом:

1. Координаты центра первой сферы  $x_1, y_1, z_1$  генерируются и записываются в массивы  $x, y, z$ , сфере присваивается номер 1.
2.  $kp=0$  (число попыток упаковать элемент).
3. Для каждой следующей сферы (новой) генерируются координаты центра  $x_i, y_i, z_i$ .
4. Проверяется, есть ли в области  $(x_i \pm 2r, y_i \pm 2r, z_i \pm 2r)$  ранее упакованные сферы.
5. Если такие находятся, то идет проверка на пересекаемость новой сферы с каждой сферой, находящейся в области  $(x_i \pm 2r, y_i \pm 2r, z_i \pm 2r)$ .

Если сфера пересекается с какой-либо из таких сфер, она отвергается и переменная  $kp$  увеличивается на 1. Если  $kp=L^3 \cdot 1000$ , то процедура упаковки заканчивается, так как разместить очередной элемент не удастся из-за отсутствия достаточных пустот (такое явление называется джамингом),  $n=i$ ; иначе переходим к пункту с ( $i$  остается прежним).

Если сфера не пересекается с какой-либо из таких сфер, она принимается: ее координаты записываются в массивы  $x, y, z$ , сфере присваивается номер  $i$ . Далее работает модифицированный алгоритм Хошена – Копельмана, который будет описан ниже. После прохождения алгоритма Хошена – Копельмана  $i$  увеличивается на 1, и переходим к пункту б данного алгоритма.

И так далее до тех пор, пока  $i$  не станет равным  $n$ .

Упаковка эллипсоидов производится аналогично, отличие от упаковок сфер состоит в следующем. Во-первых, кроме координат центра для каждого эллипсоида генерируются угол поворота (отклонение от осей  $x, y$ ) и угол наклона (отклонение от оси  $z$ ), которые в дальнейшем записываются в массивы **alfa**, **beta**. Во-вторых, для проверки на пересекаемость двух эллипсоидов создана функция (описание смотреть ниже), которая ищет общую точку (точки) двух поверхностей. Если такая точка находится, то эллипсоиды пересекаются, иначе – не пересекаются.

Наша процедура упаковки отличается от упаковок в предшествующих исследований тем, что она случайна. В предшествующих исследованиях авторы использова-

ли заполнение по каким-либо правилам: либо использовали какие-либо законы распределения; либо при пересечении объектов не отвергали его, а просто передвигали на фиксированное расстояние. В наших моделях случайно генерируется положение объекта, и если он не пересекается с другими ранее упакованными объектами, то он располагается в этом положении.

### **Модификация алгоритма Хошена – Копельмана**

Был модифицирован классический алгоритм Хошена – Копельмана, который за один проход идентифицирует все кластеры и определяет распределение элементов по кластерам под континуальную задачу. Модифицированный алгоритм Хошена – Копельмана отличается от классического тем, что в классическом алгоритме перебираются по порядку все слои решётки, а в модифицированном перебираются все элементы от 1 до  $n$ . Это даёт возможность работать алгоритму в континууме. Кроме того, при работе модифицированного алгоритма создаются списки соседей для каждого элемента (для случая сфер в первой модели соседями являются такие сферы, проникаемые оболочки которых пересекаются; во второй модели соседями являются такие сферы, проникаемые оболочки которых пересекаются и выполняется условие наличия связи между ними  $p_{gen} \leq p_{bond}$ , где  $p_{gen}$  – случайно сгенерированное число от 0 до 1; для случая эллипсоидов соседями являются такие эллипсоиды, проникаемые оболочки которых пересекаются).

