

УДК 531.19, 519.24, 537.311.3

© С. Р. Галлямов, С. А. Мельчук

## ПЕРКОЛЯЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ПРОВОДИМОСТИ ДВУХФАЗНОЙ РЕШЕТКИ: ТЕОРИЯ И КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Изучена проводимость (входящая в закон связи потока и обобщенной силы) перколяционной системы, состоящей из проводящей и непроводящей фаз. На основе представлений Шкловского–де Жена о топологической структуре бесконечного кластера установлена связь проводимости с вероятностью протекания. Получена зависимость решеточной проводимости в широком диапазоне изменения концентрации проводящей фазы. Показано согласование теории и компьютерного эксперимента, а также согласование скейлинговой зависимости проводимости (при критическом индексе из следствия гипотезы Александра–Орбаха) для квадратной и простой кубической решеток.

*Ключевые слова:* проводимость, решетка, перколяция.

### Введение

Известно, что общая особенность уравнений переноса (транспорта) состоит в том, что поток некоторой физической величины пропорционален соответствующей движущей «силе». Эта сила является градиентом некоторой величины, и уравнения для потока имеют общий вид

$$J = LX, \quad (1)$$

где  $J$  — поток физической величины,  $X$  — обобщенная сила (градиент), создающая поток,  $L$  — коэффициент пропорциональности.

Пусть двухфазная система распределена случайно на  $N$  узлах регулярной решетки размерности  $d$  и концентрация или доля узлов проводящей фазы равна  $x$ . В данной работе нас будет интересовать поведение коэффициента пропорциональности  $L$  **в зависимости от концентрации**  $x$ . В дальнейшем мы будем называть его по аналогии с законом Ома *проводимостью* и обозначать  $\sigma(x)$ .

Например, при фильтрации (протекании или просачивании) жидкости в пористых средах справедливо уравнение Дарси:

$$\mathbf{V} = -k \operatorname{grad}(H), \quad (2)$$

где  $\mathbf{V}$  — скорость фильтрации,  $\operatorname{grad}(H)$  — градиент напора  $H$ ,  $k$  — коэффициент фильтрации. Приведем также закон Ома в дифференциальной форме:

$$J = -\sigma \operatorname{grad}(\varphi), \quad (3)$$

где  $J$  — плотность тока,  $\varphi$  — потенциал электрического поля,  $\operatorname{grad}(\varphi)$  — градиент потенциала или напряженность электрического поля,  $\sigma$  — электропроводность или проводимость. То есть законы Дарси и Ома являются соответственно уравнениями переноса жидкости и электрического заряда, а (1) является обобщением уравнений (2) и (3). Для двухфазной системы, состоящей из проводящей и непроводящей фаз, коэффициенты фильтрации  $k$  и проводимости  $\sigma$  аналогичны, поэтому обобщение их в виде  $L$  вполне оправдано.

Ниже будет сказано, что проводимость двухфазной системы определяется мощностью скелета соединяющего кластера, тогда уместно рассматривать и проводимость при вихревом движении жидкости. Если область, в которой движется завихренная жидкость, разбита на кубические ячейки, у которых длина ребер равна колмогоровскому масштабу [1], то в фиксированный момент времени в одних ячейках движение будет вихревым, а в других — безвихревым. Вихри, имеющие колмогоровский масштаб, быстро затухают под действием вязкости. Существует критическая концентрация  $x_c$  ( $0 < x_c < 1$ ), при которой возникает впервые бесконечный (соединяющий) кластер из завихренных ячеек (при  $x = 1$  все ячейки завихрены).

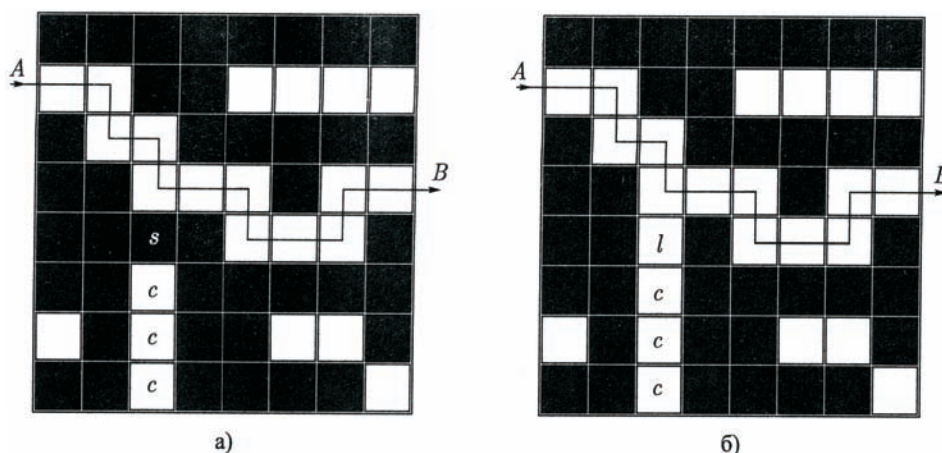
При наличии бесконечного кластера спонтанное (флуктуационное) возникновение новых завихренных ячеек будет затухать под действием вязкости, из-за отсутствия постоянного подвода энергии, а в самом бесконечном кластере устойчивым будет только скелет.

