

УДК 531.19, 519.24

© С. Р. Галлямов, С. А. Мельчук

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ РАСЧЁТА ПОРОГОВ ПРОТЕКАНИЯ КВАДРАТНОЙ И АЛМАЗНОЙ РЕШЕТОК В ПЕРКОЛЯЦИОННОЙ ЗАДАЧЕ УЗЛОВ

Предложен метод расчета порога протекания x_c бесконечной решетки в d -мерном пространстве на основе среднего значения величины x_{cL} решеток малых размеров L . Условие применимости метода ограничило круг рассматриваемых $2d$ и $3d$ решеток в задаче узлов до квадратной и алмазной. Величины x_{cL} для этих решеток рассчитывались на основе вектора начального состояния решетки и матрицы смежности графа, соответствующего решетке с долей узлов $x = 1$. Вычислены пороги протекания квадратной решетки $x_c = 0,592744$ и решетки алмаза $x_c = 0,430308$.

Ключевые слова: перколяция, решетка, порог протекания, задача узлов, граф.

Введение

Как известно большинство работ в теории перколяции по определению порогов протекания x_c решеток связаны с компьютерным моделированием. Общего метода расчета x_c не существует даже в пределах одной размерности пространства d . Для теории и практики интерес представляют $2d$ и $3d$ решетки в задаче узлов. В $2d$ пространстве задача узлов для решеток, представляющих наибольший интерес (треугольная, квадратная и шестиугольная), решена для треугольной ($x_c = 0,5$ [1, 2]) и остается нерешенной для квадратной и шестиугольной решеток. В $3d$ пространстве в задаче узлов (впрочем, как и в задаче связей) неизвестно ни одного точного решения.

В §1 данной работы предложен *метод* и *условие применимости* этого *метода* для расчета x_c бесконечной решетки в d пространстве на основе двух известных величин x_{cL_1} и x_{cL_2} , соответствующих двум размерам $L_1 < L_2$ малых решеток.

Первоначально планировалось изучить наиболее «популярные» $2d$ и $3d$ решетки (квадратная и шестиугольная, простая кубическая, объёмно-центрированная кубическая, гранецентрированная кубическая и алмазная), x_c которых определены в основном компьютерным моделированием. Введённое в работе *приближённое условие применимости метода* исключило дальнейшее изучение всех $3d$ решеток кроме решетки **алмаза**.

В §2 представлен алгоритм вычисления x_{cL} решеток при размерностях пространства $d > 1$, после применения, которого *шестиугольная* решетка была также исключена из дальнейшего рассмотрения — этим объясняется выбор решеток в названии работы. Величины x_{cL} для этих решеток рассчитывались на основе вектора начального состояния решетки и матрицы смежности графа, соответствующего решетке, в которой все узлы проводящие, то есть при $x = 1$.

§3 и §4 посвящены расчету порогов протекания алмазной и квадратной решеток на основе алгоритма §2.

§ 1. Метод расчета порога протекания x_c бесконечной решетки на основе решеток малых размеров. Применимость метода

В [3] для определения порога протекания бесконечной решетки x_c через среднее значение x_{cL} конечной решетки предложено линейное приближение для трехмерных решеток:

$$x_{cL} = x_c + \frac{B}{L}, \quad (1.1)$$

где B — константа.

Хотя (1.1) приближенное выражение, однако оно позволяет получать некоторые результаты с большой точностью, например описание нескейлинговых функций $Y(x, L)$ и $P(x, L)$ в [4].

Покажем, что для решеток малых размеров линейный закон (1.1) может быть применен для размерности пространства d .

В [4, 5] введена функция условной вероятности того, что выбранный с вероятностью x узел, интересующей нас фазы, принадлежит соединяющему кластеру

$$Y(x, L) = \frac{1}{1 + \exp[-S(x, L)]}, \quad S(x, L) = \sum_{n=1}^N a_n(x^n - x_{cL}^n), \quad (1.2)$$

где $(N - 1)$ число нетривиальных точек $Y_i(x_i)$, полученных расчетным путем, а x_{cL} соответствует условию

$$Y(x_{cL}, L) = \frac{1}{2}. \quad (1.3)$$

Вероятность протекания или вероятность того, что случайно выбранный узел решетки размера L принадлежит соединяющему кластеру $P(x, L)$ определяется как [4, 5]

$$P(x, L) = xY(x, L), \quad (1.4)$$

откуда из условия (1.3) при $x = x_{cL}$ следует, что

$$P(x_{cL}, L) = \frac{x_{cL}}{2}. \quad (1.5)$$

Тогда масса соединяющего кластера $M(L)$ или среднее число узлов в соединяющем кластере решетки размера $L = (N)^{1/d}$ при $x = x_{cL}$ будет

$$M(L) = NP(x_{cL}, L) = \frac{Nx_{cL}}{2}. \quad (1.6)$$

В [4] показано, что x_{cL} является средним значением случайной величины x , функция распределения которой задана как $Y(x, L)$, тогда согласно [6] для решетки с линейным размером L справедливо соотношение

$$|x - x_c|^{-\nu} \propto L \quad \text{или} \quad |x_{cL} - x_c|^{-\nu} \propto L \quad (1.7)$$