Модифицированный алгоритм работает следующим образом:

1. При генерации первого элемента ему присваивается кластерная метка 1 и размеру первого кластера также присваивается значение 1.
2. Для каждого следующего элемента  $i$ , проверяется, существуют ли среди ранее проверенных элементов (уже имеющих кластерную метку) её соседи.
3. Если соседей не нашлось, то элемент  $i$  предположительно принадлежит новому кластеру. В этом случае  $k$  (номер кластера) увеличивается на 1, элементу  $i$  присваивается  $k$ -ое значение кластерной метки и значению размера  $k$ -го кластера присваивается 1.
4. Если встречается один сосед, то два элемента принадлежат одному кластеру. В этом случае элементу  $i$  присваивается кластерная метка соседа и размер кластера с данной меткой увеличивается на 1.
5. Если соседей нашлось несколько, то все элементы 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:
  - находим среди кластерных меток наименьшую – она является правильной кластерной меткой, остальные метки являются неправильными;
  - объекту  $i$  и всем соседям присваивается значение правильной кластерной метки, размер кластера с правильной меткой увеличивается на  $(1 + (\text{количество соседей} - 1))$ ;
  - среди ранее рассмотренных элементов находятся те, которые имеют неправильные кластерные метки. Для каждого такого объекта меняем кластерную метку на правильную, размер кластера с правильной меткой увеличивается на количество таких объектов, а размеры кластеров с неправильными кластерными метками обнуляются.

После выполнения модифицированного алгоритма Хошена – Копельмана известно распределение элементов по кластерам, что необходимо для определения среднего размера кластера. Кроме того, для каждого элемента существует список соседей, эта информация используется в «волновом алгоритме» и для нахождения распределения количества соседей и определения значения среднего количества соседей  $B_c$ .

### «Волновой алгоритм»

Для нахождения вероятности возникновения перколяции в системе необходимо проверить на каждом испытании существует перколяционный кластер. Для этого, в процессе упаковки создаются два массива, в первый **minz** записываются все номера элементов, для которых вертикальная координата  $z$  удовлетворяет условию  $0 \leq z \leq (r + d)$  для сфер и  $0 \leq z \leq (rk + d)$  для эллипсоидов, во второй **maxz** – номера объектов, для которых  $L - (r + d) \leq z \leq L$  для сфер и  $L - (rk + d) \leq z \leq L$  для эллипсоидов. Далее для каждой пары элементов из первого и второго массивов, которые имеют одинаковые кластерные метки, определяется, существует ли непрерывный путь между ними с помощью «волнового алгоритма». Если такая пара элементов находится, то следующие элементы уже не проверяются. Такая проверка необходима, так как при моделировании используются периодические граничные условия и наличие одинаковых кластерных меток у двух объектов не гарантирует наличие пути между ними через всю систему.

Идея «волнового алгоритма» заключается в следующем:

1. Выбирается пара элементов из массивов **minz** и **maxz**, имеющих одинаковые кластерные метки: **mini** – начало пути, **maxi** – конец пути.
2. Создаются массивы **OF** (старый фронт волны), **NF** (новый фронт волны), **T** (волновая метка).
3. Создаются переменные **Tr** (время), **length** (длина пути).
4. Для всех элементов **T[i]=0**,  $0 \leq i < n$ .
5. **mini** принадлежит старому фронту волны и записывается в массив **OF**, **Tr=1**, **length=0**, **T[mini]=-1**.
6. Для каждого из элементов, принадлежащих старому фронту волны **OF**, перебираются все соседи.
7. Для каждого соседа  $j$  проверяется: если **T[j]=0**, то: **T[j]=Tr**,  $j$  записывается в массив **NF**.
8. Если массив **NF** после предыдущего действия оказался пуст, то перколяционного кластера нет. Работа алгоритма прекращается.
9. Если массив **NF** содержит элементы, то:
  - ищем среди элементов массива **NF** элемент **maxi**;
  - если **maxi** найден среди элементов массива **NF**, то перколяционный кластер найден. В этом случае найден кратчайший путь от **mini** до **maxi** **length=Tr**. Работа алгоритма прекращается;
  - в случае, если **maxi** не найден среди элементов массива **NF**, то: массив **OF** очищается; в массив **OF** записываются элементы массива **NF**, **Tr=Tr+1**; переходим к пункту f).