Общепринятое скейлинговое описание  $\sigma(x)$  при помощи критического индекса  $t$  в виде  $\sigma(x) \propto |x - x_c|^t$  применимо для системы бесконечных размеров [2, 3]. На практике численное моделирование физических процессов (в том числе перенос жидкости, заряда и так далее) можно осуществлять на решетках конечных размеров. Нам не известно точное выражение для  $\sigma = \sigma(x, L)$  как функции от концентрации  $x$  и размера решетки  $L$  для пространств размерности  $d > 1$ . Для теории и практики интерес представляют квадратная и простая кубическая (далее ПК) решетки размера  $L \gg 2$  в задаче узлов, так как задача связей может быть сведена к задаче узлов.

Для конечной решетки величина  $\sigma(x, L)$  может быть отлична от нуля и при  $x < x_c$ , поэтому в §1 данной работы на основе упрощающих допущений введена функция  $\sigma(x, L)$  для конечных решеток и в широком диапазоне  $0 < x < 1$ , что являлось основной целью данной работы. Эта цель достигалась на основе введенной ранее [4, 5] функции вероятности протекания  $P(x, L)$ .

В §2 изложен метод вычислительного эксперимента для определения проводимости  $\sigma(x, L)$  конечной решетки.

## § 1. Связь проводимости с вероятностью протекания

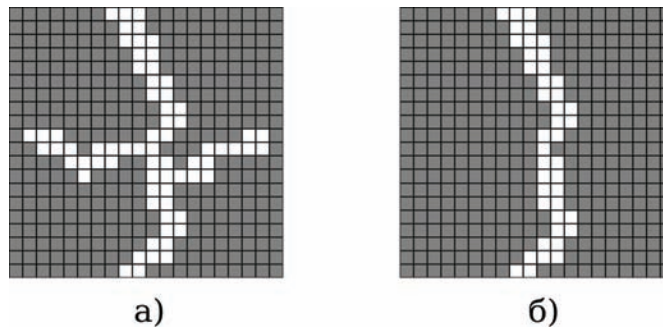


**Рис. 1.** Возможная конфигурация двухфазной системы при увеличении концентрации  $x$  на  $dx$ : а) узел  $s$  разделяет соединяющий кластер по пути  $AB$  (здесь скелет и соединяющий кластер идентичны) от мертвого конца  $ссс$ ; б) при увеличении  $x$  на  $dx$  (на один проводящий узел) мощность соединяющего кластера увеличилась на  $\Delta P(x)$ , то есть на четыре проводящих узла  $сссл$ , а скелет (остов) соединяющего кластера не добавил проводящих узлов

Рассмотрим поведение проводимости  $\sigma(x)$  при малых изменения  $dx$  концентрации проводящей фазы  $x$ . Для этого используем модель Шкловского и де Жена о топологической структуре соединяющего кластера [2, 3, 6], участки которого подразделяются на скелет (остов соединяющего кластера) и мертвые концы. Известно, что основная «масса» соединяющего кластера сосредоточена в мертвых концах, и поэтому они совершенно бесполезны с точки зрения проводимости. В статистическом ансамбле двухфазных систем, при изменении  $x$  на  $dx > 0$ , присоединение проводящего узла к мертвым концам более вероятно по сравнению с вероятностью присоединения проводящего узла к скелету, так как соответствующие этим событиям вероятности присоединения пропорциональны числу узлов, которых, из сказанного выше, в мертвых концах гораздо больше, чем в скелете.

Очевидно, для обычных решеток число проводящих узлов может меняться не менее чем на один узел, то есть  $dx$  порядка  $1/N$ . Малые изменения  $dx$  величины  $x$  могут существенно

изменять мощность соединяющего кластера на  $\Delta P(x)$ . Увеличение на  $\Delta P(x)$  (при увеличении  $x$  на  $dx > 0$ ) происходит за счет присоединения конечных кластеров к соединяющему кластеру (при этом конечные кластеры становятся мертвыми концами (рис. 1), которые, как сказано выше, не влияют на изменение проводимости). Уменьшение на  $\Delta P(x)$  (при уменьшении  $x$  на  $dx < 0$ ) сопровождается переходом мертвых концов в разряд конечных кластеров, что также не влияет на изменение проводимости. По мере того, как  $x \rightarrow x_c$ , соединяющий кластер теряет свои мертвые концы и превращается в одну бесконечно длинную цепочку, то есть в скелет с бесконечно большим сопротивлением (рис. 2).



**Рис. 2.** Возможные конфигурации двухфазной системы при уменьшении концентрации: а) соединяющий кластер с мертвыми концами; б) по мере того, как  $x \rightarrow x_c$ , соединяющий кластер теряет свои мертвые концы и превращается в скелет с большим сопротивлением

Итак, проводимость соединяющего кластера определяется мощностью его скелета  $P_S(x, L)$ :

$$\sigma(x) \propto P_S(x, L) = N_S/N, \quad (1.1)$$

где  $N_S$  — число узлов, принадлежащих скелету или остову соединяющего кластера. *Нахождение остова соединяющего кластера является одной из наиболее сложных задач теории перколяции* [7]. Решению этой проблемы посвящены многие работы, но в большинстве своем они нацелены на разработку компьютерных алгоритмов разделения соединяющего кластера на остов и мертвые концы.

