

МЕХАНИКА

УДК 531.19, 519.24

© С. Р. Галлямов, С. А. Мельчуков

ИДЕЯ ХОДЖА В ПЕРКОЛЯЦИИ: ОЦЕНКА ПОРОГА ПРОТЕКАНИЯ ПО ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКЕ

Рассмотрена перколяционная задача узлов. Методом двух решёток получены пороги протекания треугольной решётки $x_c = 1/2$ и квадратной $1,2$ решётки $x_c = 0,40725616$.

На основе идеи Ходжа из алгебраической геометрии предложен метод оценки порога протекания x_c бесконечной решётки по перколяционным свойствам её элементарной ячейки. Изучена модель элементарной ячейки решётки Бёте, которая в дальнейшем применена для оценки порогов протекания объёмноцентрированной кубической и гранецентрированной кубической решёток в трёхмерном случае и шестиугольной решётки — в плоском случае. В результате оценки получены значения $x_c(bcc) = 0,24595716$ для ОЦК, $x_c = x_c(fcc) = 0,19925370$ для ГЦК и $x_c = 0,69700003$ для шестиугольной решёток.

Ключевые слова: перколяция, порог протекания, элементарная ячейка, идея Ходжа, задача узлов.

Нет надобности понимать всю пустыню —
одной песчинки достаточно для того,
чтобы увидеть чудеса Творения.

Пауло Коэльо. Алхимик

Введение

Известно, что в теории перколяции объект исследования — это двухфазная среда, в которой случайно распределены проводящая (магнитная) и непроводящая (немагнитная) фазы, а независимым параметром является концентрация проводящей фазы x . Знание критической концентрации x_c (порога протекания), ниже которой протекание отсутствует, является важным прикладным значением теории перколяции при моделировании физических процессов переноса.

Как отмечалось в [1, 2], большинство работ в теории перколяции по определению x_c решёток связаны с компьютерным моделированием. Общего метода расчёта x_c не существует даже в пределах одной размерности пространства d , поэтому дальнейшее развитие теории перколяции, по-видимому, нуждается в *новых идеях*. Ниже предложен метод оценки порога протекания x_c бесконечной решётки на основе информации о перколяционных свойствах её элементарной ячейки, что и являлось целью данной статьи. Для достижения указанной цели впервые в теории перколяции использована *идея* английского математика В. Ходжа из алгебраической геометрии. В теории и практике интерес представляют $2d$ и $3d$ решёточные задачи. Задача узлов считается более общей, и зачастую ограничиваются только её рассмотрением.

Кратко назовём *методом двух решёток* предложенный в [1] метод оценки порога протекания x_c бесконечной решётки на основе двух известных величин x_{cL_1} и x_{cL_2} , соответствующих двум размерам $L_1 < L_2$ малых решёток в задаче узлов. Метод позволил вычислить пороги протекания *квадратной* и *алмазной* решёток, для которых линейный закон

$$|x_{cL} - x_c| \propto 1/L \quad (0.1)$$

выполняется для элементарной ячейки размера L_1 и решётки размера L_2 , условно говоря, «на один размер больше» размера L_1 . Условия *применимости* этого *метода* исключили из дальнейшего рассмотрения (с целью вычисления x_c) такие «популярные» d -решётки, как

шестиугольная, объёмно-центрированная кубическая (далее ОЦК) и гранецентрированная кубическая (далее ГЦК), так как *линейность* (0.1) для второй решётки размера $L_2 > L_1$ не соблюдается. Однако для каждой элементарной ячейки решёток *линейность* (0.1) является само собой разумеющимся фактом — для любой решётки конечного размера L можно соединить *прямой* линией точки $(1/L; x_{cL})$ и $(0; x_c)$, так как $x_{cL} \rightarrow x_c$ при $L \rightarrow \infty$.

Поэтому возникает вопрос: возможно ли определение порогов протекания бесконечных решёток на основе их элементарных ячеек, трансляцией которых в d -пространстве и построена бесконечная решётка? Другими словами задача состоит в том, чтобы вместо двух решёток использовать только элементарную ячейку. Теперь конкретизируем цель нашей статьи: *по свойствам решеточной элементарной ячейки* оценить пороги протекания ОЦК, ГЦК и шестиугольной решёток, которые были исключены из рассмотрения в [1].

Таким образом, данную статью можно считать продолжением [1], в которой методом двух решёток мы пытались изучить «популярные» решётки первой координационной группы. Оказалось, что метод двух решёток себя не исчерпал полностью и может быть использован для изучения хотя бы одной решётки второй координационной группы. Поэтому ниже в §1 продемонстрирован метод двух решёток для оценки порога протекания квадратной решётки с координационным числом $Z = 8$.

В §2 показано, что для неприводимой кривой, задаваемой функцией условной вероятности протекания $Y(x, L) = 1 / (1 + e^{-S(x, L)})$, при $x = x_c$ мы получим *полиномиальное* уравнение относительно неизвестной x_c . Решить это уравнение без каких-либо допущений (гипотез или идей) невозможно, поэтому мы обратились к идее Ходжа из алгебраической геометрии. Самой идеи оказалось достаточно для достижения поставленной цели — чему посвящены §2–§6. Обсуждению результатов работы и выводам посвящены §7 и §8.

