

## КОМПЬЮТЕРНЫЕ НАУКИ

УДК 519.246

© С. Р. Галлямов

### ПОРОГ ПРОТЕКАНИЯ ПРОСТОЙ КУБИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ В ЗАДАЧЕ УЗЛОВ В МОДЕЛИ РЕШЕТКИ БЕТЕ

По введенной функции вероятности протекания в модели решетки Бете определен порог протекания простой кубической решетки в задаче узлов:  $x_c(s.c.) = 0,3116865$ .

*Ключевые слова:* перколяция, решетка, задача узлов, вероятность протекания, порог протекания.

#### Введение

Слово «протекание» (от английского термина *percolation* — просачивание) впервые употребили в 1957 г. Бродбент и Хаммерсли [1] в связи с ими же введенным классом математических задач. Такие задачи возникают при рассмотрении протекания жидкости или газа по случайному лабиринту, например проникновение газа через пористую угольную маску. Это практическое приложение и дало название всей математической теории — теории перколяции. В литературе можно встретить и теорию протекания, и теорию просачивания. Основные термины и понятия теории перколяции приведены в [2–7, и др.], откуда следует, что в теории перколяции наиболее распространенными являются решеточные задачи: задача узлов (site problem) и задача связей (bond problem). Задача узлов считается более общей, и зачастую ограничиваются только ее рассмотрением. В данной работе, не нарушая общности, мы тоже будем рассматривать задачу узлов.

Рассмотрим двухфазную систему, состоящую из проводящей и непроводящей фаз, распределенных случайно на  $N$  узлах решетки размерности  $d$ . (При  $d = 2$  решетка может быть квадратной, треугольной, шестиугольной, плоским деревом и т. д., при  $d = 3$  перколяцию можно изучать, например, на кубической решетке, решетке алмаза, трехмерном дереве и т. д.) При изучении вопроса о прохождении жидкости через пористую среду узлы, принадлежащие проводящей фазе  $l$ , в дальнейшем будем называть жидкими, а узлы, принадлежащие непроводящей фазе  $s$ , — твердыми.

Пусть нас интересует жидкая фаза (далее фаза  $l$ ), концентрация или доля узлов которой есть

$$x = N_x/N, \quad (1)$$

где  $N_x$  — число узлов фазы  $l$ .

В задаче узлов удаляют (блокируют) узлы фазы  $l$  и одним из основных вопросов, на которые пытается ответить теория перколяции, является вопрос: при какой доле  $x_c$  прохождения жидкости через пористую среду прекращается? Критическую долю  $x_c$  узлов проводящей фазы называют порогом протекания (перколяции).

$N_x$  является суммой числа узлов  $n(x)$ , принадлежащих конечным (обособленным) кластерам  $CC$  (closed clusters), и числа узлов  $n_1(x)$ , принадлежащих соединяющему кластеру  $SC$  (spanning cluster), то есть

$$N_x = \tilde{n}(x) + \tilde{n}_1(x) \quad \text{или} \quad \tilde{X}(x) + \tilde{Y}(x) = 1, \quad (2)$$

где  $\tilde{X}(x) = \tilde{n}(x)/N_x$  — вероятность того, что узел фазы  $l$  принадлежит конечным кластерам  $CC$ , а  $\tilde{Y}(x) = \tilde{n}_1(x)/N_x$  — вероятность того, что узел фазы  $l$  принадлежит соединяющему кластеру  $SC$ . Ниже порога перколяции  $x < x_c$  соединяющий кластер исчезает и остаются только кластеры конечного размера.

Пороги протекания для некоторых плоских решеток (треугольная, квадратная, шестиугольная) найдены еще в 1964 г. Сайксом и Эссамом [8]. Впоследствии были найдены точные значения порогов перколяции еще для нескольких плоских решеток, например, для решетки «галстук-бабочка» (bow-tie), но точные значения порогов перколяции для пространств большей размерности до сих пор неизвестны. По-видимому, это связано с тем, что для аналитического решения задач теории протекания пока не существует какого-либо метода. Большинство работ по определению порогов протекания решеток связаны с компьютерным моделированием. Аналитическое определение порога протекания хотя бы одной трехмерной решетки является основной целью настоящей работы.

