

УДК: 519.676

## Структура моделей перколяции узлов на трехмерных квадратных решетках

П. В. Москалев

Воронежский государственный аграрный университет,  
Россия, 394087, г. Воронеж, ул. Мичурина, д. 1

E-mail: moskalefff@gmail.com

Получено 23 мая 2013 г.,  
после доработки 4 июля 2013 г.

В работе рассматривается структура моделей перколяции узлов на трехмерных квадратных решетках при различных формах  $(1, \pi)$ -окрестности. Для этих моделей предложены изо- и анизотропные модификации алгоритма инвазивной перколяции с  $(1, 0)$ - и  $(1, \pi)$ -окрестностями. Все рассмотренные алгоритмы являются частными случаями анизотропного алгоритма инвазивной перколяции на  $n$ -мерной решетке с  $(1, \pi)$ -окрестностью. Данный алгоритм положен в основу библиотеки SPSL, выпущенной под лицензией GNU GPL-3 с использованием свободного языка программирования R.

Ключевые слова: перколяция узлов,  $n$ -мерная квадратная решетка, неметрическое расстояние Минковского, язык программирования R, библиотека SPSL

### The structure of site percolation models on three-dimensional square lattices

P. V. Moskalev

*Voronezh State Agricultural University, 1 Michurin street, Voronezh, 394087, Russia*

**Abstract.** — In this paper we consider the structure of site percolation models on three-dimensional square lattices with various shapes of  $(1, \pi)$ -neighborhood. For these models, are proposed iso- and anisotropic modifications of the invasion percolation algorithm with  $(1, 0)$ - and  $(1, \pi)$ -neighborhoods. All the above algorithms are special cases of the anisotropic invasion percolation algorithm on the  $n$ -dimensional lattice with a  $(1, \pi)$ -neighborhood. This algorithm is the basis for the package SPSL, released under GNU GPL-3 using the free programming language R.

Keywords: site percolation,  $n$ -dimensional square lattice, non-metric Minkowski distance, R programming language, SPSL package

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2013, vol. 5, no. 4, pp. 607–622 (Russian).

## Введение

Впервые задачи теории перколяции появились в работах П. Флори и У. Штокмайера [Flory, 1941; Stockmayer, 1943], посвященных моделированию полимеризации высокомолекулярных соединений. Однако формирование современного математического аппарата и собственной терминологии в исследованиях процессов перколяции принято связывать с публикацией в 1957 году работы С. Бродбента и Дж. Хаммерсли [Broadbent and Hammersley, 1957], в которой они рассматривают задачу о протекании некоторой жидкости через случайно-неоднородную проницаемую среду.

Интересной разновидностью перколяционных моделей является сформулированная Д. Уилкинсоном и Дж. Уиллемсеном задача об инвазивной перколяции [Wilkinson and Willemsen, 1983; Koplik et al., 1983]. Чаще всего процесс инвазии, или вытеснения, рассматривается как результат взаимодействия двух несмешивающихся жидкостей: первой, уже заполняющей пористую среду, и второй, подаваемой в эту среду под некоторым давлением. Основное влияние на этот процесс оказывает соотношение градиентов давления в потоках инжектируемой и вытесняемой жидкости, обусловленное действием сил инерции, вязкого трения и межфазного взаимодействия обеих жидкостей со стенками капиллярных каналов. Существенной особенностью процесса вытеснения является наличие во многих пористых средах тупиковых пор с пониженной связностью, что приводит к захвату во внутривыводном пространстве некоторого объема вытесняемой жидкости.

Более простая, но не менее важная разновидность моделей инвазивной перколяции возникает при изучении метода ртутной порометрии. В экспериментальных исследованиях пористых структур метод инвазивной ртутной порометрии относится к числу наиболее распространенных и хорошо изученных методов, который позволяет оценивать поры с эквивалентным гидравлическим диаметром  $d$  от 3.5 нм до 500 мкм. В его основе лежит высказанная в 1921 году Е. Уошбурном [Washburn, 1921] идея создания контролируемого перепада давления  $\Delta p$  в окружающей пористое тело жидкой ртути для вдавливания некоторого ее объема  $\Delta v$  в капилляры последнего. Квазистатическое увеличение перепада давлений  $\Delta p$  позволяет ртути постепенно проникать во все более мелкие капилляры пористого тела, эквивалентный диаметр  $d$  которых будет соответствовать величине вынуждающей силы  $\Delta p$ , а приращение удельного объема инжектируемой жидкости  $\Delta v$  — суммарному объему пор данного диаметра на единицу массы исследуемого образца. Для снижения влияния на результирующие данные низкой связности тупиковых пор и захвата в поровом пространстве вытесняемых газов и/или жидкостей пористый образец перед испытаниями подвергается вакуумированию, а вдавливаемая жидкость — фильтрованию для очистки от посторонних частиц и двойной перегонке для исключения газовой выделенности в процессе испытаний. В результате, для адекватного описания процесса ртутной порометрии с помощью моделей инвазивной решеточной перколяции требуется лишь выделение подмножества достижимых узлов решетки, связанного с заданным стартовым подмножеством. Отсутствие необходимости в моделировании захвата вытесняемой жидкостью тупиковых и слабосвязных фрагментов порового пространства не только существенно упрощает решаемую задачу, но и позволяет использовать инвазивную решеточную перколяцию без захвата для моделирования внутренней структуры пористой среды.

## Общие определения

Одной из базовых задач, возникающих при моделировании перколяции, является задача выделения подмножества или кластера узлов, непрерывным образом связанных с заданным стартовым подмножеством. Простейшая модель инвазивной решеточной перколяции строится

с помощью взвешенного однородного графа или решетки, достижимость произвольного узла которой задается некоторой псевдослучайной величиной  $U_i$ . В том случае, если величины  $U_i$  и  $U_j$  в соседних узлах решетки при  $i = j \pm \varepsilon_k$  взаимно независимы, то говорят о некоррелированной перколяции или перколяции Бернулли. Величина  $\varepsilon_k$  является компонентой сдвигового вектора  $\varepsilon(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)$ , определяемого формой и радиусом окрестности внутренних узлов решетки.