при $x = x_{cL}$. Здесь ν критический показатель, зависящий от размерности пространства d . Следуя [7, 8] покажем, что в одномерном случае $\nu = 1$. Действительно, располагая узлы на линии, легко увидеть, что соединяющий кластер возникает только тогда, когда все узлы являются проводящими, то есть порог протекания $x_c = 1$ при $d = 1$. При ренормализации (ренормировке) мы группируем узлы в суперузлы по b узлов в каждом суперузле. Теперь новая концентрация x' связана с концентрацией x интересующей нас фазы до ренормировки как $x' = x^b$. Если начать ренормировку при $x = x_c = 1$, то величина $\Lambda = \frac{dx'}{dx} = bx^{b-1} = b$. Из первого по (1.7) следует, что $b|x' - x_c|^{-\nu} = |x - x_c|^{-\nu}$ и после логарифмирования получаем критический показатель

$$\nu = \frac{\log b}{\log \Lambda} = 1. \quad (1.8)$$

Рассмотрим малые решетки, характерный размер которых L порядка характерного размера L_1 элементарной решетки, то есть L может принимать значения

$$L = L_1, L_1 + 1, \dots$$

Возьмем произвольную решетку в d пространстве с числом узлов равным N . Обозначим через N_{\min} минимальное число узлов-проводников, при котором возможно появление соединяющего кластера. При числе узлов-проводников меньше чем N_{\min} условная вероятность протекания $Y(x, L)$ и вероятность протекания $P(x, L)$ равны нулю: $Y(x, L) = P(x, L) = 0$.

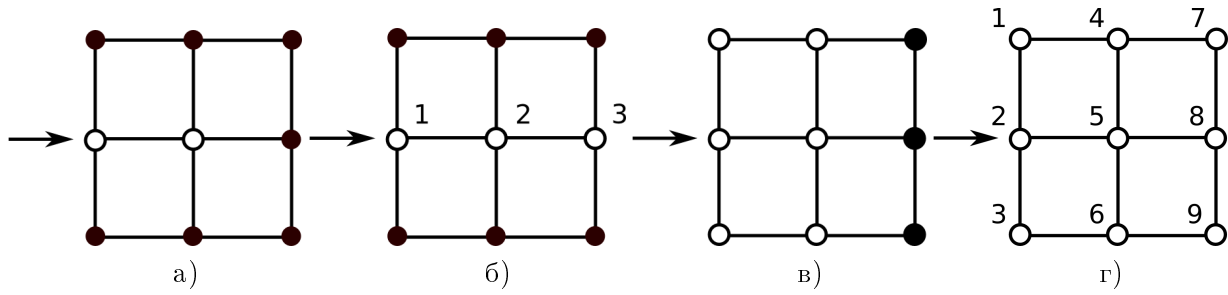


Рис. 1. Квадратная решётка, число узлов $N = 3 \times 3$. Стрелкой показано направление протекания. Проводящие узлы (узлы-проводники) — белые. а) двух узлов-проводников недостаточно для протекания слева направо; б) $N_{\min} = 3$, соединяющий кластер по трём узлам 1-2-3; в) три непроводящих узла дают хотя бы одну конфигурацию, при которой отсутствует протекание слева направо и поэтому $N_{\max} = 6$; г) конфигурация для задания матрицы смежности: все 9 узлов — проводники.

Очевидно, что для квадратной и кубической решеток N_{\min} равно размеру решетки L . Например, для квадратной решетки с $N = 3 \times 3$ (рис. 1а) двух узлов-проводников недостаточно для протекания слева направо и поэтому $N_{\min} = 3$ (рис. 1б). Значения N_{\min} для других малых решеток легко определяются из их геометрии.

Если $M(L)$ среднее число узлов в соединяющем кластере при $x = x_{cL}$ будет близко к N_{\min}

$$\frac{Nx_{cL}}{2} \approx N_{\min}, \quad (1.9)$$

то соединяющий кластер представляет одномерную ($d = 1$) цепочку, для которой, как получено выше, в (1.7) значение критического показателя $\nu = 1$. Тогда (1.7) будет линейной зависимостью от обратного размера решетки ($\frac{1}{L}$):

$$|x_{cL} - x_c| \propto \frac{1}{L}, \quad (1.10)$$

которая будет нарушаться при условии $\frac{Nx_{cL}}{2} > N_{\min}$ и строго выполняться при

$$\frac{Nx_{cL}}{2} \leq N_{\min}, \quad (1.11)$$

то есть (1.11) должно обеспечивать линейность (1.10) при любой размерности пространства d .

При размерностях пространства $d > 1$ для определения порога протекания решетки x_c при помощи (1.10) достаточно знать два значения x_{cL} , соответственно двум размерам L_1 и L_2 :

$$x_c = \frac{x_{cL_1} - x_{cL_2} \left(\frac{L_2}{L_1}\right)}{1 - \left(\frac{L_2}{L_1}\right)}, \quad (1.12)$$

при этом каждое L и x_{cL} должны удовлетворять условию (1.11).

Так как x_{cL} заранее неизвестны, заменим пока (1.9) и (1.11) их приближениями. Как сказано выше, N_{\min} — правая часть (1.9) и (1.11), для малых решеток легко определяется из их геометрии и по порядку величины равна размеру решетки L .

Вклад при $d > 1$ в левую часть (1.9) и (1.11) дает величина $N = L^d$ и x_{cL} , для оценки которой используем величины N_{\min} и N_{\max} следующим образом.

Если N_{\min} — это минимальное число узлов-проводников, при котором возможно появление соединяющего кластера, то N_{\max} соответствует максимальному числу узлов-проводников, при котором соединяющий кластер может отсутствовать. Например, для квадратной решетки с

$N = 3 \times 3$ (рис. 1в) $N_{\max} = 6$ (три непроводящих узла дают хотя бы одну конфигурацию, при которой отсутствует протекание, например, слева направо).