Для решения задачи о проводимости случайной сетки сопротивлений в регулярных решетках мы будем исходить из того, что *скелет можно обнаружить, если существует соединяющий кластер*, вероятность принадлежности к которому случайно выбранного узла решетки есть вероятность протекания  $P(x)$ . Поэтому будем искать связь проводимости  $\sigma(x)$  с вероятностью протекания  $P(x)$ .

Известно скейлинговое описание проводимости через критический индекс [2, 3]:

$$\sigma(x) \propto (x - x_c)^t, \quad (1.2)$$

где  $t$  — критический индекс проводимости, зависящий от размерности пространства  $d$ .

Запишем  $t$  из следствия гипотезы Александра–Орбаха (см. обзор [8]):

$$t = [(3d - 4)\nu - \beta]/2, \quad (1.3)$$

где  $\nu$  и  $\beta$  — критические индексы соответственно радиуса корреляции

$$L \propto |x - x_c|^{-\nu} \quad (1.4)$$

и вероятности протекания

$$P(x) \propto |x - x_c|^\beta. \quad (1.5)$$

При записи (1.4) учтено, что радиус корреляции пропорционален размеру решетки.

Значения  $\nu$  и  $\beta$  в плоском случае считаются точными [7, 9]:  $\nu_2 = 4/3$  и  $\beta_2 = 5/36$  (здесь и далее нижние индексы соответствуют размерности пространства  $d$ ), поэтому следует ожидать, что индекс  $t_2 = 91/72$  по (1.3) для проводимости по (1.2) можно применять с большой точностью. Ниже компьютерными экспериментами для квадратной решетки это будет показано. Поэтому уделим большее внимание *трехмерной* задаче.

При  $d = 3$  в [10] получено  $\nu_3 = 8/11$  и  $\beta_3 = 4/11$ , тогда  $t_3 = (5\nu_3 - \beta_3)/2 = 1$ , (63) и подтверждается экспериментально [11, 12]. Поскольку единого мнения по критическим индексам  $\nu_3$  и  $\beta_3$  в литературе нет, то следствие из гипотезы Александра–Орбаха для  $t_3$  нуждается в дополнительной теоретической и экспериментальной проверке. Для этого, очевидно, нужен другой подход (конечно же, подтверждаемый экспериментом) при решении задачи о проводимости.

Для решения задачи о проводимости случайной сетки сопротивлений в регулярных решетках мы будем исходить из того, что *скелет можно обнаружить, если существует соединяющий кластер*, вероятность принадлежности к которому случайно выбранного узла решетки есть вероятность протекания  $P(x)$ . Поэтому будем искать связь проводимости  $\sigma(x)$  с вероятностью протекания  $P(x)$ .

Оценку по (1.3) можно представить для плоского и трехмерного случая как

$$t \approx 1 + \beta \quad \text{или точнее} \quad t = 1 + \beta + \varepsilon, \quad (1.6)$$

где  $\varepsilon < \beta$  и  $\varepsilon \ll t$  ( $\varepsilon_2 = 1/8$  при  $t_2 = 91/72$  и  $\varepsilon_3 = 3/11$  при  $t_3 = 18/11$ ).

Запишем (1.2) с учетом (1.6) и далее, заменяя  $(x - x_c)^\beta$  согласно (1.5), получим:

$$\sigma(x) \propto (x - x_c)^{1+\beta+\varepsilon} \quad \text{или} \quad \sigma(x) \propto P(x)(x - x_c)^{1+\varepsilon}, \quad (1.7)$$

тогда малые изменения проводимости  $\sigma(x)$  будут

$$d\sigma(x) \propto P(x)(1 + \varepsilon)(x - x_c)^\varepsilon dx + (x - x_c)^{1+\varepsilon} dP(x), \quad (1.8)$$

а так как для  $x > x_c$  величина  $(x - x_c)^\varepsilon$  порядка единицы и  $(x - x_c)^\varepsilon \gg (x - x_c)^{1+\varepsilon}$ , то вторым слагаемым в (1.8) можно пренебречь и получить

$$d\sigma(x) \propto P(x) dx, \quad (1.9)$$

то есть малые изменения проводимости  $d\sigma(x)$  будут определяться малыми изменениями концентрации проводящей фазы  $dx$ , при этом изменения мощности соединяющего кластера  $dP(x)$  не чувствительны для изменения проводимости.