Из курсов топологии и теории множеств известно [Александров, 1977], что ключевое влияние на связность оказывает функция метрики, определяющая расстояния и формирующая  $\varepsilon$ -окрестность некоторой точки  $b$ . Одним из достаточно общих способов определения окрестности произвольной точки  $U_{\varepsilon, \pi}(b)$  является использование функции неметрического расстояния Минковского  $\rho_\pi(a, b)$ :

$$U_{\varepsilon, \pi}(b) = \{a : \rho_\pi(a, b) \leq \varepsilon\}, \quad \rho_\pi(a, b) = \left( \sum_{i=1}^n |a_i - b_i|^\pi \right)^{1/\pi}, \quad (1)$$

где  $\pi \geq 0$  — показатель неметрического расстояния Минковского (далее по тексту для краткости именуемый просто показателем Минковского);  $a(a_1, a_2, \dots, a_n)$ ,  $b(b_1, b_2, \dots, b_n)$  — координаты точек  $a$  и  $b$ .

Применение термина «неметрическое расстояние» обусловлено тем, что строгое определение метрики накладывает на функцию (1) следующие ограничения: а)  $\rho_\pi(a, b) = 0 \Leftrightarrow a = b$ ; б)  $\rho_\pi(a, b) = \rho_\pi(b, a)$ ; в)  $\rho_\pi(a, b) \leq \rho_\pi(a, c) + \rho_\pi(c, b)$ . Для неметрического расстояния Минковского все три ограничения выполняются лишь при  $\pi \geq 1$ , а на интервале  $0 \leq \pi < 1$  знак в третьем неравенстве (неравенстве треугольника) меняется на противоположный  $\rho_\pi(a, b) > \rho_\pi(a, c) + \rho_\pi(c, b)$ . В наших задачах функция неметрического расстояния  $\rho_\pi(a, b)$  определяет лишь меру удаленности точек  $a$  и  $b$  вдоль проходящей через них прямой и используется в (1) для определения окрестности  $b$  с соответствующим показателем Минковского  $\pi$ .

В общем случае относительные доли достижимых узлов  $p_k$  является компонентами вектора  $\mathbf{p}(p_1, p_2, \dots, p_n)$ , длина которого соответствует форме и радиусу используемой окрестности внутренних узлов решетки. При равных компонентах вектора  $\mathbf{p}$  реализации кластеров будут обладать статистически изотропной структурой, а при неравных — структура реализаций станет статистически анизотропной [Москалев, Шитов, 2007].

## Изотропные кластеры с $(1, 0)$ -окрестностью

Рассмотрим задачу построения статистически изотропного кластера узлов на трехмерной квадратной решетке с  $(1, 0)$ -окрестностью фон Неймана. Среди множества алгоритмов, применяющихся для решения задач перколяции, достаточно высокой эффективностью отличается однопроходный алгоритм, базовые реализации которого в были представлены в работах П. Лиса [Leath, 1976] и З. Александровиц [Alexandrowicz, 1980]. Применительно к задаче инвазивной некоррелированной перколяции без захвата основные этапы построения статистически изотропного кластера узлов на трехмерной решетке с  $(1, 0)$ -окрестностью можно сформулировать следующим образом [Москалев, 2009]:

- а) все узлы перколяционной решетки взвешиваются последовательностью псевдослучайных чисел с равномерным распределением  $u_{xyz} \sim \mathbf{U}(0, 1)$ ; недостижимыми считаются те узлы перколяционной решетки, весовой коэффициент  $u_{xyz}$  которых больше или равен заданной доли достижимых узлов  $p$ , а достижимыми — узлы, весовой коэффициент которых меньше доли достижимых узлов

$$u_{xyz} < p; \quad (2)$$

- б) среди узлов решетки формируется некоторое стартовое подмножество и либо все, либо только достижимые узлы стартового подмножества помечаются числовой меткой  $l > 1$ , к примеру  $l = 2$ ;
- в) узлы стартового подмножества объединяются с достижимыми узлами из своего  $(1, 0)$ -периметра, формируемого как объединение  $(1, 0)$ -окрестностей, и помечаются числовой меткой  $l$ ;
- г) достижимые узлы  $(1, 0)$ -периметра образуют новое стартовое подмножество на следующей итерации;
- д) пункты (в-г) повторяются до исчерпания достижимых узлов в текущем  $(1, 0)$ -периметре кластера, либо до присоединения к кластеру узлов из заданного целевого подмножества.

Описанный алгоритм используется в этом разделе для построения статистически изотропных реализаций кластеров узлов и распределений относительных частот по их выборочной совокупности на трехмерной квадратной решетке с  $(1, 0)$ -окрестностью фон Неймана. В листинге 1 показана реализация на языке С общей функции “ssTNd()”, обеспечивающей маркировку кластера узлов, связанного с заданным стартовым подмножеством на  $n$ -мерной квадратной решетке с анизотропной  $(1, \pi)$ -окрестностью Мура.

