Ю.Ю.Тарасевич

Перколяция: теория приложения алгоритмы

УРСС

ББК 22.318, 22.18

Тарасевич Юрий Юрьевич

Перколяция: теория, приложения, алгоритмы: Учебное пособие.
М.: Едиториал УРСС, 2002. — 112 с., илл.

ISBN 5–354–00233–8

Монография посвящена различным аспектам теории перколяции — простейшей модели, описывающей фазовые переходы. Рассматриваются вопросы теории, приложения и алгоритмы для решения задач перколяции.

Книга ориентирована на студентов старших курсов физико-математических специальностей, аспирантов и научных работников.

Оригинал-макет подготовлен автором в пакете LaTeX 2ε,
текст опубликован в авторской редакции.

Издательство «Едиториал УРСС». 117312, г. Москва, пр-т 60-летия Октября, 9.
Лицензия ИД № 05175 от 25.06.2001 г. Подписано к печати 02.09.2002 г.
Формат 60×84/16. Тираж 960 экз. Печ. л. 7. Зак. № 48.

Отпечатано в типографии ООО «Рохос». 117312, г. Москва, пр-т 60-летия Октября, 9.

9 785354 002337 >

ISBN 5–354–00233–8

© Ю. Ю. Тарасевич, 2002
© Едиториал УРСС, 2002

Оглавление

Предисловие **5**

1 Введение в теорию перколяции **7**

1.1 Введение 7
1.2 Немного терминологии 10
1.3 Перколяция как критическое явление 13
1.4 Критические показатели и масштабная инвариантность . . . 13
1.5 Точно решаемые задачи теории перколяции 16
1.5.1 Перколяция на одномерной цепочке 16
1.5.2 Перколяция на дереве Кейли 18
1.5.3 Точные решения для некоторых плоских решеток . . 24
1.6 Перколяционный кластер и его подструктуры. 28
1.7 Структура перколяционного кластера 32
1.7.1 Модель Скал-Шкловского-де Жена 32
1.7.2 Модель капель и связей 33
1.7.3 Модель на основе ковра Серпинского 33
1.7.4 Модель на основе фрактала Гивена-Мандельброта . 34
1.7.5 Иерархическая модель 34
1.8 Формулы для оценки порога перколяции 36
1.8.1 Определения и оценки 36
1.8.2 Оценки Шера и Цаллена 37
1.8.3 «Универсальная формула» Галама и Можера 38
1.8.4 Порог перколяции для архимедовых решеток 39
1.9 Смешанная задача теории перколяции 39
1.10 Квантовая перколяция 41
1.11 Цветная перколяция 45
1.12 Диффузионный фронт 45

1.13 Инвазионная перколяция 47
1.14 Континуальная перколяция 48
1.15 Задача «иголок» и родственные проблемы 49
1.16 «Решеточные звери» и разложение в ряд 50
1.17 Метод ренорм-групп 52
1.17.1 Метод ренорм-групп для малых ячеек 52
1.17.2 Метод ренорм-групп для больших ячеек 60
1.17.3 ε–разложение 60

2 Алгоритмы **62**
2.1 Алгоритм Зиффа 62
2.2 Алгоритм Лиса 64
2.3 Алгоритм Хошена–Копельмана 64
2.4 Алгоритмы поиска в глубину и ширину 68
2.4.1 Алгоритм поиска в глубину 68
2.4.2 Алгоритм поиска в ширину 69
2.5 Специальные алгоритмы 71

3 Некоторые приложения теории перколяции **74**
3.1 Процессы гелеобразования 74
3.2 Применение теории перколяции для описания магнитных фазовых переходов 75

A Значения порогов перколяции для различных решеток **79**

B Элементарные сведения по теории графов **81**

C Производящие функции **90**
C.1 Применение метода производящих функций для определения порога перколяции на дереве Кэли 91

D Фракталы **93**
D.1 Фракталы в математике и физике 93
D.2 Размерности 98
D.2.1 Размерность самоподобия 98
D.2.2 Размерность по Хаусдорфу–Безиковичу 99
D.3 Определение фрактальной размерности кластера. 100

Литература **102**

. . . следует проявлять осторожность, объявляя, что некоторая область науки близка к завершению. . . . К моему удивлению, теория перколяции не мертва.

Дитрих Штауффер

Предисловие

Теории перколяции уже более пятидесяти лет. Ежегодно на Западе публикуются сотни статей, посвященных как теоретическим вопросам перколяции, так и ее приложениям. Опубликована несколько монографий, посвященных как теории, так и приложениям [38, 39, 60, 82, 89], а также обзоров [55, 86, 88]. К сожалению, в нашей стране о теории перколяции знают немногие. Во многом это связано с тем, что литература по теории перколяции на русском языке довольно скудна. Мне известна единственная книга отечественных авторов, вышедшая на русском языке и целиком посвященная перколяции [99]. Даже если добавить несколько книг, в том числе и переводных, где теории перколяции посвящены отдельные главы [24, 35, 49, 130], и перевод книги [60], — список оказывается не очень впечатляющим.

С одной стороны, ощущается потребность в книге, которая могла бы послужить учебником на начальном этапе знакомства с перколяцией. С другой стороны, монография, которая отражала бы последние достижения теории перколяции и состояние проблемы на сегодняшний день, тоже весьма актуальна. Эти две во многом взаимоисключающие друг друга задачи послужили толчком для написания книги. В какой мере удалось выполнить поставленную задачу, судить читателям.

Теория перколяции имеет дело с образованием связанных объектов в неупорядоченных средах. С точки зрения математика теорию, перколяции следует отнести к теории вероятности на графах. С точки зрения физика, перколяция — это геометрический фазовый переход. С точки зрения программиста — широчайшее поле для разработки новых алгоритмов. С точки зрения практика — простой, но мощный инструмент, позволяющий в едином подходе решать самые разнообразные жизненные задачи.

Теория перколяции привлекает к себе внимание специалистов по ряду причин [38]:

- легкие и элегантные формулировки задач теории протекания сочетаются с трудностью их решения;
- их решение требует объединения новых идей из геометрии, анализа и дискретной математики;
- физическая интуиция бывает весьма плодотворной при решении этих задач;
- техника, развитая для теории перколяции, имеет многочисленные приложения в других задачах о случайных процессах;
- теория перколяции дает ключ к пониманию иных физических процессов.

То, что перколяцией занимаются специалисты в разных областях, породило определенные проблемы: исследователи порой плохо ориентируясь в работах по перколяции, выполненных специалистами из другой предметной области. Гриммет пишет [39, p. 8]: «Перколяция стала предметом энергичных исследований математиков и физиков, каждая группа использует свой собственный язык». Штауффер призывает [90] специалистов в области компьютерных экспериментов читать работы специалистов в области математической физики и наоборот. Это способствовало бы, по его мнению, большему прогрессу в теории перколяции.

Мне хочется выразить особую благодарность профессору С. А. Просандееву, который познакомил меня с основными идеями теории перколяции; доктору С. ван дер Марку, совместная работа с которым и многочисленные дискуссии серьезно повлияли на становление моего нынешнего понимания теории перколяции; всем коллегам по перколяционному сообществу, общение с которыми — не всегда продолжительное, но всегда продуктивное, — способствовало написанию этой книге.

Глава 1

Введение в теорию перколяции

1.1 Введение

Исторически теория перколяции восходит к работам Флори (1941) [26] и Стокмайера (1943) [92], которые рассматривали процесс образования гелей при полимеризации. Однако, обычно начало теории перколяции связывают с публикацией в 1957 г. работы Броадбента и Хаммерсли [16]. Авторы ввели в обиход название «теория перколяции» и рассмотрели процесс с математической точки зрения. Термин перколяция использовался для противопоставления диффузии: если в случае диффузии мы имеем дело со случайным блужданием частицы в регулярной среде, то в случае перколяции речь идет о регулярном движении (например, течении жидкости или тока) в случайной среде.

В настоящее время перколяционные процессы рассматриваются математиками, физиками, химиками, программистами, инженерами. Оказалось, что перколяция является удобной моделью для описания широкого класса явлений, которые принято называть критическими. С другой стороны, задача оказалась весьма интересной и с точки зрения чистой математики.

Большинство результатов теории перколяции получено в результате компьютерного моделирования. При этом приходится проводить многие тысячи компьютерных испытаний на больших объектах, что потребовало

разработки эффективных алгоритмов.

Выяснилось, что теория перколяции имеет точки соприкосновения с рядом новых и перспективных направлений науки, например, перколяционные процессы могут приводить к самоорганизации и образованию структур, объекты, которые образуются при перколяции, являются фракталами.

Несмотря на то, что в теории перколяции получен ряд строгих результатов, а в ее применении достигнуты значительные успехи, она находится еще в процессе становления, многое еще предстоит понять, доказать, применить.

Что же такое перколяция? Поскольку перколяцией занимаются специалисты из разных областей знаний, то для описания перколяции используется два подхода. С одной стороны, математики применяют формальный подход, основанный на представлениях теории вероятности и теории графов, строгих доказательств и формальных обозначений. С другой стороны, естественники предпочитают более простой и наглядный подход, часто заменяя строгие доказательства ссылками на аналогию, интуицию и здравый смысл. Кажется разумным использовать для начального знакомства с теорией именно второй подход.

Рассмотрим квадратную сетку 3×3 (рис. 1.1). Закрасим часть квадратов черным цветом. В нашем случае их 3. Доля закрашенных квадратов составляет $p = \frac{N_{\text{черн.}}}{N} = \frac{1}{3}$. Каким образом мы вибираем квадратики для закрашивания? Во-первых, можно выбирать квадратики случайно и независимо; во-вторых, можно ввести какие-либо правила. В первом случае говорят о случайной перколяции (математики называют ее еще перколяцией Бернулли), во втором — о коррелированной.

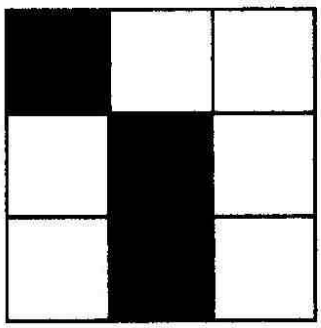


Рис. 1.1. Перколяция на квадратной решетке размером 3×3 клетки.

Одним из основных вопросов, на которые пытается ответить теория

перколяции, — при какой доле p_c закрашенных квадратов возникает цепочка черных квадратов, соединяющая верхнюю и нижнюю стороны нашей сетки? Легко сообразить, что для сетки конечного размера такие цепочки могут возникать при разных концентрациях (рис. 1.2). Однако, если размер сетки L устремить к бесконечности, то критическая концентрация станет вполне определенной (рис. 1.3). Это строго доказано. Такую критическую концентрацию называют *порог перколяции*.

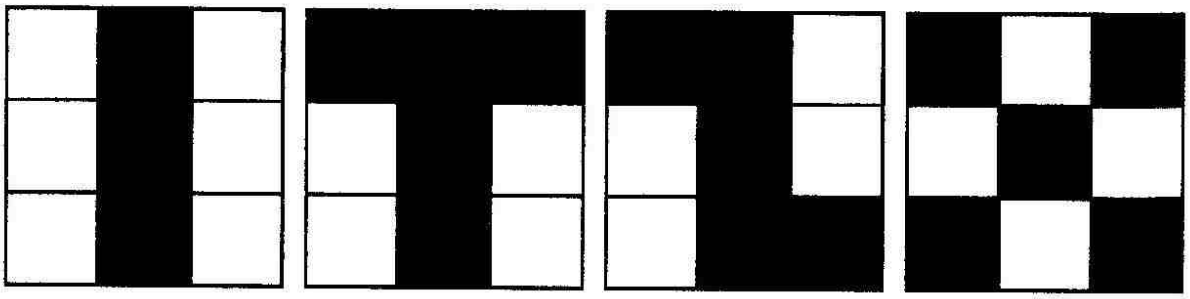


Рис. 1.2. Различные варианты заполнения решетки.

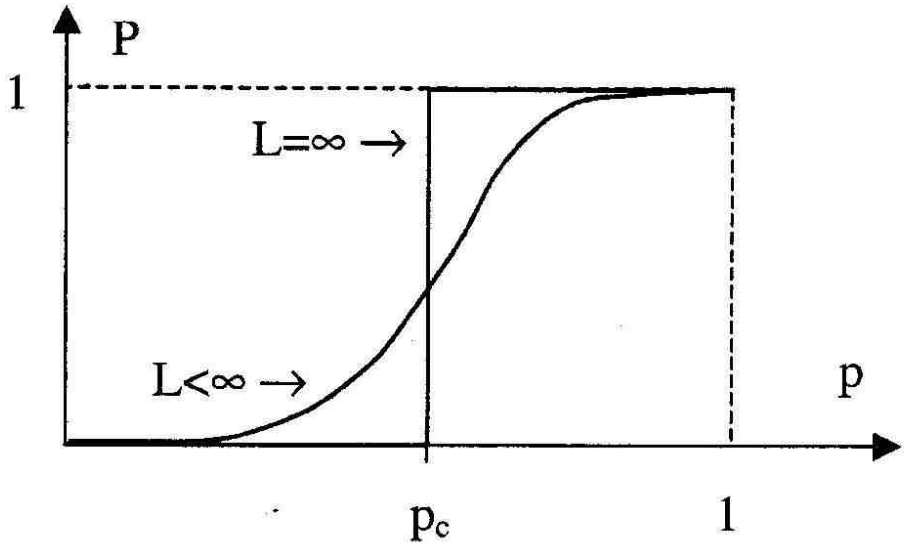


Рис. 1.3. Вероятность возникновения перколяции P в зависимости от доли заполненных узлов p. Гладкая кривая соответствует решетке конечного размера, ступенчатая — бесконечно большой решетке.

Может возникнуть резонный вопрос: а какой, собственно, смысл в этих задачах? Давайте представим, что черные квадраты — это проводник, а белые — изолятор. До тех пор, пока не возникнет цепочка

проводящих участков, связывающая верх и низ образца, образец будет изолятором. При возникновении цепочки ее свойства изменятся скачком, произойдет фазовый переход, образец станет проводником.

Если рассматривать черные квадратики в качестве молекул, то образование цепочки молекул, пронизывающей всю систему соответствует образованию геля. Если полагать, что черные квадраты — это микротрещины, то образование цепочки таких трещин приведет к разрушению, раскалыванию образца. Этот список легко можно продолжить.

Итак, польза теории перколяции, в частности, в том, что она позволяет описать процессы самой разной природы, когда при плавном изменении одного из параметров системы (концентрации чего-то) свойства системы меняются скачком.

1.2 Немного терминологии

Слово *перколяция* (percolation — англ.) означает протекание. В руской литературе можно встретить и теория перколяции, и теория протекания и даже теория просачивания. Название возникло в связи с тем, что ряд первых работ в этом направлении был посвящен процессам просачивания (протекания) жидкостей или газов через пористую среду. До сих пор это направление занимает существенную часть в работах по теории перколяции.

Пожалуй, наиболее распространенными задачами теории перколяции являются *решеточные задачи*: задача узлов и задача связей.

Решеточные модели в первую очередь представляют интерес с теоретической точки зрения, именно для них доказан ряд строгих утверждений и соотношений. К настоящему времени процессы протекания на решетках изучены и поняты достаточно хорошо. С другой стороны, эти задачи имеют и практическую значимость: даже такой простой модели оказывается достаточно, чтобы описать, например, фазовый переход парамагнетик-ферромагнетик, процесс распространения эпидемии или лесного пожара.

В химии теория перколяции применяется для описания процессов полимеризации или связывания маленьких молекул в макромолекулы (гели). В биологии распространение эпидемий можно описать с помощью модели связей. Эта же модель описывает пожар в лесу, если вероятность передачи инфекции от больного животного здоровому заменить на вероятность распространения огня от горящего дерева к соседнему. Кроме того, теория находит широкое применение для описания различных

неупорядоченных систем в химии и физике: пористые и аморфные материалы, включая и тонкие пленки; неупорядоченные ионные проводники; галактические структуры.

Рассмотрим бесконечную квадратную сетку. Физик назовет такую конструкцию периодической квадратной решеткой, а математик — бесконечным регулярным графом. Назовем точки пересечения линий *узлами* (в математических работах их обычно называют *вершинами*, в старых статьях можно встретить термин *атом*). Сами линии будем называть *связями* (математики используют термин *ребро*).

В задаче связей ищут ответ на вопрос: какую долю связей нужно удалить (перерезать), чтобы сетка распалась на две части? В задаче узлов блокируют узлы (удаляют узел, перерезают все входящие в узел связи) и ищут, при какой доле блокированных узлов сетка распадется (рис. 1.4). Понятно, что квадратная сетка является только одной из возможных моделей. Можно рассматривать перколяцию на треуголной, шестиугольной сетках, деревьях, трехмерных решетках, например, кубической, в пространстве с размерностью больше 3. Сетка не обязательно должна быть регулярной. Рассматриваются процессы и на случайных решетках.

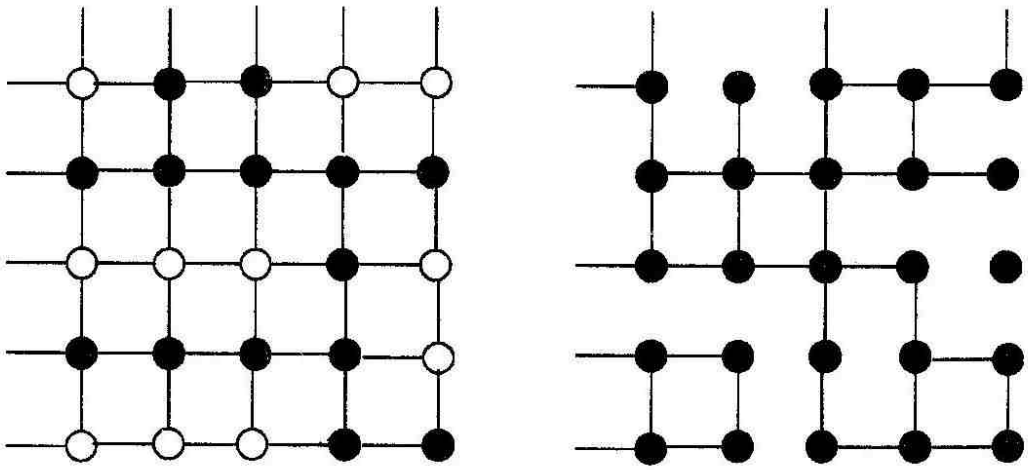


Рис. 1.4. Задача узлов (слева) и задача связей (справа) на квадратной решетке.

Цепочка связанных объектов, например, черных квадратов, называется в теории перколяции *кластер* (cluster — англ. — гроздь). Кластер, соединяющий две противоположные стороны системы, называется *перколяционным (percolating), бесконечным (infinity), стягивающим (spanning) или соединяющим (connecting)*. Изучение свойств соединяю-

щего кластера — еще одна из задач теории перколяции. Ниже порога перколяции имеются только кластеры конечного размера.

Кроме определения порога перколяции вычисляют следующие характеристики

$\langle N_s \rangle$ — среднее число кластеров размера s.

N — полное число ячеек.

$n_s(p) = \dfrac{\langle N_s \rangle}{N}$ — распределение кластеров по размерам.

$\sum\limits_s s\, n_s(p)$ — полное число занятых ячеек.

$s\, n_s(p)$ — количество занятых ячеек, принадлежащих кластерам размера s.

$w_s = \dfrac{s\, n_s(p)}{\sum\limits_s n_s(p)}$ —вероятность того, что случайно выбранный занятый узел принадлежит кластеру размера s.

$S = \sum\limits_s s\, w_s = \dfrac{\sum\limits_s s^2 n_s(p)}{\sum\limits_s s\, n_s(p)}$ — средний размер кластера.

$P_\infty(p) = \dfrac{N_\infty}{N_{\text{занятых}}}$ — вероятность того, что случайным образом выбранный занятый узел принадлежит стягивающему кластеру.

$\langle \mathbf{r} \rangle = \dfrac{1}{s} \sum\limits_{i=1}^{s} \mathbf{r_i}$ — радиус-вектор центра масс кластера.

$R_s^2 = \dfrac{1}{s} \sum\limits_{i=1}^{s} (\mathbf{r_i} - \langle \mathbf{r} \rangle)^2$ — радиус циркуляции.

$\xi(p)^2 = \dfrac{2 \sum\limits_s \langle R_s^2 \rangle s^2 n_s}{\sum\limits_s s^2 n_s}$ — длина корреляции.

Исследуют также следующие вопросы:

- структура субкритической и суперкритической фаз;
- что происходит вблизи порога перколяции;
- какова структура перколяционного кластера;
- каковы значения и свойства различных макроскопических величин, как, например, средний размер кластера;
- что происходит при изменении структуры решетки и размерности пространства.

щего кластера — еще одна из задач теории перколяции. Ниже порога перколяции имеются только кластеры конечного размера.

Кроме определения порога перколяции вычисляют следующие характеристики

$\langle N_s \rangle$ — среднее число кластеров размера s.

N — полное число ячеек.

$n_s(p) = \dfrac{\langle N_s \rangle}{N}$ — распределение кластеров по размерам.

$\sum\limits_s s\, n_s(p)$ — полное число занятых ячеек.

$s\, n_s(p)$ — количество занятых ячеек, принадлежащих кластерам размера s.

$w_s = \dfrac{s\, n_s(p)}{\sum\limits_s n_s(p)}$ —вероятность того, что случайно выбранный занятый узел принадлежит кластеру размера s.

$S = \sum\limits_s s\, w_s = \dfrac{\sum\limits_s s^2 n_s(p)}{\sum\limits_s s\, n_s(p)}$ — средний размер кластера.

$P_\infty(p) = \dfrac{N_\infty}{N_{\text{занятых}}}$ — вероятность того, что случайным образом выбранный занятый узел принадлежит стягивающему кластеру.

$\langle \mathbf{r} \rangle = \dfrac{1}{s} \sum\limits_{i=1}^{s} \mathbf{r_i}$ — радиус-вектор центра масс кластера.

$R_s^2 = \dfrac{1}{s} \sum\limits_{i=1}^{s} (\mathbf{r_i} - \langle \mathbf{r} \rangle)^2$ — радиус циркуляции.

$\xi(p)^2 = \dfrac{2 \sum\limits_s \langle R_s^2 \rangle s^2 n_s}{\sum\limits_s s^2 n_s}$ — длина корреляции.

Исследуют также следующие вопросы:

- структура субкритической и суперкритической фаз;
- что происходит вблизи порога перколяции;
- какова структура перколяционного кластера;
- каковы значения и свойства различных макроскопических величин, как, например, средний размер кластера;
- что происходит при изменении структуры решетки и размерности пространства.

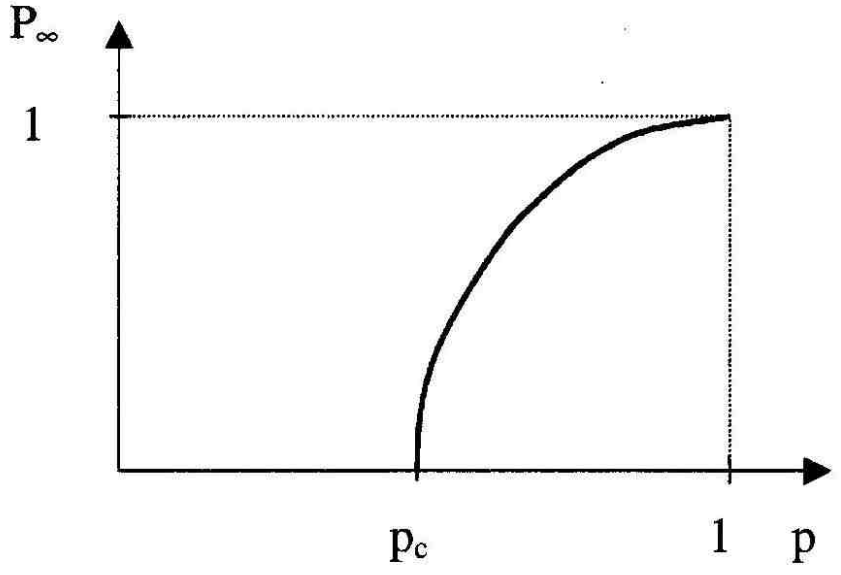


Рис. 1.5. Схематическое изображение зависимости $P_\infty(p)$.

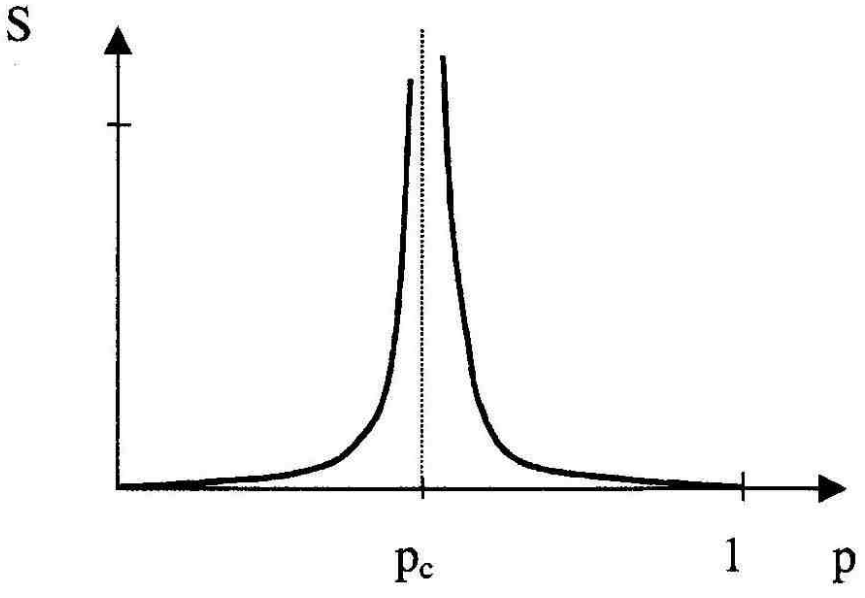


Рис. 1.6. Схематическое изображение зависимости $S(p)$.

перколяции или критическая концентрация разделяет две фазы: в одной фазе существуют конечные кластеры, в другой существует один бесконечный кластер. Рассмотрим, например, магнитный фазовый переход. При низких температурах некоторые материалы имеют ненулевую спонтанную намагниченность. При увеличении температуры спонтанная намагниченность непрерывно уменьшается и при критической температуре исчезает. В перколяции концентрация занятых узлов играет ту же роль, что и температура в температурных фазовых переходах. Вероятность, что узел принадлежит бесконечному кластеру, аналогична параметру порядка в теории температурных фазовых переходов. Многие важные характеристики кластера (длина корреляции, среднее число узлов) вблизи перехода описываются показательной функцией с различными критическими показателями.

$$\sum_s n_s(p) \propto |p - p_c|^{2-\alpha}$$

$$P_\infty(p) = \sum_s s\, n_s(p) \propto |p - p_c|^{\beta}$$

$$S(p) = \sum_s s^2\, n_s(p) \propto |p - p_c|^{\gamma}$$

$$\sum_s s\, n_s(p) e^{-hs} \propto h^{1/\delta}$$

$$\xi(p) \propto (p_c - p)^{-\nu}$$

Эти показатели являются универсальными, не зависящими от вида решетки, типа перколяции, а только от размерности пространства задачи (Таблица 1.1). Критические показатели связаны между собой соотношениями

$$\alpha = 2 - d\nu = 2 - 2\beta - \gamma,$$

$$\delta = \frac{\gamma}{\beta} + 1,$$

$$\eta = 2 - \frac{\gamma}{\nu},$$

$$2\beta + \gamma = \nu d,$$

где d — размерность пространства. Это соотношение следует из *масштабной инвариантности* или *скейлинга* — неизменности уравнений при изменении всех расстояний в одинаковое число раз.

Таблица 1.1. Значения критических показателей [27,125]

	Размерность пространства				
	$d=2$	$d=3$	$d=4$	$d=5$	$d \geqslant 6$
β	5/36	0.417 ± 0.003	0.5	0.7	1
ν	4/3	0.875 ± 0.008	0.7	0.6	1/2
γ	43/18	1.795 ± 0.005	1.8	1.6	1

1.5 Точно решаемые задачи теории перколяции

Только очень незначительное число результатов в теории перколяции получено точно. Некоторые аналитические результаты будут изложены в этом разделе.

1.5.1 Перколяция на одномерной цепочке

Рассмотрим одномерную цепочку, в которой каждый узел занят случайным образом с вероятностью p. Кластеры представляют собой группы соседних занятых узлов. Узлы, соседствующие с крайним левым и крайним правым узлами должны быть пустыми. Поскольку бесконечный кластер может возникнуть, только если все узлы в цепочке заняты, то, следовательно, $p_c = 1$. Итак, такие величины как корреляционная длина или среднее число узлов в кластере могут быть вычислены только ниже p_c.

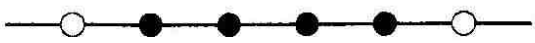


Рис. 1.7. Кластер на одномерной цепочке.