В (1.9) вероятность протекания  $P(x)$  случайно выбранного узла решетки размера  $L$  определяется как [4, 5]:

$$P(x, L) = xY(x, L), \quad (1.10)$$

где  $Y(x, L)$  — условная вероятность того, что выбранный с вероятностью  $x$  узел решетки интересующей нас фазы принадлежит соединяющему кластеру. Функция  $Y(x, L)$  введена в [4] как:

$$Y(x, L) = \frac{1}{1 + e^{-S(x, L)}}, \quad S(x, L) = \sum_i a_i(x^i - x_{cL}^i). \quad (1.11)$$

Для больших, но конечных решеток сумму  $S(x, L)$  можно представить одним слагаемым  $S(x, L) = (x - x_{cL})(a_1 + a_2 2x_{cL} + \dots + a_{N-1}(N-1)x_{cL}^{N-2}) = A_L(x - x_{cL})$  [10], тогда

$$Y(x, L) = \frac{1}{1 + e^{-A_L(x - x_{cL})}}. \quad (1.12)$$

Величина  $A_L$  для простой кубической решетки пропорциональна размеру решетки  $L$  [5]

$$A_L = a_1 \frac{L}{2}, \quad (1.13)$$

где, например, для простой кубической решетки  $a_1 \approx 12$  и поэтому  $A_L \gg 1$ . Для квадратной решетки получена менее точная оценка  $A_L$ , о чем будет изложено ниже. С учетом (1.10) и (1.12)  $d\sigma(x)$  по (1.9) запишется как

$$d\sigma(x) \propto \frac{x dx}{1 + e^{-A_L(x-x_{cL})}}. \quad (1.14)$$

Далее, при интегрировании по частям, получим

$$\sigma(x) \propto \frac{x}{A_L} \ln x(1 + z(x)) - \frac{1}{A_L} \int \ln(1 + z(x)) dx + \text{const}, \quad (1.15)$$

где введено обозначение

$$z(x) = e^{A_L(x-x_{cL})}, \quad (1.16)$$

const — постоянная интегрирования. При  $x = 0$  проводимость решетки равна нулю  $\sigma(0) = 0$ , а величина  $e^{-A_L x_{cL}} \ll 1$ , поэтому const = 0, а коэффициент пропорциональности в (1.15) определяется из условия  $\sigma(1) = 1$  после вычисления интеграла.

При  $z(x) \gg 1$  (что наблюдается уже при небольшом отклонении  $x$  от  $x_{cL}$ ) интеграл в (1.15) легко вычисляется:

$$\int \ln(1 + e^{A_L(x-x_{cL})}) dx = \frac{A_L(x-x_{cL})^2}{2} + \text{const}. \quad (1.17)$$

В общем случае мы вычисляем интеграл в (1.15) в математическом пакете Maxima [13] с применением встроенной функции romberg [14]. Метод, или правило, Ромберга используется для уточнения значения интеграла путем кратного увеличения числа разбиений. Возьмем в качестве базовой формулу трапеций с шагом  $h$ . Обозначим через  $R(n; m)$  приближение значения интеграла на шаге  $n$  уточнением порядка  $m$ . Базовая формула для метода трапеций при  $n = 1$ :

$$R(1; 1) = \frac{h}{2}(f(b) - f(a)). \quad (1.18)$$

Последовательно уменьшая шаг  $h$  в  $2^n$  раз, получим рекуррентное соотношение.

$$R(n+1; 1) = \frac{1}{2}R(n; 1) + h \sum_{i=1}^{2^n-1} f(a + (2i-1)h). \quad (1.19)$$

К примеру, если мы вычислили интеграл при  $n = 1, 2, 3, 4$ , получим следующий треугольник:

$$\begin{array}{cccc} R(1; 1) & & & \\ R(2; 1) & R(2; 2) & & \\ R(3; 1) & R(3; 2) & R(3; 3) & \\ R(4; 1) & R(4; 2) & R(4; 3) & R(4; 4) \end{array}$$

Первый столбец получается при последовательном удвоении числа шагов. Столбцы справа — результаты, полученные уточнением интеграла по следующей рекуррентной формуле:

$$R(n+1; m+1) = R(n+1; m) + \frac{R(n+1; m) - R(n; m)}{4n-1}. \quad (1.20)$$

Нижнее крайнее правое значение в треугольнике и будет уточненным значением интеграла.

Метод может управляться дополнительными параметрами, в том числе:

- rombertol — погрешность;
- rombergit — максимальное число шагов для достижения точности, указанной в параметре rombertol; в случае, если метод не сходится при заданном числе шагов, пакет выдает соответствующую ошибку.

## § 2. Компьютерные эксперименты

### 2.1. Оценка величины $A_L$ для квадратной решетки

В (1.15) для проводимости  $\sigma(x)$  простой кубической и квадратной решеток входит величина  $A_L$ , которая определяет наклон функции  $Y(x, L)$  при  $x = x_{cL}$ . Для кубической решетки, как сказано выше,  $A_L \propto L$ , что следует из линейной зависимости для трехмерных решеток [15]:

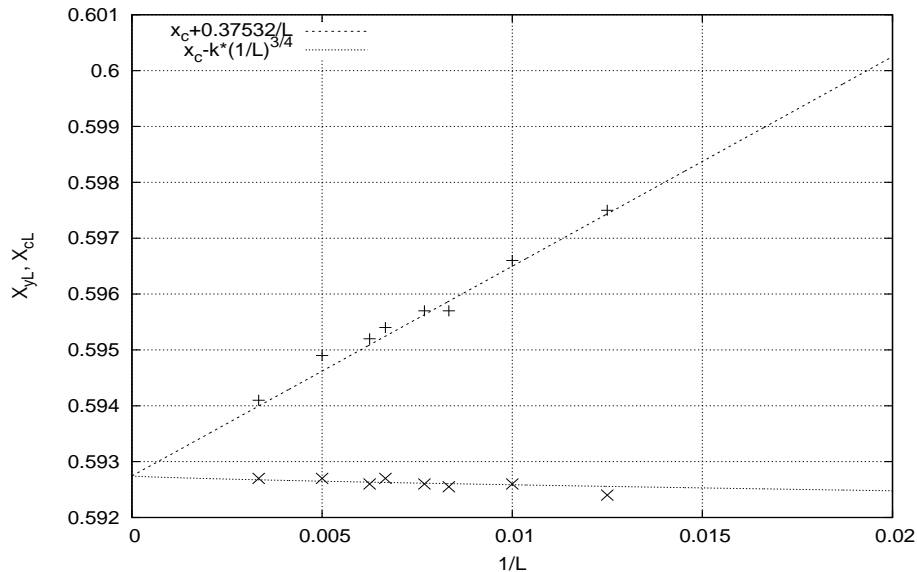
$$x_{cL} = x_c + \frac{B_3}{L}, \quad (2.1)$$

где  $B_3 = 0,174444002$  для простой кубической решетки и подтверждается компьютерными экспериментами [5]. Для квадратной решетки такой точной оценки как (1.13) пока найти не удается в связи с нелинейностью (1.4).

В связи с линейностью (2.1) возникает вопрос о справедливости нелинейности (1.4) с критическим индексом  $\nu \neq 1$ . В [10] введен параметр  $x_{YL}$  — такой, что в (1.12) при  $x = x_{YL}$  будет выполняться равенство  $Y(x_{YL}, L) = x_{YL}$ . Компьютерное моделирование, проведенное в [10] для ПК решетки показало, что (1.4) можно применять, если в качестве точки, близкой к критической, брать  $x = x_{YL}$ . То есть для ПК решетки

$$|x_{YL} - x_c|^{-\nu} \propto L \quad (2.2)$$

при критическом индексе  $\nu_3 = 8/11$  и линейная зависимость (2.1) не противоречат друг другу.



**Рис. 3.** Для квадратной решетки нелинейная зависимость  $|x_{cL} - x_c|^{-\nu} \propto L$  при критическом индексе  $\nu_2 = 4/3$  и линейная зависимость  $x_{YL} = x_c + B_2/L$  не противоречат друг другу

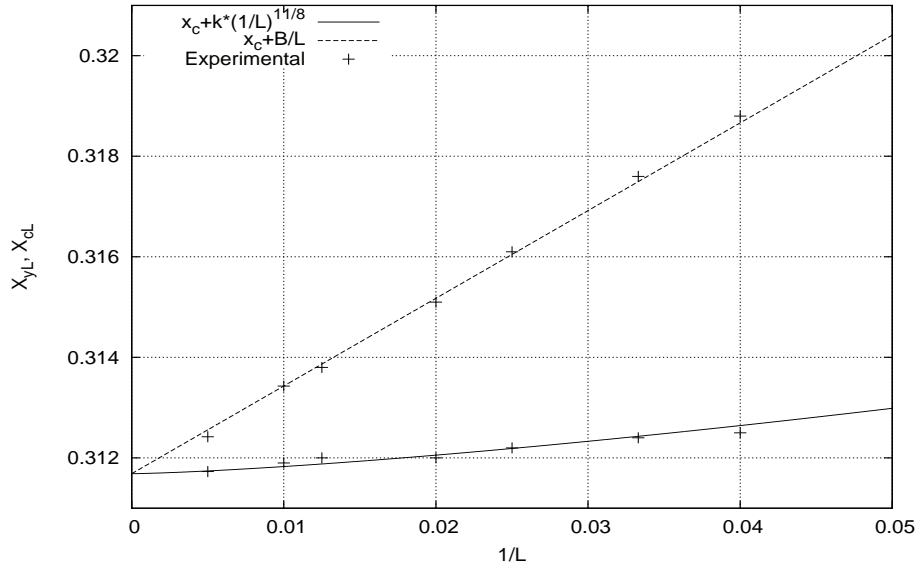
Оценим  $A_L$  для квадратной решетки исходя из компьютерных экспериментов, которые показали, что поведение  $x_{YL}$  и  $x_{cL}$  при сравнении с ПК решеткой меняются местами (рис. 3, 4). То есть для квадратной решетки линейное выражение по (2.1) выполняется для  $x_{YL}$ :

$$x_{YL} = x_c + \frac{B_2}{L}, \quad (2.3)$$

а нелинейность (2.2) для  $x_{cL}$ :

$$|x_{cL} - x_c|^{-\nu} \propto L. \quad (2.4)$$

Напомним, что в (1.12) при  $x = x_{cL}$  условная вероятность протекания  $Y(x_{cL}, L) = 0,5$ , а при  $x = x_{YL}$  условная вероятность протекания  $Y(x_{YL}, L) = x_{YL}$ .



