МЕХАНИКА 2009. Вып. 2

УДК 531.19, 519.24

© *С. Р. Галлямов, С. А. Мельчуков*

О НЕСКЕЙЛИНГЕ ВЕРОЯТНОСТИ ПРОТЕКАНИЯ ПРОСТОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ: ТЕОРИЯ И КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

На основе известных свойств функции вероятности протекания простой кубической решётки размера $L = 2$ в приближении линейной связи порога протекания бесконечной решётки x_c и среднего значения x_{cL} конечной решётки введена нескейлинговая функция вероятности протекания для решётки размера $L > 2$. Показано, что на пороге протекания нескейлинговые вероятности для всех ПК решёток одинаковы.

Компьютерные эксперименты на основе метода Монте-Карло согласуются с предлагаемой в работе теорией.

Ключевые слова: перколяция, решётка, вероятность протекания, нескейлинг, компьютерный эксперимент.

Введение

В теории перколяции вероятность протекания $P = P(x)$ как функция от концентрации x интересующей нас фазы является основной характеристикой перколяционной системы. Через вероятность протекания можно выразить свойства физических величин, зависящих от топологии больших кластеров, например, спонтанную намагниченность $M(x)$ или проводимость $\sigma(x)$ [1].

Общепринятое скейлинговое описание поведения $P(x)$ и $\sigma(x)$ при помощи критических индексов β и t: $P(x) \propto |x - x_c|^\beta$ и $\sigma(x) \propto |x - x_c|^t$ применимо вблизи критической концентрации x_c и для системы бесконечных размеров [2, 3, 4].

Известно, что численное моделирование физических процессов можно осуществлять на решётках больших, но конечных размеров ввиду ограниченных возможностей любого компьютера. В настоящее время точное выражение для $P = P(x, L)$ как функции от концентрации x и размера решётки L неизвестны для пространств размерности $d > 1$. Для теории и практики интерес представляет простая кубическая (далее ПК) решётка размера $L > 2$ в задаче узлов.

В § 1 данной работы на основе упрощающих допущений введена функция $P(x, L)$ для конечных решёток и в широком диапазоне $0 < x < 1$, что являлось основной целью данной работы. Эта цель достигалась на основе результата из [5] для функции $P(x)$ ПК решётки размера $L = 2$ в приближении [6] о линейной связи порога протекания бесконечной решётки x_c со средним значением x_{cL} конечной решётки в трёхмерном случае.

В § 2 представлена вычислительная схема компьютерного эксперимента по определению величин, необходимых для задания функции $P(x, L)$.

Для краткости функцию, характеризующую какое-либо *перколяционное свойство* (вероятность протекания $P(x, L)$ в том числе) *конечной решётки в широком интервале концентрации* x интересующей нас фазы, мы *условно назвали нескейлинговой функцией, или нескейлингом.* В качестве нескейлинга можно рассматривать средний размер конечного кластера (скейлинговое описание которого общепринято записывать через критический индекс γ: $S(x) \propto |x - x_c|^{-\gamma}$), а также другие важные характеристики перколяционной системы, которые вблизи критической точки x_c описываются показательной функцией с различными критическими индексами.

§ 1. Нескейлинговая модель вероятности протекания ПК решётки

Вероятностные свойства двухфазной системы будем получать в задаче узлов. Для этого рассмотрим статистический ансамбль, образованный большим (в пределе бесконечно большим) числом N двухфазных систем. Каждая двухфазная система размера L статистического ансамбля состоит из проводящей и непроводящей фаз, распределенных случайно на L^3 узлах ПК решётки, а x — это доля узлов интересующей нас фазы.

Вероятность протекания $P(x,\, L)$ случайно выбранного узла решётки размера L определяется как $P(x,\, L) = xY(x,\, L)$, где $Y(x,\, L)$ — условная вероятность того, что выбранный с вероятностью x узел, интересующей нас фазы принадлежит соединяющему кластеру (spanning cluster). Функция $Y(x,\, L)$ введена в [5] как

$$Y(x,\, L) = \frac{1}{1+\exp[-S(x,\, L)]}, \quad S(x,\, L) = \sum_{n=1}^{N} a_n(x^n - x_{cL}^n), \tag{1.1}$$

для задания которой, а значит и для задания $P(x,\, L)$, необходимо знать коэффициенты степенного ряда a_n и x_{cL}, здесь $N = K-1$, K — число нетривиальных точек $Y_i(x_i)$, x_{cL} соответствует условию $Y(x_{cL},\, L) = 1/2$.