Начнем с корреляционной длины ξ и корреляционной функции $g(r)$, которая представляет собой среднее число узлов в том же самом кластере

на расстоянии r от произвольно выбранного узла. Поскольку два узла, разделенных расстоянием r, принадлежат одному и тому же кластеру, то все $r-1$ узлов между ними должны быть заняты. Так как узлы заняты случайным образом с вероятностью p,

$$g(r) = 2p^r \tag{1.1}$$

Множитель 2 возникает из того факта, что узел может быть или слева или справа от исходного узла. Корреляционная длина определяется как среднее расстояние между двумя узлами, принадлежащими одному и тому же кластеру,

$$\xi^2 = \frac{\sum\limits_{r=1}^{\infty} r^2 g(r)}{\sum\limits_{r=1}^{\infty} g(r)} = \frac{\sum\limits_{r=1}^{\infty} r^2 p^r}{\sum\limits_{r=1}^{\infty} p^r}$$

Эти суммы могут быть легко вычислены. Тогда

$$\xi^2 = \frac{1+p}{(1-p)^2} = \frac{1+p}{(p_c-p)^2}$$

Таким образом, в одномерном случае $\nu = 1$. Используя этот результат, можно выразить корреляционную функцию $g(r)$ вблизи p_c

$$\ln g(r) \propto -\frac{r}{\xi},$$

где корреляционная длина ξ равна расстоянию, на котором корреляционная функция $g(r)$ уменьшается в e раз.

Теперь рассмотрим среднюю массу кластера (среднее число узлов в кластере) S. Средняя масса может быть записана как

$$S = 1 - \sum_{r=1}^{\infty} g(r), \tag{1.2}$$

где 1 возникает из-за исходного узла, который по предположению является занятым. Тогда из (1.2) следует, что

$$S = \frac{1+p}{1-p} \propto \frac{1}{p_c - 1} \tag{1.3}$$

и, следовательно, в одномерном случае $\gamma = 1$.

Величина, которая играет центральную роль в описании кластерной статистики, это вероятность того, что данный узел решетки принадлежит кластеру из s узлов. В случае цепочки эта вероятность равна $sp^s(1-p)^2$. Множитель s возникает из-за того, что выбранный узел может быть любым из s узлов данного кластера. Множитель $(1-p)^2$ появляется из-за того, что кластер обязан быть окружен пустыми узлами. В одномерном случае таких граничных пустых узла только 2. Обычно также определяют соответствующую вероятность в пересчете на 1 узел кластера n_s

$$n_s = p^s(1-p)^2. \tag{1.4}$$

Эта величина также может быть интерпретирована как число кластеров размера s, деленное на полное число узлов в системе. По определению, $\sum_{s=1}^{\infty} sn_s = p$, что может быть легко проверено с помощью (1.4). Средняя масса кластера S связана с n_s посредством выражения

$$S = \sum_{s=1}^{\infty} s \left(\frac{sn_s}{\sum\limits_{s=1}^{\infty} sn_s} \right) \tag{1.5}$$

Здесь множитель в скобках представляет собой вероятность того, что занятый узел принадлежит кластеру из s узлов. Сумма в (1.3) может быть легко вычислена и, естественно, дает тот же самый результат, что и (1.3).

Недостатком одномерной цепочки является то, что выше порога перколяции невозможно рассматривать критические свойства системы. Однако ниже порога перколяции система проявляет критическое поведение, подчиняющееся степенному закону, подобно системам большей размерности.

1.5.2 Перколяция на дереве Кейли

Еще одной системой, для которой можно получить аналитические результаты, является дерево Кейли (Кэли), называемое также решеткой Бете. Дерево Кейли имеет то преимущество, что порог перколяции на нем меньше 1, следовательно, могут быть рассмотрены режимы, как ниже, так и выше порога перколяции.

Дерево Кейли — это структура без петель, которая строится следующим образом. Начнем с центрального узла, из которого исходят z ветвей

единичной длины. Конец каждой ветви также является узлом. Таким образом, мы получаем z узлов, которые образуют первую оболочку дерева Кейли. Из каждого узла выходит $z-1$ новых ветвей, образую $z(z-1)$ узлов второй оболочки. Процесс продолжается до бесконечности. Так получается бесконечное дерево Кейли с z ветвями, исходящими из каждого узла. В случае $z=2$ дерево превращается в одномерную цепочку.

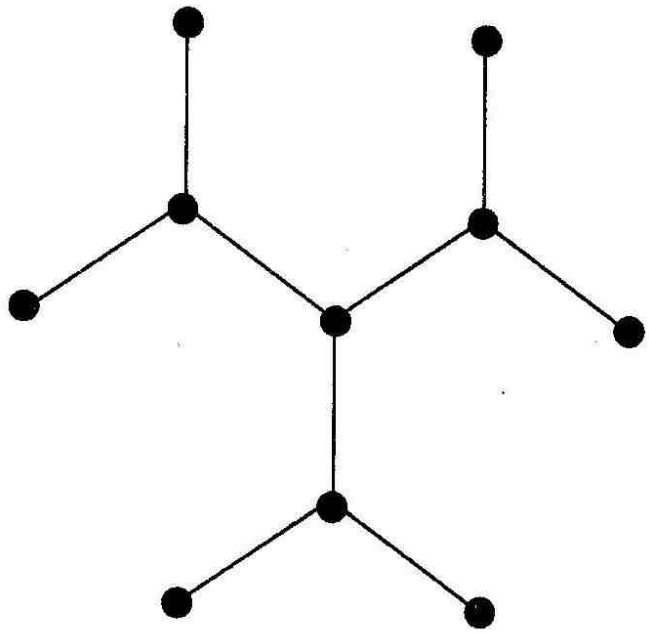


Рис. 1.8. Дерево Кейли при $z=3$. Показаны только первые два слоя.

В системе нет петель, поскольку любые два узла соединены только одним путем. Евклидово расстояние r не играет в данном случае роли, решетка описывается с помощью химического расстояния ℓ между узлами. Например, химическое расстояние между центральным узлом и произвольным узлов, принадлежащим ℓ-той оболочке, в точности равно ℓ.

ℓ-тая оболочка дерева содержит ровно $z(z-1)^{\ell-1}$ узлов, экспоненциально увеличиваясь с ростом ℓ. В d–мерной евклидовой решетке, когда d конечно, число узлов на расстоянии ℓ увеличивается как ℓ^{d-1}. Поскольку экспоненциальная зависимость может рассматриваться как степенная с бесконечным показателем, то дерево Кейли может рассматриваться как решетка бесконечной размерности. Из свойства универсальности можно ожидать, что критические показатели для дерева Кейли будут те же самые, что и для любой решетки с бесконечной размерностью. Более того, верхняя критическая размерность для перколяции равна $d_c=6$, то есть критические показатели будут те же самые для всех размерностей $d \geqslant d_c$.

Итак, мы ожидаем, что критические показатели для дерева Кейли те же самые, что и для $d \geqslant d_c$.

Как и в одномерном случае, мы начнем с вычисления корреляционной функции $g(\ell)$, которая определяется как среднее число узлов того же самого кластера, находящихся на расстоянии ℓ от произвольно выбранного занятого узла. Поскольку два узла на расстоянии ℓ принадлежат одному и тому же кластеру, то и все $\ell-1$ узла между ними должны быть заняты. Поскольку узлы заняты случайным образом с вероятностью p и каждая оболочка содержит $z(z-1)^{\ell-1}$ узлов, то

$$g(\ell) = z(z-1)^{\ell-1}p^{\ell} = \frac{z}{z-1}\left((z-1)p\right)^{\ell} \tag{1.6}$$

Для $z = 2$ дерево Кейли превращается в одномерную цепочку и уравнение (1.6) переходит в (1.1).

Критическая концентрация может быть легко получена из (1.6). Для ℓ, стремящегося к бесконечности, корреляционная функция стремится экспоненциально к нулю для $p(z-1) < 1$ и расходится для $p(z-1) > 1$. Соответственно бесконечный кластер может появиться только, если $p \geqslant 1/(z-1)$. Следовательно, для дерева Кейли

$$p_c = \frac{1}{z-1} \tag{1.7}$$

Из (1.6) можно легко вычислить корреляционную длину ξ_ℓ в ℓ пространстве

$$\xi_\ell^2 = \frac{\sum\limits_{\ell=1}^{\infty} \ell^2 g(\ell)}{\sum\limits_{\ell=1}^{\infty} g(\ell)} \tag{1.8}$$

Как и для линейной цепочки, сумма может быть легко вычислена и дает

$$\xi_\ell^2 = p_c \frac{p_c + p}{(p_c - p)^2}, \text{ при } p < p_c. \tag{1.9}$$

Итак, корреляционный показатель в ℓ пространстве равен 1 как и в одномерном случае. Как и в одномерном случае, средняя масса конечного кластера S может быть записана как

$$S = 1 + \sum_{\ell=1}^{\infty} g(\ell) \tag{1.10}$$

Подставляя (1.6) в (1.10), находим

$$S = p_c \frac{p_c + p}{p_c - p}, \text{ при } p < p_c. \tag{1.11}$$

Полученное выражение является обобщением результата, полученного для одномерного случая (1.3). Соответственно, для дерева Кейли $\gamma = 1$.

Теперь рассмотрим $n_s(p)$ — вероятность того, что произвольно выбранный узел дерева Кейли принадлежит кластеру размера s. В случае одномерной цепочки n_s была просто произведением вероятности p^s того, что s узлов заняты, на вероятность $(1-p)^2$ того, что 2 узла на периметре пустые.

Для одного кластера размером s имеется только одна возможная реализация. В общем, вероятность обнаружить кластер, состоящий из s узлов и имеющий периметр t равна $p^s(1-p)^t$ и имеется более одной реализации для кластера размера s. Кластеры с одним и тем же s могут иметь различные t. На квадратной решетке, например, кластер из трех узлов может иметь или семь или восемь узлов периметра, в зависимости от того, образует узлы соответственно линию или прямой угол. Итак, можно определить величину $g_{s,t}$, которая дает число конфигураций кластера из s узлов, с периметром t. Для кластера из 3 узлов на квадратной решетке $g_{3,7} = 4$ и $g_{3,8} = 2$. Общее выражение для n_s имеет вид

$$n_s = \sum_t g_{s,t} p^s (1-p)^t. \tag{1.12}$$

На дереве Кейли в противоположность квадратной решетке, имеется единственное соотношение между s и t. Кластер, состоящий из одного узла, окружен z узлами периметра. Кластер, состоящий из двух узлов, окружен $z + (z-2)$ пустыми узлами. В общем, кластер размера s имеет на $z-2$ узлов периметра больше, чем кластер из $s-1$ узла. Обозначая число узлов периметра кластера из s узлов через $t(s)$, получаем

$$t(s) = z + (s-1)(z-2). \tag{1.13}$$

Так для дерева Кейли уравнение (1.12) превращается в

$$n_s(p) = g_s p^s (1-p)^{2+(z-2)s} = g_s (1-p)^2 \left(p(1-p)^{z-2}\right)^s, \tag{1.14}$$

где g_s — просто число конфигураций кластера из s узлов. Заметим, что уравнение (1.14) является общим и справедливо для всех значений p.

Нас интересует поведение n_s вблизи критической концентрации. Разложим $p(1-p)^{z-2}$ в ряд вблизи точки $p_c = (z-1)^{-1}$.

$$n_s(p) \propto n_s(p_c) f_s(p), \tag{1.15}$$

где

$$f_s(p) = \left(1 - \frac{(p-p_c)^2}{2p_c^2(1-p_c)}\right)^s$$

экспоненциально уменьшается для больших s,

$$f_s(p) = \exp(-cs)$$

и

$$c \propto (p-p_c)^2.$$

Соответственно вблизи p_c $f_s(p)$ является функцией только одной переменной $(p-p_c)s^\sigma$ с $\sigma = 1/2$. Этот результат справедлив для всех p как слева, так и справа от p_c. Показатель σ показывает, как быстро уменьшается число кластеров размера s как функция s вблизи порога перколяции. На пороге перколяции это уменьшение описывается множителем $f_s(p)$. В принципе, для дерева Кейли возможно получить точное значение для g_s и, следовательно, для $n_s(p_c)$, используя комбинаторные соображения. Вместо этого мы предположим, что $n_s(p_c)$ подчиняется степенному закону

$$n_s(p_c) \propto s^{-\tau} \tag{1.16}$$

Тогда показатель τ может быть определен из (1.2) (1.15)

$$S = \frac{1}{p}\sum_s s^2 n_s(p) \propto \sum_s s^{2-\tau} e^{-cs} \propto \int_1^\infty s^{2-\tau} e^{-cs}\, ds. \tag{1.17}$$

Подставляя $z = cs$, получаем

$$S \propto c^{\tau-3} \int_c^\infty z^{2-\tau} e^{-z}\, dz. \tag{1.18}$$

Для $\tau < 3$ интеграл сходится для c, стремящихся к 0, и мы получаем $S \propto |p-p_c|^{(\tau-3)/\sigma}$ или

$$\gamma = \frac{3-\tau}{\sigma} \tag{1.19}$$

Поскольку $\gamma = 1$ и $\sigma = 1/2$, получаем $\tau = 5/2$, что согласуется с нашим предположением о том, что $\tau < 3$.

Теперь рассмотрим P_∞. Имеется простое соотношение между n_s и P_∞. Каждый узел решетки либо пустой с вероятностью $1-p$, либо заполненный и принадлежит бесконечному кластеру с вероятностью pP_∞, либо заполненный и не принадлежит бесконечному кластеру с вероятностью $p(1-P_\infty) = \sum_s sn_s$. Это приводит к точному соотношению

$$P_\infty = 1 - \frac{1}{p}\sum_s sn_s, \tag{1.20}$$

которое мы используем для определения показателя β. Ниже порога перколяции $\sum_s sn_s = p$ и $P_\infty = 0$.

Если попытаться, как мы делали ранее, заменить сумму на интеграл, то интеграл будет расходиться при c стремящемся к 0 и не может рассматриваться как константа. Чтобы избежать этой искусственной расходимости, запишем (1.20) в виде

$$P_\infty = \frac{1}{p}\sum_s s(n_s(p_c)n_s(p)) + (p-p_c)/p. \tag{1.21}$$

Эта сумма пропорциональна

$$c^{\tau-2}\int_c^\infty z^{1-\tau}(1-e^{-z})\,dz.$$

Поскольку для малых z $1-e^{-z} \approx z$, интеграл больше не расходится и

$$P_\infty \propto c^{\tau-2} + \text{const} \times (p-p_c). \tag{1.22}$$

Откуда

$$\beta = \frac{\tau-2}{\sigma} \tag{1.23}$$

Таким образом, для дерева Кейли $\beta = 1$. Заметим, что для дерева Кейли оба слагаемых в (1.22) имеют одинаковый порядок. Для обычных решеток то же самое выражение может быть использовано для нахождения критических показателей. Поскольку $(\tau-2)/\sigma < 1$, то первое слагаемое доминирует.

P_∞ и S могут рассматриваться в качестве первого и второго момента функции распределения кластеров $n_s(p)$. Нулевой момент $M_0 = \sum_s n_s$ представляет среднее число кластеров на узел решетки.

$$M_0 = \sum_s n_s \propto |p - p_c|^{2-\alpha},$$

что позволяет определить критический показатель α. Сумма может вычислена так, как это делалось выше, что дает

$$2 - \alpha = \frac{\tau - 1}{\sigma},$$

откуда для дерева Кейли $\alpha = -1$.

Следует заметить, что в отличие от критической концентрации p_c, критические показатели α, β, γ, σ, τ не зависят от z — факт, который отражает свойство универсальности критических показателей.

Как уже упоминалось ранее, мы ожидаем, что эти показатели будут те же самые для всех решеток с $d \leqslant d_c = 6$. Особую роль играет показатель ν, который характеризует корреляционную длину ξ_ℓ в химическом пространстве. Поскольку евклидово расстояние не имеет значения для дерева Кейли, мы не можем определить корреляционную длину в r пространстве. Однако свойства ξ в пространстве r для случая могут быть получены из следующих аргументов. Выше критической размерности корреляции между двумя узлами решетки более не важны, и любой путь путь на кластере будет подобен случайному блужданию, тогда

$$r^2 \propto \ell$$

Из этого уравнения следует, что $\tilde{\nu} = 1/d_{min} = d_\ell/d_f = 1/2$ и, следовательно, $\xi \propto \xi_\ell^{1/2}$. Поскольку $\xi_\ell \propto |p - p_c|^{-1}$, имеем $\nu = 1/2$ в r-пространстве для всех решеток при $d \leqslant 6$. Из соотношения $d_f = d - \beta/\nu$ и $\beta = 1$ получаем, что $d_f = 4$, $d_\ell = 2$. Поскольку критическая размерность равна 6, можно ожидать ту же самую фрактальную размерность и для пространств большей размерности. Итак, бесконечный перколяционный кластер даже в пространстве бесконечной размерности имеет размерность 4.

1.5.3 Точные решения для некоторых плоских решеток

Еще в 1964 г. Сайкс и Эссам [95] нашли пороги перколяции для некоторых плоских решеток. На многие годы эти результаты оставались единственными точными значениями порогов перколяции. Хотя в последствии

были найдены точные значения порогов перколяции еще для нескольких плоских решеток, до сих пор не известны точные значения порогов перколяции для пространств большей размерности.

Покрывающая решетка L^c получается из исходной L посредством преобразования связи в узел (bond-to-site transformation): каждая связь исходной решетки заменяется на узел новой (покрывающей решетки), узел покрывающей решетки занят или свободен соответственно тому, целая или разорванная связь в исходной решетке; узлы покрывающей решетки связаны между собой, если соответствующие ребра исходной решетки имели общий узел.[1] Задача связей на исходной решетке эквивалентна задаче узлов на покрывающей решетке. В связи с этим задачу узлов считают более общей и зачастую ограничиваются только ее рассмотрением.

Очевидно, что

$$p_{cb}(L) = p_{cs}(L^c) \tag{1.24}$$

Соответствующая (matching) L^M *или дуальная (dual)* и исходная решетки образуют дополнительную пару. Предполагается, что между решетками существует взаимно однозначное соответствие: каждое ребро исходной решетки пересекается одним ребром дуальной (соответствующей). Более того, предполагается, что если ребро исходной решетки целое, то пересекающее ее ребро дуальной — разорвано и наоборот. Соответствующая решетка определяется следующим образом: в середине каждой грани исходной решетки ставят новый узел (узел дуальной решетки), которые соединяют друг с другом, если они лежат на соседних гранях. Если соответствующая решетка совпадает с исходной, то исходную решетку называют *самодуальной* (self-matching, self-dual). Примером такой решетки является квадратная.

Можно ввести соответствие между задачей связей на одной решетки и задачей узлов на другой. Такой соответствующей парой будут треугольная и квадратная решетки.

Сайкс и Эссам [95] доказали, что

$$p_c(L) + p_c(L^M) = 1 \tag{1.25}$$

[1]Это и последующие определения, принятые у физиков, рекомендуется сравнить с формальными и строгим математическим определением, данным в Приложении В.

Триангулированные решетки

Для всех триангулированных решеток, т. е. для решеток, все грани которых — треугольники, следует, что порог перколяции в задаче узлов $p_c = 1/2$.

Квадратная решетка

Из соотношения (1.25) следует, что порог перколяции в задаче связей на квадратной решетке равен $1/2$.

Треугольная решетка

Сайкс и Эссам дополнительно доказали с использование преобразования «звезда–треугольник», что в задаче связей для треугольной решетки порог перколяции равен единственному расположенному между 0 и 1 корню кубического уравнения

$$1 - 3p + p^3 = 0$$

Откуда, $p_c = 2\sin(\pi/18) \approx 0.347296\ldots$.

Шестиугольная решетка

Поскольку шестиугольная решетка является дуальной для треугольной (см. рис. B.9 на стр. 89), то из последней формулы и (1.25) следует, что $p_c = 1 - 2\sin(\pi/18) \approx 0.652704\ldots$.

Решетка Кагоме

Поскольку решетка Кагоме является покрывающей для шестиугольной решетки (рис. 1.9), то последнее значение определяет порог перколяции задачи связей на решетке Кагоме.

Решетка $(3, 12^2)$

Порог перколяции для решетки $(3, 12^2)$[2] может быть определен точно [94]. Доказательство основывается на сходстве структуры этой решетки и решетки Кагоме. На рис. 1.10 решетка $(3, 12^2)$ показана с выделенными связями, образующими треугольники, и тонкими линиями,

[2]Смысл обозначения разъясняется в разделе 1.8.4.

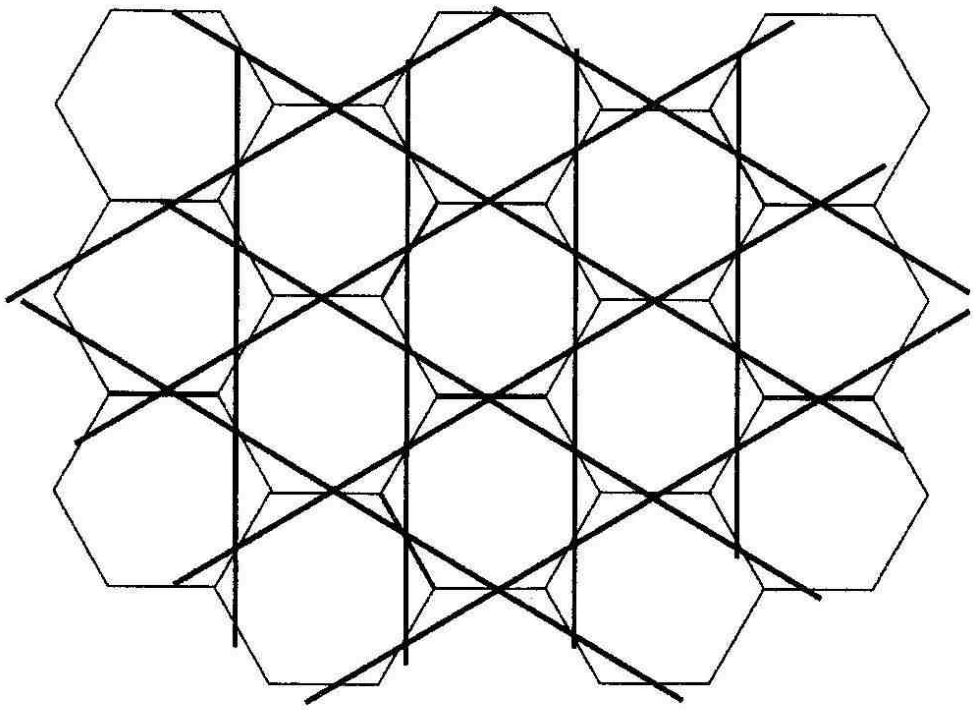


Рис. 1.9. Шестиугольная решетка и ее покрывающая — решетка Кагоме.

соединяющими эти треугольники. Если длину тонких линий устремить к нулю, то решетка $(3, 12^2)$ перейдет в решетку Кагоме. Соответственно узлы на концах тонких линий, обозначенные кружочками, сольются и станут эквиваленты одному узлу решетки Кагоме.

Пусть обе решетки находятся на пороге перколяции и p — вероятность того, что данный узел решетки $(3, 12^2)$ занят. Тогда p^2 — вероятность того, что оба узла на тонких линиях заняты и соответствующее ребро (связь) проводящая. Эта связь эквивалента единственному узлу решетки Кагоме. Порог перколяции решетки Кагоме равен $1 - 2\sin\left(\frac{\pi}{18}\right)$, следовательно, для решетки $(3, 12^2)$

$$\left(1 - 2\sin\left(\frac{\pi}{18}\right)\right)^{\frac{1}{2}} = 0.807900764\ldots \tag{1.26}$$

Решетка «галстук-бабочка»

Это необычное название — «галстук-бабочка» (bowtie) — закрепилось в перколяционном сообществе за решеткой, состоящей из квадратных и треугольных граней (рис. 1.11). Используя преобразование треугольник–звезда, удалось определить точное значение порога перколя-

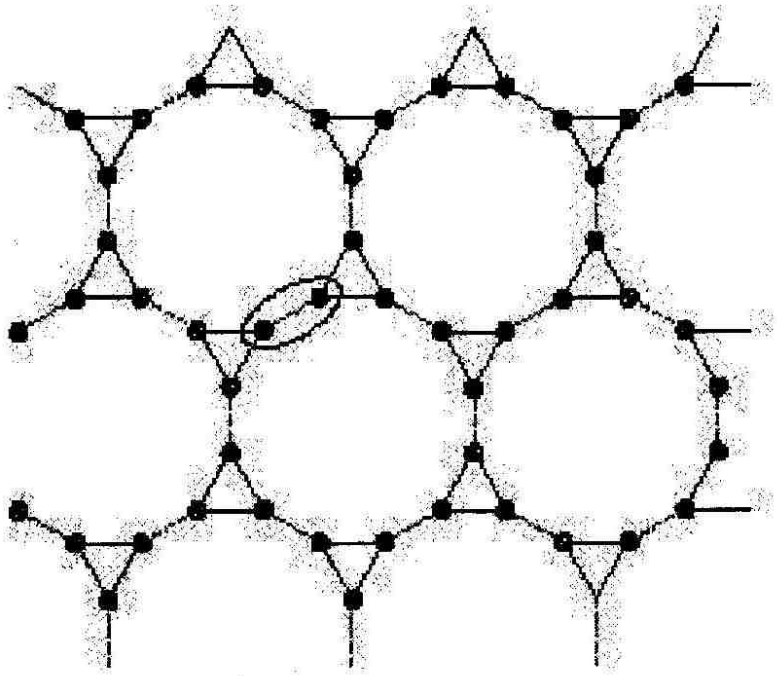


Рис. 1.10. Решетка $(3, 12^2)$

ции для задачи связей на этой решетке [104]. Порог перколяции определяется единственным корнем $p_{\bowtie}$, лежащем на интервале $(0, 1)$, уравнения $1 - p - 6p^2 + 6p^3 - p^5 = 0$ и приближенно равен 0.404518. Соответственно, для дуальной решетки порог перколяции равен $1 - p_{\bowtie}$.

1.6 Перколяционный кластер и его подструктуры.

Перколяционный кластер является фрактальным образованием, в котором в свою очередь, можно выделить иные фрактальные подструктуры. *Остов кластера* (backbone) (в русскоязычной литературе часто неправильно переводится как скелет) — токопроводящая часть кластера (рис. 1.12). *Мертвые концы* (dangling ends) — части кластера, соединенные с остовом посредством одного узла (связи). Мертвые концы составляют большую часть кластера, однако, не участвуют в проводимости. *Красные связи* (red bonds) — одиночные связи, при разрушении которых перколяционный кластер перестает проводить ток. *Скелет кластера* (skeleton) — объединение всех кратчайших путей от данного узла до узлов на заданном расстоянии. *Эластичный остов* (elastic backbone) — объединение всех кратчайших путей между двумя данными узлами. *Обо-*

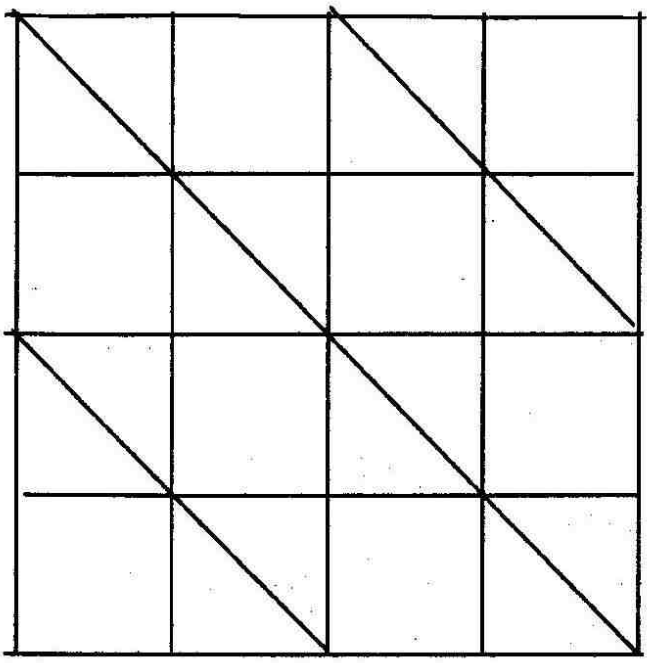


Рис. 1.11. Решетка «галстук-бабочка».

лочка (hull) или *внешний периметр* (external perimeter) состоит из тех узлов кластера, которые соприкасаются с пустыми узлами и соединены с бесконечностью посредством пустых узлов. *Полный периметр* включает также пустоты внутри кластера (рис. 1.13).

Часто рассматривают *неэкранированный внешний периметр или достижимый внешний периметр.* При внимательном рассмотрении рис. 1.13 становится понятным, что частица конечного размера, двигаясь извне, не сможет достичь многие участки внешнего периметра, т. к. проходы к ним слишком узки. Чем крупнее частица, тем меньше для нее длина достижимого внешнего периметра.

Все эти подструктуры описываются различными фрактальными размерностями (см. Таблицу 1.1), для ряда из них на сегодняшний день значения получены только путем компьютерного моделирования.