Известно, что для решетки Бете (или дерево Кейли) порог протекания  $x_c$  одинаковый для задачи узлов и задачи связей и связан с координационным числом  $Z$  простым выражением [2, 7]

$$x_c = 1/(Z - 1). \quad (3)$$

В данной работе на основе результата (3) и введенной в § 1 функции условной вероятности протекания  $Y(x)$  для элементарного кубика определен порог протекания простой кубической решетки ПК (simple cubic, s.c.).

В теории протекания вероятность протекания  $P = P(x)$  как функция от концентрации  $x$  проводящей фазы является важнейшей характеристикой перколяционной системы. Через  $P$  можно выразить свойства физических величин, зависящих от топологии больших кластеров, например спонтанную намагниченность и проводимость решетки.

Зависимость  $P(x)$  вблизи порога перколяции определяется скейлинговым соотношением [9]:

$$P(x) \propto |x - x_c|^\beta, \quad (4)$$

где  $x_c$  — критическая концентрация узлов фазы  $l$ , а  $\beta$  — критический индекс, зависящий от размерности пространства  $d$ . Анализ многочисленной литературы по скейлинговому описанию показывает, что теория и эксперимент на сегодняшний день позволяют оценить  $\beta$ , но (4) применимо лишь вблизи  $x_c$ , а значения индекса  $\beta$  по литературным данным пока не претендуют на универсальность. Также из литературы следует, что аналитическая зависимость  $P(x)$  в широком диапазоне  $x$  неизвестна. Однако для моделирования физических явлений на решетках конечных размеров (например, фильтрация жидкостей в средах, с изменяющейся как в пространстве, так и во времени пористостью) возникает необходимость введения  $P(x)$  во всем диапазоне  $0 < x < 1$ . Решение такой задачи также является целью данной работы.

## § 1. Вероятность протекания и условная вероятность протекания $Y(x)$

Вероятность протекания случайно выбранного узла  $P(x)$  по смыслу определяется произведением вероятности  $x$  того, что выбран узел жидкой фазы  $l$ , на условную вероятность  $Y(x)$  того, что выбранный узел фазы  $l$  принадлежит соединяющему кластеру  $SC$ :

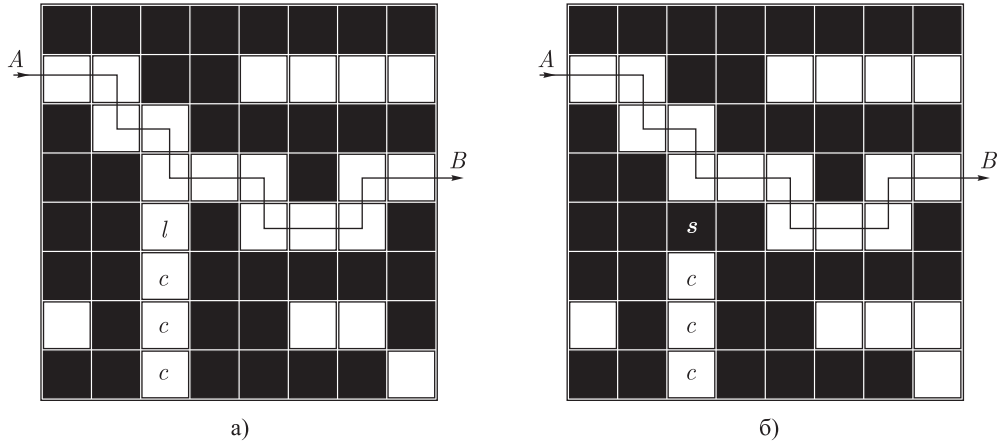
$$P(x) = xY(x). \quad (5)$$

Как сказано выше, функция  $P(x)$  в широком диапазоне  $x$  неизвестна. Из (5) видно, что при независимом параметре  $x$  поведение  $P(x)$  определяется функцией  $Y(x)$ , поэтому введем необходимую в дальнейшем функцию условной вероятности  $Y(x)$ .