Для решёток с $L > 2$ аналитическое определение a_n проблематично, однако для элементарного кубика ПК решётки ($L = 2$ и $K = 3$) определены точные значения x_{cL} и двух коэффициентов a_1 и a_2 [5]:

$$x_{c2} = 0{,}3989085; \quad a_1 = 8\ln(9/2) \quad \text{и} \quad a_2 = 0. \tag{1.2}$$

Здесь и ниже численные значения величин приводятся с точностью, совпадающей с точностью представленной в литературе (например, в [4, 7]) значением порога протекания ПК решётки.

Равенство нулю a_2 (при $a_1 \neq 0$) для $L = 2$ явилось основой для важного в дальнейшем моделирующего допущения: для ПК решёток размером $L > 2$ коэффициенты ряда a_n в (1.1) равны нулю, начиная с $n = 2$,

$$a_n = 0, \quad \text{при } n > 1, \tag{1.3}$$

то есть x_{cL} является точкой перегиба функции $Y(x,\, L)$ для решёток всех размеров, так как ее вторая производная в точке x_{cL} при условии (1.3) равна нулю:

$$Y''_{xx}(x_{cL}) = \frac{1}{4}\sum_{n=1}^{N} n(n-1)a_n x_{cL}^{n-2} = 0, \tag{1.4}$$

при этом $a_1 \neq 0$ не нарушает условия (1.4).

Теперь для задания функции $Y(x,\, L)$, а значит и для $P(x,\, L)$, необходимо знать только функции $a_1 = a_1(L)$ и $x_{cL} = x_{cL}(L)$, то есть $S(x,\, L)$ в (1.1) приобретает простой вид

$$S(x,\, L) = a_1(L)(x - x_{cL}). \tag{1.5}$$

В [5] результат (1.2) использован для вычисления порога протекания бесконечной кубической решётки x_c из уравнения

$$\frac{1}{2} + \frac{a_1(2)(x_c - x_{c2})}{4} = \frac{x_c}{1+x_c}, \tag{1.6}$$

которое легко преобразуется к виду $x_{c2} = x_c + \frac{\mathrm{const}}{a_1(2)}$ или формально для решётки размера L:

$$x_{cL} = x_c + \frac{C}{a_1(L)}, \tag{1.7}$$

где C — константа.

Покажем, что x_{cL} является (дополнительно к сказанному выше) средним значением случайной величины x, функция распределения которой задана как $Y(x,\, L)$. Известно, что среднее значение M_x (математическое ожидание) случайной величины x, функция распределения которой есть $Y(x,\, L)$, определяется как [8]:

$$M_x = \int_0^\infty [1 - Y(x,\, L)]dx, \tag{1.8}$$

то есть M_x геометрически может быть представлено площадью над кривой $Y(x,\, L)$ (рис. 1). Интегрируя (1.8) в указанных пределах, с учетом связи

$$X(x,\, L) = 1 - Y(x,\, L), \tag{1.9}$$

где $X(x,\, L)$ является условной вероятностью того, что выбранный с вероятностью x узел интересующей нас фазы, принадлежит конечному кластеру (closed clusters), получим

$$M_x = \int_0^\infty X(x,\, L)dx = \frac{1}{a_1(L)} \ln\left[1 + \exp(a_1(L)x_{cL})\right]. \tag{1.10}$$

Оценка для элементарного кубика ПК решётки при значениях из (1.2) показывает, что в (1.10) $\exp[a_1(2)x_{cL}] \gg 1$ (ниже будет показано, что $a_1(L) = a_1(2)L/2$, поэтому для решёток с $L > 2$ тем более $\exp[a_1(L)x_{cL}] \gg 1$), тогда в результате интегрирования (1.10) получаем $M_x = x_{cL}$, то есть с большой точностью x_{cL} является средним значением x, функция распределения которой является $Y(x,\, L)$.

