Modelování difúze a polymerace

M. Hanzelka, P. Polcer
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT
MirdaHanzelka@seznam.cz, PolcerPavel@seznam.cz

Abstrakt

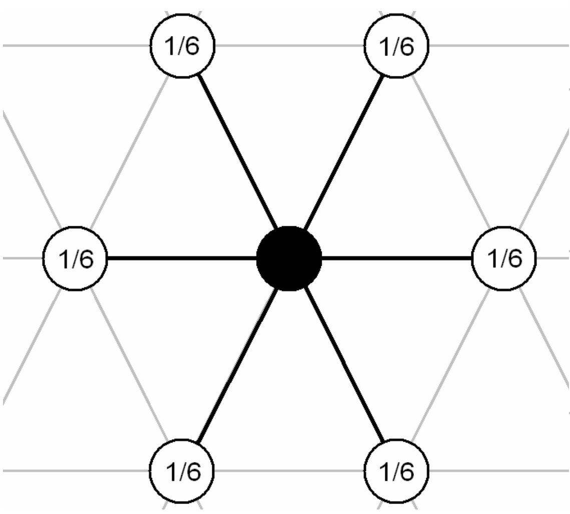
Tato práce má za cíl vytvořit model pro Brownův pohyb pomocí metody SAW. Při modelování záleží na topologii systému a zvolení pravděpodobností přechodu mezi jednotlivými stavy. Ačkoli je to model velmi jednoduchý, je překvapivě přesný. Použili jsme dva dvojrozměrné modely a provedli fraktální analýzu a odhadli na základě vypočtených entropií dimenze daných modelů. Výsledky analýzy budou porovnány s teoretickými hodnotami.

1 Úvod

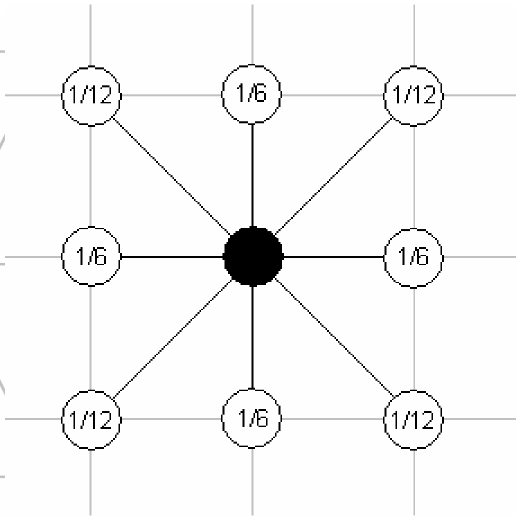
K vypracování tohoto projektu jsme se rozhodli kvůli jeho využití v praxi. Pomocí zdánlivě jednoduchých řad čísel a pravděpodobností lze vytvořit model, podle kterého se pohybují částice při difúzi, nabalování, polymeraci či Brownově pohybu. Podobné modely lze použít v mnohých oborech, třeba i při diagnostice Alzheimerovy choroby [4]. Ačkoli jsme se v našem projektu omezili pouze na vytvoření obecného modelu a jeho fraktální analýzu, je možné ho dále rozvinout a využít.

2 Modelování difúze pomocí Brownova pohybu

Pro modelování byla použita metoda SAW na 2D síti. SAW (z anglického Self Avoiding Walk) je sekvence pohybů na soustavě bodů, při které se sledovaný objekt nemůže vrátit na pozici, ve které se už jednou vyskytoval. Je to tedy speciální případ tzv. náhodné procházky (random walk). Metodu SAW lze použít na různé typy mřížek umožňující určitý počet pohybů. V námi zvolené oktagonální a hexagonální síti je každý bod obklopen šesti, respektive osmi body. Dle zvolené hodnoty pravděpodobnosti se bod pohybuje určitým směrem (Obrázky 1 a 2).