Для этого рассмотрим статистический ансамбль двухфазных систем. При данной величине  $x$  число жидких узлов  $N_x = \text{const}$ , а  $\tilde{n}(x)$  и  $\tilde{n}_1(x)$  — случайные функции от  $x$ , для которых существуют средние по ансамблю двухфазных систем  $\langle n(x) \rangle$  и  $\langle n_1(x) \rangle$  такие, что

$$\langle n(x) \rangle + \langle n_1(x) \rangle = N_x \quad \text{или} \quad X + Y = 1. \quad (6)$$

Отметим, что в (2)  $\tilde{X}(x)$  и  $\tilde{Y}(x)$  — случайные функции, а их средние в (6)  $X = \langle X(x) \rangle$  и  $Y = \langle Y(x) \rangle$  являются неслучайными функциями от  $x$ . Если  $x = \text{const}$ , то в ансамбле



**Рис. 1.** Две возможные конфигурации статистического ансамбля. а) Узел  $l$  разделяет соединяющий кластер по пути  $AB$  от мертвого конца  $lcc$ . б) Узел  $l$  заменен узлом твердой фазы  $s$ , после чего образовался конечный кластер  $csc$

двухфазных систем можно обнаружить системы, в которых  $\tilde{n}(x)$  и  $\tilde{n}_1(x)$  будут отличаться (флуктуировать) от средних  $\langle n(x) \rangle$  и  $\langle n_1(x) \rangle$ . Из (2) и (6) следует, что отклонения от средних по ансамблю будут

$$\Delta n(x) = -\Delta n_1(x) \quad \text{и} \quad \Delta Y = -\Delta X. \tag{7}$$

Эти флуктуации можно объяснить, используя модель Шкловского и де Жена о топологической структуре соединяющего кластера  $SC$  [2,6], участки которого подразделяются на скелет и мертвые концы. Последние это практически конечные кластеры, связанные со скелетом посредством одного узла жидкой фазы  $l$  (рис. 1, а), а в статистическом ансамбле двухфазных систем можно обнаружить системы, где этот узел жидкой фазы  $l$  заменен узлом твердой фазы  $s$  (рис. 1, б). Это означает, что мертвые концы соединяющего кластера  $SC$  имеют ненулевую вероятность обнаружения их в качестве конечных кластеров  $CC$ . Другими словами, в каждой двухфазной системе ансамбля любой из  $n_1(x) = N_x Y X$  узлов соединяющего кластера  $SC$  с вероятностью  $X$  принадлежит конечным кластерам  $CC$ , то есть среднее по ансамблю число узлов соединяющего кластера  $\langle \Delta n_1(x) \rangle = N_x Y X$  будет принадлежать конечным кластерам. Тогда корреляционная функция  $K(x)$  или среднее произведения  $\Delta n(x) \Delta n_1(x)$  представляется произведением их средних, то есть  $\langle n(x) n_1(x) \rangle = \langle \Delta n(x) \rangle \langle n_1(x) \rangle$  и с учетом первого равенства из (7) записывается в виде  $K(x) = -\langle \Delta n_1(x) \rangle \langle \Delta n_1(x) \rangle$  или

$$K(x) = -(N_x Y X)^2. \tag{8}$$

С другой стороны  $K(x) = \langle (n(x) - \langle n(x) \rangle)(n_1(x) - \langle n_1(x) \rangle) \rangle$  с учетом второго из (7) записывается в виде  $K(x) = N_x^2 \langle \Delta X \Delta Y \rangle = -N_x^2 \langle \Delta Y \Delta Y \rangle$ , то есть выражается через дисперсию  $\langle (\Delta Y)^2 \rangle$  :