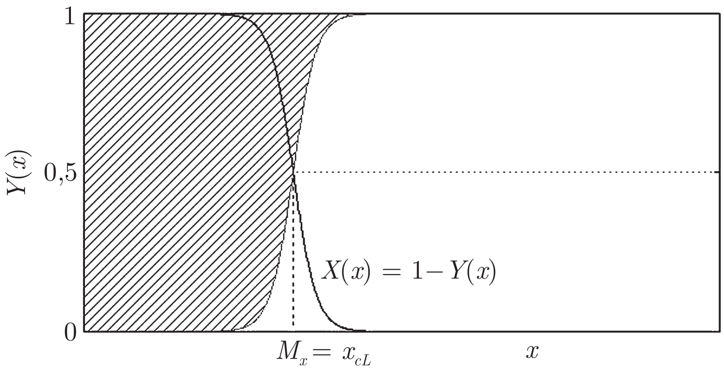

Рис. 1. Среднее значение случайной величины M_x есть площадь (заштрихована) над кривой $Y(x, L)$ и равна x_{cL}

Интеграл в (1.10) можно представить как сумму двух интегралов:

$$M_x = \int_0^\infty X(x,\, L)dx = \int_0^1 X(x,\, L)dx + \int_1^\infty X(x,\, L)dx = \int_0^1 X(x,\, L)dx,$$

тогда

$$I = \int_0^1 X(x,\, L)dx = x_{cL}, \tag{1.11}$$

так как $X(x,\, L) = 0$ при $x \geqslant 1$.

В [6] для определения порога протекания бесконечной решётки x_c через среднее значение x_{cL} конечной решётки предложена простая связь для трехмерных решёток:

$$x_{cL} = x_c + \frac{A}{L}, \tag{1.12}$$

где A — константа.

Сравнивая (1.7) и (1.12), можно увидеть, что a_1 для решётки размера L будет линейной функцией от L, тогда $a_1(L)$ и x_{cL} можно определять аналитически как

$$a_1(L) = \frac{a_1(2)L}{2} \tag{1.13}$$

и

$$x_{cL} = \frac{2x_{c2} + x_c(L-2)}{L}, \tag{1.14}$$

а нескейлинговые функции $Y(x, L)$ и $P(x, L)$ приобретают окончательный вид для ПК решётки:

$$Y(x, L) = \frac{1}{1+\exp[-a_1(L)(x-x_{cL})]} \quad \text{и} \quad P(x, L) = \frac{x}{1+\exp[-a_1(L)(x-x_{cL})]}, \tag{1.15}$$

где $a_1(L=2) = 8\ln(9/2)$, $x_{c2} = 0{,}3989085$, $x_c = 0{,}3116865$ определены в [5].

Последние два значения позволяют легко вычислить константу A в (1.12) при $L = 2:$ $A = 0{,}1744440$. Поэтому следует ожидать, что на пороге протекания значения функций $Y(x_c, L) = 1/\{1+\exp[a_1(2)A/2]\} = Y_c$ и $P(x_c, L) = x_cY_c$ не зависят от размера ПК решётки. Другими словами графики (на рис. 2 сплошные кривые) функций $Y(x, L)$ должны пересекаться в одной точке с координатами $x_c = 0{,}3116865$ и $Y_c = 0{,}2593194$, а графики (на рис. 3 сплошные кривые) функций $P(x, L)$ в точке с координатами $x_c = 0{,}3116865$ и $P_c = 0{,}0808264$.

