

МОДЕЛЮВАННЯ КЛІТИННИХ ДВИГУНІВ МЕТОДОМ РУХОМИХ КЛІТИННИХ АВТОМАТІВ

Газдюк К.П., Жихаревич В.В.

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
м. Чернівці*

Важливою областю моделювання, що значно розширює можливості застосування клітинних автоматів є моделювання хімічних реакцій [1], де має місце процес імітації молекулярних перетворень. Проводячи аналогію із біоподібними структурами, доречним є використання рухомих клітинних автоматів (МСА від англ. Movable cellular automata) для моделювання процесів утворення різноманітних молекулярних комплексів та динаміки молекулярних та нанорозмірних структур [2]. Слід зазначити, що даний метод дозволяє застосовувати різні підходи та моделі для опису модельованих середовищ. Вибір асинхронного підходу при розробці алгоритму МСА обумовлений тим, що дозволяє уникнути колізій, тобто задовольнити критерій коректності (не буде жодної спроби змінити стан однієї і тієї ж клітини більш ніж один раз в один і той самий момент часу t).

Розглянемо двовимірну модель молекулярного двигуна, де обертання здійснюється за рахунок теплової енергії коливань атомів, та опишемо правила взаємодій МСА для даної моделі при асинхронному режимі роботи. Всі автомати, як елементарні моделі атомів, здійснюють теплові коливання. При цьому випадковим чином генерується кут та відстань зміщення.

МСА зовнішньої структури, паралельно із тепловими коливаннями, прагнуть вирівнятися вздовж однієї лінії та відштовхнути автомати внутрішньої структури. МСА зовнішньої структури, що мають трьох сусідів прагнуть вирівняти положення одного із сусідів відносно інших двох.

МСА, що імітують внутрішню структуру, паралельно із тепловими коливаннями, прагнуть відштовхнути автомати зовнішньої структури.

При умові неоднакової кількості ворсинок зовнішньої структури двигуна та зубців внутрішньої, існує імовірність переходу однієї з ворсинок, що дотична до вершини зубця, від одного сегменту до іншого за годинниковою стрілкою. Імовірність зворотного переходу менша.

Оскільки обертання здійснюється лише за рахунок імітації теплових коливань, структуру можна назвати вічним двигуном другого роду. Зрозуміло, що це є однією із безлічі можливих конфігурацій, що демонструють можливість застосування методу РКА до побудови клітинних двигунів, та дослідження функціональних можливостей структури, навіть при її незначній зміні.

Література:

1. Kar S., Nag K., Dutta A., Constales D. and Pal T. An improved Cellular Automata model of enzyme kinetics based on Genetic Algorithm. Chem. Eng. Sci., 2014. – 110. – P. 105 – 118.
2. Peplow M. The Tiniest Lego: A Tale of Nanoscale Motors, Switches and Pumps. Nature, 2015. – 525. – P. 18 – 21.