$$K = -N_x^2 (dY)^2. \tag{9}$$

Через  $dY$  в (9) обозначено стандартное отклонение искомой функции  $Y(x)$ . Из (8) и (9), с учетом второго из (6) получаем

$$(1 - Y)^2 Y^2 = (dY)^2, \quad \text{или} \quad (1 - Y)Y = dY. \tag{10}$$

Заметим, что  $dY$  имеет максимальное значение при  $Y = 1/2$ , которое достигается при некотором  $x_0$ , то есть  $(dY)_{max} = 1/4$  при  $Y(x_0) = 1/2$ . Запишем  $dY$  в виде  $dY = (dY/dx) \delta x(x)$ , где  $\delta x(x)$  — функция от  $x$ . Тогда последнее из (10) после разделения переменных будет

$$f(x) dx = dY / Y(1 - Y), \tag{11}$$

здесь для удобства обозначено  $f(x) = 1/\delta x(x)$ . После интегрирования получаем

$$F(x) = \ln(Y/(1 - Y)) + C, \quad (12)$$

где постоянную интегрирования  $C = F(x_0)$  находим из условия  $Y(x_0) = 1/2$ , а  $F(x)$  запишем в виде степенного ряда:

$$F(x) = \sum_{i=0}^N a_i x^i.$$

Тогда  $F(x_0) = \sum_{i=0}^N a_i x_0^i$  и (12) можно записать как  $F(x) - F(x_0) = \ln(Y/(1 - Y))$  или

$$Y(x) = 1/(1 + \exp[-S(x)]), \quad (13)$$

$$X(x) = 1/(1 + \exp[S(x)]), \quad (14)$$

где  $S(x) = \sum_{n=1}^N a_n (x^n - x_0^n)$ , а  $a_n$  — коэффициенты степенного ряда.

Выше введенные функции (13) и (14) позволяют найти вероятность протекания  $P(x)$  по (5) и  $Q(x)$  — вероятность того, что любой узел решетки принадлежит конечному кластеру

$$Q(x) = xX(x). \quad (15)$$

Отметим, что мы не ограничивали ни размерность пространства  $d$ , ни размер решетки  $L$ , и следует ожидать, что функции (13) и (14) универсальны и пригодны в теории перколяции для описания решеток любых размеров размерности  $d \leq 2$ .

## § 2. Модель решетки Бете

Системой, для которой можно получить аналитические результаты, является дерево Кейли, называемое также решеткой Бете. Для этой решетки, как сказано выше, получено точное значение порога протекания одинаковое для задачи узлов и задачи связей

$$x_c = 1/(Z - 1) = 1/q, \quad (16)$$

где  $q = Z - 1$  — число связей, исходящих из узла, причем  $Z > 2$  (при  $Z = 2$  решетка превращается в одномерную цепочку).

Решетку Бете, имеющую  $N = Z$  узлов, будем называть *элементарной*, а *наименьшую из элементарных — примитивной*, то есть при  $Z = 3$ .

Получим значения  $Y = Y(x)$  для примитивной решетки Бете, для которой из (16) следует, что  $x_c = 1/2$ . Для возможных значений аргумента  $x_0 = 0$ ,  $x_1 = 1/3$ ,  $x_2 = 2/3$ ,  $x_3 = 1$  простые соображения комбинаторики дают соответствующие значения для  $Y$ :  $Y_0(x_0 = 0) = 0$ ,  $Y_1(x_1 = 1/3) = 0$ ,  $Y_2(x_2 = 2/3) = 2/3$ ,  $Y_3(x_3 = 1) = 1$ .