Выше порога перколяции масса кластера (число узлов кластера) внутри сферы радиуса r зависит как

$$M(r) \propto r^{d_f}.$$

В случае случайного фрактала масса кластера должна определяться путем усреднения по многим конфигурациям или многим различным центрам сфер внутри одного и того же бесконечного кластера.

Ниже порга перколяции средний размер конечного кластера описы-

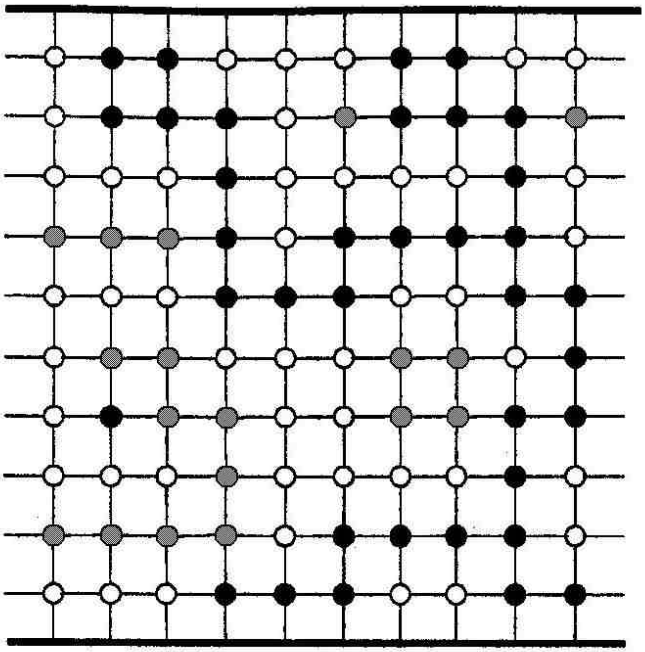


Рис. 1.12. Перколяционный кластер и его остов. Задача узлов на квадратной решетке. Узлы остова отмечены черным цветом; узлы, принадлежащие мертвым концам, — серым.

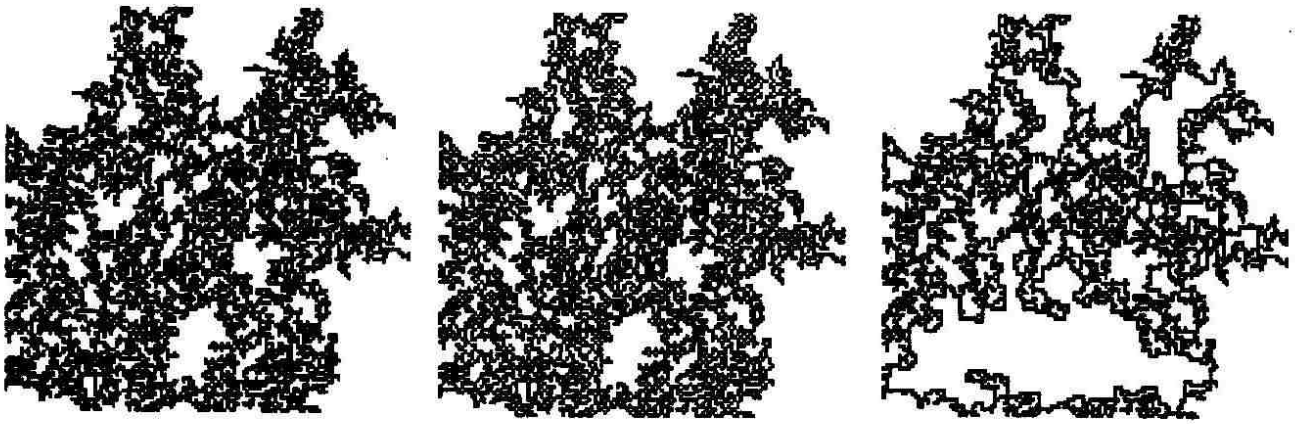


Рис. 1.13. Перколяционный кластер, его полный и внешний периметр.

Таблица 1.2. Фрактальные размерности подструктур перколяционного кластера [27]

Фрактальная размерность	Размерность пространства		
	$d = 2$	$d = 3$	$d \geqslant 6$
Размерность кластера $d_f = d - \frac{\beta}{\nu}$	91/48	2.54 ± 0.008	4
Размерность скелета d_l	1.678 ± 0.005	1.84 ± 0.02	2
Размерность скелета $d_{min} = \frac{1}{\nu}$	1.13 ± 0.004	1.374 ± 0.004	2
Размерность «красных связей» d_{red}	3/4	1.143 ± 0.01	2
Размерность оболочки d_h	7/4	2.548 ± 0.014	4
Размерность остова d_B	1.62 ± 0.02	1.855 ± 0.015	2
d_l^B	1.45 ± 0.02	1.37 ± 0.03	1

вается корреляционной длинной ξ. Выше порога перколяции корреляционная длина характеризует средний размер пустот внутри бесконечного кластера. На пороге перколяции корреляционная длина расходится. Поскольку корреляционная длина выше порога перколяции имеет конечное значение, то бесконечный кластер самоподобен на расстояниях меньше ξ. Можно рассматривать $\xi(p)$ в качестве типичного расстояния, вплоть до которого бесконечный кластер является самоподобным и может рассматриваться как фрактал. На масштабах длин больших ξ структура кластера уже не является самоподобной, и кластер можно рассматривать как однородный. Переход от фрактального к однородному состоянию принято называть *кроссовер* (рис. 1.14).

Итак, на расстояниях меньше корреляционной длины бесконечный кластер имеет фрактальную структуру. На растояниях бóльших ξ имеется однородная структура, состоящая из ячеек с характерным размером ξ.

$$M(r) \propto \begin{cases} r^{d_f}, & \text{если } r \ll \xi \\ r^{d}, & \text{если } r \gg \xi \end{cases}$$

Обычно считают, что ниже порога перколяции нет стягивающего (бесконечного кластера), а выше порога перколяции такой кластер существует только один. Последнее утверждение доказано строго. Считают, что и на пороге перколяции имеется только один бесконечный кластер. Как

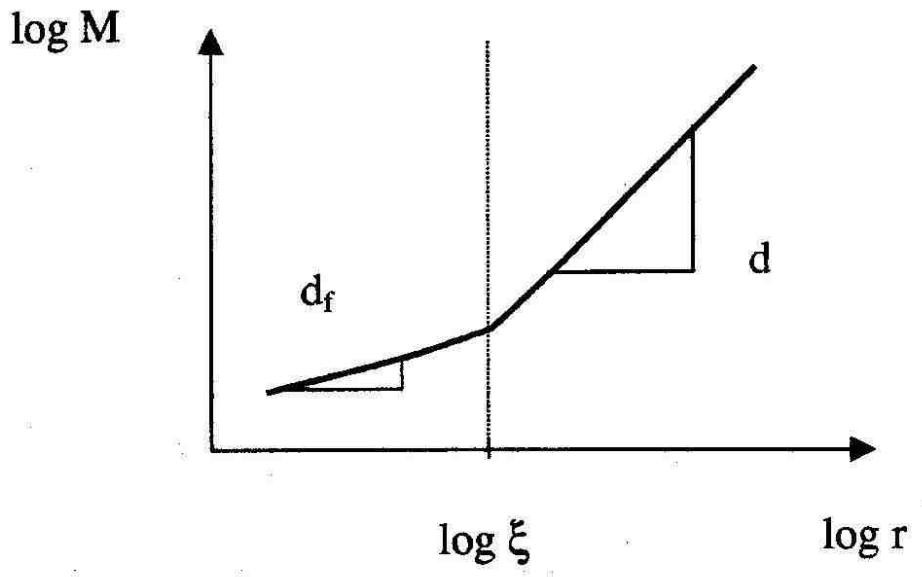


Рис. 1.14. Схематическое изображение кроссовера. На расстояниях меньше длины корреляции ξ угол наклона прямой равен d_f, на бóльших расстояниях — d.

показал Штауффер [90] на основании анализа работ различных авторов, такое мнение ошибочно: в случае квадратной или (гипер)кубической решетки достаточно большого размера на пороге перколяции возможно сосуществование нескольких стягивающих кластеров, ни один из которых не имеет положительной плотности.

1.7 Структура перколяционного кластера

Было предложено несколько геометрических моделей, описывающих структуру перколяционного кластера. Первой моделью такого рода была модель Скал–Шкловского–де Жена [34, 124].

1.7.1 Модель Скал-Шкловского-де Жена

В 1974 г. Скал и Шкловский, а в 1976 г. независимо от них де Жен, предложили модель, описывающую структуру остова перколяционного кластера в пренебрежении мертвыми концами. В литературе модель встречается так же под названиями SSK, nodes and links. Модель была предложена, чтобы предсказывать и описывать такие свойства как проводимость и эффект Холла. В этой модели предполагается, что кластер

состоит из искривленных связей, соединенных узлами, образуя нерегулярную сверхрешетку с параметром ξ, т. е. ξ является средним геометрическим расстоянием между ближайшими узлами.

Несмотря на то, что модель представляет ограниченный интерес, особенно в реальном мире с размерностью 2 и 3, поскольку рассматриваются проблемы проводимости, важно отметить, что модель имеет один точный аспект: является точной мерой плотности проводящих путей в типичном сечении образца. Это наблюдение, впервые сделанное для интерпретации эксперимента, было подтверждено моделированием по методу Монте-Карло. Это следует из наблюдения, что главное упрощающее предположение, сделанное в модели, является предположением о том, что в бесконечном кластере имеется только одна петля. Это справедливо только в случае больших размерностей (6 и выше), когда применимо приближение среднего поля. В случае малых размерностей кластер состоит из петель, находящихся внутри других петель, которые, в свою очередь, находятся в других петлях и т. д. Это справедливо во всех размерностях и среднее расстояние между независимыми проводящими путями равно ξ.

1.7.2 Модель капель и связей

Модель капель и связей (blobs and nodes, nodes, links and blobs) была предложена в 1977 г. Стенли [87] и подробно исследована в 1982 г. Конильо [19].

В этой модели предполагается, что возникающий бесконечный кластер состоит из фрагментов, в которых существуют многочисленные связи (капли), эти фрагменты соединены друг с другом одиночными связями.

1.7.3 Модель на основе ковра Серпинского

В 1981 г. в работе [33] была предложена модель, которая представляет из себя противоположный крайний случай по сравнению с моделью узлов и связей. Если в модели Скал–Шкловского–де Жена полностью пренебрегалось наличием капель, то в предложенной модели полностью исключались одиночные связи. Главным преимуществом модели является то, что некоторые иерархические модели могут быть решены в ее рамках точно. Она так же дает хорошие значения для критических показателей в случае малых размерностей пространства.

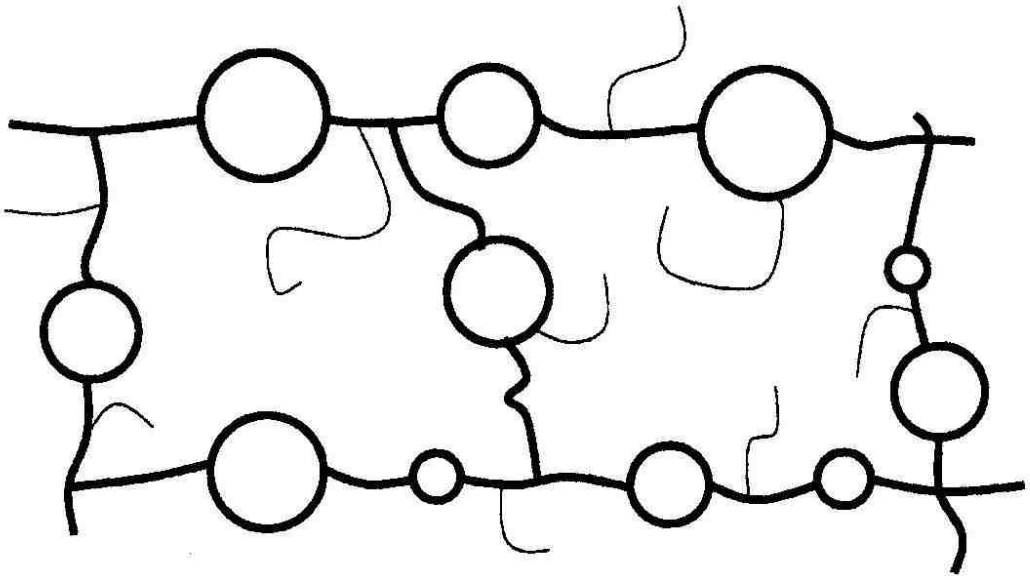


Рис. 1.15. Перколяционный кластер в модели капель и связей. Показана только малая часть мертвых концов (тонкие линии). Капли представлены в виде окружностей. Расстояние между каплями и их диаметры имеет величину порядка корреляционной длины.

1.7.4 Модель на основе фрактала Гивена-Мандельброта

Построение фрактала Гивена-Мандельброта начинается с отрезка. Следующие два этапа построения показаны на рис. 1.16. В структуре фрактала можно обнаружить петли, ветви и мертвые концы всех размеров. Таким образом, фрактал содержит те же элементы, что и перколяционный кластер. Этот факт позволяет использовать фрактал Гивена-Мандельброта в качестве одной из возможных моделей перколяционного кластера [69]. Фрактальная размерность равна $d_f = \ln 8/\ln 3 \approx 1.893$, что близко к фрактальной размерности перколяционного кластера $d_f = 91/48 \approx 1.896$.

1.7.5 Иерархическая модель

Для описания структуры остова перколяционного кластера на пороге перколяции используется иерархическая модель [4] (рис. 1.17).

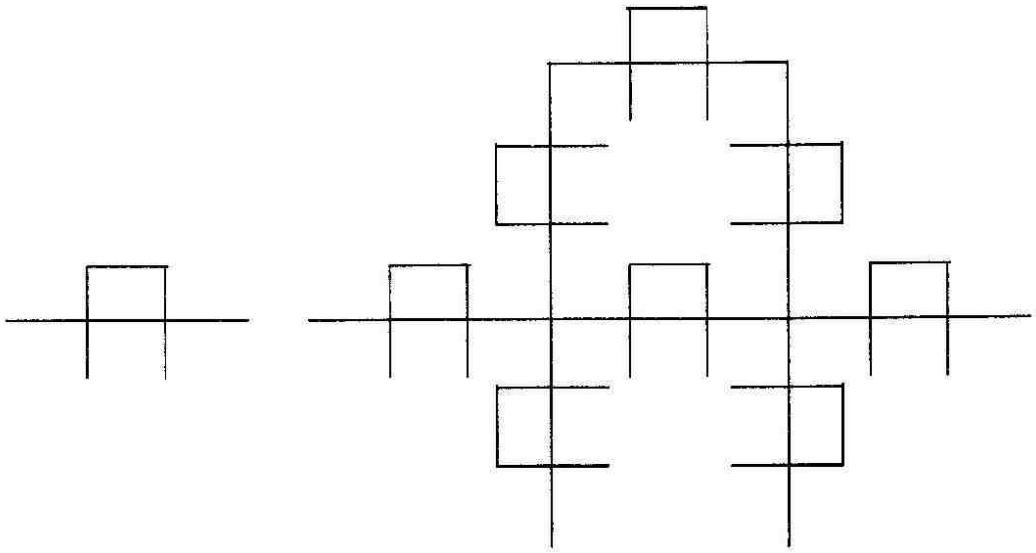


Рис. 1.16. Этапы построения фрактала Гивена-Мандельброта.

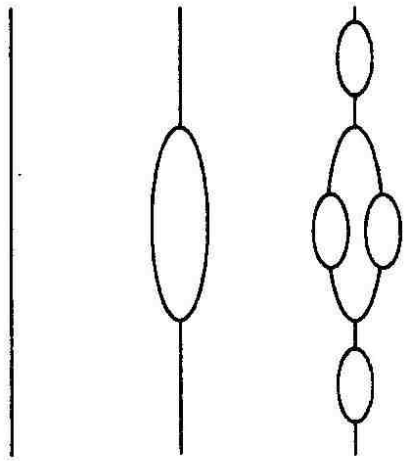


Рис. 1.17. Первые три шага построения иерархической модели.

1.8 Формулы для оценки порога перколяции

1.8.1 Определения и оценки

Будем называть случайным блужданием упорядоченную непрерывную последовательность из n шагов вдоль связей от одного узла к одному из его ближайших соседей. Блуждание называется *блужданием без самопересечений* (self-avoiding walk), если каждый узел посещается только один раз.

Константа связности (connective constant) μ описывает топологические свойства решетки и определяется как

$$\ln \mu = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \ln c_n, \tag{1.27}$$

где c_n — число путей из n шагов блуждания без самопересечений, начинающихся на данном узле. Константа связности, известная также как предел блужданий, является мерой связности решетки, то есть характеризует степень ее пересеченности. Константа связности возрастает с ростом координационного числа решетки.

Рассмотрим все пути длиной n случайного блуждания без самопересечений от данного узла. Каждый путь может быть продолжен на один шаг $z-1$ способами. Таким образом, путей из $n+1$ шагов в $z-1$ раза больше чем путей из n шагов. Следовательно, $\mu \leqslant z-1$.

Простая и строгая оценка для порога перколяции может быть получена из необходимого (но не достаточного) условия для перколяции, чтобы среднее число неблокированных путей случайного блуждания без самопересечений длины n $\mu^n p^n$ оставалось конечным для очень больших n, что дает

$$p_c \geqslant \frac{1}{\mu}. \tag{1.28}$$

Соотношение (1.28) остается справедливым как для задачи узлов [16], так и для задачи связей [25].

Для задачи узлов

$$p_c \geqslant \frac{1}{\mu} \geqslant \frac{1}{z-1}. \tag{1.29}$$

Решетка L^* содержит решетку L, если L может быть получена из L^* удалением некоторых ребер. Так, квадратная решетка может быть получена из треугольной, а шестиугольная из квадратной удалением некоторых связей 1.18.

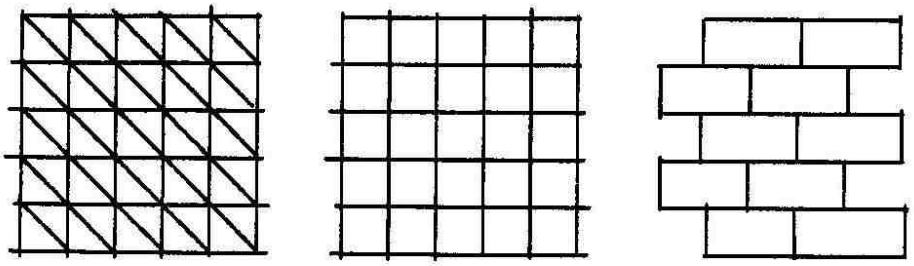


Рис. 1.18. Треугольная решетка содержит в себе квадратную, квадратная — шестиугольную.

Справедливо соотношение

$$p_{cs}(L^*) \leqslant p_{cs}(L) \tag{1.30}$$

Дуальная решетка L^D обладает следующим свойством: каждая ее связь пересекает связи исходной решетки L один и только один раз и наоборот. Фишер [25] доказал, что

$$p_{cb}(L) + p_{cb}(L^D) \geqslant 1$$

Значения порога перколяции зависят от размерности пространства и координационного числа [29]

$$zp_{cb} \approx \frac{d}{d-1}$$

1.8.2 Оценки Шера и Цаллена

Шер и Цаллен [84] ввели для оценки порога перколяции *критическую долю объема*. Вокруг каждого узла решетки описывается сфера (соответствующей размерности: окружность в двумерном случае, многомерная сфера в случае $d > 2$). Радиус сферы равен половине расстояния до ближайшего соседа. Таким образом, сферы касаются, но не пересекаются. Доля доступного объема v определяется как отношение объемов сфер, центрированных на неблокированных узлах, к полному объему сфер. Эта величина может быть вычислена по формуле

$$v = fp,$$

где f — коэффициент заполнения — отношение объема вписанной сферы к объему элементарной ячейки. Критический объем $v_c = fp_c$ с хорошей точностью зависит только от размерности.

1.8.3 «Универсальная формула» Галама и Можера

В 1996 г. Галам и Можер [30] постулировали степенной закон для определения порога перколяции как в случае задачи узлов, так и в случае задачи связей.

$$p_c = p_0 \left[(d-1)(q-1)\right]^{-\alpha} d^b$$

где d — размерность пространства, q — координационное число. Все решетки были разделены на три универсальных класса. Для первых двух классов $b = 0$ в случае задачи узлов и $b = a$ в случае задачи связей. Для третьего класса $b = 2a - 1$ в обоих случаях. Классы определяются значениями $\{p_0; a\}$. К первому классу относятся треугольная, квадратная, шестиугольная решетки ($p_0 = 0.8889$, $a = 0.3601$ для задачи узлов и $p_0 = 0.6558$, 0.6897 для задачи связей). Ко второму классу — решетка Кагоме и все регулярные решетки с $d \geqslant 3$ ($p_0 = 1.2868$, $a = 0.6160$ для задачи узлов и $p_0 = 0.7541$, $a = 0.9346$ для задачи связей). Последний класс относится к случаю высоких размерностей. Для него $b = 2a - 1$ и $p_0 = 2^{a-1}$, где $a = 0.8800$ для задачи узлов и $a = 0.3685$ для задачи связей. Точность определения порога перколяции по формуле (3.1) составляет ± 0.008 для решеток с размерностью до 7 и ± 0.0004 для решеток с размерностью 8 и выше.

В следующем году те же авторы обобщили универсальную формулу на случай анизотропных и апериодических решеток [31]. Они ввели параметр q_{eff} — эффективное координационное число, которое оказалось весьма близким к среднему координационному числу $\bar{z}$.

Однако очень скоро выяснилось, что имеется целый ряд ситуаций, когда универсальная формула дает неверный результат. Так 1997 г. ван дер Марк показал [70], что в случае объемноцентрированной решетки ($p_s = 0.246$, $p_b = 0.2623$) и простой гексагональной решетки (стопка треугольных решеток) ($p_s = 0.3623$, $p_b = 0.1859$) формула предсказывает равные пороги перколяции, поскольку для обеих решеток $d = 3$ и $q = 8$.

В дальнейшем ван дер Марк привел еще ряд примеров [71], в том числе и для изотропных решеток, когда универсальная формула давала неверные оценки. На основании полученных данных автор делает вывод о том, что размерности пространства и координационного числа недостаточно, чтобы предсказать порог перколяции решетки.

Еще один пример, когда результаты компьютерного моделирования и оценка по универсальной формуле дают заметно отличающиеся значения порога перколяции, привел Бабалевски [7]. Это случай решетки додекаэдра.

1.8.4 Порог перколяции для архимедовых решеток

В 1999 г. Сьюдинг и Зифф установили [94], что порог перколяции в задаче узлов для всех архимедовых решеток представляет линейную функцию от плотности узлов. Погрешность формулы — 1%.

Авторы заметили, что порог перколяции увеличивается с «открытостью» решетки. Для количественного описания «открытости» была введена величина ρ, равная плотности или числу узлов решетки на единицу площади, в предположении, что все связи имеют единичную длину. Обратная величина — площадь, приходящаяся на узел решетки, — может быть определена следующим образом. Соединим отрезками центры многоугольников, окружающих данный узел. Площадь полученной фигуры является искомой величиной. (Данное построение совпадает с правилом построения дуальной решетки).

Архимедовы решетки могут быть закодированы в виде $(n_1^{a_1}, n_2^{a_2}, \ldots)$, где n_i означает число вершин многоугольников, граничащих с вершиной, а показатель — количество таких многоугольников. Например, треугольная решетка имеет по 6 треугольников вокруг каждой вершины, следовательно, она обозначается (3^6). Каждая вершина решетки Кагоме имеет по два соседних треугольника и шестиугольника, следовательно, она обозначается (3636). В случае архимедовых решеток площадь правильного n-угольника определяется по формуле

$$S_n = \frac{n}{4} \operatorname{ctg} \frac{\pi}{n} = nA_n \tag{1.31}$$

здесь через A_n обозначена $1/n$ часть площади. Тогда плотность определяется по формуле

$$\rho = 4 \left[\sum_i a_i \operatorname{ctg} \frac{\pi}{n_i} \right]^{-1}$$

По методу наименьших квадратов было найдено, что порог перколяции удовлетворяет соотношению

$$p_c = 1.0405 - 0.4573\rho$$

1.9 Смешанная задача теории перколяции

Смешанная задача теории перколяции (задача узлов и связей) является естественным обобщением чистой задачи узлов и чистой задачи

связей. Обобщение позволяет как узлам, так и связям быть занятыми случайным образом с вероятностью p_s и p_b соответственно в случае случайной перколяции. В частности, если $p_s = p_b$, смешанная задача вырождается в чистую задачу узлов (или связей) на декорированной решетке. Также возможно ввести корреляции между вероятностями заполнения соседних узлов и связей. В этом случае говорят о коррелированной перколяции. Смешанная перколяция имеет многочисленные приложения в различных областях. Например, она была использована для описания перехода золь-гель (гелеобразования) в полимерах [18], распространения инфекций [45] и т. д.

В смешанной задаче ищут кластер из занятых узлов, связанных целыми связями. Когда такой кластер соединяет противоположные стороны системы, то говорят что в системе возникает перколяция. Впервые упомянутая Фришем и Хаммерсли [28], модель была впервые исследована Хошеном методом Монте-Карло [53]. Агравал и др. [2] показали, используя метод разложения в ряды, что критические показатели для чистой задачи узлов также действительны и в случае смешанной задачи. Наканиши и Рейнольдс [77] подтвердили это заключение методом ренорм-групп. Они также нашли, что граница между перколирующим и неперколирующим состояниями на плоскости (p_b, p_s) определяется одной точкой. Хаммерсли [45] доказал для частично ориентированно графа теорему, из которой следует неравенство

$$P\left(p_s p_b, 1\right) \leqslant P\left(p_s, p_b\right) \leqslant P\left(1, p_s p_b\right), \tag{1.32}$$

где $P(p_s, p_b)$ — перколяционная вероятность, то есть вероятность того, что одиночный узел соединен с бесконечным числом других узлов. Данное неравенство дает разумно узкие границы для перколяционного перехода в смешанной задаче. Для решетки Бете $p_{cs} = p_{cb} = p_c$, где p_{cs} — порог для чистой задачи узлов и p_{cb} — порог для чистой задачи связей, имеем

$$p_s p_b = p_c. \tag{1.33}$$

Форма кривой, отделяющей перколирующее состояние от неперколирующего, последовательно исследовалась Янукой и Энглманом [108]. Они предложили следующее уравнение для критической кривой в плоскости (p_b, p_s)

$$\frac{\log p_s}{\log p_{cs}} + \frac{\log p_b}{\log p_{cb}} = 1 \tag{1.34}$$

Полученное уравнение удовлетворяет неравенству (1.32) и дает правильный предел (1.33) для случая решетки Бете.

Третьяков и Инуи [98] изучили ту же самую критическую кривую для случая направленной перколяции и обнаружили малые отклонения порядка $10^{-3} \div 10^{-4}$. Тарасевич и ван дер Марк [96] провели систематическое исследование для многих решеток вплоть до пространства 5 измерений и обнаружили большое количество решеток с существенными отклонениями критической линии от формулы (1.34). Наиболее отклонения наблюдаются для решеток, у которых пороги перколяции в чистой задаче узлов и чистой задаче связей сильно отличаются. К таким решеткам относятся, например, объемноцентрированная решетка, гранецентрированная решетка, полностью триангулируемые решетки и многие другие. Можно построить целое семейство полностью триангулированных решеток (рис. 1.21) со все возрастающим отклонением линии перколяции от формулы (1.34). Это семейство решеток, вероятно, является идеальным объектом для исследования зависимости формы перколяционной кривой от величины порога перколяции в задаче связей.

В [96] была предложена иная формула для аппроксимации критической линии

$$p_b\left(p_s + \frac{p_{cb} - p_{cs}}{1 - p_{cb}}\right) = p_{cb}\frac{1 - p_{cs}}{1 - p_{cb}} \tag{1.35}$$

Формула (1.35) получена как линейная комбинация границ Хаммерсли. Она дает существенно большую точность в определении критической линии, но все же не является точной. Можно было бы ожидать, что закон, определяющий фазовый переход в смешанной задаче, будет симметричным относительно замены задача узлов — задача связей.

Кроме того, в работе [96] было показано на примере двух пар топологически различных решеток с близкими порогами перколяции [66], что форма перколяционной кривой полностью определяется порогами перколяции и не зависит от координационного числа. Этот факт позволяет предположить, что формула для перколяционной кривой не должна содержать каких-либо дополнительных параметров, кроме значений порогов перколяции в чистых задачах узлов и связей.