§1. Метод двух решёток для порогов протекания треугольной и квадратной 1,2 решёток

Метод двух решёток подробно изложен в [1]. Однако он нам понадобится здесь для дальнейшего изложения и получения нового результата — порога протекания квадратной 1,2 решётки (с учётом первой координационной группы координационное число этой плоской решётки $Z = 8$). Вероятность протекания или вероятность того, что случайно выбранный узел решётки размера L принадлежит соединяющему кластеру $P(x, L)$, связана с функцией условной вероятности протекания решётки $Y(x, L)$ как $P(x, L) = xY(x, L)$. В [2] введена функция условной вероятности протекания решётки $Y(x, L)$ на основе представлений Шкловского и де Жена о топологической структуре соединяющего кластера (скелет и мёртвые концы) в виде

$$Y(x, L) = \frac{1}{1 + e^{-S(x, L)}}, \quad \text{где} \quad S(x, L) = \sum a_i (x^i - x_{cL}^i), \quad (1.1)$$

где x_{cL} соответствует условию $Y(x_{cL}, L) = 0,5$. Коэффициенты степенного ряда a_i в (1.1) зависят от индекса i , который меняется при суммировании от 1 до $n = N_{max} - N_{min}$. N_{min} — это минимальное число узлов-проводников, при котором возможно появление соединяющего кластера, а N_{max} соответствует максимальному числу узлов-проводников, при котором соединяющий кластер может отсутствовать [1]. Метод двух решёток заключается в том, что в d -мерном пространстве на основе линейной зависимости (0.1) и двух известных величин x_{cL_1} и x_{cL_2} , соответствующих размерам $L_1 < L_2$ двух конечных решёток, получаем порог протекания x_c :

$$x_c = \frac{x_{cL_1} - x_{cL_2}(L_2/L_1)}{1 - (L_2/L_1)}. \quad (1.2)$$

Величины x_{cL_1} и x_{cL_2} можно вычислять, решая численно *систему уравнений* (1.1) для n нетривиальных точек $Y_i(x_i, L)$ условной вероятности протекания, полученных расчётным путём.

При использовании линейной зависимости (0.1) должно соблюдаться ограничение

$$Nx_{cL}/2 \leq N_{min}, \quad (1.3)$$

а так как x_{cL} заранее неизвестно, то (1.3) дополняется ещё одним ограничением

$$N_{max} \leq 3N_{min}, \quad (1.4)$$

где N — число узлов в решётке размера $L = N^{1/d}$. На основе *двух решёток* малых размеров (причем, одна решётка — элементарная, а вторая имеет характерный размер на единицу больше) в [1] вычислены пороги протекания квадратной решётки $x_c = 0,59274384$ и решётки алмаза $x_c = 0,43030774$, практически совпадающие с результатами компьютерных вычислений (здесь и далее при записи чисел используется характерная в последнее время в литературе точность для значений x_c). Эти результаты получены при соблюдении обоих ограничений (1.3) и (1.4).

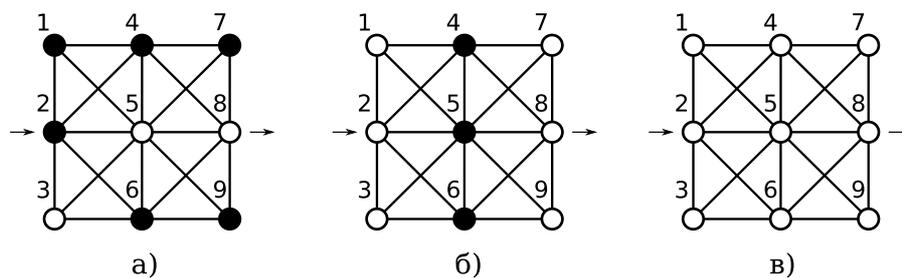


Рис. 1. Квадратная 1,2 решётка, число узлов $N = 3 \times 3$. Стрелкой показано направление протекания.

Проводящие узлы (узлы-проводники) — белые; (а) двух узлов-проводников недостаточно для протекания слева направо, $N_{min} = 3$, соединяющий кластер по трём узлам 3-5-8; (б) три непроводящих узла дают хотя бы одну конфигурацию, при которой отсутствует протекание слева направо, $N_{max} = 6$; (в) конфигурация для задания матрицы смежности: все 9 узлов — проводники

Продемонстрируем метод *двух решёток* на треугольной решётке с координационным числом $Z = 6$ и на квадратной 1,2 решётке с $Z = 8$. Следуя §3 в [1], вначале будем рассматривать решётку большего размера. Для числа узлов $N = 3 \times 3$ треугольной решётки ($N_{min} = 3$, $N_{max} = 6$) получены и сведены в таблицу следующие 4 нетривиальных значения $Y_i(x_i)$:

x_i	3/9	4/9	5/9	6/9
$Y_i(x_i)$	2/21	41/126	85/126	19/21

Следуя далее алгоритму [2], получены значения коэффициентов a_i : $a_1 = 24,74926802$; $a_2 = -23,34776656$; $a_3 = 15,56517771$ и затем определена величина $x_{cL2} = 0,50000000$, при которой $Nx_{cL}/2 \approx 2,25$ меньше $N_{min} = 3$. Надо отметить, что точка с координатами $x_{cL2} = Y(x_{cL2})$ на кривой $Y(x)$ является точкой перегиба. Убедившись в выполнении (1.3) и (1.4), перейдём к решётке меньшего размера $L_1 = 2$.