Данный алгоритм находит кратчайший путь по перколяционному кластеру. Также после нахождения перколяционного кластера нам известен его размер, что необходимо для определения его мощности и фрактальной размерности.

### Методика нахождения пересечения двух эллипсоидов

Для нахождения пересечения жёстких частей двух эллипсоидов вращения, а также для их проницаемых оболочек были созданы специальные функции. В обеих функциях используется уравнение эллипсоида

$$\frac{(x-x_0)^2 \cos^2 \alpha \cos^2 \beta}{r^2} + \frac{(y-y_0)^2 \cos^2 \alpha \sin^2 \beta}{r^2} + \frac{(z-z_0)^2 \sin^2 \alpha}{(rk)^2} = 1,$$

где  $x_0, y_0, z_0$  – координаты центра,  $\alpha, \beta$  – углы наклона и поворота соответственно.

Входными данными служат номера двух эллипсоидов  $i$  и  $j$ , для которых производится проверка на пересекаемость. Для обоих эллипсоидов известны координаты центра, угол наклона (отклонение от оси  $z$ ) и угол поворота (отклонение от осей  $x, y$ ), которые хранятся в массивах **x, y, z, alfa, beta**. Из всего куба с линейным размером  $L$  выбирается параллелепипед с минимальными размерами такой, что в него входят оба

рассматриваемых эллипсоида. Далее с шагом 0,1г перебираются все точки данного параллелепипеда. Для каждой точки проверяется, удовлетворяет ли она уравнению обоих эллипсоидов. Если такая точка находится, то эллипсоиды пересекаются. Выбор шага 0,1г является оптимальным, так как при выборе меньшего шага (т.е. рассмотрения большего количества точек) время расчетов значительно увеличивается, а полученные результаты практически совпадают.

Функция нахождения пересечения проницаемых оболочек двух эллипсоидов аналогична предыдущей. В данном случае в уравнениях эллипсоида учитывается проницаемая оболочка  $d$  и параллелепипед также выбирается с учетом толщины проницаемой оболочки.

Обе функции возвращают значение 1, если пересечение найдено, и 0, если пересечения нет.

### Прочие алгоритмы

Кроме вышеописанных алгоритмов в программе используются стандартные методики теории перколяции для определения фрактальной размерности перколяционного кластера, критических показателей [15]. Также для определения среднего количества соседей элемента и его распределения была разработана методика, использующая стандартные формулы математической статистики [1; 2]. Сначала определяется распределение количества соседей по элементам (количество элементов  $N(k)$ , имеющих  $k$  соседей). Среднее значение количества соседей элемента вычисляется по формуле:

$$B_c = \frac{\sum kN(k)}{n}.$$

Для определения порога перколяции и оценки его погрешности также используются стандартные методы теории перколяции и математической статистики. Для каждого набора начальных параметров определена вероятность возникновения перколяционного кластера  $P(p)$ ; далее полученные результаты компьютерного эксперимента аппроксимируются функцией  $P(p) = (1 + \exp(-(p - p_c(L))a))^{-1}$ . 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 ошибку компьютерного эксперимента.

При аппроксимации учитываются ошибки проведенных измерений следующим образом. 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  $t=1,98$  – коэффициент Стьюдента. Значение параметра  $p$ , при котором вероятность возникновения кластера равна 0,5, принимается за значение порога перколяции. Ошибка результата вычисляется, используя стандартное отклонение среднего:

$$s = \sqrt{\frac{\chi^2}{n-1}},$$

по формуле

$$\pm t \frac{s}{\sqrt{n}},$$

где  $t$  – коэффициент Стьюдента.

Таким образом, нами были подробно описаны алгоритмы и методики, используемые при моделировании континуальной перколяции сфер и эллипсоидов. Главными результатами проделанной работы являются:

1. Модификация алгоритма Хошена – Копельмана для континуальной перколяционной задачи.
2. Разработка методики нахождения пересечения двух эллипсоидов и их проникаемых оболочек.
3. Разработка методики определения среднего значения соседей  $B_c$ , приходящихся на один элемент, и его распределения.