Листинг 1. Реализация функции “ssTNd()” на языке С

```

1 #include <R.h>
2 #include <Rinternals.h>
3 ///////////////////////////////////////////////////////////////////
4 // Функция ssTNd() обеспечивает маркировку кластера узлов,
5 // связанного со стартовым подмножеством на n-мерной
6 // квадратной решетке с анизотропной (1,π)-окрестностью.
7 ///////////////////////////////////////////////////////////////////
8 // Аргументы:
9 //   bA - число узлов стартового подмножества;
10 //   clA - линейные индексы узлов кластера;
11 //   acA - матрица достижимости узлов решетки;
12 //   eA, pA - линейные индексы и относительные доли
13 //           достижимых узлов для (1,π)-окрестности.
14 // Переменные:
15 //   cls, acc, e, b, p - указатели на clA, acA, eA, bA, pA
16 //   a, *b - индексы узлов из текущего (1,π)-периметра
17 //           кластера по вектору cls[]: от, до;
18 //   c - индекс текущего узла периметра по вектору cls[];
19 //   h - индекс текущего узла окрестности по вектору e[];
20 //   n - число узлов, образующих (1,π)-окрестность.
21 ///////////////////////////////////////////////////////////////////
22 SEXP ssTNd(SEXP pA, SEXP acA, SEXP bA, SEXP eA, SEXP clA) {
23   acA = coerceVector(acA, REALSXP);
24   clA = coerceVector(clA, INTSXP);
25   pA = coerceVector(pA, REALSXP);
26   bA = coerceVector(bA, INTSXP);
27   eA = coerceVector(eA, INTSXP);
28   double *p, *acc;
29   int *b, *e, *cls,
30       n=length(eA), a=0, db, c, h, ch;
31   cls = INTEGER(clA); e = INTEGER(eA); b = INTEGER(bA);
32   acc = REAL(acA); p = REAL(pA); db = *b;
33   while (db>0) { // Пока периметр непуст:
34     db = 0; // Обнуляем текущий периметр.

```



```

33 .Call("ssTNd", p, acc, b, e, cls)
34 return(acc)
35 }
36 fssi30 <- function(n=1000, x=33, p=0.311608,
37                   set=(x^3+1)/2, all=TRUE) {
38   rfq <- array(0, dim=rep(x, times=3))
39   for (i in seq(n))
40     rfq <- rfq + (ssi30(x, p, set, all) > 1)
41   return(rfq/n)
42 }

```

Приведенные выше реализации были опубликованы автором в составе библиотеки SPSL [Moskalev, 2012] под лицензией GNU GPL-3 и с июня 2012 года доступны для свободной загрузки через систему репозитория CRAN.

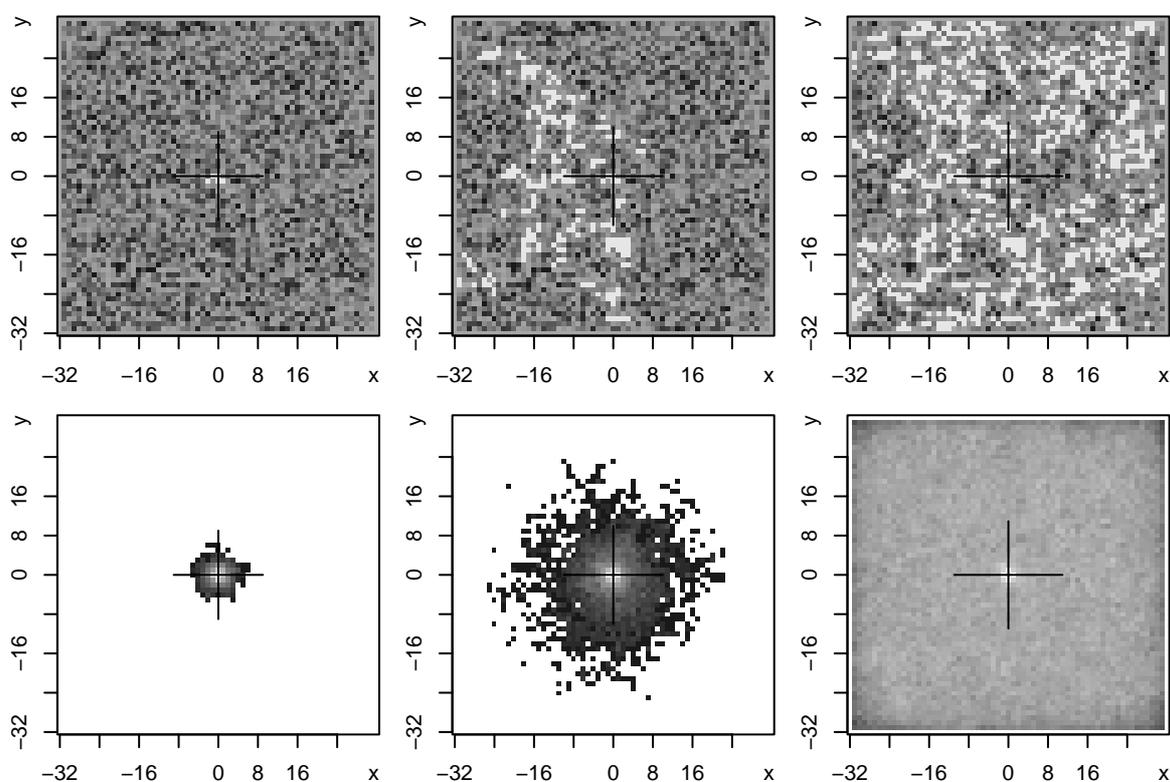


Рис. 1. Сечения плоскостью  $z = 0$  изотропных кластеров (верхний ряд) и распределений относительных частот узлов  $(1, 0)$ -окрестностью фон Неймана на трехмерной квадратной решетке размером  $x = 65$  узлов для выборки объемом  $m = 500$  реализаций при:  $p = 0.2816 < p_c$  (слева);  $p = 0.3116 \approx p_c$  (в центре);  $p = 0.3416 > p_c$  (справа)

Примеры построения статистически изотропных реализаций кластеров и распределений относительных частот на трехмерной квадратной решетке размером  $x = 65$  узлов с  $(1, 0)$ -окрестностью фон Неймана и непроницаемыми граничными условиями при различных значениях доли достижимых узлов  $p$  показаны на рисунке 1.