1.10 Квантовая перколяция

Явление квантовой перколяции интенсивно исследуется, особенно в последнее десятилетие. Помимо чисто теоретического интереса, кванто-

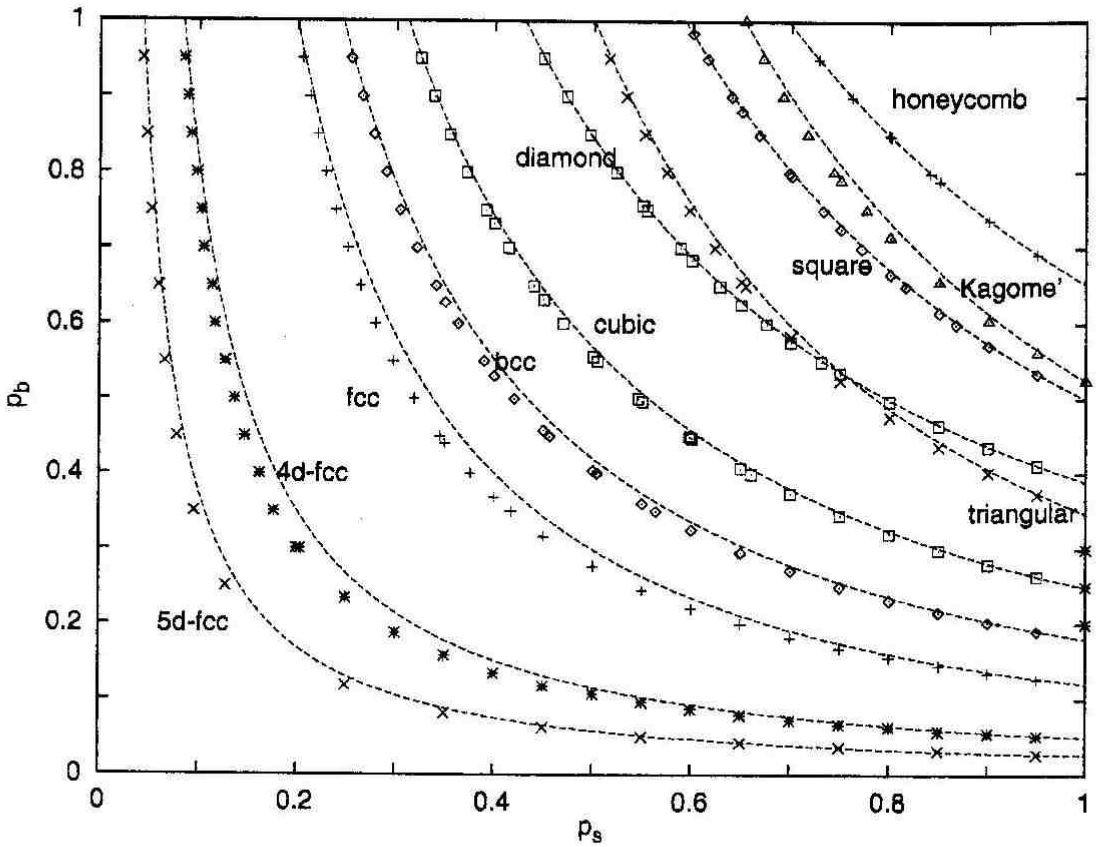


Рис. 1.19. Сравнение результатов компьютерного моделирования с аппроксимацией по формуле (1.34).

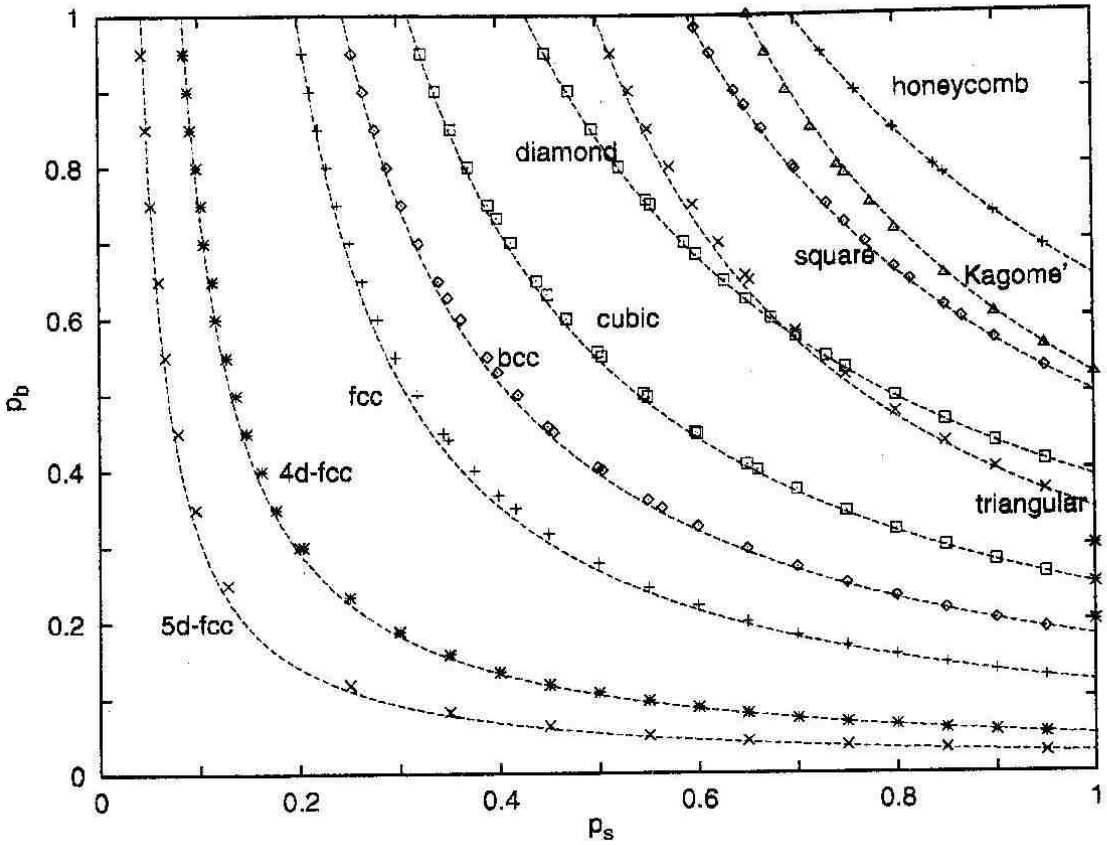


Рис. 1.20. Сравнение результатов компьютерного моделирования с аппроксимацией по формуле (1.35).

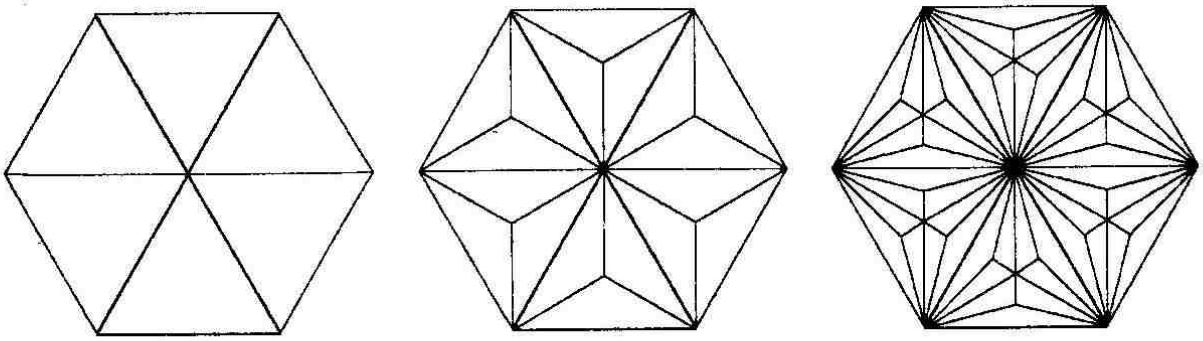


Рис. 1.21. Построение семейста триангулированных решеток с $p_{cs} = 1/2$ и p_{cb}, уменьшающимся от левого рисунка к правому. Построение может быть продолжено до бесконечности.

вая перколяция привлекает к себе внимание благодаря возможным приложениям в области наноструктурных материалов и для объяснения механизмов высокотемпературной сверхпроводимости. Явление изучается как аналитически [63], так и численно [103].

Возникновение перколяционного кластера еще недостаточно для появления проводимости, т. к. электронные состояния могут быть локализованными. Появление делокализованных состояний на перколяционном кластере называется *квантовой перколяцией*. Критическая концентрация примесей, при которых происходит переход от локализованных к делокализованным состояниям, называется *порогом квантовой перколяции* p_q, который выше порога обычной перколяции p_c [89]. Утверждается, что в двумерном случае порог квантовой перколяции равен 1, т. е. волновые функции остается локализованными, пока перколяционный кластер не займет весь кристалл [27]. В трехмерном случае вычисления показывают, что $p_c < p_q < 1$. Это некоторый аналог андерсоновской локализации, но критические показатели здесь другие.

С математической точки зрения определение порога квантовой перколяции сводится к исследованию спектра собственных значений однозонного гамильтониана метода сильной связи [27].

$$H = \sum_n |n\rangle \varepsilon_n \langle n| + \sum_{n \neq m} |n\rangle V_{nm} \langle m|, \tag{1.36}$$

где $|n\rangle$ представляют локализованные волновые функции, центрированные на узле n, $V_{nm} = 1$, если узлы n и m являются ближайшими соседями на одном и том же перколяционном кластере и $V_{nm} = 0$ в противном случае. Для простоты обычно полагают $\varepsilon_n = 0$. (При введении примесей в идеальный кристалл возникают локализованные электронные состояния, происходит так называемая андерсоновская локализация. В этом случае все $V_{nm} = 1$, а ε_n— случайные числа.)

Гамильтониан (1.36), в свою очередь, можно рассматривать как матрицу инцидентностей некоторого случайного графа.

В последнее время проводятся интенсивные исследования, направленные на определение спектра собственных значений матрицы инцидентностей различных случайных графов [9–11].

Особый интерес представляет задача об оценке порога перколяции в смешанной задаче (задаче узлов и связей). Такая задача возникает, например, при исследовании альтернантных систем — бинарных систем, в которых атомы различных сортов чередуются. Математической моделью

кристаллической решетки альтернантной системы является двудольный граф.

Подход, позволяющий оценить спектр собственных значений двудольного графа, был предложен в [20] и развит в [122]. Дополнительную информацию о спектре собственных значений можно получить с использованием кругов Гершгорина [115].

1.11 Цветная перколяция

Существует несколько обобщений стандартных решеточных моделей теории перколяции на «полихроматический» случай — наличие в системе компонент различных сортов (цветов). В работе [109] впервые было проведено обобщение задачи перколяции для случая системы, состоящей из двух компонент (белые и черные), а также на случай многокомпонентной системы (полихроматический или многоцветный процесс). Проанализировано разделение на области с перколяцией компонент различных цветов для случая C цветов на решетке с порогом перколяции p_c. Панхроматический режим, т. е. режим, когда наблюдается протекание всех компонент, возникает, когда $C < p_c^{-1}$, занимая часть всей рассматриваемой области равную $(1 - Cp_c)^{C-1}$. Полихроматическая перколяция представляет интерес для случая решеток с высокой связанностью, имеющих низкое значение порога перколяции. Такими решетками, в частности, являются решетки большой размерности, а также решетки, в которых учитывается взаимодействие не только ближайших соседей.

В работе [46] была рассмотрена смешанная задача (задача узлов и связей) для случая двухкомпонентной системы.

В работе [54] был предложен приближенный критерий для определения порога перколяции в многокомпонентной системе и рассмотрены приложения цветной перколяции для решения задач о прыжковой проводимости.

1.12 Диффузионный фронт

Рассмотрим диффузию частиц на плоской квадратной решетке [24,89]. Источником частиц является одна из сторон решетки, на которой концентрация частиц поддерживается постоянной и равной 1. Каждая из частиц может перейти в один из четырех соседних узлов, если он свободен.

Смещение частицы вдоль взаимно перпендикулярных осей статистически независимы, поэтому средний квадрат расстояния частицы от источника в момент времени t определяется формулой

$$\langle x^2 \rangle = Dt \tag{1.37}$$

где D — коэффициент диффузии.

Вероятность того, что узел на расстоянии x от источника занят в момент времени t, равна

$$P(x,t) = 1 - \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_0^{\frac{x}{\sqrt{Dt}}} e^{-\frac{u^2}{2}} du \tag{1.38}$$

в противоположность «обычной» перколяции, где вероятность заполнения узлов постоянная величина, в данном случае вероятность зависит как от координаты, так и от времени. При фиксированном t вероятность монотонно убывает от 1 при ($x = 1$) до 0 ($x \gg \sqrt{Dt}$). Вблизи источника, где вероятность заполнения близка к 1, занятые узлы образуют довольно компактный и однородный кластер. Для больших x вероятность заполнения узлов ниже порога перколяции на решетке, и здесь имеются только маленькие изолированные кластеры. Границу связного кластера называют скорлупой или оболочкой (рис. 1.22) Средняя координата граница скорлупы x_c связана с порогом перколяции соотношением

$$P(x_c, t) = p_c. \tag{1.39}$$

С течением времени скорлупа смещается, при этом увеличивается и ее ширина. Скорлупа имеет фрактальную структуру и ее фрактальная размерность равна

$$D_h = \frac{1+\nu}{\nu} = \frac{7}{4} \tag{1.40}$$

Понятно, что фрактальные свойства, т. е. самоподобие скорлупы, проявляется только на масштабах, меньших ширины скорлупы. Характерный размер конечных кластеров определяется соотношением

$$\xi \propto \xi_0 \left| p(x) - p_c \right|^{-\nu} \tag{1.41}$$

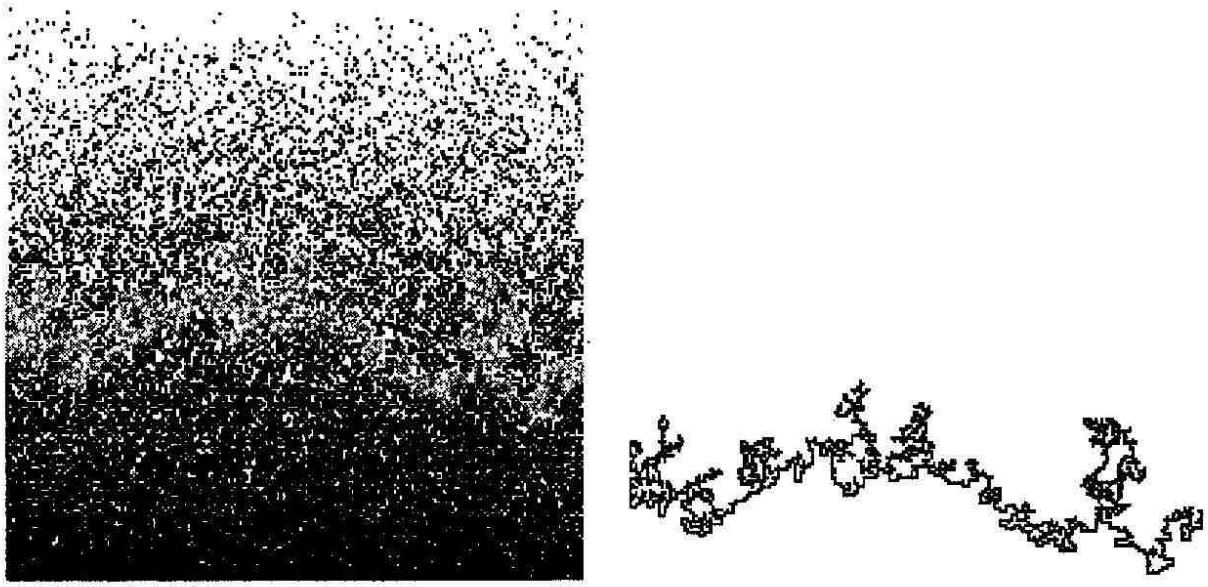


Рис. 1.22. Диффузия частиц от протяженного источника, находящегося в нижней части рисунка. Диффузионный фронт показан серым цветом. Справа показан только диффузионный фронт.

1.13 Инвазионная перколяция

Инвазионная перколяция (перколяция с вытеснением) — это динамический перколяционный процесс вытеснения одной жидкости другой в пористой среде [106]. Если очень медленно впрыскивать воду в пористую среду, заполненную маслом, то капиллярные эффекты будут преобладать над вязкими, и динамика процесса будет определяться процессами в масштабе отдельных пор. Процесс можно промоделировать на решетке, рассматривая узлы и связи как поры и связывающие их каналы. Узлам приписываются случайные числа, которые характеризуют размеры пор и каналов.

Алгоритм состоит в следующем

1. Каждому узлу решетки приписывается случайное число $r \in [0, 1]$.
2. Выбираются узлы впрыскивания вытесняющей жидкости (источники) и места вытекания вытесняемой жидкости (стоки).
3. Определяются узлы роста — узлы, занятые вытесняемой жидкостью и соседствующие с вытесняющей жидкостью.
4. Вытесняющая жидкость проходит в тот узел роста, где значение r наименьшее.

5. Узлы роста в областях, полностью окруженных вытесняющей жидкостью, теряют активность и исключаются из списка узлов роста.

6. Процесс заканчивается, когда вытесняющая жидкость достигает стока.

Можно рассматривать процессы без захвата, опуская пункт 5.

1.14 Континуальная перколяция

Несмотря на то, что решеточная формулировка перколяционных задач очень удобна как для аналитического, так и для численного изучения, многие естественные неупорядоченные системы не имеют решеточной структуры и требуют применения другого подхода. Универсальность критических показателей выдерживает умеренные возмущения такие, как введение корреляций ближнего порядка или изменение типа решетки при сохранении размерности пространства. Это порождает идею о том, что и наличие самой решетки не является необходимым. Континуальная задача перколяции имеет различные формулировки, среди которых наиболее популярны следующие три.

Модель пустот или модель швейцарского сыра [41]. Сферические пустоты (одинакового размера или имеющие некоторое распределение по размерам) случайным образом помещаются внутрь проводящей среды. Сферические пустоты могут перекрывать друг друга (рис. 1.23). При критической доле объема, занятого такими пустотами, возникает бесконечный кластер соединенных друг с другом пустот, и система теряет проводящие свойства или механическую жесткость. Эта модель удобна для описания эластичных свойств и транспорта в пористых средах.

Проблема сфер или обратная модель швейцарского сыра, известна так же как *модель случайных узлов или перекрывающихся дисков* [79, 123]. В этой задаче сферы являются проводящими и находятся в непроводящей среде. Можно ввести близкодействующие корреляции между дисками — силы отталкивания между дисками, что приводит к сдвигу порога перколяции, но оставляет неизменными критические показатели. При некотором критическом объеме, занятом перекрывающимися сферами, в системе возникает бесконечный проводящий кластер. Модель была использована для описания прыжковой проводимости в допированных полупроводниках [130] и фазовых переходах в ферромагнетиках [1].

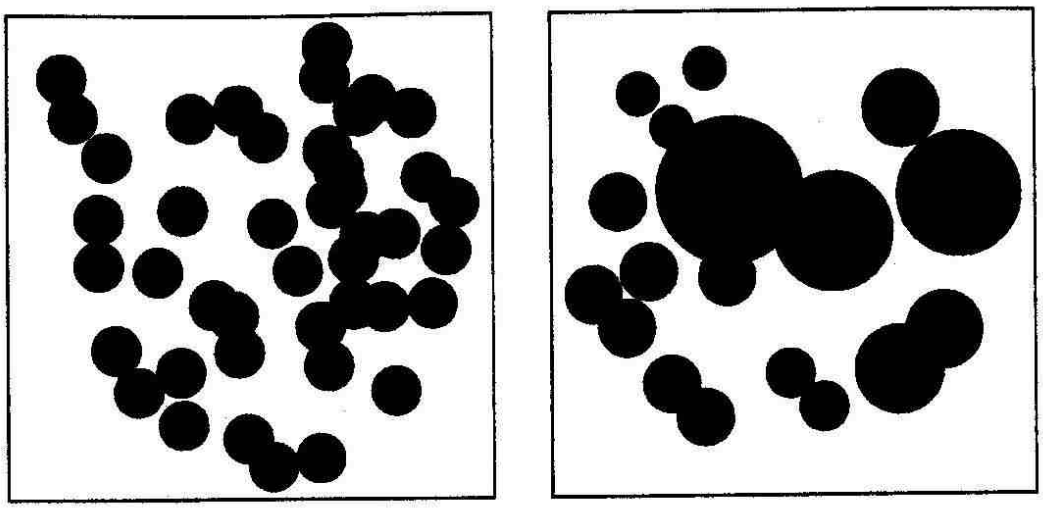


Рис. 1.23. Континуальная перколяция для случая объектов одинакового и различного радиуса.

В модели потенциалов рассматривается гладкая функция $\psi(x)$ и изучается геометрия области, где $\psi(x) \leqslant h = \text{const}$. Эта модель была введена для описания локализации квазиклассических электронов. Тогда $\psi(x)$ — потенциал, создаваемый примесями, а h — энергия электрона.

1.15 Задача «иголок» и родственные проблемы

Промежуточное положение между классическими решеточными задачами и континуальной перколяцией занимают задачи о перколяции на решетке неточечных объектов. Можно рассмотреть перколяцию иголок — непересекающихся анизотропных объектов на двумерной решетке [100]. Еще одна возможность — размещение на квадратной решетке квадратных блоков со стороной, кратной длине связей — задача Накамуры [76].

В работе [100] было показано, что экспериментальные данные хорошо аппроксимируются формулой

$$p_c(a) = C\left(1 - \gamma\left(\frac{a-1}{a}\right)^2\right) \tag{1.42}$$

где a — длина иголок, C, $\gamma = 0.31 \pm 0.01$ — константы. Формула не справедлива для случая точечных объектов (обычная перколяция) $a = 1$, однако оказывается справедливой для случая задачи Накамуры.

Примечательно, что такое же соотношение, но с иным значением постоянной C выполняется и для задачи случайной адсорбции (random sequentinal adsorbtion, RSA, jamming). При достижении порога перколяции в случае анизотропных объектов решетка содержит много пустот размера, достаточного для размещения в них дополнительных иголок. Однако при некотором значении концентрации иголок оказывается, что на решетке отсутствуют пустоты достаточного для размещения еще одной иголки размера. Эта концентрация называется порогом адсорбции. Отношение порога перколяции к порогу адсорбции равно 0.62 ± 0.01.

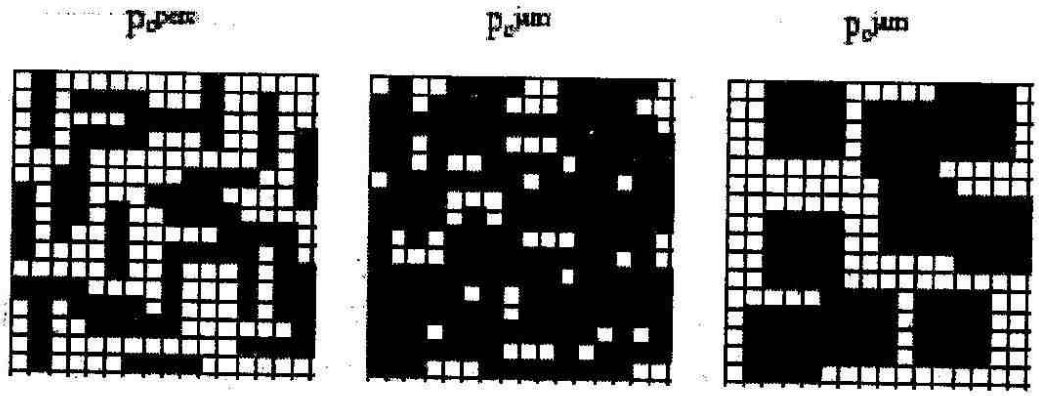


Рис. 1.24. Перколяция иголок, адсорбция, задача Накамуры.

1.16 «Решеточные звери» и разложение в ряд

Среднее число n_s малых кластеров может быть подсчитано точно. Рассмотрим квадратную решетку и подсчитаем число кластеров размером 2. Такой кластер состоит из 2 занятых узлов (вероятность p^2), окруженных шестью свободными (вероятность $(1-p)^6$). Он может быть расположен вертикально или горизонтально (2 варианта) (1.25). Таким образом,

$$n_2 = 2p^2(1-p)^6.$$

Среднее число кластеров, состоящих из 3 узлов, определяется выражением

$$n_3 = 2p^3(1-p)^8 + 4p^3(1-p)^7.$$

Рост числа конфигураций стремительно растет с увеличением размера кластера. Так для кластера из 4 узлов число конфигураций равно 19, а

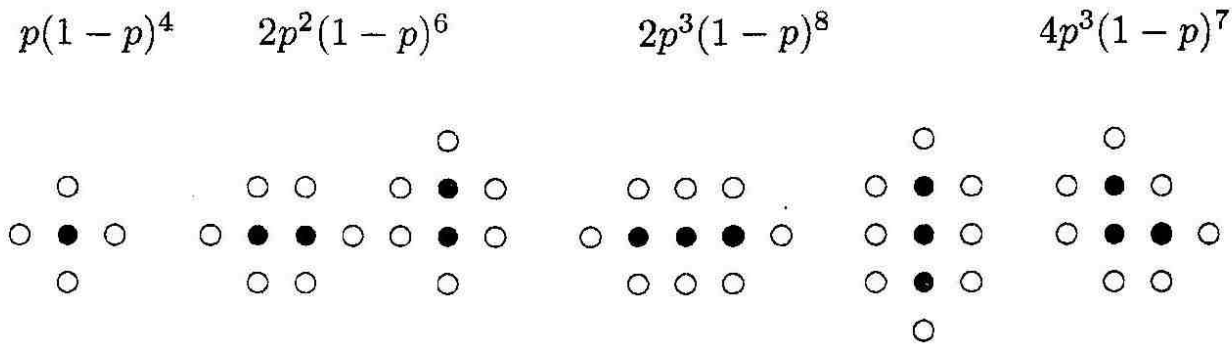


Рис. 1.25. «Решеточные звери» на квадратной решетке

для кластера из 5 узлов — 63. Понятно, что для достаточно больших кластеров подсчет всех конфигураций возможен только с использованием компьютера.

Обозначая периметр t — число свободных узлов, ближайшими соседями которых являются занятые узлы данного кластера, и g_{st} — число геометрически различных кластерных конфигураций[3] из s узлов с периметром t, имеем для среднего числа кластеров размера s на узел решетки следующее выражение

$$n_s(p) = \sum_t g_{st} p^s (1-p)^t. \tag{1.43}$$

Эта формула справедлива для любой решетки. Полученные нами выше выражения для случая малых кластеров на квадратной решетке являются ее частными случаями.

Сложность заключается в том, что суммирование предполагает знание всех возможных конфигураций и периметров. Тем не менее, известны некоторые асимптотические результаты для очень больших кластеров.

Можно воспользоваться результатами, полученными для кластеров небольшого размера, чтобы провести экстраполяцию на случай $s \to \infty$. По результатам экстраполяции можно получить значения критических показателей. Например, k-й момент функции распределения кластеров определяется выражением

$$M_k = \sum_{s=1}^{\infty} s^k n_s(p). \tag{1.44}$$

[3]Такие конфигурации принято еще называть «решеточными зверями» («lattice animals»)

Выражение (1.44) может быть аппроксимировано конечным степенным рядом

$$M_k = \sum_{l=1}^{l_{\max}} a_l(k) p^l. \tag{1.45}$$

С учетом формулы (1.43) выражение (1.45) принимает вид

$$M_k = \sum_{s,t} g_{s,t} s^k p^s (1-p)^k.$$

Таким образом, коэффициенты $a_l(k)$ могут быть выражены через $g_{s,t}$, которые могут быть вычислены непосредственно вплоть до некоторого s. Из результатов аппроксимации можно определить порог перколяции и один из критических показателей. Аппроксимация часто проводится методом Паде.

1.17 Метод ренорм-групп

Существует два варианта метода ренорм-групп. Метод ренорм-групп в реальном пространстве (small-cell, reall-space, position-space renormalization group) и метод ренорм-групп в обратном пространстве (reciprocal q space renormalization) или ε-разложение (ε-expansion). Дальнейшее изложение в основном следует работе [89].

1.17.1 Метод ренорм-групп для малых ячеек

Основной идеей ренормализации является самоподобие перколяционного кластера вблизи критической точки. В разделе 1.6 было сказано, что для разных масштабов длин справедливы различные степенные законы (кроссовер). Переход от одного вида степенного закона к другому происходит при характерных размерах L порядка корреляционной длины $\xi \propto |p - p_c|^{-\nu}$. Таким образом, кластеры могут быть разделены на две большие группы: те, масса которых s больше, чем $|p - p_c|^{1/\sigma}$, и те, масса которых меньше этой величины. Для маленьких кластеров или маленьких систем справедлив один вид степенного закона, например $P \propto L^{-\beta/\nu}$, а для больших кластеров или систем выполняется иной степенной закон, например $P \propto |p - p_c|^{\beta}$. Другими словами, все кластеры или системы с линейным размером меньше, чем корреляционная длина ξ, подобны друг другу в среднем, постольку поскольку они содержат множество узлов.