При $x = x_1 = \frac{N_{\min}-1}{N}$ условная вероятность протекания $Y(x, L)$ равна 0, а при $x = x_2 = \frac{N_{\max}+1}{N}$ равна 1. Для оценки x_{cL} возьмем среднее x_1 и x_2 :

$$x_{cL} = \frac{x_1 + x_2}{2} = \frac{N_{\max} + N_{\min}}{2N}, \quad (1.13)$$

тогда условия (1.9) и (1.11) будет выражаться теперь через N_{\min} и N_{\max} :

$$N_{\max} \approx 3N_{\min} \quad \text{и} \quad N_{\max} \leq 3N_{\min}. \quad (1.14)$$

Выражения (1.13) и (1.14) служат только для предварительной оценки x_{cL} и того, что можно ожидать выполнение линейной зависимости (1.10).

Проверим два характерных размера решетки L_1 и L_2 на выполнение (1.14). Для этого выберем наиболее «популярные» решетки: квадратную и шестиугольную в плоском случае и простую кубическую, ОЦК, ГЦК и решетку алмаза в трехмерном случае. Результаты проверки удобно свести в следующую таблицу:

Решетка	Z	N	L_1, L_2	N_{\max}	N_{\min}	выполнение (1.14) $N_{\max} \leq 3N_{\min}$
Квадратная (рис. 1)	4	4	$L_1 = 2$	2	2	да
		9	$L_2 = 3$	6	3	да
Шестиугольная (рис. 2)	3	6	$L_1 = \sqrt{6}$	5	4	да
		24	$L_2 = \sqrt{24}$	22	8	да
Простая кубическая (ПК)	6	8	$L_1 = 2$	4	2	да
		27	$L_2 = 3$	18	3	нет
Объемно-центрированная кубическая (ОЦК)	8	9	$L_1 = \sqrt[3]{9}$	8	3	да
		35	$L_2 = \sqrt[3]{35}$	31	5	нет
Гранецентрированная кубическая (ГЦК)	12	14	$L_1 = \sqrt[3]{14}$	10	3	нет
		63	$L_2 = \sqrt[3]{9}$	51	5	нет
Алмаза (рис. 3а и рис. 3б) Центрированный тетраэдр (элементарная решетка алмаза) (рис. 4а и рис. 4б)	4	14	$L_2 = \sqrt[3]{14}$	12	5	да
		5	$L_1 = \sqrt[3]{5}$	4	3	да

Из последнего столбца таблицы видно, что выполнение (1.14) для двух размеров L_1 и L_2 одного вида решетки позволяет ожидать выполнения (1.10), а значит и (1.12) для нахождения порога протекания x_c для **квадратной**, **шестиугольной** и **алмазной решеток**. Однако сделанный выбор решеток является предварительным и требует повторной проверки выполнения неравенства (1.11) после более точного, чем по (1.13), определения x_{cL} . Забегая вперед, заметим, что после применения алгоритма для более точного вычисления x_{cL} , описанного ниже в § 2, для шестиугольной решетки из $N = 24$ узлов (или $L_2 = \sqrt{24}$) получено $x_{cL_2} = 0,742756$, при котором $\frac{N x_{cL}}{2} = 8,91$ больше $N_{\min} = 8$. Тогда шестиугольная решетка должна быть исключена из дальнейшего рассмотрения, хотя применение (1.12) при $L_1 = \sqrt{6}$ и $x_{cL_1} = 0,788294$ дает порог протекания шестиугольной решетки $x_c = 0,697218$ — результат очень близкий к 0,697043, полученный в [9]. Здесь и далее численные значения рассчитанных нами величин x_{cL} и x_c приводятся с точностью до 6 значащих цифр. Такая точность обеспечивается алгоритмом Зиффа для задачи узлов на квадратной решетке. Данный алгоритм признан наиболее эффективным для определения порога протекания методом компьютерного моделирования в модели градиентной перколяции [10].

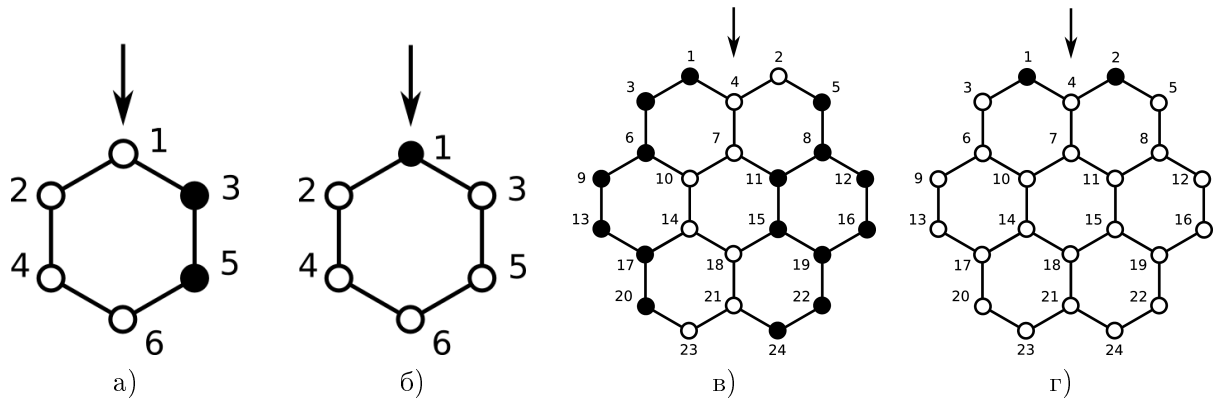


Рис. 2. Шестиугольные решётки с $N = 6$ и $N = 24$. Стрелкой показано направление протекания. Проводящие узлы (узлы-проводники) — белые. а) $N = 6$, $N_{\min} = 4$, б) $N = 6$, $N_{\max} = 5$ в) $N = 24$, $N_{\min} = 8$ г) $N = 24$, $N_{\max} = 22$.