Соединим полученные точки прямыми на плоскости  $xY$  (рис. 2):

$$y_2(x) = x$$

для интервала  $x_2 < x \leq 1$  и

$$y_1(x) = Y_2 + k(x - x_2) \quad (17)$$

для интервала  $x_1 \leq x \leq x_2$ .

Прямую по (17) можно формально считать разложением (13) в ряд около единственной нетривиальной точки  $x_2$ :

$$Y(x) = Y(x_2) + [dY(x_2)/dx](x - x_2), \quad (18)$$

где угол наклона прямой  $y_1(x)$  равен  $k = [dY(x_2)/dx] = 2$ . При  $x > x_2$  прямая  $y_1(x)$  меняет свой наклон и переходит в прямую  $y_2(x) = x$ , для которой наклон равен 1. Другими словами, прямая  $y_1(x)$  имеет наибольший наклон на зависимости  $Y(x)$ , включая и единственную нетривиальную  $x_2$ .

Рассмотрим поведение  $y_2(x)$  в области  $x_1 \leq x \leq x_2$ , так как именно этому интервалу принадлежит порог протекания  $0 < x_c < 2/3$ . Здесь  $Y_2 = x_2 = 2/Z$ , а  $k = (Z - 1)/(Z - 2)$ , то есть прямую  $y_2(x)$  можно формализовать через  $Z$  и  $x$ :

$$y_2(x) = 2/Z + (Z - 1)/(Z - 2)[x - 2/Z], \quad (19)$$

На пороге протекания  $x = x_c = 1/(Z - 1)$ , тогда  $y_1(x_c) = Y(x_c)$  и вероятность протекания  $P(x_c)$ , и вероятность того, что любой узел решетки принадлежит конечному кластеру  $Q(x_c)$  выражаются через  $Z$  соответственно:

$$Y(x_c) = 1/Z, \quad (20)$$

$$P(x_c) = x_c Y(x_c) = 1/Z(1 + Z), \quad (21)$$

$$Q(x_c) = x_c - P(x_c) = 1/Z. \quad (22)$$

Или через  $x_c$  соответственно:

$$Y(x_c) = x_c/(1 + x_c), \quad (23)$$

$$P(x_c) = x_c^2/(1 + x_c), \quad (24)$$

$$Q(x_c) = x_c/(1 + x_c). \quad (25)$$

Полученные соотношения (17)–(25) и (16) составляют основу модели решетки Бете как для задачи узлов, так и для задачи связей.

Проверим наши результаты для треугольной, шестиугольной (дуальные) и квадратной (самодуальная) решеток, для которых известны точные значения порогов протекания. На пороге протекания для шестиугольной ( $Z_6 = 3$ ) и треугольной ( $Z_3 = 6$ ) решеток по формулам (21) и (22) вычисляем  $P$  и  $Q$ :  $P_6(Z_6) = 1/Z_6(Z_6 - 1) = 1/6$  и  $Q_3(Z + 3) = 1/Z_3 = 1/6$ , то есть  $P$  для шестиугольной и  $Q$  для треугольной решеток на пороге протекания одинаковы:

$$P_6(Z_6) = Q_3(Z_3).$$

Теперь, применяя замену  $Z = (1 + x)/x$  в (21) и (22), то есть используя (24) и (25) в модели решетки Бете, получаем уравнение:

$$x_6^2/(1 + x_6) = x_3/(1 + x_3). \quad (26)$$

Для дуальных решеток известна связь на пороге протекания  $x_c + x_{cd} = 1$ , то есть в нашем случае  $x_6 = 1 - x_3$ , при которой кубическое уравнение (26) записывается как

$$(1 - x_3)^2/(2 - x_3) = x_3/(1 + x_3) \quad (27)$$

и имеет единственный корень в интервале  $0 < x_3 < 1$ , равный  $x_3 = 2 \sin(\pi/18) = 0.347296$ , где через  $x_3$  и  $x_6$  обозначены соответственно пороги протекания для треугольной и шестиугольной решеток в задаче связей.