**Рис. 4.** Для ПК решетки нелинейная зависимость  $|x_{YL} - x_c|^{-\nu} \propto L$  при критическом индексе  $\nu_3 = 8/11$  и линейная зависимость  $x_{cL} = x_c + B_3/L$  не противоречат друг другу

В компьютерных экспериментах для квадратной решетки (при  $x_c = 0,592744$  и при  $\nu_2 = 4/3$ ) величина  $x_{cL}$  для  $L \geq 80$  практически не меняется (рис. 3):

$$x_{cL} \approx x_c. \tag{2.5}$$

Из (1.12) получим

$$x_{cL} - x_{YL} = \frac{\ln(1/x_{YL} - 1)}{A_L} \tag{2.6}$$

и с учетом (2.3) и (2.5) запишем

$$B_2 = -(L/A_L) \ln(1/x_{YL} - 1) = \text{const}. \tag{2.7}$$

Измерив наклон прямой  $B_2$ , мы обнаружили, что

$$B_2 \approx \ln(1/x_c - 1) = 0,375, \tag{2.8}$$

то есть у квадратной решетки для  $L \geq 80$  при  $L \rightarrow \infty$

$$A_L \approx L. \tag{2.9}$$

Этот результат мы используем для описания проводимости квадратной решетки по (1.15).

### 2.2. Метод вычислительного эксперимента для определения проводимости

Здесь мы используем модель, предложенную В. А. Журавлёвым [16]. Пусть  $i, j = 1, 2, \dots, N$  — номера узлов модельной решетки, тогда можно ввести величину локальной проводимости  $\sigma_{ij}(x)$ , отнесенной к двум соседним узлам, в рамках линейного закона:

$$J_{ij} = -\sigma_{ij}(x)(\text{grad } \varphi)_{ij}. \tag{2.10}$$

А интегральная проводимость всей решетки определится из того же линейного закона:

$$\sigma_x(x) = -\frac{\langle J \rangle_\Omega}{\langle \text{grad } \varphi \rangle_V}, \tag{2.11}$$

где  $J_{ij}$ ,  $(\text{grad } \varphi)_{ij}$  — плотность тока проводимости и градиент потенциала между узлами  $i$  и  $j$  решетки,  $\langle J \rangle_\Omega$  — средняя по поверхности  $\Omega$  величина плотности тока, выходящего из объема  $V$  решетки,  $\langle \text{grad } \varphi \rangle_V$  — средний градиент потенциала в объеме решетки. Для решеточной модели двухфазной системы локальная проводимость  $\sigma_{ij}(x)$ , отнесенная к паре смежных узлов, есть

$$\sigma_{ij}(x) = \sigma_0 g_{ij}, \quad g_{ij} = \begin{cases} 1 & i, j \text{ принадлежат проводящей фазе} \\ 0 & i \text{ или } j \text{ принадлежат непроводящей фазе} \end{cases}, \quad (2.12)$$

где  $\sigma_0 = \text{const}$ . Тогда из условия неразрывности  $\text{div } J = 0$  для модельной решетки запишем:

$$\sum_{j=1}^z J_{ij} = -(1/h) \sum_{j=1}^z \sigma_{ij}(x)(\varphi_j - \varphi_i) = 0, \quad (2.13)$$

где  $h$  — период ячейки решетки,  $z$  — первое координационное число. Заметим, что (2.13) есть обычное представление в центральных разностях уравнения Лапласа  $\nabla^2 \varphi = 0$ , которое, как известно, при заданных граничных условиях имеет единственное решение.

Граничные условия в процессе вычислений задаются следующим образом. Если между двумя крайними, ограничивающими решетку поверхностями задать разность потенциалов  $\Delta \varphi$ , то можно считать, что потенциал во всех узлах одной поверхности равен  $\Delta \varphi$ , а в узлах противоположной поверхности равен нулю. При этом на боковых поверхностях, ограничивающих решетку, принимаются циклические граничные условия. Если из (2.13) выразить потенциал  $\varphi_i$  узла решетки

$$\varphi_i = \sum_{j=1}^z \sigma_{ij} \varphi_j / \sum_{j=1}^z \sigma_{ij} \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (2.14)$$

то можно построить итерационные вычисления для определения поля потенциала в узлах решетки. Задавая произвольные начальные значения потенциала в узлах, можно по (2.14) найти следующие приближения для  $\varphi_i$ , которое служит начальным приближением для последующих вычислений поля  $\varphi_i$ . Итерационный процесс завершается, если в двух последовательных вычислениях поля потенциалов совпадают с заданной точностью, а последнее распределение  $\varphi_i$  по узлам решетки считается окончательным. Отметим, что при фильтрации жидкости в пористой среде, в которой проводящей фазой является жидкость, вместо потенциала  $\varphi$  используется давление  $p$ , так как уравнение Дарси и закон Ома в дифференциальной форме аналогичны.