Это подобие нарушается для больших размеров порядка ξ и для малых размеров порядка расстояния на решетке между ближайшими соседями a. Правее порога перколяции корреляционная длина бесконечна, так что все большие кластеры на решетке подобны друг другу. Если мы выделяем часть среднего размера на большой решетке, то и эта часть и сама решетка все еще значительно меньше чем ξ при $p = p_c$ и подобны друг другу в среднем. Следует иметь в виду, что подобие сохраняется между расстояниями a и ξ только в среднем. Если провести усреднение по многим кластерам, то можно обнаружить такое подобие. Идея подобия в качестве основания термических критических явлений и скейлинг восходят к 1960 годам (обзор Каданова [56]) и приводят к первой ренормализационной теории Вильсона [107]. При ренормализации в реальном пространстве мы заменяем ячейку из нескольких узлов на один суперузел, при этом линейный размер b ячейки должен быть много меньше ξ. Конечно, мы теряем часть информации, если, например, 16 узлов ячейки 4×4 на квадратной решетке заменяются одним суперузлом. Но если скейлинг основывается на том факте, что все ячейки размера b подобны друг другу, то возможно мы сможем получить из этого приближения хорошие значения для критических показателей, когда мы ренормализуем целую ячейку скажем b^d узлов в одну суперячейку. Количественно такая ренормализация ячеек в узлы требует определенного правила, определяющего, как она должна проводиться. Кроме того, концентрация p занятых суперячеек будет в общем отличаться от концентрации исходных узлов. Только справа от критической точки, где самоподобие выполняется, мы имеем $p' = p = p_c$. В общем мы знаем, что корреляционная длина ξ ограничивает справедливость самоподобия, итак, предел ξ является тем же самым как в случае исходной решетки, так и в случае ренормализованной решетки из суперячеек. Если в исходной решетке мы имеем $\xi = \xi_0|p - p_c|^{-\nu}$, то в ренормализованной решетке с постоянной решетки b мы имеем $\xi' = \xi_0|p' - p_c|^{-\nu}$, с той же самой постоянной пропорциональности ξ_0, величины порядка постоянной решетки, и тем же самым критическим показателем ν, в случае если и $|p - p_c|$ и $|p' - p_c|$ остаются очень маленькими. Тем не менее, новая решетка имеет новую постоянную решетки b, и ξ' измеряется в ее единицах: $\xi' = \xi/b$. Итак,

$$b|p' - p_c|^{-\nu} = |p - p_c|^{-\nu}$$

является основным уравнением в случае ренормализации в реальном пространстве. Беря логарифм от обеих сторон уравнения, получаем

$$\frac{1}{\nu} = \frac{\log \frac{p'-p_c}{p-p_c}}{\log b} = \frac{\log \lambda}{\log b}$$

где

$$\lambda = \frac{p' - p_c}{p - p_c} = \frac{dp'}{dp}$$

при $p = p'$. Часто в публикациях по ренормализации $1/\nu$ сокращенно обозначают y или y_T или y_p. Суммируя, мы ренормализуем ячейку размера b в единичный суперузел: чтобы сохранить величину ξ неизменной при этой ренормализации, мы также изменяем p на p'.

Применение метода ренорм-групп для одномерной цепочки

Чтобы продемонстрировать эту идею вновь вернемся к одномерному случаю. Предположим, мы группируем узлы на линии в ячейки по b узлов в каждой ячейке. Один конец ячейки будет связан с другим только в том случае, когда все ее узлы заняты. Итак, мы можем заменить ячейку на новый суперузел и определить вероятность заполнения этого суперузла как

$$p' = p^b \tag{1.46}$$

Если мы начнем с $p = 1$, то из этого следует, что $p' = 1$. Точка $p^* = 1$ определяется таким образом как неподвижная точка такого преобразования ренорм-групп. Неподвижная точка остается неподвижной при ренормализации. Если мы начнем с $p < 1$, то уравнение (1.46) дает $b' < p$. Если мы повторим эту процедуру много раз, то получим для ренормализованной концентрации значение ноль. Конечно, $p = 0$ также является неподвижной точкой, которую мы можем ассоциировать с решеточными животными. В неподвижной точке $p = 1$ p' то же самое, что и p. Кроме того, если мы вычисляем ξ в единицах расстояния между нашими новыми суперузлами, то имеем $\xi' = \xi/b$. Поскольку $p' = p$ мы также должны иметь и $\xi' = \xi$. Эти два уравнения совместны только если $\xi = \infty$ (или нулю). Итак, мы идентифицировали неподвижную точку $p^* = 1$ как порог перколяции p_c. Теперь мы можем вернуться к уравнению (1.46). Из него

$$\lambda = \frac{dp'}{dp} = bp^{b-1} = b \text{ при } p = 1$$

Следовательно, уравнение (1.46) дает

$$\frac{1}{\nu} = \frac{\log \lambda}{\log b} = \frac{\log b}{\log b} = 1 \tag{1.47}$$

В соответствии с раделом 1.5.1 метод ренорм-групп оказывается точным в одномерном случае. Ситуация менее очевидно в случае пространства большей размерности. Как и в рассмотренном выше примере, нам надо связать p' с вероятностью того, что ячейка связывает противоположные линии или плоскости. Существует множество способов выбрать ячейку и определить p' и ни один из них не дает простого точного результата. В этом разделе мы представим два достаточно простых и точных примера: один для задачи узлов на треугольной решетке, а второй — для задачи связей на квадратной.

Применение метода ренорм-групп для задачи узлов на треугольной решетке

На треугольной решетке каждый треугольник содержит три узла в вершинах и мы поместим суперузел в центре треугольника. Рис. 1.26 показывает, что мы ренормализовали подходящие треугольники таким образом, что каждый исходный узел принадлежит только одному треугольнику.

Теперь мы ищем вероятность p' того, что такой суперузел, принадлежащий ренормализованному треугольнику, занят, если каждый из исходных узлов занят с вероятностью p. Суперузел занят, если существует стягивающий кластер. В нашем треугольнике это соответствует случаю, когда или все три узла заняты (вероятность p^3), или когда заняты два соседних узла и соединяют две противоположных конца треугольника. Последний случай может быть реализован тремя способами (в зависимости от того, какие из трех возможных пар заняты), каждый из которых имеет вероятность $p^2(1-p)$). Итак, ренормализованная вероятность равна

$$p' = p^3 + 3p^2(1-p) \tag{1.48}$$

График функции $p(p')$ сходен с графиком функции $P(p)$, представленным на рис. 1.3. Справа от критической точки мы должны иметь полное сходство: $p' = p = p^*$. В нашем случае, уравнение $p' = p$ с p' из уравнения (1.48) имеет три решения

$$p^* = 0, \frac{1}{2}, 1$$

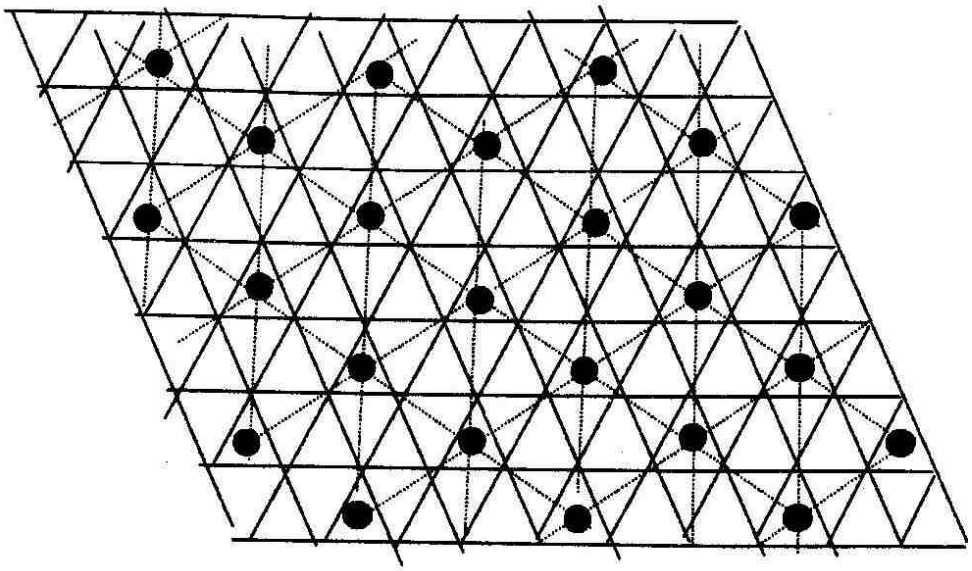


Рис. 1.26. Ренормализация треугольной решетки. Сплошными линиями показана исходная решетка, пунктирными — ренормализованная.

Первое (0) и последнее (1) решение являются тривиальными и существуют для всех решеток и всех размерностей; нас интересует только нетривиальная неподвижная точка $p^* = 1/2$. Эта неподвижная точка точно совпадает с известным критическим значением p_c для треугольной решетки — первый признак того, что метод ренорм групп может быть правильным. Теперь разложим уравнение (1.48) в ряд вблизи критической точки

$$p' = p^* + \lambda(p - p^*) + O(p - p^*)^2,$$

где

$$\lambda = \frac{dp'}{dp} = 6p - 6p^2 = \frac{3}{2} \text{ при } p = p^* = \frac{1}{2}.$$

В нашем частном случае мы имеем $b^2 = 3$ поскольку на плоскости три старых узла формируют один новый суперузел. Тогда уравнение (1.47) дает

$$\nu = \frac{\log\sqrt{3}}{\log 3/2} = 1.355.$$

Этот результат, являясь прекрасной аппроксимацией предположительно точного значения $\nu = 4/3$ в двумерном случае, вновь подтверждает правильность метода ренорм-групп. На первый взгляд кажется странным, что результат для ν не является точным. Причина этого кроется в том,

что преобразование ренормализации не сохраняет связность между узлами. Два узла, которые принадлежали до преобразования одному кластеру, могут принадлежать после преобразования к различным кластерам. Следовательно, различные схемы ренормализации могут приводить к различным значениям критических показателей, что является серьезным недостатком метода ренорм-групп в теории перколяции.

Применение метода ренорм-групп для задачи связей на квадратной решетке

Теперь рассмотрим еще одну приближенную схему метода ренорм-групп, которая представляется очень точной для задачи связей на квадратной решетке [15, 80]. В этой схеме заменяют ячейку размером 2×2 с 8 связями на одну суперячейку только с 2 связями. Две новые связи представляют связи в вертикальном и горизонтальном направлениях. Если мы рассматриваем только горизонтальное направление, то мы можем игнорировать два «мертвых конца» и связность слева направо определяетя пятью связями AB, BC, BE, DE, RF. Рис. 1.27 показывает исходную конфигурацию этих связей с их соответствующими вероятностями.

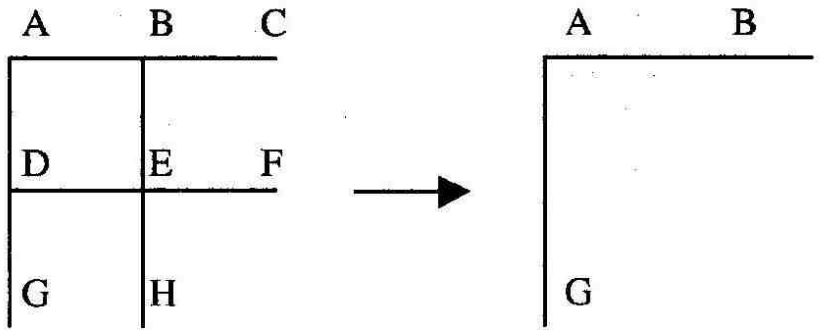


Рис. 1.27. Применение метода ренорм-групп для задачи связей на квадратной решетке

Две грани AD и CA будут тогда связаны с вероятностью

$$p' = p^5 + 5p^4(1-p) + 8p^3(1-p)^2 + 2p^2(1-p)^3 = 2p^5 - 5p^4 + 2p^3 + 2p^2,$$

где различные слагаемые соответствуют конфигурациям с 5, 4, 3 и 2 связями. Легко проверить, что

$$p^* = \frac{1}{2} \qquad b = 2 \qquad \lambda = \left.\frac{dp'}{dp}\right|_{p=p^*} = \frac{13}{8}.$$

Итак,

$$\frac{1}{\nu} = \frac{\ln \lambda}{\ln 6} \approx 0.700, \qquad \nu \approx 1.428.$$

Вновь значение порога перколяции точное, а значение критического показателя близко к точному значению 4/3.

Тот факт, что уравнения дают точные значения для порогов перколяции и хорошие оценки для критического показателя не должен вводить нас в заблуждение. В действительности, оба выражения приближенные.

Применение метода ренорм-групп в смешанной задаче

Естественно, метод ренорм-груп может быть применен и для исследования смешанной задачи теории перколяции, то есть задачи узлов и связей. Такое исследование провели Наканиши и Рейнолдс [77]. Они рассмотрели случай квадратной решетки. Рассматриваемая ячейка состоит из 4 узлов и 8 связей. Вероятность заполнеия узлов — p_s, связей — p_b. Ренормализация проводится в два этапа: на первом шаге ренормализуются узлы путем подсчета вероятности p'_s того, что можно соединить узельную часть ячейки. На втором шаге подсчитыватся вероятность p'_b того, что ячейка может быть пройдена по связям. Каждый из этих шагов может быть проведен различными способами.

При подсчете p'_s авторы требовали, чтобы существовал стягивающий путь или в вертикальном или в горизонтальном направлении. Тогда

$$p'_s = p_s^4(1-(1-p_b)^4) + 4^3(1-p_s)(1-(1-p_b)^2) + 4p_s^2(1-p_s)^2 p_b$$

Для вычисления p'_b авторы требовали, чтобы можно было попасть в ячейку извне и достичь ее противоположной стороны.

$$\begin{aligned} p'_s p'_b = (p_s^4(p_b^4 + 4p_b^3(1-p_b) + 3p_b^2(1-p_b)2) + \\ 2p_s^3(1-p_s)p_b^2(1-p_b^2)(1-(1-p_b)^2) \\ + (p_s^4(2p_b^2(1-p_b)^2 + 2p_b(1-p_b)3) \\ + p_s^3(1-p_s)(2p_b(1-p_b) + 2p_b) + 2p_s^2(1-p_s)^2 p_b)p_b \end{aligned} \quad (1.49)$$

Уравнение дает правильные предельные случаи для $p_s = 1$ и $p_b = 1$. Уравнение позволило определить критический показатель и фазовую кривую.

Применение метода ренорм-групп для определения фрактальной размерности «красных связей»

Метод ренорм-групп был успешно применен Конильо [19] для определения фрактальной размерности «красных связей». Чтобы определить d_{red} вновь рассмотрим исходную решетку с постоянной решетки 1 и суперрешетку с постоянной решетки $b \gg 1$. В суперрешетке связи между двумя узлами заняты, если узлы связаны в исходной решетке. Это правило больше подходит для решения проблем перколяции, чем правило старшинства, обсуждавшееся ранее. На пороге перколяции концентрация связей в обеих решетках одна и та же.

Если мы удалим малую часть связей q исходной решетки, то определенная доля q' ренормализованных связей станет разорванной. Концентрация связей в обеих решетках равна соответственно

$$p = p_c(1-q) \text{ и } p' = p_c(1-q').$$

Следовательно

$$q = \frac{p_c - p}{p_c} \text{ и } q' = \frac{p_c - p'}{p_c}.$$

Соотношение между q и q' может быть получено следующим образом. Рассмотрим ренормализованную связь, соединяющую два узла суперрешетки, которые по определению принадлежат к одному кластеру исходной решетки. Если мы удалим малую часть связей q, то вероятность того, что оба узла станут изолированными

$$q' = n_{\text{red}} q, \qquad (q \to \infty), \tag{1.50}$$

где $n_{\text{red}} \propto b^{d_{\text{red}}}$ — число «красных связей» на остове, соединяющем два узла. Уравнение (1.50) отражает тот факт, что удаление только одной красной связи между двумя узлами достаточно, чтобы разделить их. Вероятность существования красных капель, имеющая по меньшей мере порядок q^2, пренебрежимо мала при $q \to 0$.

Из уравнения (1.50) мы немедленно получаем

$$p_c' - p \propto b^{d_{\text{red}}}(p_c - p)$$

Сравнивая этот результат с (1.47), мы получаем точное соотношение

$$d_{\text{red}} = \frac{1}{\nu}.$$

1.17.2 Метод ренорм-групп для больших ячеек

Как мы показали, метод ренорм-групп в реальном пространстве — всего лишь приближенная схема. Отличное согласие, найденное выше, для порога перколяции и критического показателя является исключением, а не правилом. Для других решеток и для других размерностей пространства обычно имеются существенно большие отклонения. Только если мы устремим b к бесконечности, мы можем ожидать, что метод ренорм-групп даст точное значение. На квадратной решетке с $b = 5$ ренормализация 25 узлов в одну 5×5 ячейку приводит к 2^{25} различным конфигурациям, что делает задачу весьма непростой. Чтобы перейти к большим системам использу.n моделирование методом Монте-Карло, чтобы обеспечить репрезентативную выборку из всех возможных конфигураций.

Идея метода заключается в том, чтобы сгенерировать на компьютере случайным образом заполненные ячейки, а затем ренормализовать их.

1.17.3 ε—разложение

Другой вариант метода ренорм-групп состоит в выражении флуктуаций в системе через Фурье-компоненты. Затем итеративно суммируют по всем волновым векторам, так же как мы итеративно усредняли выше по всем треугольникам в реальном пространстве. Элементарный обзор этого метода был дан Вильсоном [107]. Суммирование по волновым векторам не может быть проведено точно, и используется метод возмущений в терминах малого параметра ε подобно диаграммной технике, применяемой при решении задачи многих тел в теории поля.

В случае перколяции ε-разложение [47] сначала преобразует перколяцию в температурный фазовый переход, в так называюмую модель Поттса с Q состояниями при $Q \to 1$ [57]. Авторы нашли частичную функцию этой модели Поттса

$$Z_{\text{Potts}} = \langle Q^{\sum_s m_s} \rangle,$$

где каждый узел решетки может быть в одном из Q различных состояний. Сумма берется по всем действительным кластерным числам m_s в данной конфигурации, и $n_s = \langle m_s \rangle$ — среднее число кластеров. Здесь усреднение определяется по всем случайным конфигурациям перколяции. Температура связана с вероятностью соотношением

$$\log(1-p) \propto T^{-1}$$

Для случая $Q = 2$ результат соотносится с моделью Изинга со спином 1/2 для ферромагнетиков. Легко можно увидеть, что случай $Q \to 1$ означает перколяцию. Для этого мы разложим

$$Q^{\sum_s m_s} = \exp\left(\ln(Q)\sum_s m_s\right) \approx 1 + \ln(Q)\sum_s m_s \approx 1 + (Q-1)\sum_s m_s$$

Тогда

$$-\frac{F_{\text{Potts}}}{k_B T} = \ln(Z_{\text{Potts}}) = \ln\langle 1 + (Q-1)\sum_s m_s\rangle \approx (Q-1)\sum_s \langle m_s\rangle$$

где F_{Potts} называется свободной энергией

$$F_{\text{Potts}} = -k_B T(Q-1)\sum_s n_s \text{ для } Q \to 1$$

В этом смысле сумма по всем кластерным числам в (1.4) соответствует пределу свободной энергии модели Поттса (подходящим образом нормированной). Итак, решение температурного фазового перехода в модели Поттса также дает решение для вероятностного фазового перехода в перколяции. (Предел $Q \to 0$ соответствует особому виду перколяции: в задаче связей допускаются только кластеры-деревья, т. е. кластеры, не имеющие циклов [57, 91]).

С помощью этого метода разложение возмущений порядка ε и ε^2 с $\varepsilon = 6 - d > 0$ дает в случае d–мерного пространства [27]

$$\beta = 1 - \varepsilon/7 - \frac{61}{12348}\varepsilon^2 + \ldots \tag{1.51}$$

$$\gamma = 1 + \varepsilon/7 + \frac{565}{12348}\varepsilon^2 + \ldots \tag{1.52}$$

Решающий шаг был скрыт. Обычно наш параметр возмущения имеет размерность d. Каков смысл в использовании на целой размерности вроде $d = 5.9$, для которого разложение должно быть хорошим? Очевидно, что в действительности нам нужны результаты для трехмерного и, возможно, двумерного случая. Однако численно уже даже довольно короткий ряд дает разумный результат для трехмерного случая. Введение не целой размерности Вильсоном и Фишером является новым численным инструментом для описания окружающей нас действительности.

Глава 2

Алгоритмы

Хотя в теории перколяции получен ряд строгих математических результатов, основной прогресс достигнут на пути использования компьютерных методов (изучение процессов путем моделирования методом Монте-Карло). Разработан ряд высокоэффективных алгоритмов, которые, в частности, позволили определить порог перколяции для множества решеток с высокой точностью. Работа по разработке новых эффективных алгоритмов интенсивно продолжается. Особый интерес представляют алгоритмы для обработки подструктур перколяционного кластера и алгоритмы, основанные на параллельных вычислениях.

2.1 Алгоритм Зиффа

Данный алгоритм [111] считается самым эффективным для определения порога перколяции, во всяком случае, для двумерных решеток. Кроме того, его реализация очень проста. Алгоритм успешно применялся для нахождения порогов перколяции с точностью до 6 значащих цифр для задачи узлов на квадратной решетке [112], для задачи узлов на решетке Кагоме [114] и архимедовых решетках [94].

Алгоритм основывается на двух идеях. Первая основана на модели градиентной перколяции [81,83] (ср. с движением диффузионнго фронта, раздел 1.12). В градиентной перколяции вероятность заполнения узла зависит от координаты, т. е. можно говорить о градиенте концентрации на решетке. Это значит, что узлы нижнего ряда решетки заняты с вероятно-

стью 0, узлы верхнего — с вероятностью 1. Вдоль вертикального направления, таким образом, вероятность заполнения узлов линейно растет. В верхней части решетки образуется перколяционный кластер, простирающийся слева направо. Сверху кластер ограничен границей решетки, а нижняя его часть образует оболочку (скорлупу) (hull). Двигаясь по границе оболочки с левой стороны решетки можно достичь ее правой границы. То есть оболочка образует путь через все решетку. Средняя высота этого пути равна порогу перколяции. Для каждого данного градиента концентрации оценка для порога перколяции может быть получена как отношение занятых узлов внешнего периметра к полному числу (занятые узлы плюс свободные узлы периметра).

$$p_c(\nabla p) = \frac{n_{occ}}{n_{occ} + n_{vac}},$$

где n_{occ} — число занятых связей оболочки, n_{occ} — число свободных связей оболочки. Если размер системы увеличивается или градиент концентраций уменьшается, то оценка порога перколяции зависит от градиента концентраций линейно. Это позволяет проводить простую экстраполяцию данных, полученных на конечной решетке, на случай бесконечной системы. На практике применяется достаточно малый градиент порядка $\Delta p/a \approx 10^{-4}$, где a — параметр решетки, после чего проводится экстраполяция на случай нулевого градиента.

Вторая идея заключается в том, как найти внешний периметр. Для этого используется хорошо известный метод обхода лабиринта: если двигаться по лабиринту, касаясь его стены левой рукой, то можно дойти до выхода из лабиринта.

Конкретная реализация идеи осуществляется следующим образом. Прменяется метод блуждания, генерирующего оболочку [102,110], при котором одновременно генерируется и идентифицируется граница кластера. Статус узла (занят или свободен), достигнутого в процессе случайного блуждания определяется путем генерации случайного числа и сравнения его с вероятностью заполнения узлов. Если в процессе блуждания данный узел еще не достигнут, то его статус не будет определяться, случайное число не будет генерироваться для него. Такой подход способствует увеличению эффективности алгоритма. Алгоритм не требует создания списков связных узлов или маркировки кластеров.

Инициализация решетки начинается с заполнения верхней половины первого столбца занятыми узлами, а нижней половины — свободными. В горизонтальном направлении налагаются периодические граничные усло-

вия. Каждый столбец очищается после того, как он был посещен.

2.2 Алгоритм Лиса

Для генерации отдельного кластера широко применяют алгоритм Лиса [61]. Алгоритм независимо был предложен также Хаммерсли [44] и Александровицем [3]. Идея алгоритма заключается в следующем. Выбираем на решетке некоторый начальный узел и полагаем, что он занят. Просматриваем все граничащие с ним узлы (периметр) и заполняем их с вероятностью p или оставляем пустыми с вероятностью $1-p$. После просмотра всех узлов периметра образуется кластер большего размера. Просматриваем все узлы, принадлежащие его периметру, заполняя их с вероятностью p, и т. д. Процесс продолжается до тех пор, пока не останется непроверенных ячеек. Кластеры, полученные методом Лиса, подчиняются распределению $s^2 n_s(p)$. Алгоритм применяют для изучения свойств единичного кластера, в частности, он может быть использован для получения кластерных подструктур (остова, скелета и т. п.).

2.3 Алгоритм Хошена–Копельмана

В 1976 г. Хошен и Копельман предложили алгоритм [52] для определения порога перколяции и подсчета размеров кластеров. В настоящее время этот алгоритм находит широкое применение и называется алгоритмом Хошена–Копельмана (по имени авторов) или алгоритмом многократной маркировки кластеров, как первоначально назвали его сами авторы. Главным достоинством алгоритма является то, что он позволяет определить порог перколяции и распределение кластеров по размерам за один проход по решетке. Кроме того, алгоритм позволяет экономить машинную память, так как для его работы достаточно хранить в памяти только один ряд (слой) рассматриваемой решетки.

В основе алгоритма лежит соображение о том, что принадлежность узла к тому или иному кластеру является глобальным свойством и может быть определена только после просмотра всей решетки. Идея алгоритма заключается в том, что всем занятым узлам решетки приписываются различные кластерные метки.

Рассмотрим работу алгоритма на примере задачи узлов на квадратной решетке. Следует иметь в виду, что существует множество вариантов ал-

горитма, мы рассмотрим лишь простейший. Моделировать решетку будет массив a размером $L \times L$.

Пусть узлы решетки заполнены с вероятностью p. Будем генерировать случайные числа, равномерно распределенные на интервале $[0, 1]$. Если сгенерированное число меньше или равно p, очередному элементу массива a присвоим значение 1, иначе — 0. Поскольку компьютерный эксперимент придется проводить многократно эту последовательность случайных чисел нужно зафиксировать. Хранить последовательность в виде массива было бы очень не экономично, но достаточно воспользоваться тем свойством генераторов псевдослучайных чисел, что каждый раз они генерируют одну и ту же последовательность чисел. Генерация решетки со случайным распределением заполненных узлов и присвоение узлам кластерных меток может проводиться одновременно.

Для того, чтобы работа со всеми элементами массива была единообразной, удобно добавить к нему одну строку с номером 0 и один столбец с номером 0, заполненные нулями. Кроме того, создадим массив кластерных меток cl. Первоначально значения элементов этого массива совпадают с их номерами. В процессе проверки эти номера могут изменяться. Если значение элемента массива стало меньше его номера, то такую кластерную метку называют неправильной. Правильное значение кластерной метки — значение элемента массива.

Начнем просматривать последовательно все элементы массива, начиная с элемента $a[1, 1]$. Нулевой столбец будем пропускать. Возможны следующие ситуации.

- Если значение текущего элемента массива равно 0, то переходим к следующему элементу.
- Если текущее значение равно 1, то осуществляем следующую проверку:
  - Если сосед слева $a[i, j-1]$ и сосед сверху $a[i-1, j]$ имеют значения 0, то в качестве рабочей гипотезы принимаем, что данный элемент входит в новый кластер, присваиваем текущему элементу номер очередной кластерной метки. Конечно, вполне может оказаться, что новый, как нам кажется, кластер является просто веткой какого-то другого кластера. Выяснить это мы сможем только просмотрев весь массив целиком.
  - Если сосед сверху имеет значение 0, а сосед слева не равен нулю, то текущая ячейка и ее сосед слева принадлежат одному

и тому же кластеру. Текущему элементу присваиваем номер кластерной метки соседа слева.

- Если сосед сверху имеет значение, отличное от нуля, а сосед слева нулевое значение, то текущая ячейка и ее сосед сверху принадлежат одному и тому же кластеру. Однако, у соседа сверху кластерная метка может быть неправильной, так как в результате последующих проверок могло выясниться, что кластер, к которому принадлежит эта ячейка, слился с другим кластером. Поэтому текущему элементу следует присвоить номер *правильной кластерной метки* соседа сверху.
- Если и сосед сверху и сосед слева имеют ненулевые значения, то все три ячейки принадлежат одному кластеру. Текущему элементу присваиваем наименьший из номеров правильных кластерных меток соседа сверху и соседа сверху. Корректируем массив кластерных меток. Для этого в элемент массива cl, соответсвующий большей из кластерных меток заносим номер правильной кластерной метки.

Рассмотрим еще один вариант алгоритма, позволяющий одновременно получить распределение кластеров по размерам. Для подсчета распределения кластеров по размерам потребуется вспомогательный массив N.

1. Если текущий узел не имеет соседних занятых узлов, то предположительно он относится к новому кластеру и ему приписывается очередной номер кластерной метки k.

2. Заносим в массив N размер нового кластера $N(k) := 1$. Поскольку генерация решетки и присвоение кластерной метки происходит одновременно, то при анализе соседних узлов, естественно, рассматривается только та часть решетки, которая уже сгенерирована к текущему моменту.