§ 2. Алгоритм вычисления x_{cL} решеток при размерностях пространства $D > 1$

Отметим, что (1.12) является точным выражением для определения порога протекания x_c при ограничении (1.11), выполнение которого следует ожидать для решеток малых размеров. Поэтому поставим задачу определения x_{cL} для решеток с малым числом узлов N .

При известной геометрии решетки подсчитаем N_{\min} и N_{\max} . Для определения x_{cL} , смысл которого определен в (1.3), используем функцию условной вероятности протекания $Y(x, L)$ по (1.2):

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

где теперь $n = N_{\max} - N_{\min}$. Для задания $Y(x, L)$ необходимо определить коэффициенты a_i при заранее известных $Y_i(x_i, L)$, вычисление которых является задачей, которую необходимо решить в первую очередь. Для этого используем алгоритм из теории графов [?]

Представим решетку в виде неориентированного графа $\Gamma = \langle V_i, r_j \rangle$, $\{V_i\}$ — множество вершин (узлы решетки), $\{r_j\}$ — множество ребер (пара связанных узлов). Сам граф можно задать, например, матрицей смежности.

При числе узлов-проводников меньше чем N_{\min} условная вероятность протекания $Y(x, L)$ равна 0, а при числе узлов-проводников более чем N_{\max} — равна 1. Поэтому вычисляем условные вероятности протекания при числе узлов k в интервале от N_{\min} до N_{\max} . Для этого фиксируем k — число узлов-проводников и определяем все возможные пространственные конфигурации (комбинации) расположения узлов для решетки определенной графом Γ . Число таких конфигураций равно числу сочетаний из N по k : $C_N^k = \frac{N!}{(N-k)!k!}$.

Для расчетов необходимо заранее знать: число узлов N в решетке; матрицу смежности графа, определяющего решетку и число узлов (при изучении протекания, например, слева направо) в левой плоскости и число узлов в правой плоскости (далее число «левых» и «правых» узлов).

Для нахождения вероятности Y_k каждый вариант решетки представляется в виде массива длины N : $u = (u_0, u_1, \dots, u_{N-1})$. $u_k = 0$, если k -ый узел непроводящий и $u_k = 1$, если k -ый узел — узел-проводник.

Зададим начальное состояние решетки вектором $\mathbf{r}(1, \dots, 1, 0, \dots, 0)$, у которого число единиц равно числу «левых» узлов. Умножая вектор \mathbf{r} на матрицу смежности, получим вектор состояния, в котором к «левым» узлам будут добавлены узлы-проводники, смежные с «левыми». Повторяем умножение до тех пор, пока произведение не расширит множество достижимых узлов до максимального значения N_{\max} . Если среди них есть хотя бы один «правый», то считается, что конфигурация решетки обладает свойством протекания. Геометрически это означает,

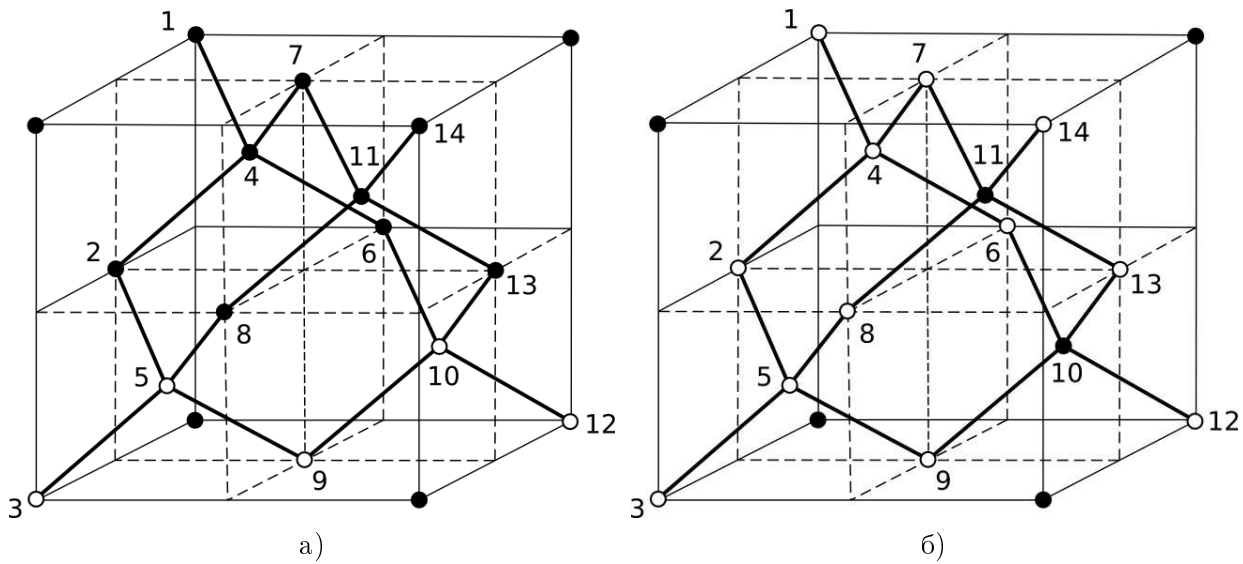


Рис. 3. Решётка алмаза, число узлов $N = 14$. Направление протекания слева направо. Проводящие узлы (узлы-проводники) — белые. а) $N_{\min} = 5$, б) $N_{\max} = 12$.