Очевидно, для самодуальных решеток  $P(x) = P^d(x)$  и  $Q(x) = Q^d(x)$ , то есть (23) и (24) можно записать как

$$x^2/(1 + x) = (1 - x)^2/(2 - x), \quad (28)$$

$$x/(1 + x) = (1 - x)/(2 - x).$$

Уравнения (26) и (27) имеют единственный корень в интервале  $0 < x < 1$ , равный  $x = 0,5$ .

Из полученных результатов можно сделать вывод: модель решетки Бете позволяет получать точные решения для некоторых решеток в плоском случае.

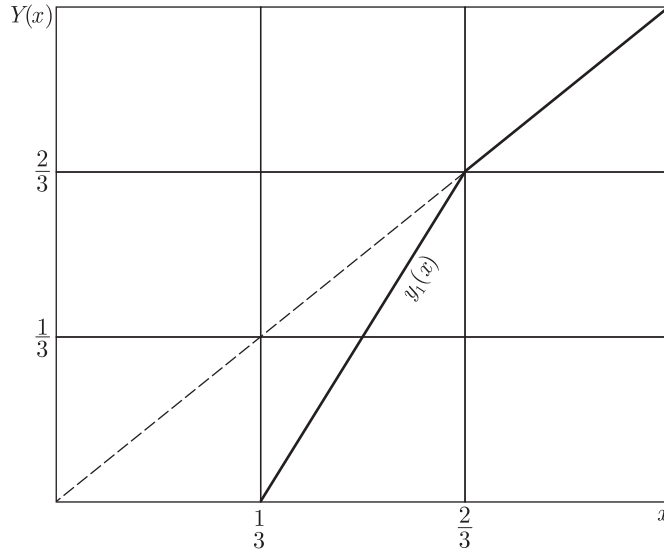


Рис. 2. Поведение функции  $Y(x)$  для примитивной решетки Бете ( $z = 3$ )

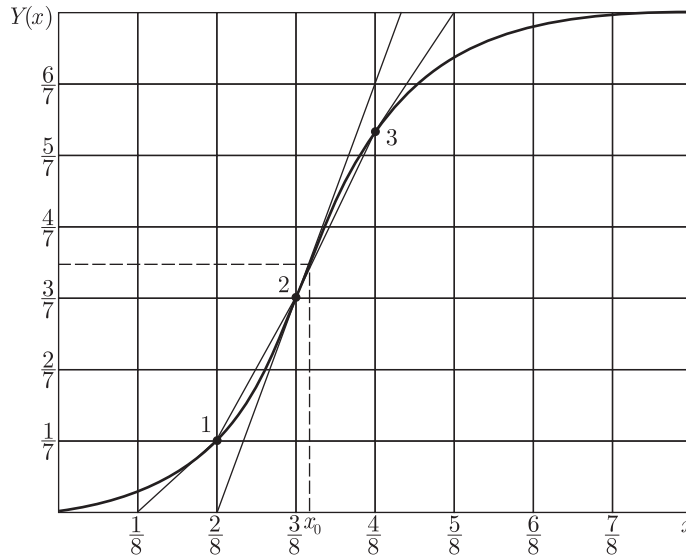


Рис. 3. Функция  $Y(x)$  для элементарного кубика простой кубической решетки. 1, 2, 3 — нетривиальные точки

Теперь перейдем к решетке размерности  $d = 3$ .