3. Если текущий узел имеет только один соседний занятый узел, то эти два узла принадлежат к одному и тому же кластеру. Текущему узлу присваиваем номер правильной кластерной метки соседнего узла ($k_{\text{proper}}^{\text{neighbor}}$), увеличиваем размер кластера на единицу $N(k_{\text{proper}}^{\text{neighbor}}) := N(k_{\text{proper}}^{\text{neighbor}}) + 1$.

4. Если текущий узел имеет соседние занятые узлы, то текущий узел объединяет соседние кластеры в один. Главной находкой авторов

алгоритма является идея о том, что не следует проводить переприсваивание кластерных меток уже просмотренным узлам. Определяем минимальную правильную кластерную метку соседних узлов и присваиваем ее текущему узлу. Подсчитываем полное число узлов в новом объединенном кластере $N(k) := 1 + \sum_i N(k_i)$.

5. Суммирование проводится по всем соседним занятым узлам с положительными кластерными метками. Теперь различные узлы, принадлежащие одному и тому же кластеру, помечены различными кластерными метками. Чтобы отметить их принадлежность к одному кластеру необходимо изменить их кластерные метки. Для этого в элементы массива N, соответствующие неправильно помеченным кластерам, заносится $-k$ — номер правильной кластерной метки со знаком минус.

Таким образом, когда вся решетка будет сформирована, пустые узлы будут помечены нулями, а занятые узлы — положительными целыми числами. Кроме того, будет сформирован массив кластерных меток, состоящий из положительных и отрицательных целых чисел. Узлам, сразу помеченным правильными кластерными метками, соответствуют положительные целые числа — размер кластера, а узлам, которые в процессе анализа изменили свои первоначальные метки, — отрицательные.

Полученное при моделировании значение порога перколяции для решетки конечного размера должно быть экстраполировано на бесконечность. Для этого можно воспользоваться скейлинговыми соотношениями.

Если под величиной $\langle p_c(L)\rangle$ понимать среднее значение концентрации, при которой перколяция впервые возникает на решетке с линейным размером L, то справедливо соотношение [89]

$$|\langle p_c(L)\rangle - p_c(\infty)| \propto L^{-1/\nu} \tag{2.1}$$

Если критический показатель ν неизвестен или для независимой проверки можно воспользоваться соотношением

$$|\langle p_c(L)\rangle - p_c(\infty)| \propto \Delta(L), \tag{2.2}$$

где $\Delta(L)$ — дисперсия, определяемая выражением

$$\Delta(L) = \sqrt{|\langle p_c(L)^2\rangle - \langle p_c(L)\rangle^2|}. \tag{2.3}$$

Кроме того, можно построить зависимость вероятности возникновения протекания $P(p)$ от концентрации. Точка, соответствующая вероятности 50%, является порогом перколяции. Аппроксимацию экспериментальных данных проводят либо с помощью полиномов, либо с помощью интеграла ошибок.

2.4 Алгоритмы поиска в глубину и ширину

Хотя алгоритмы поиска в глубину (depth first search, DFS) и ширину (breadth first search, BFS) [119] (см. также обзор [6]) могу применяться для нахождения стягивающего кластера и определения порога перколяции, обычно они используются для исследования кластерных подструктур.

2.4.1 Алгоритм поиска в глубину

Алгоритм поиска в глубину (Depth First Search — DFS) может использоваться для поиска путей на графе или покрывающего дерева графа. Алгоритм может быть разделен на два шага:

1. Создать связанный список. Каждый элемент должен (нести) переменную типа Boolean «проверено», установленную на (FALSE).

2. Выбрать непроверенный элемент из списка. Пометить его как проверенный. Выполнить процедуру поиска в глубину для соседнего непроверенного элемента. Повторять, пока список не исчерпается.

Программа 2.4.1 Поиск в глубину

```
function DFS (vertex.V,i);
checked.V:=TRUE;
for vertex.W in (соседи V) do
     if not checked.W do DFS(vertex.W,i);
return; {конец рекурсивной функции DFS}
```

Вся программа, включая создание связанного списка, не превысит одной страницы, и, что еще важнее, логика программы основана всего на

пяти этих строках[1]. Вместо рекурсивной функции можно использовать стек.

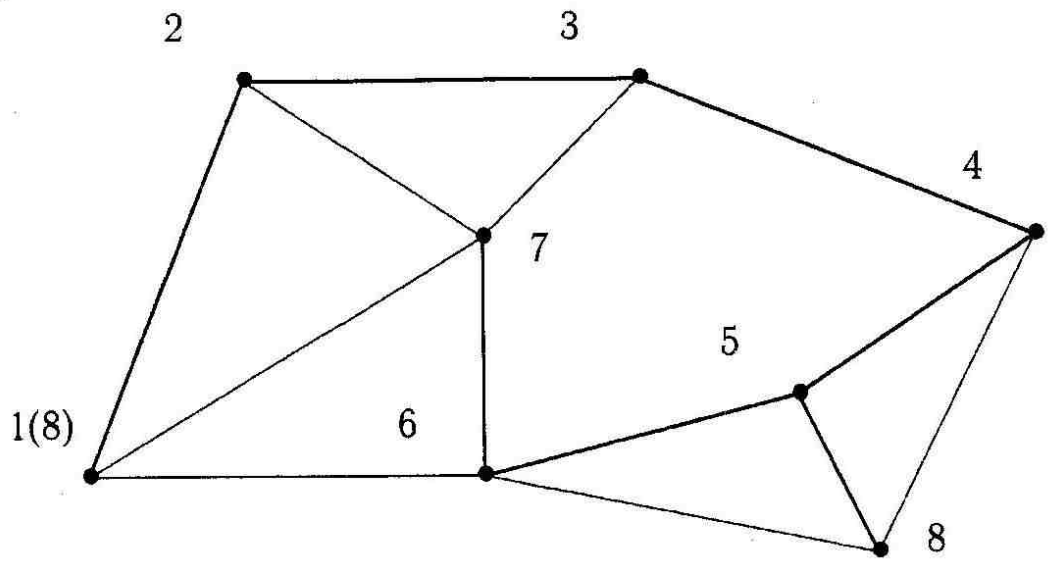


Рис. 2.1. Порядок просмотра узлов при поиске сначала в глубину. Жирными линиями показано покрывающее дерево, полученное в результате выполнения алгоритма.

2.4.2 Алгоритм поиска в ширину

Очевидное изменение организации работы процедуры — замена стека на очередь. В этом случае будет применяться принцип FIFO — First In First Out — первым пришел первым ушел. В данном алгоритме сначала просматриваются все узлы из ближайшего окружения данного узла, после чего процесс продолжается с узлами периметра. На шаге n в очереди находятся все узлы, расположенные на расстоянии n от исходного. Этот факт позволяет использовать алгоритм для нахождения таких подструктур как скелет кластера.

Алгоритм поиска в ширину (Breadth First Search — BFS) сходен с алгоритмо DFS, с той лишь разницей, что узлы помещаются не в стек, а в очередь. Алгоритм может применяться, чтобы найти кратчайший путь между двумя узлами.

[1]Нотация, используемая здесь, не следует строго конкретному языку программирования, но, можно надеяться, является достаточно ясной.

1. Создайте связанный список. Каждый элемент должен нести две переменные типа (boolean): **проверенный** и **в очереди**, обе помеченные как (FALSE), и переменную типа (integer) ((LEVEL)), помеченную (0).

2. Пометьте два узла (скажем, (1) для узла с самой большой y-координатой и (2) для узла с наименьшим y).

3. Начните поиск в ширину элемента с меткой (2) с узла (1). Когда элемент с меткой (2) найден, BFS может вернуть длину наикратчайшего пути между (1) и (2), которая пропорциональна уровню поиска, достигнутого к тому моменту.

Функция BFS может быть использована для нахождения наикратчайшего пути следующим образом:

Программа 2.4.2 Поиск в ширину

```
1 function BFS (vertex.V);
2 создать очередь с единственным элементом V;
3 InTheQueue.V:=TRUE;
4 while queue not empty
5 V:=Read (queue);
6 Pop (queue);
7 checked.V:=TRUE;
8 for vertex.W in (соседи V)
9 if ((not InTheQueue.W) AND (not checked.W)) do
10 Level.W:=Level.V + 1;
11 InTheQueue.W:=TRUE;
12 Inject (queue, W);
13 end; {do}
14 end; {for}
15 end; {while}
16 return; {конец функции BFS}
```

Ход программы для этой функции показан графически на рис. 2.2. Числа в круглых скобках соответствуют переменной (LEVEL), присвоенной узлу. Другое число соответствует порядку, в котором узлы входят в очередь.

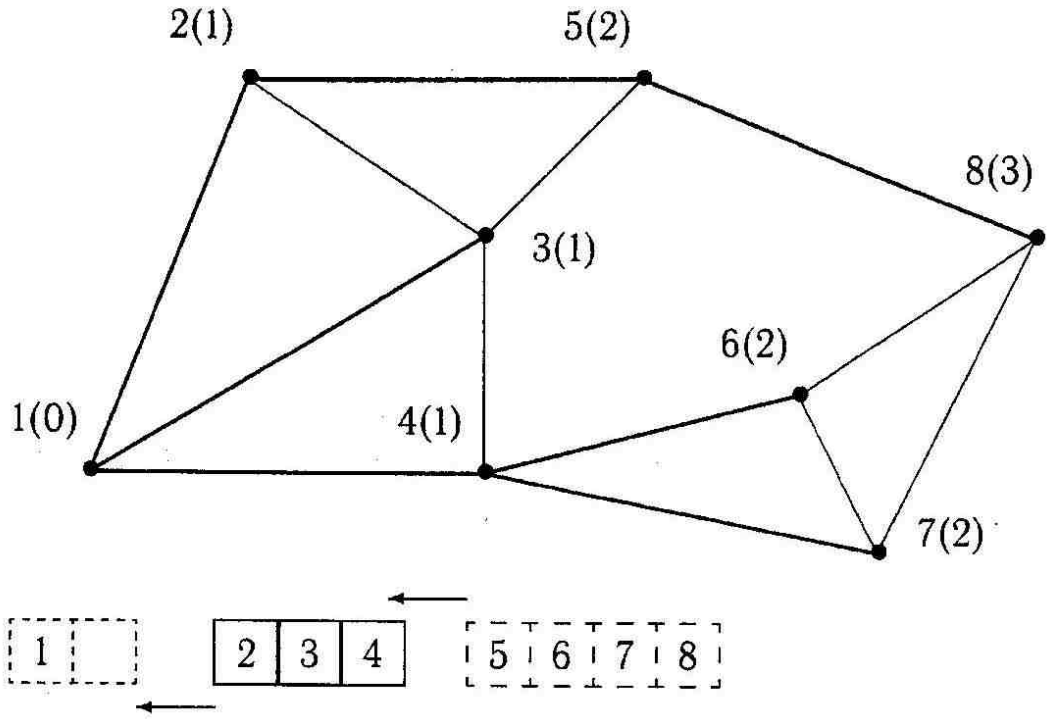


Рис. 2.2. Пример нумерации узлов при поиске в ширину. Внизу показана очередь, необходимая для второго шага.

Прямоугольники внизу, нарисованные сплошной линией, представляет собой очередь, заполненную до второго выполнения инструкций Read (queue) и Pop (queue). Стрелки показывают изменения в содержимом очереди, перед третьим исполнения упомянутых инструкций.

После завершения процедуры целое число (Level), написанное на каждом элементе, означает наикратчайший путь из соответствующего узла к узлу, где поиск начался — начальный пункт поиска в ширину. Если поиск начался с узла, помеченного (1) (см. выше), значение (Level), присвоенное узлу с меткой (2), даст наикратчайший путь между этими двумя узлами (предполагается, что все соединения имеют равную длину).

2.5 Специальные алгоритмы

Решение специфических задач, например, идентификация кластерных подструктур, требует разработки специальных алгоритмов. Иногда удается построить эффективный алгоритм для решения задачи для какого-то определенного типа решеток (как правило, плоских). Для получения результатов с высокой точностью приходится проводить компьютерные экс-

перименты на объектах большога размера. В этом случае представляется целесообразным применять параллельные алгоритмы. Вот далеко не полный перечень ситуаций, в которых возникает потребность в модификации существующих или создании принципиально новых алгоритмов.

Одной из наиболее сложных задач теории перколяции является отыскание остова перколяционного кластера. Решением этой проблемы занимались многие аворы в различных подходах (см., например, обширный список публикаций в [75,101]). Так, в работе [101] был предложен алгоритм для определения остова перколяционного кластера в случае плоского графа, который в отличии от алгоритма Хошена–Копельмана идентифицирует мертвые концы кластера по их локальным свойствам. Эффективность алгоритма в 4 раза выше, чем у алгоритма поиска в глубину, потребность в памяти такая же, как и у алгоритма Хошена–Копельмана. Алгоритм основан на теореме Жордана.

В работе [37] был описан и использован эффективный рекурсивный алгоритм для отыскания остова перколяционного кластера в двумерном случае. Идея алгоритма основывается на «правиле левой руки»: если двигаться в темноте по лабиринту, все время касаясь левой рукой стены, то в конечном итоге можно добраться до выхода из лабиринта. Этот подход применяется, в частности, для определения внешнего периметра перколяционного кластера. Однако, если остановить процесс, когда будет достигнута противоположная сторона системы (решетки, на которой рассматривается перколяционный процесс), то будет получен только фрагмент внешнего периметра. Все узлы этого фрагмента, которые были пройдены дважды в различных направлениях, относятся к мертвым концам, все остальные узлы относятся к остову. Многократно применяя эту процедуру, можно разделить перколяционный кластер на остов и мертвые концы.

Параллельные алгоритмы начали применяться для решения перколяционных задач достаточно давно (см., например, обзор в [93]). Важным стимулом для развития эффективных параллельных алгоритмов для подсчета кластера стала динамика переворота кластера для моделирования методом Монте-Карло спиновых систем. Такая динамика впервые была предложена в 1987 году [62] (так называемая динамика Свенцен-Ванга) и после этого подвержена многочисленным модификациям [22,23,105].

Спиновые переменные, определенные на узлах решетки, могут формировать кластеры из одинаковых, т. е. параллельных, спинов. Два параллельных соседних спина могут принадлежать одному кластеру, если соблюдается дополнительное правило (вероятностное или зависящее от

температуры). Теперь важным свойством кластера является направление спина, а не его размер.

Для последовательного алгоритма можно легко видоизменить алгоритм Хошена–Копельмана, чтобы выполнить динамику переворота кластера. Такие алгоритмы оказались весьма эффективными для очень больших систем на пороге критичности, и многие работы были посвящены развитию параллелизованных кодов. Можно выделить два класса алгоритмов: для компьютеров с несколькими, но мощными процессорами и для параллельных компьютеров. Оказывается, что параллельные компьютеры подходят для малых систем, а компьютеры с мощными процессорами — для больших систем [5].

Можно соотнести конфигурацию узлов при перколяции перколяции с конфигурацией процессоров для компьютера с несколькими тысячами (даже сотнями тысяч [51]) процессоров — скажем, один или несколько узлов на процессор. Маркировка кластеров здесь заменяется на параллельную корректировку на всех процессорах. Если каждый процессор соответствует одиному узел, то маркировка может быть описана как процедура «местной диффузии» [17, 40]. Предполагая, что все процессоры были инициализированы разными метками, на каждом корректирующем шаге каждый процессор проверяет всех своих соседей и выбирает значение наименьшей метки в качестве своей собственной для следующего корректирующего шага. Это повторяется до тех пор, пока не прекратится изменение меток, и таким образом процессоры с равными метками образуют кластеры. Дальнейшее обсуждение приложений к спиновым моделям может быть найдено в [5].

Алгоритмы для параллельных компьютеров с несколькими, но мощными процессорами привлекают больше внимания, по крайней мере потому, что каждый кластер сетевой рабочей станции может играть роль параллельного компьютера. В этом случае параллелизованные версии алгоритма алгоритм Хошена–Копельмана представляют первоочередной интерес. Сейчас принято, что алгоритм Хошена–Копельмана может быть успешно параллелизован [40,58]. Идея состоит в том, чтобы разделить квадратный образец на полоски: по одной полоске на процессор. На каждой полоске действует последовательный алгоритм Хошена–Копельмана (параллельно с другими), сохраняя метки для пограничных узлов. Затем главный процессор собирает данные и восстанавливает конфигурацию полностью.

Глава 3

Некоторые приложения теории перколяции

Применения теории перколяции столь обширны и разнообразны, что только этому вопросу посвящена целая монография [82] и многочисленные обзоры (например, [21]). Трудно назвать область, в которой бы не применялась теория перколяции. Образование гелей [26, 92], прыжковая проводимость в полупроводниках [130], распространение эпидемий [85,89], ядерные реакции [12–14], образование галактических структур [85], свойства пористых материалов [16] — вот далеко не полный перечень разнообразных приложений теории перколяции. Не представляется возможным дать сколь-нибудь полный обзор работ по приложениям теории перколяции, поэтому мы остановимся только на некоторых избранных вопросах.

3.1 Процессы гелеобразования

Хотя именно процессы гелеобразования были первыми задачами, где был применен перколяционный подход, эта область еще далеко не исчерпана. Процесс гелеобразования заключается в слиянии молекул. Когда в системе возникают агрегаты, простирающиеся сквозь всю систему, говорят, что произошел переход золь-гель. Обычно считают, что система описывается тремя параметрами — концентрацией молекул, вероятностью образования связей между молекулами и температурой. Послед-

ний параметр влияет на вероятность образования связей. Таким образом, процесс гелеобразования можно рассматривать как смешанную задачу теории перколяции. Весьма примечательно, что этот же подход используется и для описания магнитных систем [48]. Имеется любопытное направление для развития этого подхода. Задача гелеобразования белка альбумина имеет важное значение для медицинской диагностики [128]. Известно, что молекулы белка имеют вытянутую форму. При переходе раствора белка в фазу геля существенное влияние оказывает не только температура, но и наличие примесей в растворе и на поверхности самого белка. Таким образом, в смешанной задаче теории перколяции необходимо дополнительно учесть анизотропию молекул. В определенном смысле это сближает рассматриваемую задачу с задачей «иголок» и задачей Накамуры. Определение порога перколяции в смешанной задаче для анизотропных объектов — новая задача теории перколяции. Хотя для целей медицинской диагностики достаточно решить задачу для объектов одного типа, представляет интерес исследовать задачу для случаев объектов разной степени анизотропии и даже разной формы. Как уже отмечалось ранее, задача «иголок» занимает промежуточное место между решеточными и континуальными задачами, поэтому следующим естественным шагом является переход к континуальному рассмотрению процесса гелеобразования белка.

3.2 Применение теории перколяции для описания магнитных фазовых переходов

Одной из особенностей соединений на основе La_2CuO_4 и $YBa_2Cu_3O_7$ является переход из антиферромагнитного в парамагнитное состояние уже при незначительном отклонении от стехиометрии. Исчезновение дальнего порядка происходит при избыточной концентрации дырок $x = 0.02$ в плоскости CuO_2, в то же время ближний антиферромагнитный порядок сохраняется в широкой области концентраций x вплоть до сверхпроводящей фазы [127].

На качественном уровне явление объясняется следующим образом. При допировании дырки появляются на атомах кислорода, что приводит к возникновению конкурирующего ферромагнитного взаимодействия между спинами и подавлению антиферромагнетизма. Резкому снижению температуры Нееля также способствует движение дырки, приводящее к

разрушению дальнего антиферромагнитного порядка [120].

С другой стороны, количественные результаты резко расходятся со значениями порога протекания для квадратной решетки ($p_c = 0.41$), в рамках которой удается описать фазовый переход в изоструктурных материалах [127]. Встает задача видоизменить теорию протекания таким образом, чтобы в ее рамках описать фазовый переход в слое CuO_2.

При описании слоя CuO_2 считается, что на каждый атом меди приходится одна локализованная дырка, то есть полагают, что все атомы меди магнитные. Однако, результаты зонных [121] и кластерных [117] расчетов показывают, что в недопированном состоянии числа заполнения меди составляют $0.5 - 0.6$, а для кислорода — $0.1 - 0.2$. На качественном уровне этот результат легко понять, анализируя результат точной диагонализации гамильтониана для кластера Cu_2O_4 с периодическими граничными условиями. Основное состояние кластера представляет собой суперпозицию антиферромагнитного состояния ($Cu \uparrow Cu \downarrow$) и состояний без антиферромагнитного упорядочения на атомах меди.

Можно считать, что примерно на половине атомов меди имеется по одной дырке, на остальных атомах меди имеется либо ни одной, либо две дырки. Альтернативная интерпретация: лишь половину времени дырка проводит на атомах меди. Антиферромагнитное упорядочение возникает в том случае, когда на ближайших атомах меди имеется по одной дырке. Кроме того, необходимо, чтобы на атоме кислорода между этими атомами меди либо не было дырки, либо было две дырки, чтобы исключить возникновение ферромагнитного взаимодействия. При этом не имеет значения, рассматриваем мы мгновенную конфигурацию дырок или одну из составляющих волновой функции основного состояния.

Используя терминологию теории протекания, будем называть атомы меди с одной дыркой неблокированными узлами, а атомы кислорода с одной дыркой разорванными связями. Переход дальний антиферромагнитный порядок — ближний антиферромагнитный порядок в этом случае будет соответствовать порогу протекания, то есть появлению стягивающего кластера — бесконечной цепочки неблокированных узлов, соединенных неразорванными связями.

По крайней мере два момента резко отличают задачу от стандартной теории протекания: во-первых, стандартная теория предполагает наличие атомов двух сортов, магнитных и немагнитных, мы же имеем только атомы одного сорта (меди), свойства которых меняются в зависимости от локализации дырки; во-вторых, стандартная теория считает два узла связанными, если оба они не блокированы (магнитные) — задача узлов,

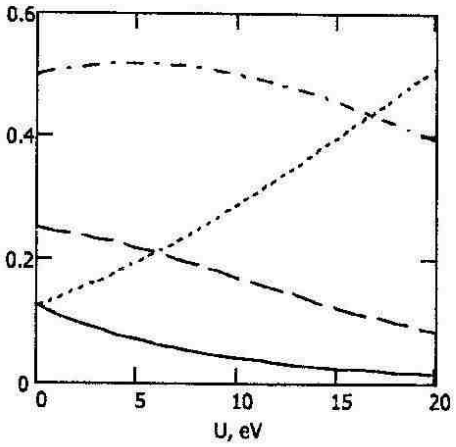


Рис. 3.1. Вероятность реализации различных дырочных конфигураций в кластере Cu_2O_4 с периодическими граничными условиями в зависимости от параметра электростатического взаимодействия на атомах меди. Пунктирная линия — (Cu ↑ Cu ↓), штрих-пунктирная — (Cu ↑↓), штриховая — (Cu ↑ O ↓), сплошная — (O ↑ O ↓ +O ↑↓).

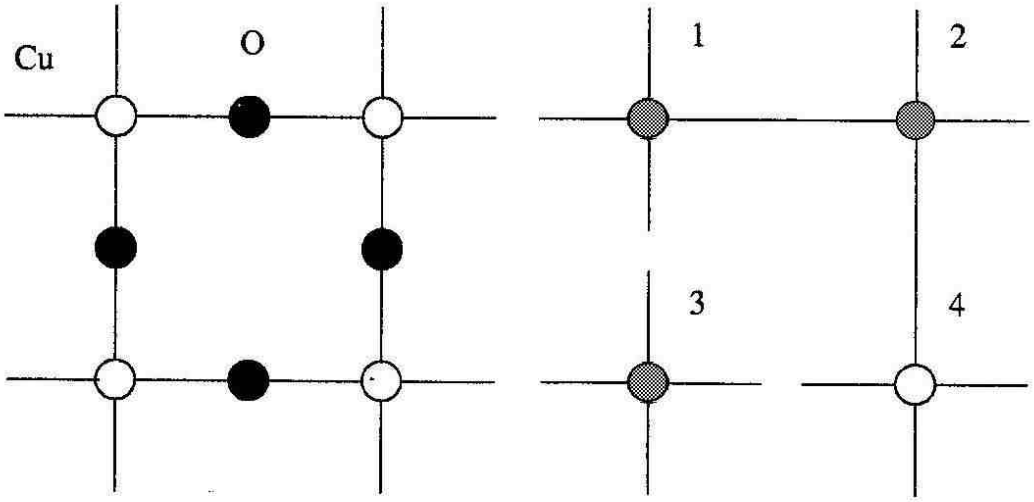


Рис. 3.2. а) Фрагмент плоскости CuO_2; б) образование кластера в плоскости. Серым цветом показаны атомы меди, на которых имеется одна дырка. Связь между магнитными атомами 1 и 3 разорвана; хотя атомы 2 и 4 связаны, они не образуют кластера, так как атом 4 не имеет магнитного момента.

либо, если связь между ними не разорвана — задача связей; в нашем же случае происходит как блокирование узлов, так и разрыв связей.

Таким образом, задача сводится к отысканию порога протекания на квадратной решетке для комбинированной задачи узлов и связей.

При рассмотрении мгновенной конфигурации дырок на атомах меди в недопированном состоянии ($p_s = 0.5 - 0.6$) уже на качественном уровне становится понятно, что система находится вблизи порога протекания ($p_s = 0.5$). Малое изменение как p_s, так и p_b приводит к резкому изменению свойств системы. Проведенный расчет подтверждает этот вывод количественно, демонстрируя плавную монотонную зависимость порога протекания при переходе задача узлов — комбинированная задача — задача связей.

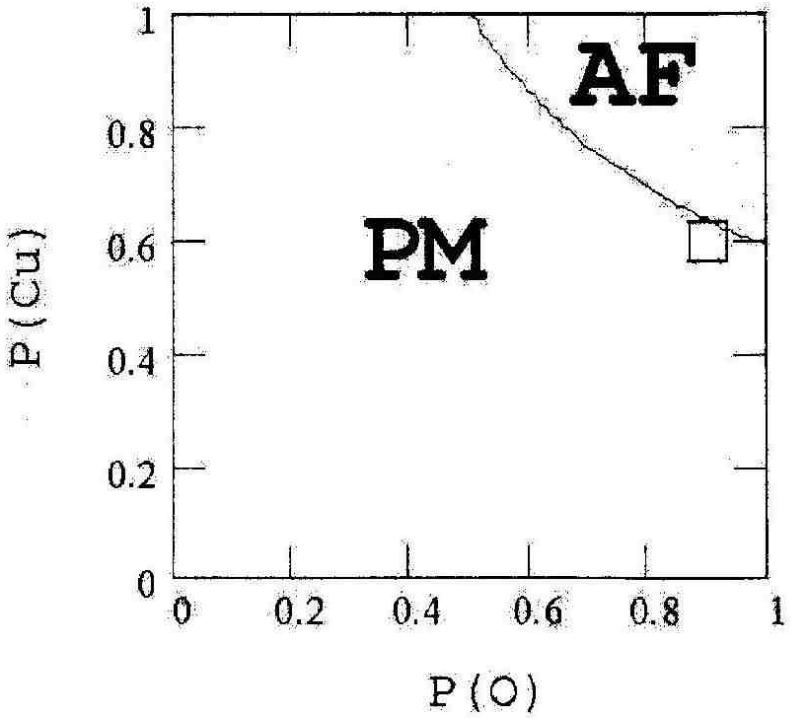


Рис. 3.3. Фазовая диаграмма. Недопироапнное состояние помечено квадратиком.

Приложение А

Значения порогов перколяции для различных решеток

В таблице использованы следующие обозначения:

- $p_{\triangle} = 2\sin(\pi/18) = 0.347296\ldots$,
- $1 - p_{\triangle} = 0.652703\ldots$,
- $p_{\bowtie} = 0.5474(2)$ — единственный корень уравнения $1 - p - 6p^2 + 6p^3 - p^5$ на интервале $(0, 1)$.

Таблица А.1. Значения порогов перколяции для различных решеток

lattice	p_s	Источник	p_b	Источник
треугольная	0.5	[59, 95]	$p_\triangle$	[95]
квадратная	0.592 746 0(5)	[111]	0.5	[59]
шестиугольная	0.697 043 (3)	[94]	$1 - p_\triangle$	[95]
«бабочка»			$p_{\bowtie}$	[104]
Кагоме	0.652 703 . . .	[95]	0.524 405 3(3)	[114]
octagonal	0.5	[95]	0.3230(2)	[70, 74]
star-dual	0.5	[95]	0.2593(2)	[74]
low-p_b	0.5	[95]	0.2006(3)	
puzzle	0.550806(3)	[94]	0.4142(2)	
direct	0.550213(3)	[94]	0.4195(2)	
кубическая, simple cubic, sc	0.311 608 0(3)	[64]	0.248 812 6(5)	[65]
объемноцентрированная (bcc)	0.245 961 5(10)	[64]	0.180 287 5(10)	[65]
гранецентрированная (fcc)	0.199 236 5(10)	[64]	0.120 163 5(10)	[65]
гексагональная плотно упакованная (ГПУ), hcp	0.199 255 5(10)	[66]	0.120 164 0(10)	[66]
алмаза	0.4301(2)	[73]	0.3893(2)	[70]
4d-cubic	0.196901(5)	[8]	0.1600(2)	[32]
4d-fcc	0.0842(3)	[73]	0.049(1)	[73]
5d-fcc	0.0431(3)	[73]	0.026(2)	[73]
5d-Кагоме	0.2084(4)	[72]	0.130(2)	[73]

Приложение В

Элементарные сведения по теории графов

Данное приложение содержит основные термины и определения теории графов и служит цели облегчить физикам понимание работ по теории перколяции, написанных математиками. Для дальнейшего знакомства с теорией графов можно порекомендовать, например, [126].