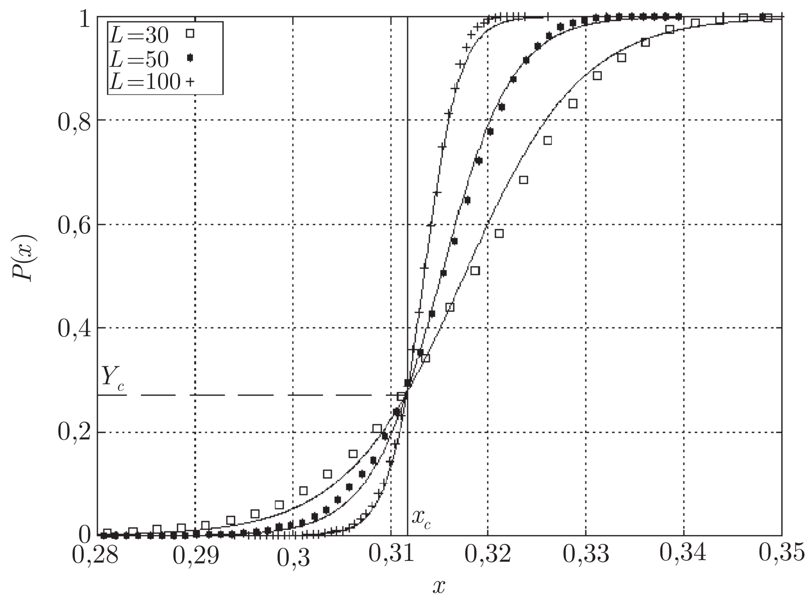

Рис. 2. Экспериментальные точки ПК решётки при $L = 30$; 50 и 100 практически лежат на теоретических кривых $Y(x, L)$, которые (сплошные) пересекаются в критической точке x_c . Вертикальная линия при $x_c = 0{,}3116865$ (задача узлов) соответствует перколяционному переходу для бесконечной решётки — предельной функции условной вероятности протекания $Y(x, L \to \infty)$. На пороге протекания функции $Y(x, L)$ одинаковы и равны $Y(x_c, L) = Y_c = 0{,}2593194$ независимо от размера решетки L (горизонтальная штриховая линия)

Это свойство конечных ПК решёток можно использовать для введения понятия критической точки x_c (порог протекания) для бесконечной ПК решётки как точки, где значения нескейлинговых функций по (1.15) одинаковы для всех конечных решёток. Другими словами, нескейлинг конечной решётки превращается в скейлинг («закон подобия») в единственной точке, называемой критической. Такой результат подтверждает гипотезу подобия Каданова–Вильсона [9, 10], которая применительно к перколяционной системе дает нам самоподобие бесконечного (соединяющего) кластера.

§ 2. Компьютерный эксперимент

Компьютерные испытания проводились в целях проверки изложенной в § 1 теоретической модели.

Получим выражения, по которым можно определять функции $a_1 = a_1(L)$ и $x_{cL} = x_{cL}(L)$ из компьютерного эксперимента. Для этого используем результаты интегрирования функций $Y(x, L)$ и $X(x, L)$ в интересующих нас пределах. Так, согласно (1.11),

$$I_1 = \int_0^1 Y(x, L)dx = 1 - x_{cL}, \tag{2.1}$$

а также

$$I_2 = \int_0^{x_{cL}} Y(x, L)dx = \frac{\ln 2}{a_1(L)}, \tag{2.2}$$

$$I_3 = \int_{x_{cL}}^1 Y(x, L)dx = 1 - x_{cL} - \frac{\ln 2}{a_1(L)}, \tag{2.3}$$

$$S_3 = \int_{x_{cL}}^1 X(x, L)dx = \frac{\ln 2}{a_1(L)}. \tag{2.4}$$

При интегрировании полагалось, что для $L > 2$

$$\exp[-a_1(L)(1 - x_{cL})] \ll 1 \quad \text{и} \quad \exp[a_1(L)x_{cL}] \gg 1, \tag{2.5}$$

так как, согласно (1.13), $a_1(L) \approx 6L \gg 1$.

Интегралы I_1, I_2 и I_3 выражают площади под кривой $Y(x, L)$ при соответствующих пределах, а интеграл S_3 — площадь под кривой $X(x, L)$ или площадь над кривой $Y(x)$. Поэтому, заменяя интеграл I_1 по (2.1) конечной суммой, с большой точностью можно определить x_{cL} для решётки размера L по экспериментальным точкам x_i, $Y_i(x_i)$:

$$x_{cL} = 1 - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k}(x_{i+1} - x_i)(Y_{i+1} + Y_i), \tag{2.6}$$

где k может принимать максимальное значение $k_{\max} = 1/h_{\min}$, если $h_{\min} = 1/L^3$ — минимально возможный шаг по x.

Каждое экспериментальное значение $Y_i(x_i)$ определялось из компьютерных испытаний методом Монте-Карло:

$$Y_i(x_i) = \frac{N_x}{N}, \tag{2.7}$$

где N — общее число двухфазных систем (сгенерированных в процессе компьютерного эксперимента) в статистическом ансамбле, N_x — число систем в ансамбле, в которых образовался соединяющий (бесконечный) кластер при данном значении x и размере ПК решётки L.

Напомним, что каждая двухфазная система статистического ансамбля состоит из проводящей и непроводящей фаз, распределенных случайно на L^3 узлах ПК решётки, а x — это доля узлов интересующей нас фазы.