По найденному распределению  $\varphi_i$  по узлам решетки, с помощью (2.10), вычисляются решеточные компоненты  $J_{ij}$  плотности тока, действующие между узлами  $i$  и  $j$ . Затем может быть вычислена интегральная проводимость по (2.11). Для этого определяется среднее значение плотности тока, проходящего через поперечные сечения решетки, параллельные ограничивающим поверхностям:

$$\langle J \rangle_\Omega = \sum_i J_{ij} / \sum_i 1 = (\sum_i (\sigma_0 g_{ij} / h) (\varphi_j - \varphi_i)) / \sum_i 1, \quad (2.15)$$

а средний градиент потенциала в объеме решетки есть

$$\langle \text{grad } \varphi \rangle_V = \Delta \varphi / (N_z - 1), \quad (2.16)$$

где  $i$  — номера узлов в выбранном сечении решетки, принадлежащие проводящей фазе;  $\sum_i 1$  — число узлов в выбранном сечении решетки, принадлежащих проводящей фазе;  $N_z$  — число узлов решетки вдоль направления  $z$ , совпадающего с градиентом потенциала  $\text{grad } \varphi$ . Следовательно, интегральная проводимость решетки, согласно (2.11), (2.15), (2.16), принимает вид:

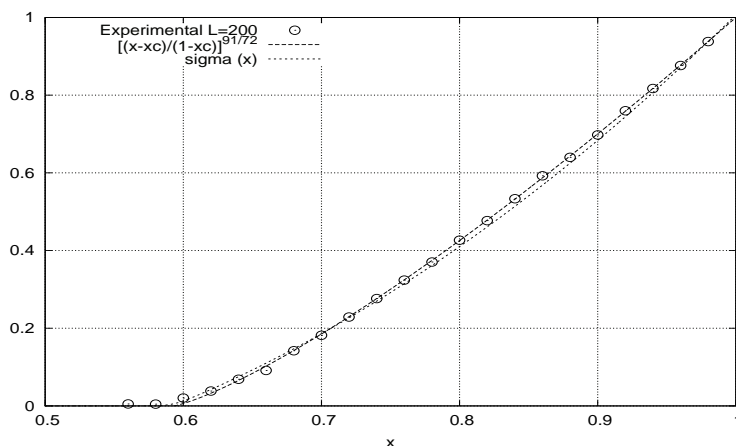
$$\sigma_x(x) = \sigma_0 ((N_z - 1) / \sum_i 1) \sum_i (g_{ij} (\varphi_j - \varphi_i) / \Delta \varphi). \quad (2.17)$$



Изложенный выше метод вычислительного эксперимента был реализован в компьютерном эксперименте. При  $d = 3$  использовалась простая кубическая решетка, содержащая  $40 \times 40 \times 40$  узлов в модели случайного распределения проводящей фазы, а при  $d = 2$  — квадратная решетка, содержащая  $200 \times 200$  узлов. По (2.17) определялась зависимость нормированной проводимости  $\sigma_x(x)/\sigma_0$  в широкой области изменения концентрации проводящей фазы.

### § 3. Обсуждение результатов

Найденные в компьютерном эксперименте нормированные проводимости  $\sigma_x(x)/\sigma_0$  по (2.17) сравнивались с нормированными проводимостями по (1.15), которые получались после расчета интеграла при  $A_L = 240,65$  и  $A_L = 200$  для простой кубической и квадратной решеток соответственно.



**Рис. 5.** Согласование результатов компьютерного эксперимента по (2.17) со степенным законом по (3.1) для критического индекса проводимости  $t_2 = 91/72$  и с теоретической зависимостью по (1.15) при  $A_L = 200$  для квадратной решетки,  $\sigma(x)$  — нормированная проводимость по (1.15)

Дополнительно вычислялись и строились зависимости нормированной проводимости  $\sigma_x(x)/\sigma_0$  по (1.2):

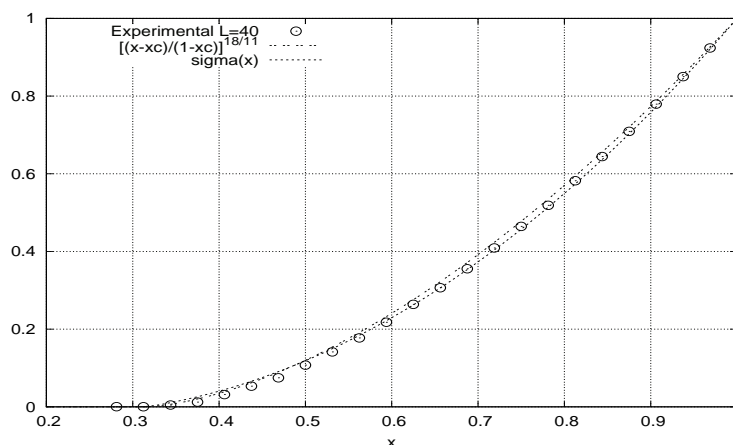
$$\frac{\sigma_x(x)}{\sigma_0} = \left( \frac{x - x_c}{1 - x_c} \right)^t, \quad (3.1)$$

где  $x_c = 0,3116865$  — порог протекания простой кубической решетки;  $x_c = 0,5927438$  — порог протекания квадратной решетки;  $t = t_3 = 18/11$  — критический индекс для  $d = 3$  (для простой кубической решетки) и  $t = t_2 = 91/72$  — критический индекс для  $d = 2$  (для квадратной решетки). Значения критических индексов  $t_3$  и  $t_2$  вычислялись из следствия гипотезы Александра–Орбаха по (1.3).