что в данной конфигурации решетки появилась линейная цепочка, соединяющая левую плоскость с правой.

После перебора всех возможных последовательностей длины N с k единицами и $(N - k)$ нулями нужно выбрать те m_x конфигураций, которые обладают свойством протекания, после чего находим искомую вероятность в виде отношения $Y_k = \frac{m_x}{C_N^k}$.

Вычислив для каждого k вероятности Y_k , получаем

$$Y_k = Y(x_k), \quad (2.1)$$

где $x_k = \frac{k}{N}$, $k = N_{\min} + 1, \dots, N_{\max}$.

Подставив в (1.2) все значения Y_k из (2.1), получим систему из k нелинейных уравнений

$$Y_k(x) = \frac{1}{1 + e^{-\sum_{i=1}^n a_i(x_k^i - x_0^i)}} \quad (2.2)$$

относительно неизвестных x_0 и a_i , здесь через x_0 обозначено x_{cL} в (1.2).

Эта система может быть преобразована к линейной системе из $(k - 1)$ уравнений относительно a_i и многочлена степени $(k - 1)$ с неизвестной x_0 . Для этого выделим сумму в правую часть:

$$\ln\left(\frac{1}{Y_k} - 1\right) = -\sum_{i=1}^n a_i(x_k^i - x_0^i), \quad (2.3)$$

и избавимся от x_0 , после чего остается система уравнений вида

$$\ln\left(\frac{1}{Y_k} - 1\right) - \ln\left(\frac{1}{Y_1} - 1\right) = -\sum_{i=1}^n a_i(x_k^i - x_1^i) \quad (2.4)$$

относительно a_i . Решаем (2.4) любым известным способом и находим a_i .

Теперь подставляем найденные коэффициенты a_i в систему уравнений (2.3), нужный корень x_0 которой можно найти, к примеру, итерационным методом Ньютона. Корень (2.3) в промежутке, где Y принимает значение 0,5 и есть искомое значение $x_0 = x_{cL}$.

§ 3. x_{cL} решеток алмаза и тетраэдра. Порог протекания алмазной решетки

Вычислим x_{cL} для решетки алмаза по алгоритму § 2. Из рис. 3а видно, что $N_{\min} = 5$, а из рис. 3б, что $N_{\max} = 12$.

Алмазная решетка, с узлами, занумерованными как на рис. 3, дает следующую информацию:

- 1) Полное число узлов равно 14;
- 2) Матрица смежности, графа, определяющего алмазную решетку, задается как

```

1 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 1 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1 1 0 1 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0
0 1 1 0 1 0 0 1 1 0 0 0 0 0
0 0 0 1 0 1 0 0 0 1 0 0 0 0
0 0 0 1 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0
0 0 0 0 1 0 0 1 0 0 1 0 0 0
0 0 0 0 1 0 0 0 1 1 0 0 0 0
0 0 0 0 0 1 0 0 1 1 0 1 1 0
0 0 0 0 0 0 1 1 0 0 1 0 1 1
0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 0 1 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 1

```

Эта матрица соответствует решетке, в которой все узлы проводящие.

- 3) число «левых» узлов: 3; число «правых» узлов: 3.

Возьмем, к примеру, конфигурацию решетки $u = (0, 1, 1, 0, 1, 1, 0, 1, 0, 1, 1, 0, 1, 0)$, соответствующую доле узлов-проводников $x = \frac{8}{14}$. Этой конфигурации решетки будет соответствовать матрица смежности с обнуленными строками и столбцами с номерами узлов 1, 4, 7, 9, 12, 14:

```

0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 1 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 1 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 1 1 0 1 0 0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 0 0 1 0 0 1 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 1 0 0 0 1 0 0 1 0
0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 1 0 1 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 1 0 1 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

```

Зададим начальное состояние решетки вектором $\mathbf{r}(1, \dots, 1, 0, \dots, 0)$, у которого число единиц равно 3 (числу «левых» узлов). Умножая вектор \mathbf{r} на матрицу смежности, получим вектор состояния, в котором к «левым» узлам будут добавлены узлы-проводники, смежные с «левыми». Повторяем умножение до тех пор, пока произведение не расширит множество достижимых узлов до максимального значения. Если среди них есть хотя бы один «правый», то считается, что конфигурация решетки обладает свойством протекания.