Будем обозначать V — множество *точек* (*вершин*). Обозначение происходит от слова vertex — вершина. Обозначение $v \in V$ означает, что v — вершина из множества V.

Линии, соединяющие вершины (v_i, v_j), называются *рёбрами* E. От английского edge — ребро.

Альтернативное определение. *Ребро* — упорядоченная или неупорядоченная пара вершин. $E = (a, b), \quad a, b \in V$.

Граф (graph) G — множество вершин V и набор рёбер E.

$$G = G(V, E)$$

Иногда граф называют *сетью* (network), вершины — *узлами* (node), рёбра — *связями* (bond).

Неупорядоченная пара вершин называется (неориентированное) *ребро* (undirected edge).

$$E = (a, b) = (b, a)$$

Граф, содержащий только неориентированные рёбра, называется *неориентированный граф*.

Упорядоченная пара вершин называется *ориентированным ребром* (directed edge) или *дугой* (arc).

$$(a, b) \neq (b, a)$$

Граф, содержащий только ориентированные ребра (дуги), называется *ориентированным графом* (directed graph) или иногда *орграфом*.

Граф, содержащий как ориентированные, так и неориентированные ребра, называется *смешанным* или *частично ориентированным* графом.

Говорят, что ребро $E = (a, b)$ *инцидентно* вершинам a и b. Вершины a и b инцидентны ребру E.

Вершина, не инцидентная никакому ребру, называется *изолированной*.

Граф, состоящий только из изолированных вершин, называется *нуль-графом* или *вполне несвязным* или *пустым*.

Две вершины называются *смежными*, если существует соединяющее их ребро.

Два графа G_1 и G_2 называются *изоморфными*, если существует взаимно однозначное соответствие между множествами вершин, такое что, число ребер, соединяющих две любые вершины в G_1, равно числу ребер в G_2.

Степень или *валентность* вершины a — число ребер, инцидентных вершине $\rho(a)$.

Для изолированной вершины $\rho(a) = 0$.

Вершина степени 1 называется *висячей* или *концевой*.

В случае ориентированнога графа говорят о *полустепени исхода* и *полустепени захода*, то есть числе ребер входящих в данную вершину и исходящих из нее.

Если полустепень исхода верщины равна нулю, то такая вершина называется *стоком*.

Если полустепень захода верщины равна нулю, то такая вершина называется *источником*.

Граф, имеющий только один источник и только один сток, называется *сетью*.

Полный граф — такой граф, ребрами которого являются *все* возможные пары вершин из V. В полном графе любые две вершины смежные. Полный граф с n вершинами обозначают K_n.

Граф называется *двудольным*, если его вершины можно раскрасить двумя цветами так, что вершины одного цвета имеют смежные вершины

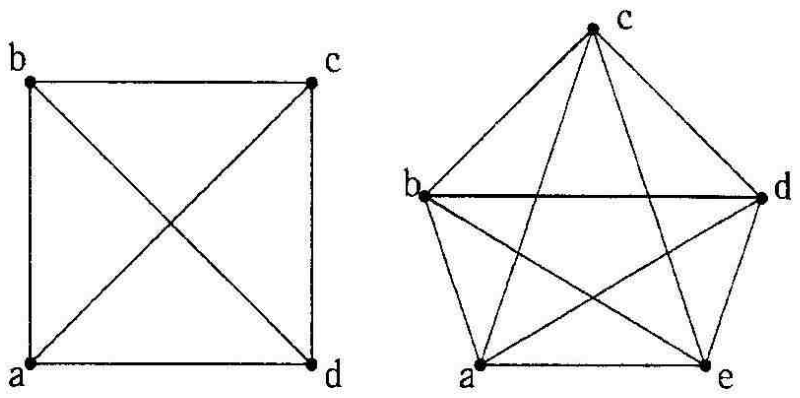


Рис. В.1. Полные графы K_4 и K_5.

только другого цвета. Полный двудольный граф обозначают $K_{n,m}$.

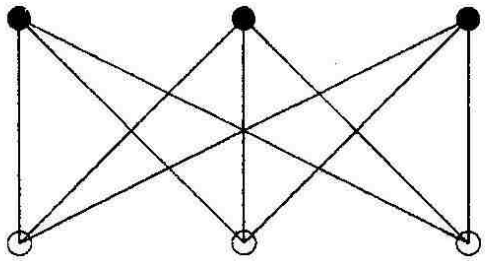


Рис. В.2. Двудольный граф $K_{3,3}$.

Ребро, у которого обе концевые точки совпадают, называется *петлей* (loop).

$$L = (a, a)$$

Вершины могут соединяться несколькими ребрами. Такие ребра называются *кратными*.

$$E_i = (a, b)_i$$

Граф, который не содержит петель и кратных рёбер, называется *простым*.

Если число ребер [и число вершин] бесконечно, то граф называется *бесконечным*.

Если все локальные степени $\rho(a)$ конечны, то граф называется *локально конечным* (localy finite).

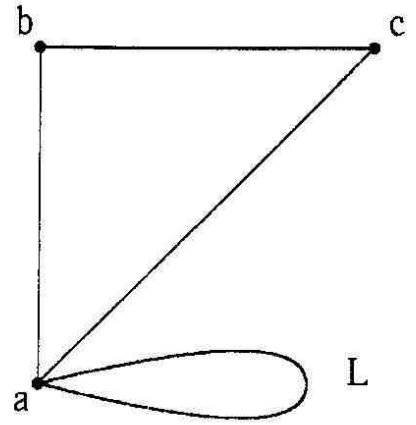


Рис. В.3. Петля.

Граф называется *однородным* или *регулярным* (regular) степени n, если

$$\rho(a) = n, \quad \forall a \in V$$

Цепь (chain) — последовательность идущих друг за другом ребер.

Путь (path) — это цепь, в которой все ребра различны.

Если все вершины пути, за исключением может быть первой и последней, различны, то путь называется *простым*.

Замкнутая цепь называется *циклом*. Цикл — это связный регулярный граф степени 2. Цикл из n вершин обозначают C_n. Цикл называется простым, если он не проходит ни через одну вершину более одного раза.

Ориентированный граф называется *(слабо) связным* (connected), если связен соответствующий ему неориентированный граф.

Ориентированный граф называется *(сильно) связным* (strongly

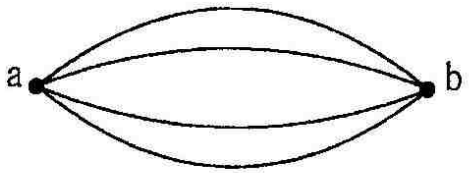


Рис. В.4. Кратные рёбра.

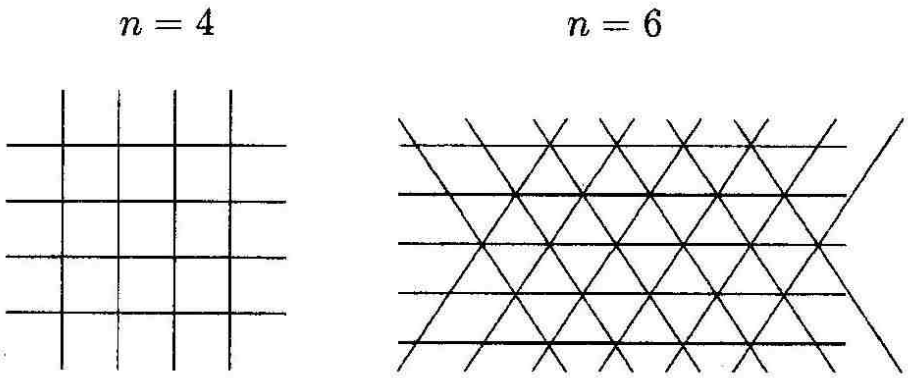


Рис. В.5. Фрагменты регулярных графов.

connected), если любые два различных узла в нем соединены ориентированным путем.

Лес — это граф без циклов.

Дерево (tree) — это граф, в котором существует одна и только одна цепь, соединяющая каждую пару вершин. Таким образом, дерево — связанный граф без циклов.

Вершины степени 1 в дереве называются *листьями*.

Дерево, содержащее все вершины некоторого графа G, называется *покрывающим деревом* (spanning tree) графа G.

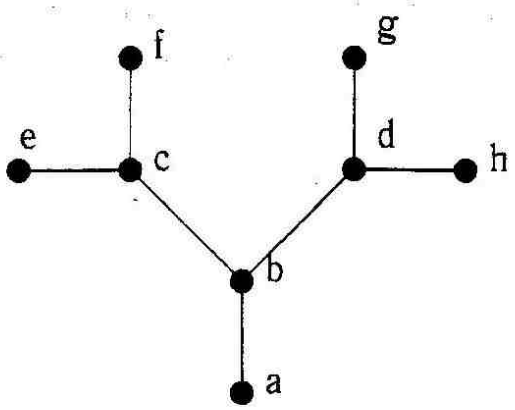


Рис. В.6. Двоичное дерево.

Гранью называют часть плоскости, ограниченной простым циклом и не содержащей внутри других циклов.

Граф называется *плоским* или *планарным* (planar), если он может быть изображен на плоскости так, что все пересечения ребер являются вершинами.

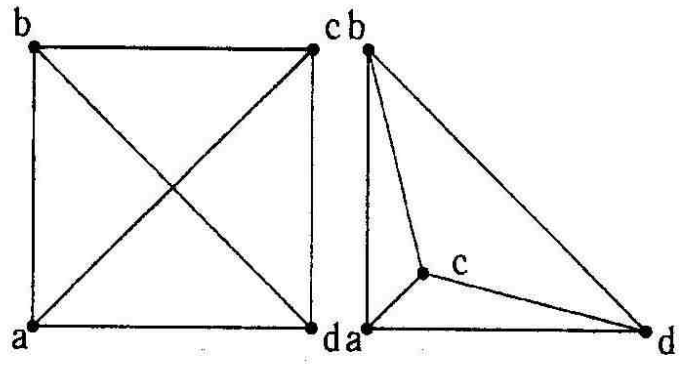


Рис. В.7. Полный граф K_4 является плоским.

Теорема В.0.1 (Фари). *Простой планарный граф всегда можно изобразить на плоскости так, что все его рёбра будут отрезками прямых линий.*

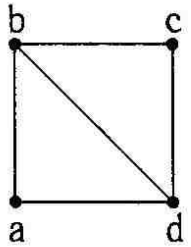
Простой граф называется *максимально плоским*, если нельзя добавить к нему ни одного ребра так, чтобы полученный граф был плоским. Все грани максимально плоского графа — треугольники, поэтому максимально плоский граф еще называют *триангулированным*.

Теорема В.0.2. *Графы K_5 и $K_{3,3}$ не планарны.*

Два графа *гомеоморфны* (тождественны до вершин степени 2), если они могут быть получены из одного и того же графа включением в его ребра новых вершин степени 2.

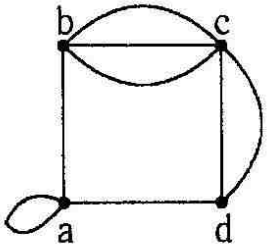
Два любых циклических графа гомеоморфны.

Матрица смежности вершин — это квадратная матрица, каждая строка и каждый столбец которой сопоставлены определенной вершине графа. Матричный элемент равен числу ребер (дуг), связывающих две вершины.



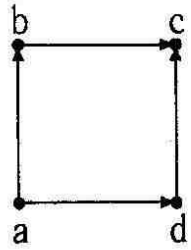
	a	b	c	d
a	0	1	0	1
b	1	0	1	1
c	0	1	0	1
d	1	1	1	0

простой граф



	a	b	c	d
a	1	1	0	1
b	1	0	3	0
c	0	3	0	2
d	1	0	2	0

граф с кратными ребрами и петлей



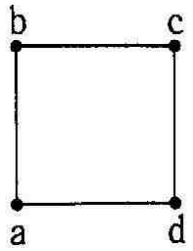
	a	b	c	d
a	0	1	0	1
b	0	0	1	0
c	0	0	0	0
d	0	0	1	0

ориентированный граф

Сумма элементов строки (столбца) матрицы смежности равна степени соответствующей вершины.

Если обозначить матрицу смежности $\mathbf{M}$, то матричный элемент $\|\mathbf{M}^m\|_{i,j}$ будет показывать, сколько различных путей длины m ведет из вершины i в вершину j.

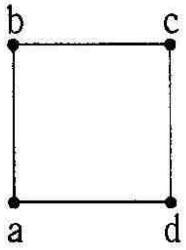
Матрица смежности рёбер показывает, какие ребра являются смежными. Это квадратная матрица, каждая строка и каждый столбец которой сопоставлены определенному ребру. Матричный элемент равен нулю, если соответствующие ребра не смежны, и равен 1, если смежны.



	ab	bc	cd	da
ab	0	1	0	1
bc	1	0	1	0
cd	0	1	0	1
da	1	0	1	0

Матрица инцидентности считается компактным способом представления графа. Это прямоугольная матрица $n \times m$, где n — число вершин,

а m — число ребер. Столбцы этой матрицы сопоставляют ребрам, а строки — вершинам графа. Матричный элемент равен нулю, если вершина не инцидентна ребру, и равен единице, если инцидентна.



	ab	bc	cd	da
a	1	0	0	1
b	1	1	0	0
c	0	1	1	0
d	0	0	1	1

Обобщение этих матриц — конечные и бесконечные матрицы, элементы которых вещественные числа $\rho(a, b)$, обозначающих меру, мощность, пропускную способность ребра.

Если рассматривать матрицу смежности ребер как матрицу смежности вершин, то можно получить *смежностный* или *рёберный* или *покрывающий* граф. Такой переход соответствует преобразованию ребра в вершину (bond-to-site transformation).

Реберный граф $L(G)$ простого графа G — это такой граф, в котором вершины сопоставлены рёбрам G. Вершины в $L(G)$ смежные, если соответствующие им рёбра в G смежные.

Для построения смежностного графа поставим в середине каждого ребра исходного графа точки. Это — вершины смежностного графа. Соединим полученные вершины между собой, если они лежат на смежных ребрах.

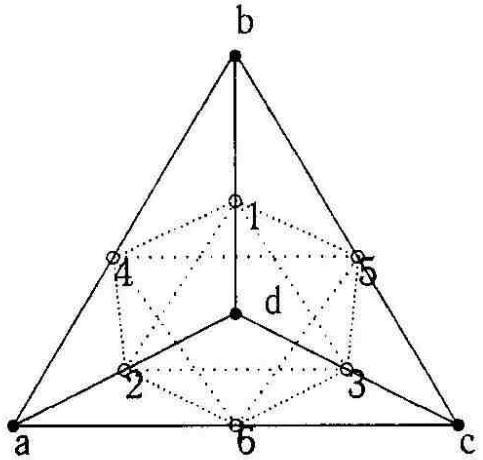


Рис. В.8. Построение смежностного графа.

Для построения *дуального* или *двойственного* графа нужно поставить точку внутри каждой грани исходного графа, в том числе, и внутри бесконечной грани, если она имеется. Эти точки являются вершинами дуального графа. Соединяем две вершины между собой, если они принадлежат соседним граням. Будем проводить линии так, чтобы они пересекали только общее ребро соседних граней и не пересекали другие рёбра.

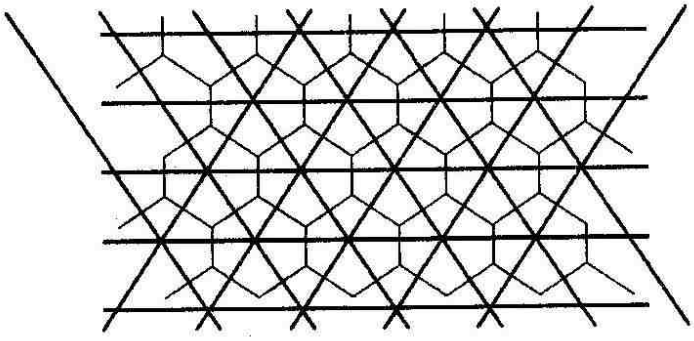


Рис. В.9. Регулярный граф (жирные линии) и его дуальный (тонкие линии).

Приложение С

Производящие функции

Метод производящих функций, к сожалению, обычно не излагается в курсах математики для физиков, хотя и широко применяется теоретиками. Ниже приводятся минимально необходимые сведения, более полную информацию можно найти, например, в [116].

Пусть имеется функция $F(x)$ такая, что в некоторой окресности числа x_0 (действительного или комплексного) она может быть представлена в виде степенного ряда

$$F(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i. \tag{C.1}$$

Функция $f(x)$ называется *производящей* (generating) для числовой последовательности $a_0, a_1, \ldots$.

При нахождении числовых последовательностей бывает полезно использовать следующие действия с производящими функциями.

Умножение производящей функции на число

$$Af(x) = A\sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i = \sum_{i=0}^{\infty} (Aa_i) x^i.$$

Сумма двух производящих функций

$$f(x) + g(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i + \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^i = \sum_{i=0}^{\infty} (a_i + b_i) x^i.$$

Произведение Коши

$$f(x) \cdot g(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i \cdot \sum_{j=0}^{\infty} b_j x^j = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k,$$

где

$$c_k = \sum_{l=0}^{k} a_l b_{k-l}$$

C.1 Применение метода производящих функций для определения порога перколяции на дереве Кэли

Рассмотрим задачу связей на дереве Кэли с координационным числом 3. Пусть связи разорваны с вероятностью p. Для каждого узла введем вероятность $F(s)$ того, что он соединен посредством данной связи с веткой из s связей. В действительности, $F(s)$ может быть идентифицирована с величиной sn_s, введенной в разделе 1.2. Поскольку все узлы и все ветви дерева Кэли эквивалентны, мы можем записать

$$F(s) = (1-p) \sum_{s_1+s_2=s-1} F(s_1)F(s_2), \qquad F(0) = p \tag{C.2}$$

Чтобы упростить вычисление суммы, введем производящую функцию

$$f(x) = \sum_{s=0}^{\infty} F(s) x^s \tag{C.3}$$

как будет показано ниже; между такими величинами как P_∞, $\langle s \rangle$ и производящей функцией существует простая связь. Умножая обе части уравнения (C.2) на x^s и суммируя по s, получаем квадратное уравнение

$$f(x) = p + (1-p)xf^2(x) \tag{C.4}$$

с двумя действительными корнями. Принимая во внимание, что если $x \leqslant 1$, то и $f(x) \leqslant 1$, выбираем наименьший из двух корней

$$f(x) = \frac{1 - \sqrt{1 - 4p(1-p)x}}{2(1-p)x} \tag{C.5}$$

Параметр порядка — $P_\infty = 1 - f(1)$. При $x = 1$ положительное значение квадратного корня равно $|2p-1|$. Если $p > 1/2$, то мы имеем $f(1) = p/(1-p) < 1$ и параметр порядка отличен от нуля. Следовательно, $p_c = 1/2$ и

$$P_\infty = 1 - f(1) = \frac{1-2p}{1-p} \propto (p_c - p)^\beta \tag{C.6}$$

с $\beta = 1$. Функция $f(x)$ имеет особенность в точке $x_0 = 1/4p(1-p)$ типа

$$f(x) = A + B|x - x_0|^\alpha, \text{ где } \alpha = \frac{1}{2} \tag{C.7}$$

В соответствии с теоремой Tauberian, которая соотносит особенность в $f(x)$ с особенностью в $F(s)$, (C.7) полагают, что разложение функции $f(x)$ в ряд Тейлора вблизи $x = 0$ ведет себя как

$$F(s) = s^{-\tau+1}\phi(s^\sigma|p - p_c|) \propto s^{-\tau+1}\exp(-s/s_c), \tag{C.8}$$

где

$$\tau = 2 + \alpha, \qquad s_c = 1/\ln(x_0).$$

Итак, в нашем случае

$$\tau = 5/2, \qquad s_c \approx \frac{1}{x_0 - 1} = \frac{p(1-p)}{(p-p_c)^2}$$

откуда

$$\sigma = 1/2$$

В этом простом случае функция $F(s)$ может быть вычислена в соответствии с биномиальным разложением $\sqrt{1-y}$

$$F(s) = 2p\frac{(2s-1)!!}{(2s+2)!!}\left(4p(1-p)\right)^s,$$

где отношение факториалов имеет асимптотическое поведение $s^{-3/2}$ и $(4p(1-p))^s$ дает экспоненциальную обрезку.

Мы можем также подсчитать средний размер кластера

$$\langle s \rangle = \sum_{s=0}^{\infty} sF(s) = \left.\frac{d\,f(x)}{d\ln x}\right|_{x=1}$$

и дает

$$\langle s \rangle = \begin{cases} \dfrac{1-p}{2|p-p_c|} & \text{при } p > p_c \\ \dfrac{p}{2|p-p_c|} & \text{при } p < p_c \end{cases}$$

что означает $\gamma = 1$ в обоих случаях.

Приложение D

Фракталы

D.1 Фракталы в математике и физике

Лишь после того, как в 1975 г. Бенуа Б. Мандельброт [67] написал свою первую книгу по фракталам, стало ясно, что огромное количество странных объектов, давно известных людям, представляют собой различные проявления фракталов.

> Мандельброт назвал фракталами структуры, состоящие из частей, которые в каком-то смысле подобны целому.

Наиболее полно фрактальная концепция излагается в классической книге [68], много полезной информации по применению фрактальных идей в теории перколяции можно найти также в книгах [24, 27] и обзоре [125].

Странные математические объекты — «математические монстры» — привлекли внимание ученых еще в прошлом веке. В 1883 г. Георг Кантор описал множество, которое теперь называют *множество Кантора* или *пыль Кантора*.

Рассмотри отрезок единичной длины. Разделим его на три части и удалим из него открытую среднюю треть, оставив ее концевые точки. Получим два отрезка длиной по 1/3 каждый. Вырежем среднюю треть из каждого отрезка и будем повторять эту процедуру с вновь полученными отрезками до бесконечности (рис. D.1). Полученное в бесконечном пределе множество называется множеством Кантора и обладает рядом необычных свойств. Это множество имеет мощность континуума, в то

же самое время его мера равна нулю. Каждый из фрагментов множества Кантора выглядит, как все множество в целом. Говорят, что множество Кантора *самоподобно*.

Рис. D.1. Этапы построения множества Кантора.

В 1886 г. Карл Вейерштрасс построил функцию, не имеющую производной ни в одной точке

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A^n \cos\left(B^n \pi x\right),$$

где $0 < A < 1$, а произведение AB достаточно велико. График этой функции — бесконечно изломанная линия. При увеличении любой участок этой кривой выглядит подобно всей кривой. Можно построить множество разнообразных функций, подобных функции Вейерштрасса. В то время подобные функции представлялись чем-то аномальным. Эрмит писал Стилтьесу в 1883 г.: «Я с дрожью ужаса отворачиваюсь от ваших несчастных проклятых функций, у которых нет производных».[1]

В 1904 г. Хельге фон Кох рассмотрел необычную кривую. Часто ее приводят в курсе математического как пример непрерывной, но недифференцируемой кривой. Рассмотри отрезок единичной длины. Удалим из него среднюю треть и дополним двумя отрезками длиной 1/3. Отрезок превратился в ломанную из 4 звеньев. Применим ту же самую операцию к каждому из отрезков ломанной. Будем повторять эту процедуру бесконечное число раз (рис. D.2). Можно построить *снежинку или остров Коха*, используя в качестве начального объекта, равносторонний треугольник. Легко понять, что такая снежинка или остров будут иметь бесконечный периметр, но ограничивать будут при этом конечную площадь.

В 1915 г. Вацлав Серпинский (Серпиньский) придумал несколько интересных конструкций, названных в последствии его именем. *Прокладка* или *салфетка Серпинско* получается из равностороннего треугольника.

[1]Цитируется по [118]

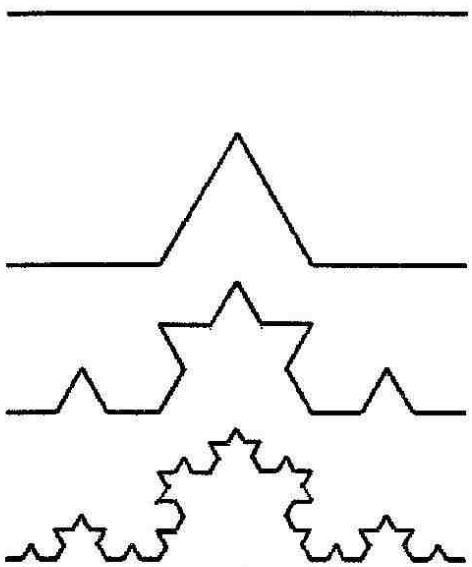


Рис. D.2. Этапы построения кривой Коха.

Проведем в треугольнике средние линии и удалим ограниченную ими центральную часть треугольника. Повторим процедуру по отношению к каждому из полученных треугольников и так до бесконечности (рис. D.3). Подобным же образом можно получить *ковер Серпинского*, используя в качестве исходного объекта квадрат. Можно построить и трехмерные аналоги этих объектов. Их часто называют *губками*.

В начале XX века Пьер Фату и Гастон Жюлиа исследовали свойства отображения $z_{n+1} = z_n^2 + c$ на комплексной плоскости. При фиксированном c в зависимости от выбора начального приближения пределом последовательности может быть либо ноль либо бесконечность. Можно сказать, что ноль и бесконечность являются аттракторами. Граница, разделяющая области притяжения этих двух аттракторов, называется *множеством Жюлиа*. Эта граница бесконечно изрезана и представляет собой фрактал (рис. D.4).

Используя то же самое отображение, Бенуа Мандельброт выбирал фиксированную точку на комплексной плоскости и прослеживал ее судьбу при различных значениях параметра c, при этом возникали следующие ситуации:

1. Числа становились все меньше и меньше, их последовательность приближалась к нулю. Мы говорим, что нуль является аттрактором — в данном случае точкой притяжения для процесса.

2. Числа увеличиваются, стремясь к бесконечности, в этом случае бес-

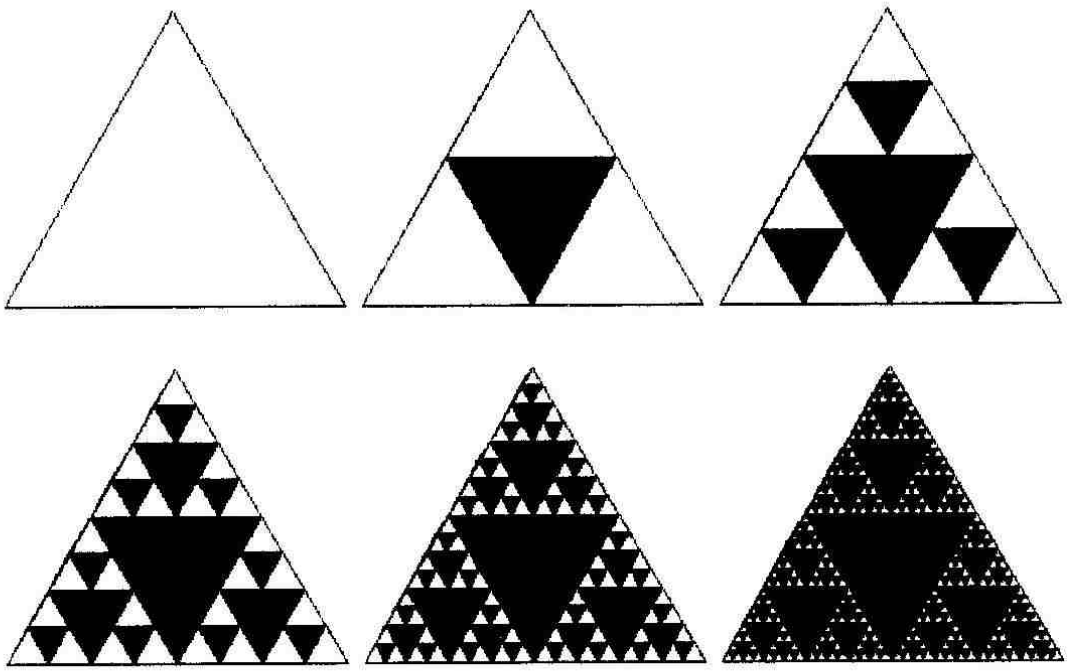


Рис. D.3. Этапы построения прокладки Серпинского.

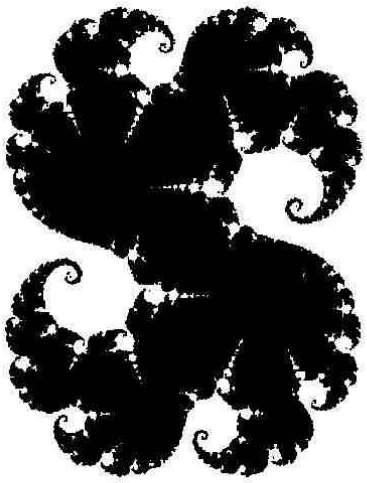


Рис. D.4. Множество Жюлиа при $c = 0.27334 + 0.00742i$.