Для экспериментального определения $a_1(L)$ заменим сумму интегралов I_2 и S_3 конечной суммой $I_2 + S_3 = S$ в виде

$$S = \frac{1}{2}\left\{\sum_{i=1}^{m}[(x_{i+1} - x_i)(Y_{i+1} + Y_i)] + \sum_{j=1}^{n}[(x_{j+1} - x_j)(X_{j+1} + X_j)]\right\}, \tag{2.8}$$

где $m = x_{cL}/h_m$, $n = (1 - x_{cL})/h_n$, h_m — шаг по x в интервале от 0 до x_{cL}, а X_{j+1} и X_j определяются из связи (1.9) в интервале от x_{cL} до 1 с шагом h_n.

Область заметного изменения нескейлинговой функции $Y(x, L)$ будем характеризовать шириной перехода $\Delta x = 4/a_1(L)$, тогда для достижения наибольшей точности компьютерных экспериментов необходимо, чтобы в области Δx шаги h_m и h_n были минимальными: $h_{\min} = 1/L^3$.

Определив сумму S из (2.2) и (2.4), находим экспериментальное значение $a_1(L)$:

$$a_1(L) = \frac{2\ln 2}{S}, \tag{2.9}$$

где S определяется по (2.8).

В компьютерных экспериментах число систем в статистическом ансамбле задавалось от 10^4 до 10^6 в зависимости от размера решётки L, который принимал значения от 3 до 100, а вычисления выполнялись на вычислительном кластере и SMP-системах с применением интерфейса MPI.

§ 3. Обсуждение результатов

Основные результаты работы представлены графически на рис. 2–5.

На рис. 2 и 3 показано, что теоретические (сплошные кривые) и экспериментальные нескейлинговые функции $Y(x, L)$ и $P(x, L)$ практически совпадают. В качестве меры несовпадения (ошибки) экспериментального нескейлинга $Y(x, L)$ и предложенного в § 1 теоретического по (1.15) использовано стандартное отклонение $\sigma_{YL} = \sqrt{D_{YL}}$, где $D_{YL} = \overline{(\Delta Y_L)^2}$ есть дисперсия, вычисленная для нетривиальных точек случайной (экспериментальной) функции $Y(x, L)$. Так для $L = 30$, 50 и 100 получены соответствующие значения стандартных отклонений $\sigma_{Y30} = 0{,}025$; $\sigma_{Y50} = 0{,}019$; $\sigma_{Y100} = 0{,}014$. На основе даже такой «пессимистичной» (завышенной) оценки стандартных отклонений можно сказать, что теория и эксперимент согласуются друг с другом.

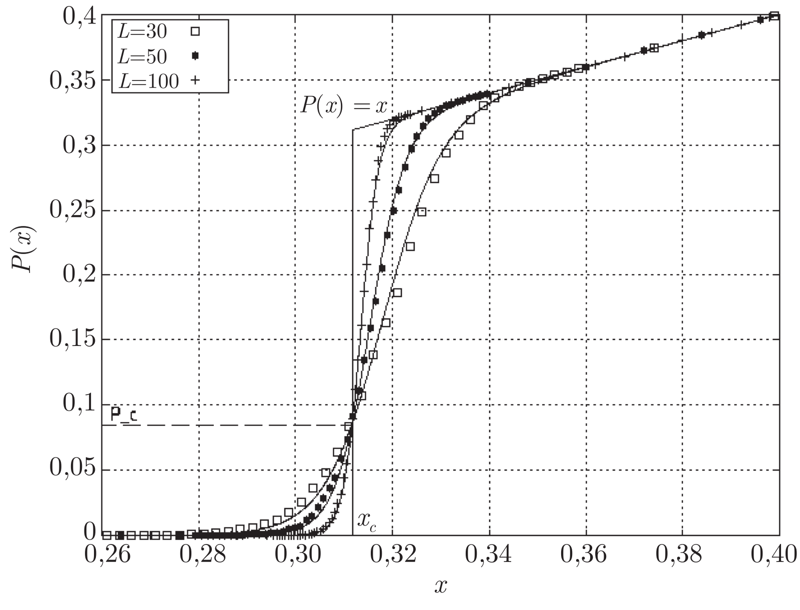

Рис. 3. В окрестности x_c нескейлинговые вероятности протекания ПК решётки $P(x,L)$ для $L = 30$; 50 и 100 (сплошные кривые) резко возрастают и пересекаются в критической точке x_c. Выше x_c и далее при $x \to 1$ вероятности протекания $P(x,L)$ возрастают практически линейно независимо от размера решёток L. На пороге протекания функции $P(x,L)$ одинаковы и равны $P(x_c,L) = P_c = 0{,}0808264$ независимо от размера решётки L (горизонтальная штриховая линия). Предельной функции вероятности протекания $P(x, L\to\infty)$ соответствует вертикальная линия при $x_c = 0{,}3116865$, переходящая в (сплошную наклонную) прямую $P(x) = x$ при $x > x_c$