При компьютерной реализации алгоритма было использовано расширение языка C++ Standard Template Library. Для перебора всех возможных последовательностей длины N с k

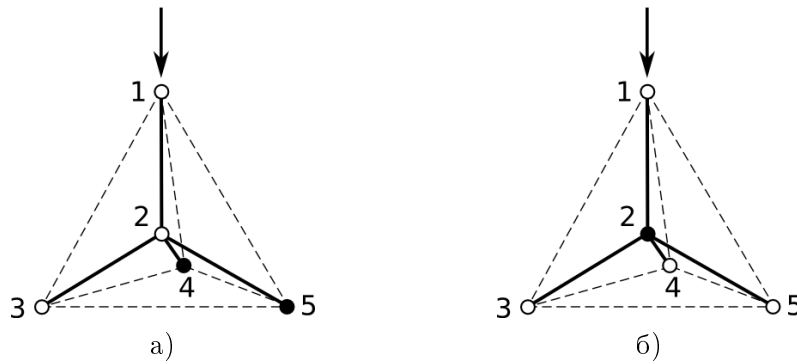


Рис. 4. Центрированный тетраэдр (элементарная решётка алмаза), число узлов $N=5$. Стрелкой показано направление протекания. Проводящие узлы (узлы-проводники) - белые. а) $N_{\min} = 3$, б) $N_{\max} = 4$.

единицами и $(N - k)$ нулями использовалась функция `next_permutation`. Перебрав все комбинации и выбрав те m_x конфигураций, которые обладают свойством протекания, находим вероятность в виде отношения $Y_k = \frac{m_x}{C^k_N}$.

Для элементарной решетки алмаза получены и сведены в таблицу следующие восемь нетривиальных значений $Y_i(x_i)$:

x_i	$\frac{5}{14}$	$\frac{6}{14}$	$\frac{7}{14}$	$\frac{8}{14}$	$\frac{9}{14}$	$\frac{10}{14}$	$\frac{11}{14}$	$\frac{12}{14}$
$Y_i(x_i)$	$\frac{8}{1001}$	$\frac{128}{3003}$	$\frac{37}{286}$	$\frac{826}{3003}$	$\frac{508}{1001}$	$\frac{731}{1001}$	$\frac{163}{182}$	$\frac{89}{91}$

Подставив в (2.1) все $Y_i(x_i)$ из таблицы, получим систему из 8 нелинейных уравнений по (2.2) относительно неизвестных x_0 и a_i , которая может быть преобразована к линейной системе из семи уравнений относительно a_i и многочлена степени 7 с неизвестной x_0 по (2.3). Для этого выделим сумму в правую часть:

$$\ln\left(\frac{1}{Y_k} - 1\right) = -\sum_{i=1}^n a_i(x_k^i - x_0^i), \tag{3.1}$$

и избавимся от x_0 , после чего остается система уравнений вида (2.4)

$$\ln\left(\frac{1}{Y_k} - 1\right) - \ln\left(\frac{1}{Y_1} - 1\right) = -\sum_{i=1}^n a_i(x_k^i - x_1^i) \tag{3.2}$$

относительно a_i . Решая систему (3.2) любым известным способом, находим a_i . Для алмазной решетки получены следующие значения a_i :

$$a_1 = -491,064998; \quad a_2 = 3488,505332; \quad a_3 = -11662,074916; \quad a_4 = 21722,789179; \\ a_5 = -23132,509717; \quad a_6 = 13184,464932; \quad a_7 = -3113,736924,$$

а также $x_0 = x_{cL} = 0,640572$, при котором $Nx_{cL}/2 = 4,48$ меньше $N_{\min} = 5$. Убедившись в выполнении(1.11) перейдем к центрированному тетраэдру.

Тетраэдр.

Алмазная решетка состоит из центрированных тетраэдров (далее тетраэдр), каждый из которых содержит по 5 узлов, то есть тетраэдр является элементарной решеткой для решетки алмаза с одинаковым координационным числом $Z = 4$. Из рис. 4а видно, что $N_{\min} = 3$, а из рис. 4б, что $N_{\max} = 4$, отсюда получаем две нетривиальные точки $Y_i(x_i)$ для $x_1 = \frac{3}{5}$ и $x_2 = \frac{4}{5}$:

x_i	$\frac{3}{5}$	$\frac{4}{5}$
$Y_i(x_i)$	$\frac{3}{10}$	$\frac{6}{10}$



Рис. 5. Зависимость $Y(x)$ для тетраэдра представляется в виде двух прямых $Y_1(x)$ и $Y_2(x)$. Площадь над прямыми $Y_1(x) = (15x - 6)/10$ и $Y_2(x) = 2x - 1$ равна $x_{ст1} = 0,72$. Прямая $Y_1(x)$ принимает значение 0,5 при $x_{ст1} = 0,7(3)$.

Построим зависимость $Y(x)$ через эти точки и получим две прямые $Y_1(x) = \frac{15x-6}{10}$ и $Y_2(x) = 2x - 1$ (рис. 5) Используя из [5] результат интегрирования:

$$I = \int_0^1 [1 - Y(x, L)] dx = x_{cL},$$

геометрически смысл, которого означает, что x_{cL} является площадью над зависимостью $Y(x, L)$, находим площадь над прямыми $Y_1(x)$ и $Y_2(x)$ и определяем первое значение $x_{ст1} = 0,72$. Далее из условия $Y_1(x) = \frac{15x-6}{10} = \frac{1}{2}$ находим второе значение $x_{ст2} = 0,7(3)$. Считая, что $x_{ст1}$ и $x_{ст2}$ имеют одинаковые веса находим их среднее $x_{ст} = 0,72(6)$, при котором $\frac{N_{cL}}{2} = 1,82$ меньше $N_{\min} = 3$. Убедившись в выполнении (1.11) для тетраэдра с $L_1 = (5)^{1/3}$, перейдем к вычислению x_c .

Порог протекания алмазной решетки.