Реализации и распределения относительных частот, показанные на рисунке 1 (слева), соответствуют докритическим значениям доли достижимых узлов  $p < p_c$ . На рисунке 1 (в центре) показаны реализации и распределения при околоскритических значениях доли достижимых узлов  $p \approx p_c$ , а на рисунке 1 (справа) — при сверхкритических значениях  $p > p_c$ . Для большей наглядности взвешивающая данную решетку последовательность псевдослучайных чисел  $u_{xyz} \sim \mathbf{U}(0, 1)$

была зафиксирована. Белым цветом в верхнем ряду на рисунке 1 обозначены узлы, принадлежащие кластеру; светло-серым цветом — недостижимые узлы, а темно-серым — достижимые узлы, не связанные со стартовым подмножеством.

Черным цветом в нижнем ряду на рисунке 1 показаны узлы с относительными частотами  $w_{xy0} = 0.02$ , а белым — с частотами  $w_{xy0} = 0.32$ ; все узлы с частотами, выходящими за пределы данного интервала  $w_{xy0} \notin [0.02; 0.32]$ , условно не показаны. Символом “+” на рисунке 1 отмечено стартовое подмножество узлов кластера в центре решетки, причем размеры элементов символа относительно центральной точки  $(0, 0, 0)$  соответствуют доле достижимых узлов, масштабированной по радиусу перколяционной решетки  $\frac{(x-1)p}{2}$ .

## Изотропные кластеры с $(1, \pi)$ -окрестностью

В классической задаче о перколяции узлов на трехмерной квадратной решетке используется единичная окрестность фон Неймана  $U_{1,0}(b)$ , соответствующая нулевому показателю Минковского  $\pi = 0$ . Для выделенного узла  $b$  такая окрестность включает в себя  $n = 6$  узлов, только одна из координат которых отличается от одноименной координаты узла  $b$  на единицу. В другом предельном случае при  $\pi \rightarrow \infty$  единичная окрестность Мура  $U_{1,\infty}(b)$  для выделенного узла  $b$  на трехмерной квадратной решетке будет включать в себя  $n = 26$  узлов, хотя бы одна из координат которых отличается от одноименной координаты выделенного узла на единицу.

Нетрудно проверить, что единичная окрестность Мура для узла  $b$  на трехмерной квадратной решетке образуется как объединение трех подмножеств узлов, для которых: а) только одна, б) только две, в) только три из координат отличаются от одноименной координаты  $b$  на единицу. Тогда при промежуточных показателях Минковского  $\pi \in (0, \infty)$  мера удаленности  $\rho_\pi$  для шести осевых узлов, образующих окрестность  $U_{1,0}$ , будет сохраняться постоянной и равной единице  $\rho_{\pi,1} = 1$ , а для остальных 20 узлов, входящих в окрестность  $U_{1,\infty}$ , будет убывать от  $\rho_{\pi,2} \rightarrow \rho_{\pi,3} \rightarrow \infty$  при  $\pi \rightarrow 0+$  до  $\rho_{\pi,3} \rightarrow \rho_{\pi,2} \rightarrow 1+$  при  $\pi \rightarrow \infty$ . Например, в манхэттенской метрике при  $\pi = 1$  расстояние до 20 неосевых узлов будет равно  $\rho_{1,2} = 2$  или  $\rho_{1,3} = 3$ , а в евклидовой метрике при  $\pi = 2$  расстояние до тех же узлов будет равно  $\rho_{2,2} = \sqrt{2}$  или  $\rho_{2,3} = \sqrt{3}$ .

Для учета неметрического расстояния в модели изотропной решеточной перколяции узлов проведем нормировку доли достижимых узлов  $p$  в неравенстве (2) на меру их удаленности  $\rho_\pi$  от текущего узла. Тогда итерационный процесс построения реализации перколяционного кластера будет основываться на проверке выполнения весового неравенства

$$u_{xyz} < \frac{p}{\rho_\pi} \quad (3)$$

для каждого узла  $(x, y, z)$  из единичной окрестности Мура некоторого текущего подмножества узлов, где  $u_{xyz} \sim \mathbf{U}(0, 1)$  — равномерно распределенные на интервале  $(0, 1)$  псевдослучайные числа;  $p$  — относительная доля достижимых узлов решетки.

Также как и в предыдущем случае те узлы, для которых неравенство (3) выполняется, помечаются числовой меткой  $l > 1$  и образуют текущее подмножество для следующей итерации. Условием остановки процесса является появление на очередной итерации пустого текущего подмножества узлов или достижение узла из заданного целевого подмножества.

В листинге 3 показана реализация на языке R функций “ssi3d()” и “fssi3d()”, которые обеспечивают инициализацию переменных, необходимых для корректного вызова функции “sstNd()”. Функция “ssi3d()” обеспечивает маркировку статистически изотропного кластера узлов, связанного с заданным стартовым подмножеством “set” на трехмерной квадратной решетке заданного размера “x” с  $(1, \pi)$ -окрестностью Мура при заданных долях достижимых узлов “p0”, “p1” и “p2”. Функция “fssi3d()” обеспечивает расчет матрицы относительных частот



```

55 rfq <- array(0, dim=rep(x, times=3))
56 for (i in seq(n))
57   rfq <- rfq + (ssi3d(x, p0, p1, p2, set, all) > 1)
58 return(rfq/n)
59 }

```

Приведенные выше реализации функций “ssi3d()” и “fssi3d()” также вошли в состав библиотеки SPSL [Moskalev, 2012], опубликованной автором под лицензией GNU GPL-3.