Такое же согласие теории по формулам (1.12) и (1.13) и компьютерного эксперимента по вычислению среднего значения x_{cL} и коэффициентов $a_1(L)$ видно соответственно на рис. 4

и 5, на которых линейная зависимость (в первом случае от обратного размера решётки, а во втором случае от размера решётки) подтверждается.

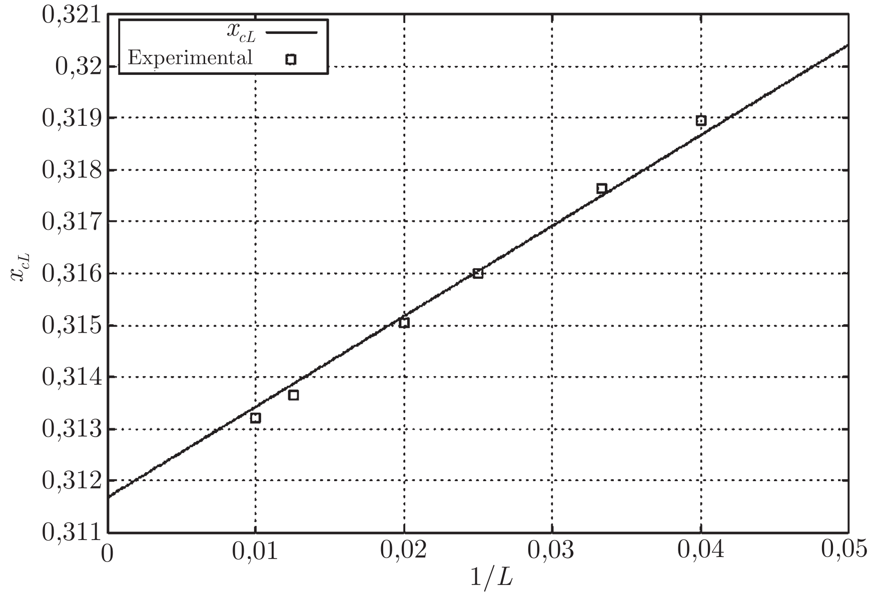

Рис. 4. Линейная зависимость (сплошная прямая) x_{cL} от обратного размера решётки по формуле (1.12) и полученные в компьютерных экспериментах значения x_{cL} для ПК решеток размерами $L = 25$; 30 ; 40 ; 50 ; 80 и 100 (задача узлов)