Подставим полученные значения $x_{cL1} = 0,72(6)$ для тетраэдра размера $L_1 = (5)^{1/3}$ и решетки алмаза $x_{cL2} = 0,64057194$ размера $L_2 = (14)^{1/3}$ в формулу (1.12) и получим порог протекания алмазной решетки $x_c = 0,43030774$.

§ 4. X_{cL} квадратных решеток размерами $L_1 = 2$ и $L_2 = 3$. Порог протекания квадратной решетки.

$L_2 = 3$. Следуя §3, вначале рассмотрим решетку большего размера. Из рис. 1б видно, что $N_{\min} = 3$, а из рис. 1в, что $N_{\max} = 6$.

Квадратная решетка, с узлами, занумерованными как на рис. 1г, дает следующую информацию:

- 1) Полное число узлов равно 9;

2) Матрица смежности, графа, определяющего квадратную решетку с $N = 3 \times 3$, задается как

$$\begin{array}{cccccccc} 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{array}$$

Эта матрица соответствует решетке, в которой все узлы проводящие (рис. 1 г).

3) число «левых» узлов: 3; число «правых» узлов: 3.

По алгоритму § 2 для квадратной решетки с $N = 3 \times 3$ получены и сведены в таблицу следующие четыре нетривиальных значений $Y_i(x_i)$:

x_i	$\frac{3}{9}$	$\frac{4}{9}$	$\frac{5}{9}$	$\frac{6}{9}$
$Y_i(x_i)$	$\frac{1}{28}$	$\frac{11}{63}$	$\frac{59}{126}$	$\frac{67}{84}$

Следуя, далее алгоритму § 2 получены значения коэффициентов a_i :

$$a_1 = 53,051604 \quad a_2 = -75,785239 \quad a_3 = 47,231464$$

и затем определена величина $x_{cL2} = 0,565637$, при которой $\frac{Nx_{cL}}{2} = 2,54$ меньше $N_{\min} = 3$. Убедившись в выполнении (1.11), перейдем к решетке меньшего размера.

L1 = 2. Для квадратной решетки с числом узлов $N = 2 \times 2$ легко найти $N_{\min} = N_{\max} = 2$, то есть получим всего одну нетривиальную точку $Y_i(x_i) = 1/3$ при $x_1 = 1/2$ (рис. 6). Аналогично § 4 (для тетраэдра) используя геометрический смысл x_{cL} находим площадь над прямыми $Y_1(x) = \frac{4x-1}{3}$ и $Y_2(x) = \frac{8x-3}{3}$ и определяем первое значение $x_{c21} = 0,541(6)$. Далее из условия $Y_2(x) = \frac{8x-3}{3} = \frac{1}{2}$ второе значение $x_{c22} = 0,5625$. Считая, что x_{c21} и x_{c22} имеют одинаковые веса находим их среднее $x_{c2} = 0,55208(3)$, при котором $\frac{Nx_{cL}}{2} = 1,10$ меньше $N_{\min} = 2$. Убедившись в выполнении (1.11) для квадратной решетки с $L_1 = 2$, перейдем к вычислению x_c .

Порог протекания квадратной решетки.

Подставим полученные значения $x_{cL1} = 0,55208(3)$ для квадратной решетки размера $L_1 = 2$ и $x_{cL2} = 0,565637$ для квадратной решетки размера $L_2 = 3$ в формулу (1.12) и получим порог протекания квадратной решетки $x_c = 0,592744$.

§ 5. Обсуждение результатов.

Линейная связь $|x_{cL} - x_c| \propto \frac{1}{L}$ по формуле (1.10), использованная нами для расчета x_c в виде (1.12), применялась для решеток минимальных размеров, x_{cL} которых максимально отличается от значения x_c для бесконечной решетки. То есть скейлинговое соотношение $|x - x_c|^{-\nu} \propto L$ с критическим показателем $\nu \neq 1$ *вблизи порога* протекания формализуется в скейлинговое соотношение *вдали порога* протекания с критическим показателем $\nu = 1$.

Метод, реализованный на основе вектора начального состояния решетки и матрицы смежности графа, соответствующего решетке с долей узлов $x = 1$, при вычислении условных вероятностей $Y_i(x_i)$ приводит к их точным значениям для решеток малых размеров. Поэтому следовало ожидать, что вычисленные выше x_{cL} , необходимые для расчета порога протекания x_c по (1.12), определены с большой точностью. Для подтверждения этого сравним полученные нами значения x_c с величинами, полученными компьютерным моделированием с литературными данными.

Вычисленное в § 3 значение порога протекания алмазной решетки $x_c = 0,430308$ отличается не более чем на 0,044% от значения $x_c = 0,4301(2)$, полученное в [11].