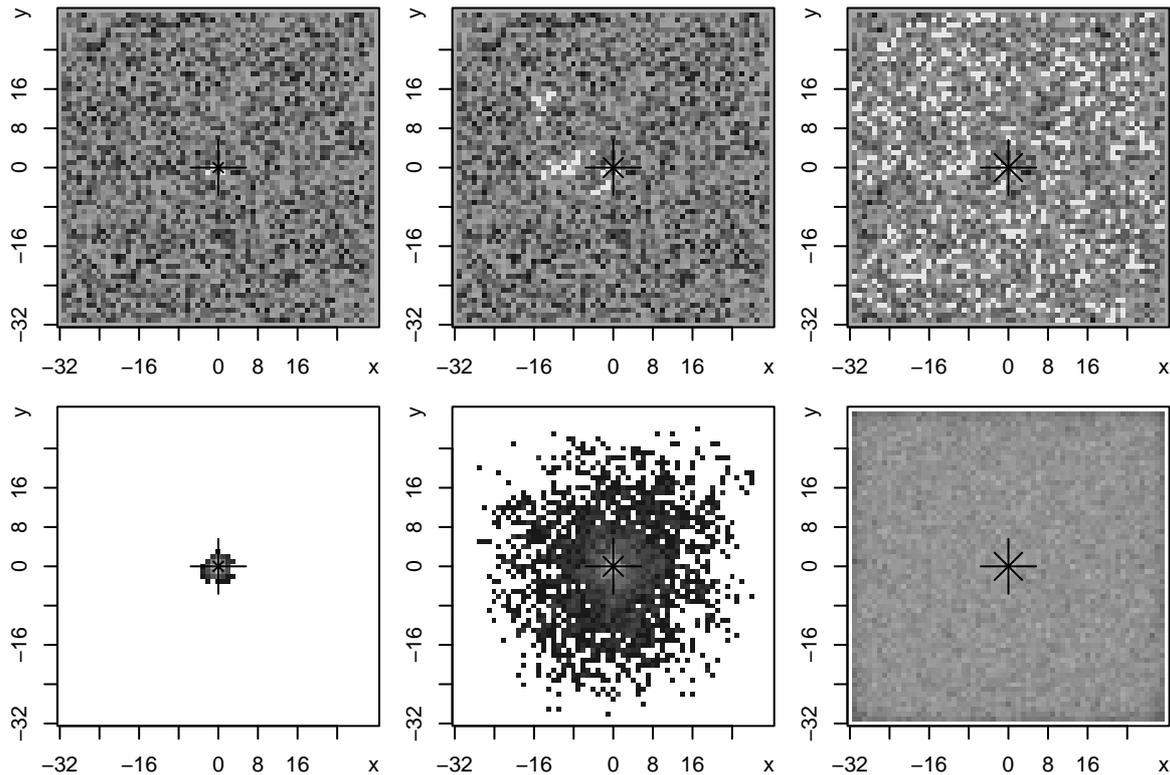


Рис. 2. Сечения плоскостью  $z = 0$  изотропных кластеров (верхний ряд) и распределений относительных частот узлов (нижний ряд) с  $(1, \pi)$ -окрестностью Мура на трехмерной квадратной решетке размером  $x = 65$  узлов для выборки объемом  $m = 500$  реализаций при  $p = 0.175$  и:  $\pi = 0.5$  (слева);  $\pi = 1$  (в центре);  $\pi = 2$  (справа)

Примеры построения отдельных реализаций статистически изотропных кластеров и распределений относительных частот на трехмерной квадратной решетке размером  $x = 65$  узлов с  $(1, \pi)$ -окрестностью Мура и непроницаемыми граничными условиями при фиксированной доле достижимых узлов  $p = 0.175$  и различных значениях показателя Минковского  $\pi$  приведены на рисунке 2.

На рисунке 2 (слева) показаны реализации и распределения относительных частот при значениях показателя Минковского  $\pi = 0.5$ , соответствующих неметрическим расстояниям. На рисунке 2 (в центре) показаны реализации и распределения относительных частот при значениях  $\pi = 1$ , соответствующих манхеттенской метрике, а на рисунке 2 (справа) — при значениях  $\pi = 2$ , соответствующих евклидовой метрике. Остальные параметры для отображения отдельных реализаций в верхнем ряду на рисунке 2 и распределений относительных частот в нижнем ряду на рисунке 2 выбраны идентичными примерам из предыдущего раздела. Символом “\*” на рисунке 2 отмечено стартовое подмножество узлов кластера в центре решетки, причем размеры элементов символов относительно центральной точки  $(0, 0, 0)$  соответствуют долям достижимых

узлов и их попарным средним, нормированным на меру удаленности узла в  $(1, \pi)$ -окрестности Мура и масштабированным по радиусу перколяционной решетки  $\frac{(x-1)p}{2p\pi}$ .

Сравнение статистически изотропных распределений относительных частот для инвариантно взвешенных решеток с единичными окрестностями фон Неймана и Мура в нижнем ряду на рисунках 1 и 2 показывает, что вероятность появления перколяционного кластера  $P_\infty(p, \pi)$  является возрастающей функцией как по доле достижимых узлов  $p$ , так и по показателю Минковского  $\pi$ . Следовательно, при возрастании значений показателя  $\pi$  на решетке с окрестностью Мура критическое значение доли достижимых узлов  $p_c(\pi)$  будет снижаться. Действительно, сравнивая показанные в нижнем ряду слева на рисунках 1 и 2 сечения плоскостью  $z = 0$  статистически изотропных распределений относительных частот узлов с единичными окрестностями фон Неймана и Мура нетрудно заметить, что последний случай соответствует докритическому значению для трехмерной решетки  $p = 0.175 < p_c(\pi = 0.5)$ . Тогда показанные в центре и справа в нижнем ряду на рисунке 2 распределения соответствуют около- и сверхкритическим значениям долей достижимых узлов для трехмерной решетки:  $p = 0.175 \approx p_c(\pi = 1)$  и  $p = 0.175 < p_c(\pi = 2)$ .