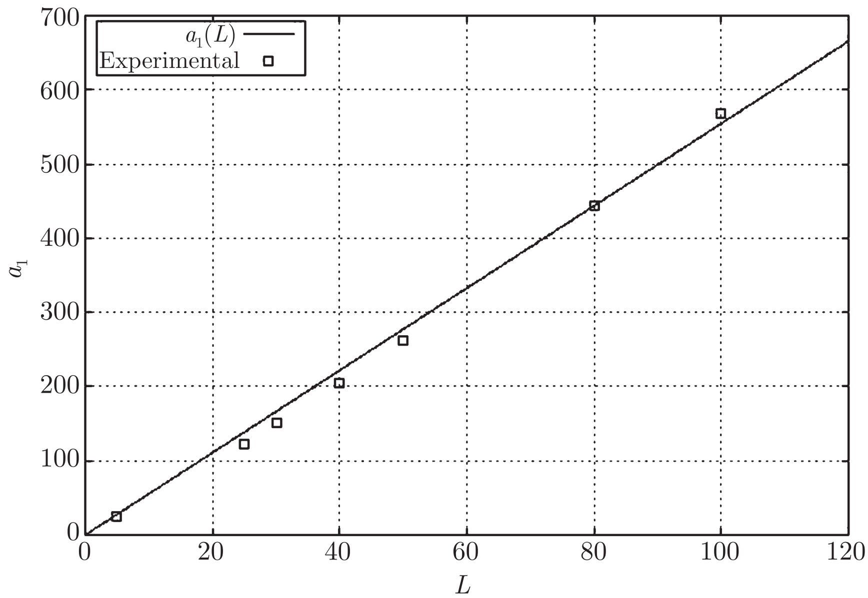

Рис. 5. Линейная зависимость (сплошная прямая) коэффициента $a_1(L)$ от размера решётки по формуле (1.13) и полученные в компьютерных экспериментах значения $a_1(L)$ для ПК решеток размерами $L = 3$; 25 ; 30 ; 40 ; 50 ; 80 и 100 (задача узлов)

§ 4. Выводы

1. Допущение о том, что для ПК решёток размером $L > 2$ коэффициенты ряда a_n в (1.1) равны нулю, начиная с $n = 2$, и второе допущение о линейной связи порога протекания бесконечной решётки x_c и среднего значения x_{cL} конечной решётки по (1.12), предложенное авторами [6], позволили ввести простую модель поведения нескейлинговых вероятностей по (1.15), что подтверждается экстенсивным компьютерным моделированием.

2. Модель поведения нескейлинговых вероятностей позволяет ввести понятие критической точки x_c (порог протекания) для бесконечной ПК решётки как точки, где значения нескейлинговых функций по (1.15) одинаковы для всех конечных решёток. Это подтверждает гипотезу подобия Каданова–Вильсона, которая применительно к перколяционной системе дает нам самоподобие бесконечного (соединяющего) кластера.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Займан Дж. Модели беспорядка. — М.: Мир, 1982. (Ziman J. M. Models of disorder. — N.Y.-London-Melbourne: Cambridge University Press, 1979.)
2. Эфрос А. Л. Физика и геометрия беспорядка. — М.: Наука, 1982. — 176 с. (Библиотечка «Квант». Вып. 19.)
3. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. — М.: Наука, 1979.
4. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. — М.: Едиториал УРСС, 2002. — 112 с.
5. Галлямов С. Р. Порог протекания простой кубической решётки в задаче узлов в модели решётки Бёте // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. — 2008. — Вып. 3. — С. 109–115.
6. Левинштейн М. Е., Шур М. С., Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. О связи между критическими индексами теории протекания // ЖЭТФ. — 1975. — Т. 69. — С. 386.
7. Lorenz C. D., Ziff R. M. Universality of the excess number of clasters and the crossing probability function in three-dimensional percolation // J. Phys. A: Math. Gen. — 1998. — Vol. 31. — P. 8147–8157.
8. Вентцель Е. С., Овчаров Л. А. Задачи и упражнения по теории вероятностей. — М.: Высш. шк., 2006. — С. 123.
9. Kadanoff L. P. et al. Static Phenomena Near Critical Points: Theory and Experiment // Rev. Mod. Phys. — 1967. — Vol. 39. — P. 395–431.
10. Wilson K. G. Renormalization group and critical phenomena. 1. Renormalization group and Kadanoff scaling picture // Phys. Rev. — 1971. — Vol. B4. — P. 3174.

Поступила в редакцию 11.05.09

S. R. Gallyamov, S. A. Mel'chukov

On nonscaling probability function for passing in a simple cubic lattice: theory and computer experiment

Using known properties of the probability function for passing in a simple cubic lattice with $L = 2$ in approximation of a linear relation between a passing threshold of an infinite lattice x_c and average value x_{cL} of a finite lattice, we introduce a nonscaling probability function of passing of a lattice with $L > 2$. We show that on the passing threshold nonscaling probabilities for all simple cubic lattices are the same. Computer experiments based on the Monte–Carlo method are in agreement with the theory proposed.

Keywords: percolation, lattice, passing probability, nonscaling, computer experiment.

Mathematical Subject Classifications: 60K, 82B

Галлямов Сергей Рафаэлович,
ст. преп., кафедра общей физики,
Удмуртский государственный университет, 426034, ул. Университетская, 1
E-mail: galser@uni.udm.ru

Мельчуков Сергей Анатольевич,
Ст. преп., кафедра высокопроизводительных вычислений и параллельного программирования,
Удмуртский государственный университет, 426034, ул. Университетская, 1
E-mail: sam@izh.com