конечность — аттрактор для процесса.

3. Специфический случай. Последовательности точек лежат на границе двух областей притяжения.

Данная граница имеет фрактальную структуру и является так называемым *странным аттрактором* для процесса. Если взглянуть на любой из ее поворотов или заливов, то можно обнаружить, что одна и та же форма встречается в различных местах и имеет различные размеры. Фигура, находящаяся внутри этой границы, получила название *множество Мандельброта* (рис. D.5).

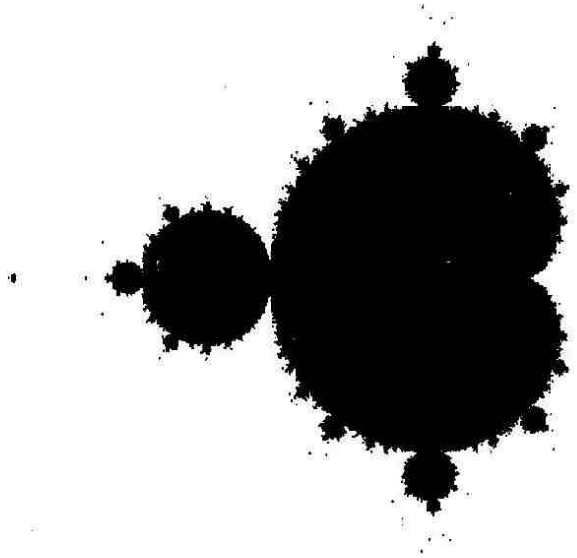


Рис. D.5. Множество Мандельброта.

Множество физических объектов, как выяснилось в недавнем прошлом, имеют фракталоподобную структуру [24]. Однако, в отличии от математических фракталов, большинство физических — так называемые нерегулярные фракталы. Принято различать регулярные и нерегулярные фракталы. Первые — плод воображения — на каждом этапе масштабирования в точности повторяют объект в целом. Нерегулярные фракталы — продукт природы или деятельности человека — на каждом уровне масштаба структура фрактала подобна, но не идентична объекту в целом. Понятно, что в отличие от математических, у естественных фракталов подобие сохраняется в широком, но конечном диапазоне масштабов.

Типичные природные фракталы — деревья, реки, облака, береговая линия.

Фракталами являются дендриты (от греч. дендрон — дерево). Дендритоподобные структуры возникают в различных областях физики, например, при кристаллизации металлов. Дендритоподобную структуру имеет обыкновенная снежинка.

К фрактальным структурам можно отнести также так называемые аэрогели — твердые тела состоящие из связанных между собой микрочастиц, составляющих жесткий каркас, который занимает лишь малую часть общего объема. Особенность аэрогелей — огромный размер внутренних пор и различная их величина, перекликается с одним из определений фрактала:

> фрактал — это объект, имеющий в себе пустоты любого размера.

D.2 Размерности

D.2.1 Размерность самоподобия

Если разделить единичный отрезок на N равных частей длиной $l = 1/N$, то очевидно, длина исходного отрезка будет равна $1 = Nl$. Если разбить единичный квадрат на N равных квадратов со стороной $l = 1/N^{1/2}$, то, очевидно, площадь исходного квадрата будет равна $1 = Nl^2$. Если разбить единичный куб на N равных кубов со стороной $1/N^{1/3}$, то, очевидно, объем исходного куба будет равен $1 = Nl^3$. Во всех этих случаях выполнялось соотношение $Nl^d = 1$, где d — размерность самоподобия. В рассмотренных случаях она выражалась целым числом и совпадала с Евклидовой размерностью. Размерность самоподобия может быть вычислена по формуле

$$d = -\frac{\ln N}{\ln l}.$$

Хотя мы записали натуральный логарифм, понятно, что основание не играет никакой роли: можно было бы записать десятичные логарифмы или логарифмы по основанию 2.

Найдем размерность самоподобия множества Кантора. Чтобы построить множество Кантора единичной длины нужно взять 2 множества длиной 1/3, следовательно

$$d = -\frac{\ln 2}{\ln 1/3} = \frac{\ln 2}{\ln 3} \approx 0.6309.$$

Размерность самоподобия оказалась дробной. Образно можно сказать, что множество Кантора уже не отрезок, но еще не точка.

Чтобы найти размерность самоподобия салфетки Серпинского заметим, что одна салфетка состоит из 3 салфеток с размером стороны 1/2. Тогда

$$d = -\frac{\ln 3}{\ln 1/2} = \frac{\ln 3}{\ln 2} \approx 1.5850,$$

то есть прокладка Серпинского занимает промежуточное положение между линией и фигурой.

В случае кривой Коха требуется 4 кривых длиной 1/3, чтобы составить исходную кривую, таким образом, размерность самоподобия равна

$$d = -\frac{\ln 4}{\ln 1/3} = \frac{\ln 4}{\ln 3} \approx 1.2618.$$

Все рассмотренные выше самоподобные объекты имели дробную размерность. Является ли это общим свойством всех самоподобных объектов? Нет! В 1890 г. Джузеппе Пеано построил непрерывную функцию, отображающую отрезок на квадрат. График этой функции — линия, целиком заполняющая квадрат, — называется кривой Пеано. Ее размерность — 2.

D.2.2 Размерность по Хаусдорфу–Безиковичу

Когда речь идет о фракталах, то часто используют размерность по Хаусдорфу–Безиковичу.

Для того, чтобы измерить длину L_0 кривой, можно подсчитать число $N(\delta)$ прямолинейных отрезков длины δ, необходимых для того, чтобы покрыть её. Тогда длина кривой —

$$L = N(\delta)\delta \xrightarrow[\delta\to 0]{} L_0\delta^0.$$

Можно определить площадь кривой, используя для покрытия не отрезки, а квадраты (треугольники, круги и т. п.) с линейным размером δ.

$$S = N(\delta)\delta^2 \xrightarrow[\delta\to 0]{} L_0\delta^1.$$

Подобным же образом можно определить и объем линии

$$V = N(\delta)\delta^3 \xrightarrow[\delta\to 0]{} L_0\delta^2.$$

Очевидно, что в пределе для обычной кривой длина будет конечной, а площадь и объем равны нулю. В то же время для фрактальной кривой, например, кривой Коха или Пеана, длина будет бесконечной. Длина, площадь, объем можно определить не только для кривой, но и для поверхности или тела.

Вычисляя длину, площадь, объем, то есть меру M_d, мы покрывали множество точек различными геометрическими объектами (отрезками, кругами, кубами). Тогда $M_d = \sum \gamma(d)\delta^d$, где $\gamma(d)$ — геометрический коэффициент, который зависит от выбора покрывающего объекта, d — размерность меры. Тогда

$$M_d = \sum \gamma(d)\,\delta^d = \gamma(d)\,N(\delta)\,\delta^d \xrightarrow[\delta\to 0]{} \begin{cases} 0, & \text{если } d > D \\ \infty, & \text{если } d < D \end{cases}$$

Величина D, при которой этот предел отличен от нуля и бесконечности, есть *размерность Хаусдорфа–Безиковича* или *хаусдорфова размерность*. Для фрактальных структур она, как правило, нецелочисленная. Одно из определений фракталов гласит:

> фрактал — это объект, у которого размерность Хаусдорфа–Безиковича строго больше его топологической размерности.

Например, с точки зрения топологии прокладка Серпинского одномерна, так как может быть разделена на части удалением как максимум счетного числа точек (точнее, всего лишь двух).

D.3 Определение фрактальной размерности кластера.

1. Генерируем кластер.

2. Находим центр масс кластера. В двумерном случае координаты центра масс определяются по формулам

$$x_c = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \;\; y_c = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$$

где n — число узлов в кластере, (x_i, y_i) — координаты i-го узла.

3. Находим число узлов кластера $m(l)$, находящихся внутри квадрата со стороной l и центром в центре масс кластера (x_c, y_c).

4. Увеличиваем величину l в 2 раза и повторяем пп. 3-4 s раз, пока квадрат не покроет кластер целиком.

5. Строим зависимость $\ln m$ от $\ln l$.

6. Вычисляем фрактальную размерность по методу наименьших квадратов, используя формулу [97]

$$d_f = B = \frac{s\sum\limits_{i=1}^{s} X_i Y_i - \sum\limits_{i=1}^{s} X_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{s} Y_i}{\Delta}$$

$$\delta d_f = \delta B = \frac{\sigma_B}{\sqrt{s}}$$

здесь $X_i = \ln l_i$, $Y_i = \ln m(l_i)$.

$$A = \frac{\sum\limits_{i=1}^{s} X_i^2 \sum\limits_{i=1}^{s} Y_i - \sum\limits_{i=1}^{s} X_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{s} X_i Y_i}{\Delta}$$

$$\sigma_B^2 = \frac{s\sigma_y^2}{\Delta}$$

$$\sigma_y^2 = \frac{1}{s}\sum_{i=1}^{s} (Y_i - A - BX_i)^2$$

$$\Delta = s\sum_{i=1}^{s} X_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{s} X_i\right)^2$$

7. Повторяем пп. 1–7 несколько раз с разными последовательностями случайных чисел.

8. Находим среднее значение фрактальной размерности.

Литература

1. Abrikosov A. A. Spin glasses with short range interaction. // Adv. Phys. **29**, 869 (1980).

2. Agrawal P., Redner S., Reynolds P. J., Stanley H. E. Site-bond percolation: a low-density series study of the uncorrelated limit. // J. Phys. A: Math. Gen. **12**, 2073–2085 (1979).

3. Alexandrowicz Z. Critically branched chains and percolation clusters. // Phys. Lett. **A 80**, 284 (1980).

4. de Arcangelias L. Render S., Coniglio A. Anomalous voltage distribution of random resistor networks and a new model for the backbone at the percolation threshold. // Phys. Rev. B **31** 4725–4727 (1985).

5. Babalievski F. Comput. Phys. Commun. **67**, 453 (1992).

6. Babalievski F. Cluster counting: the Hoshen-Kopelman algorthm vs. Spanning three approach. // International Journal of Modern Physics C. **9**(1), 43–61 (1998).

7. Babalievski F. Comment on "Universal formulas for percolation thresholds. II. Extension to anisotropic and aperiodic lattices" // Phys. Rev. E **55**(1), 1228–1229 (1997).

8. Ballesteros H. G., Fernández L. A., Martín-Mayor V., Muñoz Sudupe A., Parisi G., Ruiz-Lorenzo J. J. Measures of critical exponents in the four-dimensional site percolation. // Phys. Lett. B **400**, 346–351 (1997).

9. Bauer M., Golinelli O. Random incidence matrices: moments of spectral density. // Preprint T00/088; cond-mat/0007127.

10. Bauer M., Golinelli O. Random incidence matrices: spectral density at zero energy. // Preprint Spht 00/087; cond-mat/0006472.

11. Bauer M., Golinelli O. On the kernel of tree incidence matrices. // Journal of Integer Sequences, **3** (2000), Article 00.1.A.

12. Bauer W., Dean D. R., Mosel U., Post U. New approach to fragmentation reactions: the nuclear lattice model // Physics Letters **150B**(1,2,3), 53–56 (1985).

13. Bauer W., Post U., Dean D. R., Mosel U. The nuclear lattice model of proton induced multi-fragmentation reactions // Nuclear Physics **A452**, 699–722 (1986).

14. Bauer W. Extraction of signals of a phase transition from nuclear fragmentation // Phys. Rev. C **38**(3), 1297–1303 (1988).

15. Bernasconi J. Real-space renormalization of bond-disordered conductance lattices. // Phys. Rev. B **18**, 2185–2191 (1978).

16. Broadbent S. K., Hammersley J. M. Percolation processes I. Crystals and mazes. // Proc. Camb. Phil. Soc. **53**, 629–641 (1957).

17. Brower R. C., Tamayo P., York B. Parallel multigrid algorithms for percolation clusters. // J. Stat. Phys. **63**, 73–88 (1991).

18. Coniglio A., Stanley H. E., Klein W. Site-Bond Correlated Percolation Problem: A Statistical Mechanical Model of Polymer Gelation // Phys. Rev. Lett. **42**(8), 518–522 (1979).

19. Coniglio A. Cluster structure near the percolation threshold. // J. Phys. A: Math. Gen. **15**, 3829–3844 (1982).

20. Coulson C. A., Longuet-Higgins H. C. The electronic structure of conjugated systems. I General theory // Proc. Roy. Soc. 1947, **191**, Sec. A, №1024, pp. 39–60.

21. Deutscher G. Applications of percolation. // Soulletie J., Vannimenus J., Stora R. (eds) Les Houches, Session XLVI, 1986 — Le hasard et la matière/Chance and matter. — Elsevier Science Publishers B.V., 1987.

22. Dress C., Krauth W. Cluster Algorithm for hard spheres and related systems. // J. Phys. A **29** (1995) L597; LANL e-print: cond-mat/9612183.

23. Evertz H. G., Lana G., Marcu M. Cluster algorithm for vertex models. // Phys. Rev. Lett. **70**, 875–879 (1993).

24. Feder J. Fractals. — New York: Plenum Press, 1988. (Русский перевод: Федер Е. Фракталы. — М.: Мир, 1991.)

25. Fisher M. E., Essam J. W. Some cluster size and percolation problems. // J. Math. Phys., **2**(4), 609–619 (1961).

26. Flory P. J. J. Am. Chem. Soc. 63 3083,3091,3906 (1941).

27. Fractals and Disordered Systems. 2nd Edition. Bunde A., Havlin S. (Eds.) — Springer, 1996.

28. Frisch H. L., Hammersley J. M. J. Soc. Ind. Appl. Math. 11, 894–918 (1963).

29. Frish L. A., Sonnenblick E., Vyssotsky V. A., Hammersly J. M. Critical Percolation Probabilities (Site Problem) // Phys. Rev. **124** 1021–1022 (1961).

30. Galam S., Mauger A. Universal formulas for percolation thresholds. // Phys. Rev. E, **53**(3), 2177–2181 (1996).

31. Galam S., Mauger A. Universal formulas for percolation thresholds. II. Extension to anisotropic and aperiodic lattices // Phys. Rev. E **56**(1), 322–325 (1997).

32. Gaunt D. S., Ruskin H. Bond percolation processes in d dimensions. // J. Phys. A: Math. Gen. **11**, 1369–1380 (1978).

33. Gefen Y., Aharony A., Mandelbrot B. B., Kirkpatrick S. Solvable Fractal Family, and Its Possible Relation to the Backbone at Percolation. // Phys. Rev. Lett. **47**, 1771–1774 (1981).

34. de Gennes P. G. J. Physique Lett. 37 L1.

35. Gould H., Tobochnik J. An Introduction to Computer Simulation Methods Applications to Physical Systems. — Addison-Wesley Publishing Company: Reading, 1988.
(Русский первод: Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: В 2-х частях. Часть 2. — М.: Мир, 1990. — 400 с.)

36. Grassberger P. Conductivity exponent and Backbone dimension in 2-d percolation. // cond-mat/9808095.

37. Grassberger P. Spreading and backbone dimensions of 2D percolation. // J. Phys. A: Math. Gen. **25**, 5475–5484 (1992).

38. Grimmet G. Percolation. — Berlin: Springer-Verlag, 1989. (2nd ed., 1999)

39. Grimmet G. Percolation and disordered systems, in Lectures in Probability Theory and Statistics, Ecole d'Ete de Probabilites de Saint-Flour XXVI-1996, Springer Lecture Notes in Math. no. 1665, ed. P. Bernard, published 1997, pages 153–300.

40. Hackl R., Matitus H.-G., Singer J. M., Husslein T. H., Morgenstern I. Int. J. of Mod. Phys. C **4** 1117 (1993).

41. Halperin B. I., Feng S., Sen P. S. Difference between lattice and continuum percolation transport exponents. // Phys. Rev. Lett **54**, 2391–2394 (1985).

42. Hammersley J. M. Comparison of atom and bond percolation processes. // J. Math. Phys, **2**(5), 728–733 (1961).

43. Hammersley J. M. // Meth. in Comp. Phys. 1, 281 (1963).

44. Hammersley J. M., Handscomb D. C. Monte Carlo Methods, Methuen, 1964.

45. Hammersley J. M. A generalization of McDiarmid's theorem for mixed Bernoulli percolation. // Math. Proc. Camb. Phyl. Soc. **88**, 167–169 (1980).

46. Harreis H. M., Bauer W. Phase Transition in a Two-Component Site-Bond Percolation Model. // cond-mat/9907330.

47. Harris A. B., Lubensky T. C., Holcomb W. K., Dasgupta C. Renormalization Group Approach fo Percolation Problems. // Phys. Rev. Lett. **35**, 327; E1397 (1975).

48. Heermann D. W., Stauffer D. Phase Diagram for Three-Dimensional Correlated Site-Bond Percolation. // Z. Phys. B **44**, 339–344 (1981).

49. Heermann D. W. Computer simulations methods in theoretical Physics. — Berlin: Springer-Verlag, 1986.
(Русский перевод: Хеерман Д. В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1990. — 176 с.)

50. Herrmann H. J., Hong D. C., Stanley H.-E. Backbone and elastic backbone of percolation clusters obtained by the new method of 'burning'. // J. Phys. A **17** L261 (1984).

51. Hortensius P. D., Card H. W., McLeod L. D. J. Comput. Phys. **84** 76 (1989).

52. Hoshen J., Kopelman R. Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. // Phys. Rev. B **14**(8), 3438–3445 (1976).

53. Hoshen J. Univ. of Michigan, preprint (1978).

54. Ioselevich A. S. Multicomponent Percolation Criteria and its Application to Hopping in disordered Conductors. // Phys. Rev. Lett. **74**(8), 1411–1414 (1995).

55. Isichenko M. B. Percolation, statistical topography, and transport in random media. // Rev. Mod. Phys. **64**(4), 961–1043 (1992).

56. Kadanoff L. P. et al. Static Phenomena Near Critical Points: Theory and Experiment. // Rev. Mod. Phys. **39**, 395–431 (1967).

57. Kasteleyn P. W., Fortuin C. M. Phys. Soc. Japan Suppl. 26 (1969) 11 and Physica 57 (1974) 536.

58. Kertész J., Stauffer D. Critical slowing down in the Swendsen-Wang dynamics: A parallel computer study. // Int. J. Mod. Phys. C **3**, 1275 (1992).

59. Kesten H. The critical probability of bond percolation on the square lattice equals 1/2. // Comm. Math. Phys. **74**, 41–59 (1980).

60. Kesten H. Percolation Theory for Mathematicians. — Boston: Birkhäuser, 1982.
(Русский перевод: Кестен Х. Теория просачивания для математиков. — М.: Мир, 1986. — 392 с.)

61. Leath P. L. Cluster size and boundary distribution near percolation threshold // Phys. Rev. B, **14**(11), 5046–5055 (1976).

62. Lee S. B., Torquato S., Kane J. Monte Carlo study of correlated continuum percolation: Universality and percolation thresholds. // Phys. Rev. A **41**, 5338–5344 (1990).

63. Lima R. P. A., Lyra M. L. Quantum percolation in power-law diluted chains // cond-mat/0103545.

64. Lorenz C. D., Ziff R. M. Universality of the excess number of clusters and the crossing probability function in three-dimensional percolation. // J. Phys. A: Math. Gen. **31** 8147–8157 (1998).

65. Lorenz C. D., Ziff R. M. Precise determination of the bond percolation thresholds and finite-size scaling corrections for the sc, fcc, and bcc lattices. // Phys. Rev. E **57**, 230–236 (1998).

66. Lorenz C. D., May R., Ziff R. M. Similarity of percolation thresholds on the hcp and fcc lattices. // cond-mat/9908034.

67. Mandelbrot B. B. Les objets fractals: forme, hasard et dimension. — Paris: Flamarion, 1975.

68. Mandelbrot B. B. Fractal Geometry of Nature. — San Francisco: Freeman, 1982.
(Русский перевод: Мандельброт Б. Фрактальная геометрия природы. — М.: Институт компьютерных исследований, 2002. — 656 стр. ISBN 5-93972-108-7)

69. Mandelbrot B. B., Given J. A. Physical Properties of a New Fractal Model of Percolation Clusters. // Phys. Rev. Lett. **52**, 1853–1856 (1984).

70. van der Marck S. C. Comment on "Universal formulas for percolation thresholds." // Phys. Rev. E, **55**(1), 1228–1229 (1997).

71. van der Marck S. C. Percolation thresholds and universal formulas. // Phys. Rev. E, **55**(2), 1514–1517 (1997); Erratum **56**, 3732 (1997).

72. van der Marck S. C. Site percolation and random walks on d-dimensional Kagome lattices. // J. Phys. A: Math. Gen. **31** (1998) 3449–3460.

73. van der Marck S. C. Calculation of percolation thresholds in high dimensions for fcc, bcc and diamond lattice. // Int. J. Mod. Phys. C **9**, 529–540, (1998).

74. van der Marck S. C. to be published.

75. Moukarzel C., Duxbury P. M. Comparison of rigidity and connectivity percolation in two dimensions. // cond-mat/9702249.

76. Nakamura M. Random sequential packing in square cellular structures. // J. Phys. A: Math. Gen. **19**, 2345–2351 (1986).

77. Nakanishi H., Reynolds P. J. Site-bond percolation by position-space renormalization group. // Phys. Lett. A **71**, 252–255 (1979).

78. Newman M. E. J., Ziff R. M. Efficient Monte Carlo algorithm and high-precision results for percolation // Phys. Rev. Lett. **85**, 4104–4107 (2000).

79. Pike G. E., Senger C. H. Percolation and conductivity: A computer study. I // Phys. Rev. B **10**, 1421–1434 (1984).

80. Reynolds P. J., Stanley H. E., Klein W. A real-space renormalization group for site and bond percolation. // J. Phys. C, **10**, L167–172 (1977).

81. Rosso M., Gouyet J. F., Sapoval B. Determination of percolation probability from the use of concentration gradient. // Phys. Rev. B **32**, 6053–6054 (1985).

82. Sahimi M. Applications of Percolation Theory. — London: Taylor & Francis, 1992.

83. Sapoval B., Rosso M., Gouyet J. F. The fractal nature of a diffusion front and relation to percolation. // J. Physique Lett. (Paris) **46**, L149 (1985).

84. Scher H., Zallen R. Critical density of percolation processes. // J. Chem. Phys. **53**, 3579 (1970).

85. Schulman L. S., Seiden P. E. Percolation and Galaxies // Science, **233**, 425 (1986).

86. Shante V. K. S., Kirkpatrick S. An Introduction to Percolation Theory. // Advances in Physics, v. XX, no. 85, 325–357 (1971).

87. Stanley H. E. Cluster shapes at the percolation threshold: and effective cluster dimensionality and its connection with critical-point exponents. // J. Phys. A **10**(11), L211–L220 (1977).

88. Stauffer D. Scaling theory of percolation clusters. // Physics Reports **54**, 1–74 (1979).

89. Stauffer D., Aharony A. Introduction to Percolation Theory. — London: Taylor & Francis, 1992.

90. Stauffer D. Minireview: New Results for Old Percolation. // Physica A **242**, 1 (1997).

91. Stephen M. J. Phys. Lett. **56 A**, 149 (1976).

92. Stockmayer W. H. Theory of molecular size distribution and gel formation in branched polymers. // J. Chem. Phys. **11** 45–55 (1943).

93. Stoll E. A fast cluster counting algorithm for percolation on and off lattices. // Computer Physics Communications, **109**, 1–5 (1998).

94. Suding P. N., Ziff R. M. Site percolation thresholds and universal formulas for the Archimedean lattices. // Phys. Rev. E **60**(1) 275–283 (1999).

95. Sykes M. F., Essam J. W. Exact critical percolation probabilities for site and bond percolation in two dimensions. // J. Math. Phys. **5**(8), 1117–1127 (1964).

96. Tarasevich Yu. Yu., van der Marck S. C. An investigation of site-bond percolation on many lattices. // Int. J. of Modern Physics C, **10**(7), 1993–1204 (1999).

97. Taylor J. R. An Introduction to Error Analysis. — University Science Books: Mill Valley, 1982.
(Русский перевод: Тейлор Дж. Введение в теорию ошибок. — М.: Мир, 1985. — 272 с.)

98. Tretyakov A. Yu., Inui N. Critical behaviour for mixed site-bond percolation // J. Phys. A: Math. Gen. **28** 3985–3990 (1995).

99. Эфрос А. Л. Физика и геометрия беспорядка. — М.: Наука. Глав. ред. физ.-мат. лит., 1982. — 176 с. — (Библиотечка «Квант». Вып. 19)

100. Vandewalle N., Galam S., Kramer M. Random Sequential Deposition of Needles // Eur. Phys. J. B **14**, 407–410 (2000). (cond-mat/0004271)

101. Wei-Guo Yin, Ruibao Tao Rapid algorithm for identifyingbackbones in the two-dimensional percolation model // cond-mat/0012169.

102. Weinrib A., Trugman S. A new kinetic walk and percolation perimeter. // Phys. Rev. B **31**, 2993–2997 (1985).

103. Weiße A., Fehske H. Numerical study of quantum percolation // cond-mat/0106247.

104. Wierman J. C. A bond percolation critical probability determination based on the star-triangle transformation. // J. Phys. A: Math. Gen. **17**, 1525–1530 (1984).

105. Wiese U. J., Ying H. P., Ying H. P. Phys. Lett. A **168**, 143 (1992).

106. Wilkinson D., Willemsen J. F. Invasion percolation: A new form of percolation theory. J. Phys. **A16**, 3365–3376 (1983).

107. Wilson K. G. Renormalization group and critical phenomena.I. Renormalization group and Kadanoff scaling picture. // Phys. Rev. **B4**, 3174 (1971).

108. Yanuka M., Englman R. Bond-site percolation: empirical representation of critical probabilities. // J. Phys. A: Math. Gen. **23**, L339–L345 (1990).

109. Zallen R. Polychromatic percolation: Coexistence of percolating species in highly connected lattices // Phys. Rev. B **16**, 1426–1435 (1977).

110. Ziff R. M., Cummings P. T., Stell G. Generation of percolation cluster perimeters by a random walk // J. Phys. A: Math. Gen. **17**, 3009 (1984).

111. Ziff R. M., Sapoval B. The efficient determination of the percolation threshold by a frontier generating walk in a gradient // J. Phys. A: Math. Gen. **19** L1169–L1172 (1986).

112. Ziff R. M., Stell G. Univ. Mich. report. 11–18 (1988).

113. Ziff R. M. Spanning probability in 2D percolation. // Phys. Rev. Lett. **69**, 2670–2673 (1992).

114. Ziff R. M., Suding P. N. Determination of the bond percolation threshold for the Kagome lattice. // J. Phys. A: Math. Gen. **30**, 5351–5359 (1997).

115. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1988.

116. Грэхем Р., Кнут Д., Паташник О. Конкретная математика. Основания информатики. — М.: Мир, 1998.

117. Елесин В. Ф., Кашурников В. А., Опёнов Л. А., Подливаев А. И. Энергия связи электронов или дырок в кластерах Cu – O: точная диагонализация гамильтониана Эмери. // ЖЭТФ **99**(1), 237–248 (1991).

118. Зельдович Я. Б., Соколов Д. Д. Фракталы, подобие, промежуточная асимптотика. // Успехи физических наук **146**(3) 493–506 (1985).

119. Липский В. Комбинаторика для программистов. — М.: Мир, 1988. — 213 с., ил.

120. Плакида Н. М. Высокотемпературные сверхпроводники. — М.: Международная программа образования, 1996.

121. Просандеев С. А., Тарасевич Ю. Ю. Влияние корреляционных эффектов на зонную структуру, низкоэнергетические электронные возбуждения и функции откликов в слоистых оксидах меди. // УФЖ **36**(3), 434–440 (1991).

122. Ребане Т. К. Спектр энергии электронов в неупорядоченных альтернантных структурах. // ФТТ **28**(5) 1368–1369 (1986).

123. Скал А. С., Шкловский Б. И. Влияние концентрации примесей на прыжковую проводимость в полупроводниках.// Физика и техника полупроводников, 1759 (1973).

124. Скал А. С., Шкловский Б. И. Топология бесконечного кластера в теории перколяции и ее связь с теорией прыжковой проводимости.// Физика и техника полупроводников, **8**, 1586 (1974).

125. Соколов И. М. Размерности и другие геометрические критические показатели в теории протекания. // УФН **150**(2) 221–255 (1985).

126. Уилсон Р. Введение в теорию графов. — М.: Мир, 1977.

127. Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников / Под. ред. Д. М. Гинзберга. — М.: Мир, 1990.

128. Шабалин В. Н., Шатохина С. Н. Морфология биологических жидкостей человека. — М.: Хризостом, 2001. — 304 с.: ил.

129. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Теория протекания и проводимость сильно неоднородных сред. // УФН, **117**(3), 401–436 (1975).

130. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. — М.: Наука, 1979.