## Анизотропные кластеры с $(1, 0)$ -окрестностью

Рассмотрим задачу о построении статистически анизотропного кластера узлов на трехмерной квадратной решетке с  $(1, 0)$ -окрестностью фон Неймана. С алгоритмической точки зрения это означает векторизацию изотропного весового неравенства (2) по узлам, образующим  $(1, 0)$ -окрестность фон Неймана [Москалев, 2013]

$$u_{xyz} < p_k \quad \text{для } k = 1, 2, \dots, n, \quad (4)$$

где  $p_k$  — компоненты вектора долей достижимых узлов  $\mathbf{p}$  размерности  $n = 6$  для трехмерной решетки. При  $p_1 = p_2 = \dots = p_n$  кластер узлов будет статистически изотропным, в противном случае — неравные компоненты вектора  $\mathbf{p}$  приведут к появлению ненулевой меры статистической анизотропии.

Для количественной оценки статистической анизотропии кластера воспользуемся евклидовой нормой разности векторов  $L_2 = \|\mathbf{p} - \langle \mathbf{p} \rangle\|$ , где  $\langle \mathbf{p} \rangle$  — усредненный по компонентам вектор долей достижимых узлов  $\mathbf{p}$ . Тогда в изотропном случае при  $\mathbf{p} = \langle \mathbf{p} \rangle$  мера анизотропии будет равна нулю  $L_2 = 0$ , а в анизотропном случае при  $\mathbf{p} \neq \langle \mathbf{p} \rangle$  — строго больше нуля  $L_2 > 0$ .

Также как и в изотропном случае те узлы, для которых неравенство (4) выполняется, помечаются числовой меткой  $l > 1$  и образуют текущее подмножество для следующей итерации. Условием остановки процесса является появление на очередной итерации пустого текущего подмножества узлов или достижение узла из заданного целевого подмножества.

В листинге 4 показана реализация на языке R функций “ssa30()” и “fssa30()”, которые обеспечивают инициализацию переменных, необходимых для корректного вызова функции “ssTnd()”. Функция “ssa30()” обеспечивает маркировку статистически анизотропного кластера узлов, связанного с заданным стартовым подмножеством “set” на трехмерной квадратной решетке заданного размера “x” с  $(1, 0)$ -окрестностью фон Неймана при заданных компонентах вектора долей достижимых узлов “p”. Функция “fssa30()” обеспечивает расчет матрицы относительных частот узлов для выборки статистически анизотропных реализаций заданного объема “n”, связанных с заданным стартовым подмножеством “set” на трехмерной квадратной решетке заданного размера “x” с  $(1, 0)$ -окрестностью фон Неймана при заданных компонентах вектора долей достижимых узлов “p”.



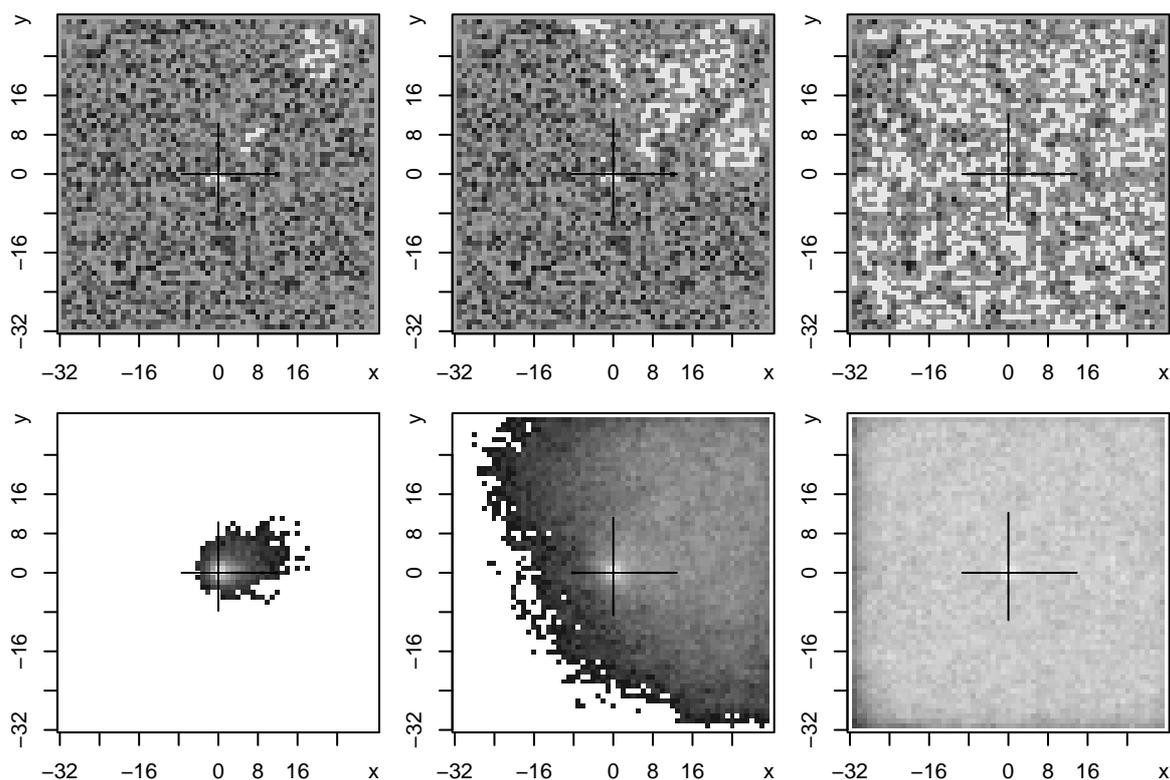


Рис. 3. Сечения плоскостью  $z = 0$  анизотропных кластеров (верхний ряд) и распределений относительных частот узлов (нижний ряд) с  $(1, 0)$ -окрестностью фон Неймана на трехмерной квадратной решетке размером  $x = 65$  узлов для выборки объемом  $m = 500$  реализаций при:  $\mathbf{p}_1 = (0.232; 0.372; 0.242; 0.322; 0.282; 0.282)$  (слева);  $\mathbf{p}_2 = (0.262; 0.402; 0.272; 0.352; 0.312; 0.312)$  (в центре);  $\mathbf{p}_3 = (0.292; 0.432; 0.302; 0.382; 0.342; 0.342)$  (справа)

частот в нижнем ряду на рисунке 3 выбраны идентичными примерам из предыдущих разделов. Символом “+” на рисунке 3 отмечено стартовое подмножество узлов кластера в центре решетки, причем размеры элементов символов относительно центральной точки  $(0, 0, 0)$  соответствуют компонентам вектора долей достижимых узлов, масштабированным по радиусу перколяционной решетки  $\frac{(x-1)p}{2}$ .