*Работа выполнена в рамках проекта Министерства образования и науки Российской Федерации № 1.588.2011 «Математическое моделирование процессов самоорганизации в системах микро- и наночастиц».*

#### Список литературы

1. **Герасимович А. И.** Математическая статистика / А. И. Герасимович, Я. И. Матвеева. – Минск : Высшая школа, 1978. – 200 с.
2. **Тейлор Д.** Введение в теорию ошибок : пер. с англ. / Д. Тейлор. – Москва : Мир, 1985. – 272 с.
3. **Ambrosetti G.** Percolative properties of hard oblate ellipsoids of revolution with a soft shell / G. Ambrosetti, N. Johner, C. Grimaldi, A. Danani, P. Ryser // *Physical Review E*. – 2008. – Vol. 78. – P. 061126(11).
4. **Akagawa S.** Geometrical percolation of hard-core ellipsoids of revolution in the continuum / S. Akagawa, T. Odagaki // *Physical Review E*. – 2007. – Vol. 76, № 8. – P. 051402(5).
5. **Gado E.** Slow dynamics in gelation phenomena: From chemical gels to colloidal glasses / E. Gado, A. Fierro, L. Arcangelis, A. Coniglio // *Physical Review E*. – 2004. – Vol. 69. – P. 051103 (9).
6. **Hoshen J.** Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm / J. Hoshen, R. Kopelman // *Physical Review B*. – 1976. – Vol. 14, № 8. – P. 3438–3445.
7. **Kenji O.** Fluctuations in chemical gelation / O. Kenji, M. Sato, M. Kohmoto // *Physical Review E*. – 2007. – Vol. 75. – P. 041402 (6).
8. **Lorenz C. D.** Precise determination of the critical percolation threshold for the three-dimensional “Swiss cheese” model using a growth algorithm / C. D. Lorenz, R. M. Ziff // *J. Chem. Phys.* – 2001. – Vol. 114. – P. 3659–3661.
9. **Matsumoto M.** Mersenne twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator / M. Matsumoto // *ACM Trans. on Modeling and Computer Simulations*. – 1998. – Vol. 8. – P. 3–30.
10. **Pike G. E.** Percolation and conductivity: A computer study. I / G. E. Pike, C. H. Seager // *Physical Review B*. – 1974. – Vol. 10. – P. 1421–1434.
11. **Pike G. E.** Percolation and conductivity: A computer study. II / G. E. Pike, C. H. Seager // *Physical Review B*. – 1974. – Vol. 10. – P. 1435–1446.
12. **Rotureau M.** 3d Monte Carlo simulation of site-bond continuum percolation of spheres / M. Rotureau, J. C. Gimel, T. Nicolai, D. Durand // *Physical Review E*. – 2003. – Vol. 11. – P. 61–64.
13. **Rubin F.** The Lee path connection algorithm / F. Rubin // *IEEE Transactions on Computers*. – 1974. – Vol. 23. – P. 907–914.
14. **Sahimi M.** Application of Percolation Theory / M. Sahimi. – London : Taylor & Francis, 1994. – 258 p.
15. **Stauffer D.** Introduction to Percolation Theory / D. Stauffer, A. Aharony. – London : Taylor & Francis, 1992. – 181 p.
16. **Yi Y. B.** Void percolation and conduction of overlapping ellipsoids / Y. B. Yi // *Physical Review A*. – 2006. – Vol. 74. – P. 031112 (6).
17. **Zhydkov V. O.** 3D continuum percolation approach and its application to lava-like fuel-containing materials behaviour forecast / V.O. Zhydkov // *Condensed Matter Physics*. – 2009. – Vol. 12, № 2. – P. 193–203.