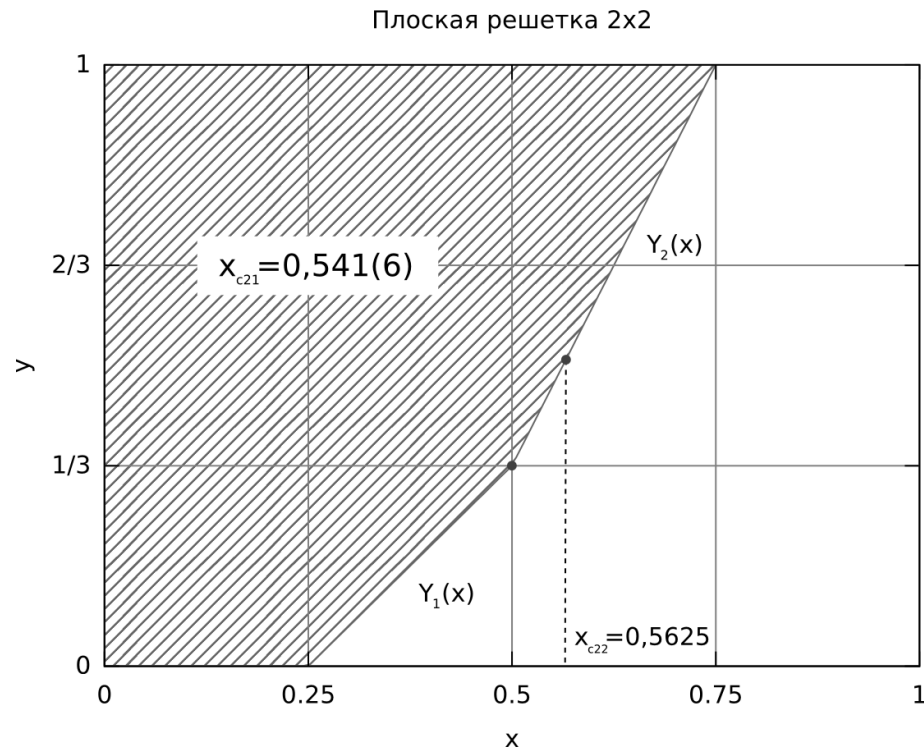


Рис. 6. Зависимость $Y(x)$ для квадратной решётки размера $L_1 = 2$ представляется в виде двух прямых $Y_1(x)$ и $Y_2(x)$. Площадь над прямыми $Y_1(x) = (4x - 1)/3$ и $Y_2(x) = (8x - 3)/3$ равна $x_{c21} = 0,541(6)$. Прямая $Y_2(x)$ принимает значение 0,5 при $x_{c22} = 0,5625$.

Вычисленное в § 4 значение порога протекания квадратной решетки $x_c = 0,592744$ отличается не более чем на 0,00034% от значения $x_c = 0,592746$, полученное методом компьютерного моделирования Монте-Карло в модели градиентной перколяции. Как сказано выше, данный алгоритм для определения порога протекания для двумерных решеток признан наиболее эффективным [10].

§ 6. Выводы.

1. Скейлинговое соотношение $|x - x_c|^{-\nu} \propto L$ с критическим показателем $\nu \neq 1$ *вблизи порога* протекания для квадратной и алмазной решеток формализуется в скейлинговое соотношение *вдали порога* протекания с показателем $\nu = 1$.

2. Метод расчета порогов протекания для $2d$ и $3d$ -мерных решеток в перколяционной задаче узлов на основе линейной связи (1.10) реализуется наиболее точно в плоском случае для квадратной и в трехмерном случае для алмазной решеток.

3. Определенные в работе расчетным путем пороги протекания $x_c = 0,592744$ для квадратной решетки и $x_c = 0,430308$ для алмазной решетки практически совпадают с наиболее точными значениями, полученными компьютерным моделированием.

Авторы благодарны В. В. Васькину за конструктивное обсуждение и критические замечания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kesten H. The critical probability of bond percolation on the square lattice equals 1/2. // Comm. Math. Phys. 74. 41–59 (1980).
2. Sykes M. F., Essam J. W. Exact critical percolation probabilities for site and bond percolation in two dimensions. // J. Math. Phys. 5 (8). 1117–1127(1964).

3. 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.
4. 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.
5. Галлямов С. Р. Порог протекания простой кубической решетки в задаче узлов в модели решетки Бете // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. — 2008. — Вып. 3. — С. 109–115.
6. Stauffer D., Aharony A. Introduction to percolation theory. — London: Taylor & Francis, 1992.
7. Федер Е. Фракталы. — М., Мир, 1991 — С. 126–127.
8. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. — М.: Едиториал УРСС, 2002. — С. 53–55.
9. Suding P. N., Ziff R. M. Site percolation thresholds and universal formulas for the Archimedean lattices. // Phys. Rev. E60 (1), P. 275–283 (1999).
10. Ziff R. M., Sarpoval B. The efficient determination of the percolation threshold by a frontier generating walk in a gradient // J. Phys. A: Math. Gen. 19L 1169–L1172 (1986).
11. Ахо А. В., Хопкрофт Д., Ульман Д. Д. Структуры данных и алгоритмы, М.: Издательский дом «Вильямс», 2000, С. 187–195.
12. van der Marck S. C. Calculation of percolation threshold in high dimensions for fcc, bcc and diamond lattice // Int. J. Mod. Phys. C 9, P. 529-540(1998).

Поступила в редакцию 01.12.2009

S. R. Gallyamov, S. A. Melchukov

On one method of calculating percolation thresholds for square and diamond lattices in the percolation problem of knots

A method of calculating the percolation threshold x_c in d -dimensional space is proposed based on the average value of the quantity x_{cL} of small-sized lattices L . The condition for applicability of the method has limited the range of $2d$ and $3d$ lattices being considered in the problem of knots to square and diamond lattices. The values of x_{cL} for these lattices have calculated in terms of the vector of the initial state of the lattice and the adjacency matrix of the graph corresponding to the lattice with the fraction of knots $x = 1$. Percolation thresholds for the square lattice $x_c = 0,592744$ and the diamond lattice $x_c = 0,430308$ have been calculated.

Keywords: percolation, lattice, percolation threshold, site problem, graph.

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