Obrázek1: Hexagonální síť

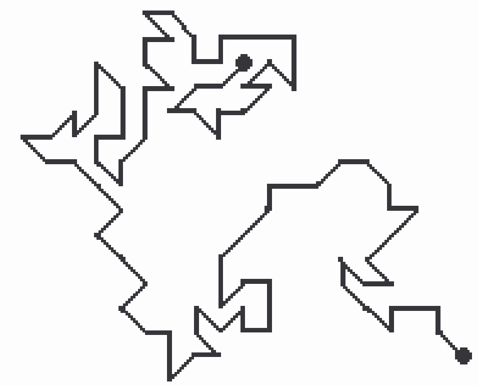


Obrázek 2: Oktagonální síť

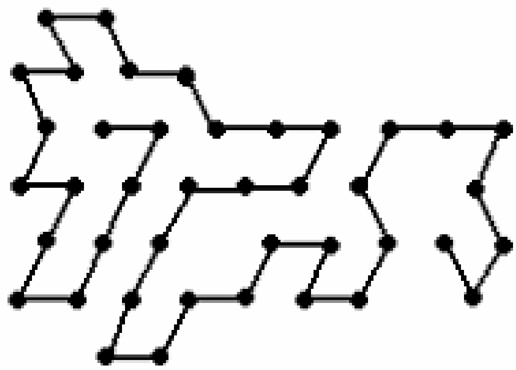
3 Simulační experiment

Simulace Brownova pohybu se provádí následovně. Pomocí počítačového programu necháme vygenerovat řadu čísel, z nichž každé symbolizuje daný směr pohybu. V oktagonální síti musíme vytvořit dvě řady čísel, které určují pohyb po osách x, y. Jak u svislého, tak u vodorovného pohybu musí být 50% pravděpodobnost, že objekt pohyb nevykoná, aby nedošlo k eliminaci směrů přímých a nezůstaly jen ty šikmé.

Poté zaznamenáváme trajektorii objektu, dokud nedojde do stavu, kdy nemůže vykonat další pohyb (Obrázek 3 a 4). Tento postup zopakujeme několikrát pro každou z obou zvolených sítí.



Obrázek 3:
Ukázka trajektorie
(oktagonální síť)



Obrázek 4:
Ukázka trajektorie
(hexagonální síť)

4 Odhad entropie

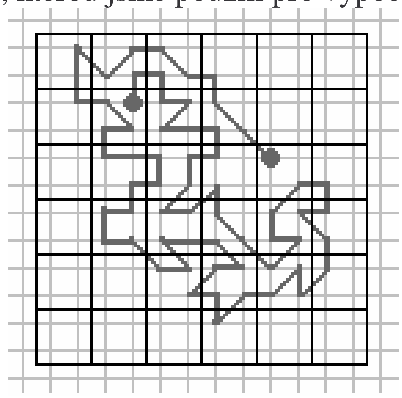
Abychom mohli vypočítat entropii, musíme každou ze simulací proložit sítí o velikosti mřížky ε. Pro hodnoty ε>5 jsou výsledky již značně závislé na umístění mřížky. Zvolené hodnoty jsou vyjádřeny v násobcích délky části základní mřížky (Obrázek 5). Entropie podle Rényiho je definována vztahem

$$H_q = \frac{1}{1-q} \log_2 \left(\sum_{p_k > 0} p_k^q \right),$$

kde p_k je pravděpodobnost, že k-tá oblast obsahuje body zkoumané množiny. Pro q = 1 dostaneme vztah

$$H_1 = \lim_{q\to 1} H_q = -\sum_{k=1}^{N} p_k \log_2 p_k = H \,,$$

což je entropie podle Shannona, kterou jsme použili pro výpočty v našich modelech.