Результаты расчетов и построений показаны для квадратной решетки на рис. 5, а для простой кубической решетки — на рис. 6.

Из рис. 5 видно согласование результатов компьютерного эксперимента по (2.17) и степенного закона по (3.1), что подтверждает следствие гипотезы Александра–Орбаха (1.3) для критического индекса проводимости  $t_2 = 91/72$  в двумерном случае и точность статических критических индексов  $\nu_2 = 4/3$  и  $\beta_2 = 5/36$ . Построенная теоретическая зависимость по (1.15) при  $A_L = 200$  для квадратной решетки также согласуется с результатами компьютерного эксперимента по (2.17).

На рис. 6 показано хорошее согласование результатов компьютерного эксперимента как для следствия гипотезы Александра–Орбаха (1.3) при критическом индексе проводимости  $t_3 = 18/11$ , так и для зависимости по (1.15) при  $A_L = 240,65$  для простой кубической решетки.



**Рис. 6.** Согласование результатов компьютерного эксперимента по (2.17) со степенным законом по (3.1) для критического индекса проводимости  $t_3 = 18/11$  и с теоретической зависимостью по (1.15) при  $A_L = 240,65$  для ПК решетки,  $\sigma(x)$  — нормированная проводимость по (1.15)

#### § 4. Выводы

Сформулированы перколяционная модель и метод вычислительного эксперимента для определения проводимости двухфазной решетки со случайным распределением фаз в двумерном и трехмерном случаях. Установлено согласование результатов компьютерных экспериментов со следствием из гипотезы Александра–Орбаха для связи динамического индекса проводимости  $t$  со статическими  $\nu$  и  $\beta$ , а также с предложенной теоретической моделью для простой кубической и квадратной решеток.

Авторы благодарны В. В. Васькину за конструктивное обсуждение и критические замечания при подготовке данной работы.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Монин А. С., Яглом А. М. Статистическая гидромеханика, ч. 2. — М.: Наука, 1967.
2. Эфрос А. Л. Физика и геометрия беспорядка. — М.: Наука, глав. ред. физ.-мат. лит., 1982. — 176 с. (Библиотечка «Квант». Вып. 19).
3. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. — М., Наука, 1979. — С. 126–128, 133–139, 159–165.
4. Галлямов С. Р. Порог протекания простой кубической решетки в задаче узлов в модели решетки Бёте // Вестник Удмуртского университета. Математика, механика, компьютерные науки. — 2008 — Вып. 3. — С. 109–115.
5. Галлямов С. Р., Мельчуков С. А. О нескейленге вероятности протекания простой кубической решетки: теория и компьютерный эксперимент // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. — 2009. — Вып. 2. — С. 29–36.
6. Москалёв П. В. Анализ структуры перколяционного кластера. — ЖТФ, 2009. — Т. 79., вып. 6.
7. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. — М.: Едиториал УРСС, 2002. — С. 13–24.
8. Соколов И. М. Размерности и другие геометрические критические показатели в теории протекания // УФН150(2)221–225(1985).
9. Федер Е. Фракталы. — М., Мир, 1991 — С. 126–128.
10. Галлямов С. Р., Мельчуков С. А. О критических индексах в трехмерной перколяции в задачах узлов и твердых сфер // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. — 2010. — Вып. 2. — С. 67–79.

11. Luthi B., Moran T. J., Pollina R. J. Phys. Chem. Solids 31, 1741 (1970).
12. Bennet H. S. Phys. Rev. 185, 801(1969).
13. Maxima, a Computer Algebra System.  
<http://maxima.sourceforge.net>
14. Maxima 5.22.1 Manual.  
[http://maxima.sourceforge.net/docs/manual/en/maxima\\_70.html](http://maxima.sourceforge.net/docs/manual/en/maxima_70.html)
15. Левинштейн М. Е., Шур М. С., Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. О связи между критическими индексами теории протекания, ЖЭТФ, 1975. — Т. 9. — С. 386.
16. Журавлёв В. А. и др. Перколяционная модель двухфазной зоны сплавов // Известия Академии наук СССР. Металлы. — 1982. — № 2. — С. 131–133.

Поступила в редакцию 27.11.10

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

**Percolation model of conductivity of two-phase lattice: theory and computer experiment**

The conductivity of percolation system is studied (the system consists of conductive and non-conducting phases). The connection of conductivity with probability is determined using the conception of Shklovskii–de Gennes on the topological structure of infinite cluster. The dependence lattice conductivity is obtained in a wide range of modification of conductive phase concentration. The concordance of theory and computer experiment is shown. Also the concordance of scaling dependence and conductivity for square and simple cubical lattice is shown using the critical index from the consequence of hypothesis of Alexander–Orbah.

*Keywords:* conductivity, lattice, percolation.

Mathematical Subject Classifications: 60K35, 82B43, 82C70

Галлямов Сергей Рафаэлович, ст. преп., кафедра общей физики, Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1 (корп. 4), E-mail: galser@uni.udm.ru

Мельчуков Сергей Анатольевич, ст. преп., кафедра высокопроизводительных вычислений и параллельного программирования, Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1 (корп. 4), E-mail: sam@parc.uni.udm.ru