Используя сечения плоскостью  $z = 0$  статистически анизотропных распределений относительных частот, представленных в нижнем ряду на рисунке 3, нетрудно заметить, что основное влияние на протекание в заданном направлении перколяционной решетки  $\pm i, \pm j, \pm k$  оказывают значения соответствующих компонент векторов  $\mathbf{p}_3$ . К примеру, кластеры распределении относительных частот, показанном в нижнем ряду слева на рисунке 3 обладают структурой, сверхкритической в направлениях орт  $i, j$  и докритической в направлениях  $-i, -j$ . Действительно, сравнивая компоненты вектора  $\mathbf{p}_1 = (0.232; 0.372; 0.242; 0.322; 0.282; 0.282)$  с порогом перколяции узлов на трехмерной квадратной решетке  $p_c \approx 0.311$  можно записать, что доли достижимых узлов имеют докритические значения  $p_{11} < p_{13} < p_c$  в направлениях орт  $i, j$ , и сверхкритические  $p_{12} > p_{14} > p_c$  в направлениях  $-i, -j$ . При этом протекания ни в одном из этих направлений не наблюдается, поскольку доли достижимых узлов в ортогональных направлениях  $\pm k$  также имеют докритические значения  $p_{15} = p_{16} < p_c$ .

### Анизотропные кластеры с $(1, \pi)$ -окрестностью

Рассмотрим задачу о построении статистически анизотропного кластера узлов на трехмерной квадратной решетке с  $(1, \pi)$ -окрестностью Мура. С алгоритмической точки зрения это





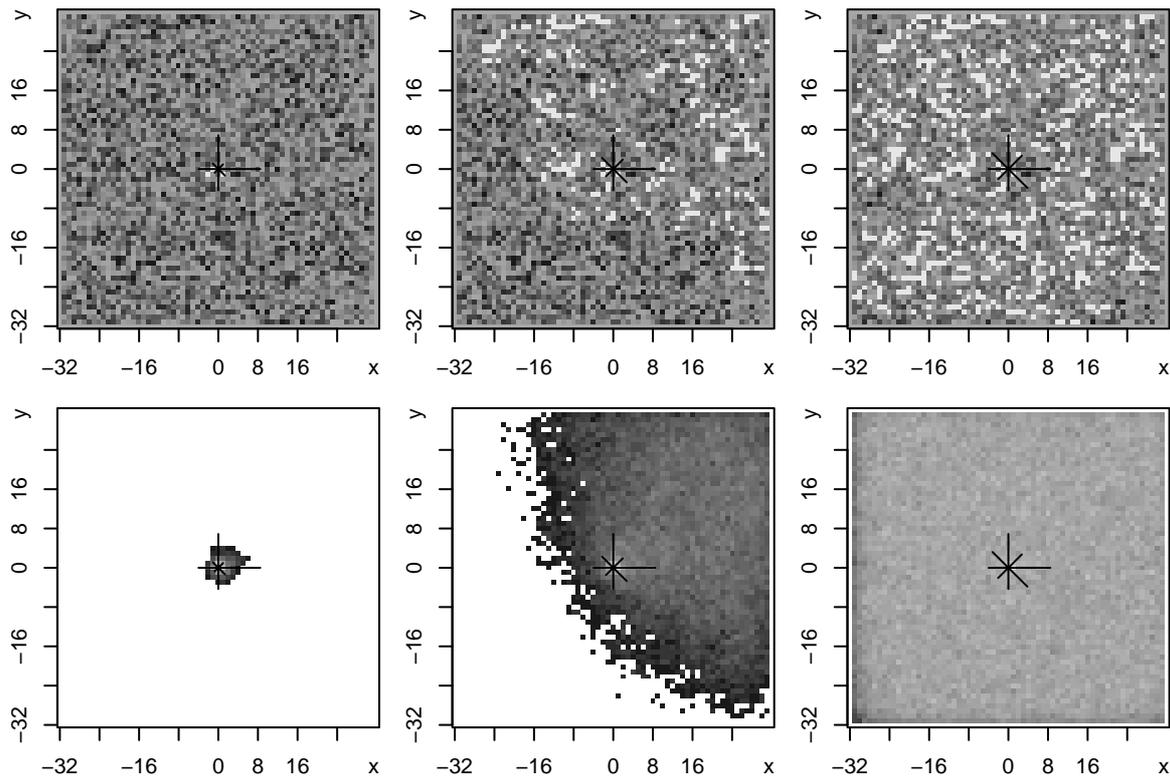


Рис. 4. Сечения плоскостью  $z = 0$  анизотропных кластеров (верхний ряд) и распределений относительных частот узлов (нижний ряд) с  $(1, \pi)$ -окрестностью Мура на трехмерной квадратной решетке размером  $x = 65$  узлов для выборки объемом  $m = 500$  реализаций при  $p_3 = (0.125; 0.265; 0.135; 0.215; 0.175; 0.175)$  и:  $\pi = 0.5$  (слева);  $\pi = 1$  (в центре);  $\pi = 2$  (справа)

рисунке 4 (в центре) показаны реализации и распределения относительных частот при значениях  $\pi = 1$ , соответствующих манхеттенской метрике, а на рис. 4 (справа) — при значениях  $\pi = 2$ , соответствующих евклидовой метрике. Основные параметры для отображения отдельных реализаций в верхнем ряду на рисунке 3 и распределений относительных частот в нижнем ряду на рисунке 3 выбраны идентичными примерам из предыдущих разделов. Символом “\*” на рисунке 4 отмечено стартовое подмножество узлов кластера в центре решетки, причем размеры элементов символов относительно центральной точки  $(0, 0, 0)$  соответствуют компонентам вектора долей достижимых узлов и их попарным средним, нормированным на меру их удаленности в  $(1, \pi)$ -окрестности Мура и масштабированным по радиусу перколяционной решетки  $\frac{(x-1)p}{2\rho_\pi}$ .