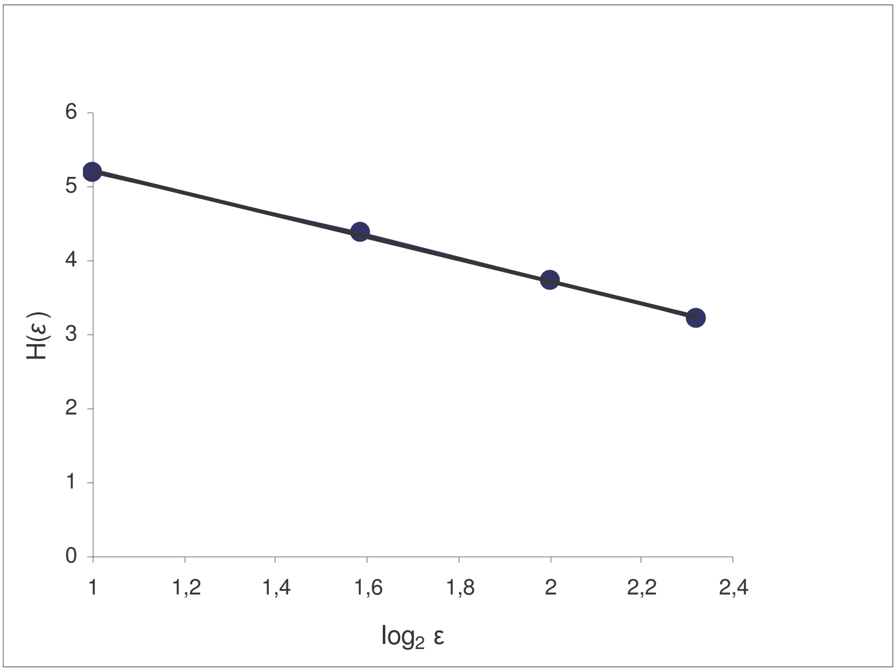
Obrázek 5: Mřížka pro ε = 2

5 Odhad dimenzí struktury

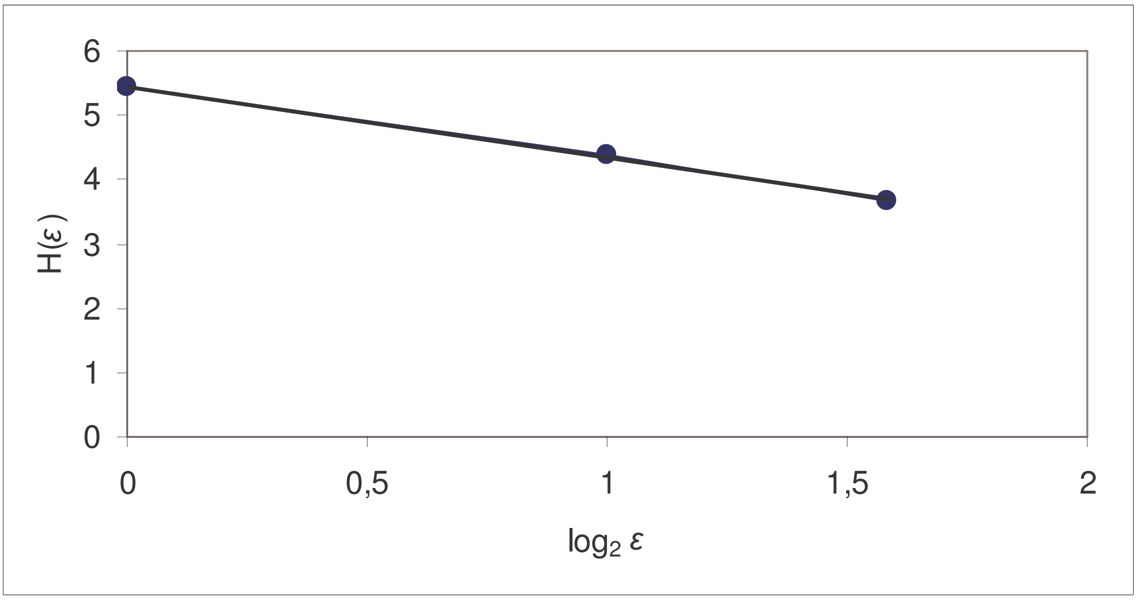
Rényiova dimenze se odhaduje z experimentálních dat podle vzorce

$$H_q = A_q - D_q \log_2 \varepsilon$$

V grafech závislosti entropie na logaritmu ε (Obrázek 6 a 7) je dimenze směrnicí přímky.



Obrázek 6: Graf pro oktagonální síť



Obrázek 7: Graf pro hexagonální síť

6 Shrnutí

Pro oktagonální síť vychází hodnota Hausdorffovy dimenze 1,4896, pro hexagonální síť 1,099. Podle údajů v literatuře by měla být Hausdorffova dimenze v 2D tetragonální síti rovna 4/3 [1]. Výsledky jsou poměrně blízké teoretické hodnotě, takže je námi zvolený model použitelný.

Poděkování

Děkujeme doc. Ing. Jaromíru Kukalovi, Ph.D. za pomoc a podporu při realizaci tohoto projektu a za četné rady, které daly naší práci potřebnou úroveň.

Reference:

[1] KUKAL, J.: *Fraktály a entropie,* Prezentace PowerPoint, KSE, FJFI, ČVUT v Praze

[2] SHANNON, C. E.: *A Mathematical Theory of Communication,* The Bell System Technical Journal, 1948, pp. 379–423, 623–656

[3] ALFRÉD RÉNYI, *On Measures of Entropy and Informatik,* Mathematical Institut Hungarian Academy of Science, 1961 pp. 547-561

[4] ADAMČÍK, J.: *Využití odhadů Minkowski-Bouligandovy dimenze k diagnostice Alzheimerovy demence,* FJFI ČVUT v Praze, 2010