### References

1. Gerasimovich A. I., Matveeva Y. I. *Matematicheskaya statistika* [Mathematical statistics]. Minsk, Vysshaya shkola, 1978, 200 p.
2. Taylor D. *Vvedenie v teoriyu oshibok* [Introduction in the theory of mistakes]. Moscow, Mir, 1985, 272 p.
3. Ambrosetti G., John N., Grimaldi C., Danani A., Ryser P. Percolative properties of hard oblate ellipsoids of revolution with a soft shell. *Physical Review E*, 2008, vol. 78, 061126 (11).
4. Akagawa S., Odagaki T. Geometrical percolation of hard-core ellipsoids of revolution in the continuum. *Physical Review E*, 2007, vol. 76 (8), 051402 (5).
5. Gado E., Fierro A., Arcangelis L., Coniglio A. Slow dynamics in gelation phenomena: From chemical gels to colloidal glasses. *Physical Review E*, 2004, vol. 69, 051103 (9).
6. Hoshen J., Kopelman R. Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. *Physical Review B*, 1976, vol. 14 (8), pp. 3438–3445.
7. Kenji O., Sato M., Kohmoto M. Fluctuations in chemical gelation. *Physical Review E*, 2007, vol. 75, 041402 (6).
8. Lorenz C. D., Ziff R. M. Precise determination of the critical percolation threshold for the three-dimensional “Swiss cheese” model using a growth algorithm. *J. Chem. Phys.*, 2001, vol. 114, pp. 3659–3661.
9. Matsumoto M. Mersenne twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator. *ACM Trans. Modeling and Computer Simulations*, 1998, vol. 8, pp. 3–30.
10. Pike G. E., Seager C. H. Percolation and conductivity: A computer study. I. *Physical Review B*, 1974, vol. 10, pp. 1421–1434.
11. Pike G. E., Seager C. H. Percolation and conductivity: A computer study. II. *Physical Review B*, 1974, vol. 10, pp. 1435–1446.
12. Rottereau M., Gimel J. C., Nicolai T., Durand D. 3d Monte Carlo simulation of site-bond continuum percolation of spheres. *Physical Review E*, 2003, vol. 11, pp. 61–64.
13. Rubin F. The Lee path connection algorithm. *IEEE Transactions on Computers*, 1974, vol. 23, pp. 907–914.
14. Sahimi M. *Application of Percolation Theory*. London, Taylor & Francis, 1994, 258 p.
15. Stauffer D., Aharony A. *Introduction to Percolation Theory*. London, Taylor & Francis, 1992, 181 p.
16. Yi Y. B. Void percolation and conduction of overlapping ellipsoids. *Physical Review A*, 2006, vol. 74, 031112 (6).
17. Zhydkov V. O. 3D continuum percolation approach and its application to lava-like fuel-containing materials behaviour forecast. *Condensed Matter Physics*, 2009, vol. 12 (2), pp. 193–203.

УДК 539.193/.194;535/33.34

## СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ФЛАВОНОИДОВ.

### 2. МОНОГИДРОКСИФЛАВОНЫ $C_{15}O_3H_{10}$

**Михаил Давыдович Элькин**, доктор физико-математических наук, профессор

**Альфия Рафаиловна Гайсина**, ассистент

**Анатолий Михайлович Лихтер**, доктор технических наук, доцент, заведующий кафедрой

**Диана Мухамеджановна Нуралиева**, аспирант

**Владимир Вячеславович Смирнов**, кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой

**Екатерина Юрьевна Степанович**, ассистент

**Ильмира Тауфиковна Шагаутдинова**, магистрант

Астраханский государственный университет

Российская Федерация, 414056, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а

тел. 8 (8512) 61-08-84, e-mail: elkinmd@mail.ru, gaisinaalfiya@mail.ru,

kofl@aspu.ru, dianet\_88@mail.ru, vsmirnov@mail.ru, stepakyr1@mail.ru,

ilmira178s@mail.ru