## Заключение

Сопоставление структуры рассмотренных выше моделей перколяции узлов на трехмерной квадратной решетке показывает, что изотропная модель с  $(1, 0)$ -окрестностью фон Неймана является частным случаем как изотропной модели с  $(1, \pi)$ -окрестностью Мура, так и анизотропной модели с  $(1, 0)$ -окрестностью фон Неймана. В свою очередь, изо- и анизотропная модели с  $(1, 0)$ -окрестностью фон Неймана, а также изотропная модель с  $(1, \pi)$ -окрестностью Мура являются частными случаями анизотропной модели с  $(1, \pi)$ -окрестностью Мура, причем размерность решетки на указанные отношения существенной роли не влияет. Это приводит к выводу о существовании иерархической структуры моделей перколяции узлов на  $n$ -мерных квадратных решетках, допускающих описание в рамках универсального алгоритма, реализация которого приведена в листинге 1.

Основным параметром изотропной модели перколяции узлов с  $(1, 0)$ -окрестностью фон Неймана является относительная доля достижимых узлов:  $p = \frac{N_p}{N_t}$ , где  $N_p$  — количество достижимых узлов решетки;  $N_t$  — общее количество узлов решетки. Сопоставляя отдельному узлу перколяционной решетки некий минимальный объем  $V_0$ , нетрудно показать, что с физической точки зрения относительная доля достижимых узлов  $p$  соответствует априорной оценке полной объемной пористости моделируемой среды:  $\Pi_{vt} = \frac{V_p}{V_t}$ , где  $V_p = V_0 N_p$  — полный (несвязный) объем порового пространства;  $V_t = V_0 N_t$  — репрезентативный объем пористой среды. Тогда компоненты вектора  $\mathbf{p}(p_1, p_2, \dots, p_n)$  в анизотропных моделях перколяции узлов будут совпадать с априорными оценками полной объемной пористости по соответствующим направлениям моделируемой среды  $\Pi_{vt}(\Pi_{vt1}, \Pi_{vt2}, \dots, \Pi_{vtm})$ .

Выделение кластера, содержащего  $N_c$  узлов, позволяет оценить эффективную объемную пористость моделируемой среды:  $\Pi_{vc} = \frac{V_c}{V_t}$ , где  $V_c = V_0 N_c$  — эффективный (связный) объем порового пространства. Обобщение  $(1, 0)$ -окрестности фон Неймана до  $(1, \pi)$ -окрестности Мура показывает, что связный объем порового пространства зависит от показателя Минковского  $V_{c,\pi}$  и подчиняется неравенству:  $0 \leq V_{c,0} \leq V_{c,\pi} \leq V_{c,\infty} \leq V_p$ , где  $V_{c,0}$ ,  $V_{c,\infty}$  — объемы порового пространства, соответствующие наихудшей и наилучшей связности моделируемой среды.

## Список литературы

- Александров П. С. Введение в теорию множеств и общую топологию. — М.: Наука, 1977. — 368 с.
- Москалев П. В., Шитов В. В. Математическое моделирование пористых структур. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. — 120 с.
- Москалев П. В. Анализ структуры перколяционного кластера // *Журнал технической физики*. — 2009. — Т. 79, № 6. — С. 1–7.
- Москалев П. В. Иерархическое построение моделей перколяции узлов на  $n$ -мерных квадратных решетках // *Математика. Компьютер. Образование. Сборник тезисов XX Международной научной конференции*. — № 20. — М.–Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2013. — С. 184.
- Alexandrowicz Z. Critically branched chains and percolation clusters // *Physics Letters A*. — 1980. — Vol. 80, no. 4. — P. 284–286.
- Broadbent S., Hammersley J. Percolation processes: I. Crystals and mazes // *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. — 1957. — Vol. 53, no. 3. — P. 629–641.
- Flory P. Molecular size distribution in three dimensional polymers. Part I–III // *Journal of the American Chemical Society*. — 1941. — Vol. 63, no. 11. — P. 3083–3100.
- Koplik J., Wilkinson D., Willemsen J. Percolation and capillary fluid displacement // *The Mathematics and Physics of Disordered Media: Percolation, Random Walk, Modeling, and Simulation* / Hughes B., Ninham B. (ed.). — Berlin: Springer, 1983. — P. 169–183.
- Leath P. Cluster size and boundary distribution near percolation threshold // *Physical Review B*. — 1976. — Vol. 14, no. 11. — P. 5046–5055.
- Moskalev P. V. SPSL: Site percolation on square lattice. — 2012. — R package version 0.1-8. — URL: <http://cran.r-project.org/package=SPSL>.
- Stockmayer W. Theory of molecular size distribution and gel formation in branched-chain polymers // *The Journal of Chemical Physics*. — 1943. — Vol. 11, no. 2. — P. 45–55.
- Washburn E. Note on a method of determining the distribution of pore sizes in a porous material // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. — 1921. — Vol. 7, no. 4. — P. 115–116.
- Wilkinson D., Willemsen J. Invasion percolation: a new form of percolation theory // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. — 1983. — Vol. 16, no. 14. — P. 3365–3376.