Вычислим коэффициенты  $a_n$ , входящие в  $S(x)$  по (13) и (14), для элементарного кубика простой кубической решетки ПК. Известно, что в вершинах кубика размещается  $N = 8$  узлов, поэтому возможные значения  $x_i = 0, 1/8, 2/, \dots, 1$ . Далее методами элементарной комбинаторики найдем  $Y_i(x_i)$  и составим таблицу

$x_i$	0	1/8	2/8	3/8	4/8	5/8	6/8	7/8	1
$Y_i(x_i)$	0	0	1/7	3/7	54/70	1	1	1	1

Из таблицы видно, что число нетривиальных значений  $Y_i(x_i)$  равно трем, значит можно определить  $x_0$  и два коэффициента степенного ряда  $a_1$  и  $a_2$ . Решив три уравнения вида

$$Y_i(x_i) = 1/(1 + \exp[-S_i(x_i)]),$$

получаем  $x_0 = 0.3989085$ ,  $a_1 = 8 \ln(9/2)$ ,  $a_2 = 0$ .

Полученные значения позволяют построить для элементарного кубика простой кубической решетки график функции  $Y(x)$  (рис. 3)

$$Y(x) = 1/(1 + \exp[-S(x)]), \quad (29)$$

где по вычисленным значениям  $x_0$  и  $a_1$  определяется функция  $S(x) = a_1(x - x_0)$ .

Определив первую и вторую производные, можно увидеть, что в точке  $x_0$  зависимость  $Y(x)$  имеет наибольший наклон  $k = a_1/4$ , поэтому в модели решетки Бете, то есть в (17), принимаем  $x_2 = x_0$ , а  $Y_2 = Y(x_0) = 1/2$ .

На пороге протекания из (23) в модели решетки Бете  $y_1(x_c) = Y(x_c) = x_c/(1 + x_c)$ , тогда  $y_1(x_c) = Y_2 + k(x_c - x_2)$  можно приравнять  $x_c/(1 + x_c)$  и решать уравнение относительно  $x_c$ :

$$1/2 + a_1/4(x_c - x_0) = x_c/(1 + x_c). \quad (30)$$

Уравнение (30) имеет единственный положительный корень в интервале  $0 < x < 1$ , равный  $x_c = 0,3116865$ . Полученный результат прекрасно согласуется с компьютерным моделированием Лоренца и Зиффа, которые получили  $x_c(s.c.) = 0,3116080$  [10], а также с полученным значением  $x_c(s.c.) \approx 0,3117$  на основе метода ренорм-групп [11].

Автор благодарен В. В. Васькину за конструктивное обсуждение и критические замечания.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Broadbent S. K., Hammersley J. M. Percolation processes I. Crystals and mazes. // Proc. Camb. Phil. Soc. — 1957. — Vol. 53. — P. 629–641.
2. Эфрос А. Л. Физика и геометрия беспорядка. — М.: Наука, Глав. Ред. физ. мат. лит., 1982. — 176 с. (Библиотечка «Квант». Вып. 19).
3. Федер Е. Фракталы. — М.: Мир, 1991.
4. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: в 2-х частях. Часть 2. — М.: Мир, 1990. — 400 с.
5. Кестен Х. Теория просачивания для математиков. — М.: Мир, 1986. — 392 с.
6. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. — М.: Наука, 1979.
7. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. — М.: Едиториал УРСС, 2002. — 112 с.
8. Sykes M. F., Essam J. W. Exact critical percolation probabilities for site and bond percolation in two dimensions // J. Math. Phys. — 1964. — Vol. 5, № 8. — P. 1117–1127.
9. Stauffer D. // Phys. Rep. — 1979. — Vol. 54, № 1.
10. 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. — 1998. — Vol. 31. — P. 8147–8157.
11. Stauffer D. Introduction to percolation theory. — London: Taylor & Francis, 1985.

Поступила в редакцию 30.11.08

**S. R. Gallyamov**

**A passing threshold of a simple cubic lattice in the site problem of Bethe lattice model**

Using the probability function of passing in Bethe lattice model we have found the passing threshold of a simple cubic lattice in the site problem:  $x_c(s.c.) = 0,3116865$ .

*Keywords:* percolation, lattice, site problem, probability of passing, a passing threshold.

Mathematical Subject Classifications: 06B:03G10

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