Для треугольной решётки с числом узлов $N = 2 \times 2$ легко найти $N_{min} = N_{max} = 2$ и получить всего одну нетривиальную точку $Y_i(x_i) = 1/2$ при $x_1 = 1/2$, то есть $x_{cL1} = 1/2$. Убедившись в выполнении (1.3) и (1.4), найдём порог протекания треугольной решётки. Подставим полученные значения $x_{cL1} = 1/2$ для треугольной решётки размера $L_1 = 2$ и $x_{cL2} = 0,500000000$ для треугольной решётки размера $L_2 = 3$ в формулу (1.2) и получим порог протекания треугольной решётки $x_c = 1/2$ с большой точностью. Завершая рассмотрение треугольной решётки, заметим, что $Y(x_{cL}) = x_{cL2} = x_{cL1} = x_c$, а также $Y(x_{cL}) = x_{cL} = Y(x_Y) = x_Y = x_c$.

В [1] рассматривались решётки только первой координационной группы. Следует ожидать, что если ограничения (1.3) и (1.4) соблюдаются, то метод двух решёток можно распространить и на решётки последующих координационных групп. Убедимся в этом в задаче узлов на

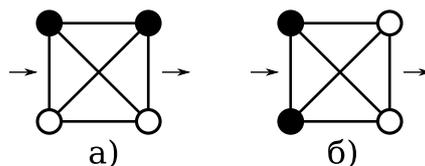


Рис. 2. Квадратная 1,2 решётка, число узлов $N = 2 \times 2$. Стрелкой показано направление протекания. Проводящие узлы (узлы-проводники) – белые; (а) $N_{min} = 2$, (б) $N_{max} = 2$.

квадратной решётке со второй координационной группой (далее квадратная 1,2), для которой координационное число $Z = 8$.

Квадратная решётка 1,2

$L_2 = 3$. Вначале рассмотрим решётку большего размера. Квадратная решётка 1,2 с узлами, занумерованными как на рис. 1, даёт следующую информацию.

1. Полное число узлов равно 9.
2. Матрица смежности графа, определяющего квадратную решётку 1,2 с $N = 3 \times 3$, задаётся как

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

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

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

Для числа узлов $N = 3 \times 3$ квадратной 1,2 решётки ($N_{min} = 3$ по рис. 1 а, $N_{max} = 6$ по рис. 1 б) получены и сведены в таблицу следующие 4 нетривиальных значения $Y_i(x_i)$:

x_i	3/9	4/9	5/9	6/9
$Y_i(x_i)$	17/84	67/126	52/63	27/28

Следуя далее алгоритму в [1] получены значения коэффициентов a_i : $a_1 = 43,17551854$; $a_2 = -65,90915334$; $a_3 = 47,23146415$ и затем определена величина $x_{cL2} = 0,43436316$, при которой $Nx_{cL}/2 \approx 1,95$ меньше $N_{min} = 3$. Убедившись в выполнении (1.3) и (1.4), перейдём к решётке меньшего размера $L_1 = 2$.

$L_1 = 2$. Для квадратной 1,2 решётки с числом узлов $N = 2 \times 2$ легко найти $N_{min} = N_{max} = 2$ (рис. 2) и получить всего одну нетривиальную точку $Y_i(x_i) = 2/3$ при $x_1 = 1/2$. Используя геометрический смысл x_{cL} , находим площадь над прямыми $Y_1(x) = (8x - 2)/3$ и $Y_2(x) = 4x/3$ (рис. 3) и определяем первое значение $x_{c21} = 0,458(3)$. Далее из условия $Y_1(x) = (8x - 2)/3 = 1/2$ второе значение $x_{c22} = 0,4375$. Считая, что x_{c21} и x_{c22} имеют одинаковые веса, находим их среднее $x_{c2} = 0,44791(6)$, при котором $Nx_{cL}/2 \approx 0,90$ меньше $N_{min} = 2$. Убедившись в выполнении (1.3) и (1.4) для квадратной 1,2 решётки с $L_1 = 2$, перейдём к вычислению x_c .

Порог протекания квадратной 1,2 решётки

Подставим полученные значения $x_{cL1} = 0,44791(6)$ для квадратной 1,2 решётки размера $L_1 = 2$ и $x_{cL2} = 0,43436316$ и для квадратной 1,2 решётки размера $L_2 = 3$ в формулу (1.2) и

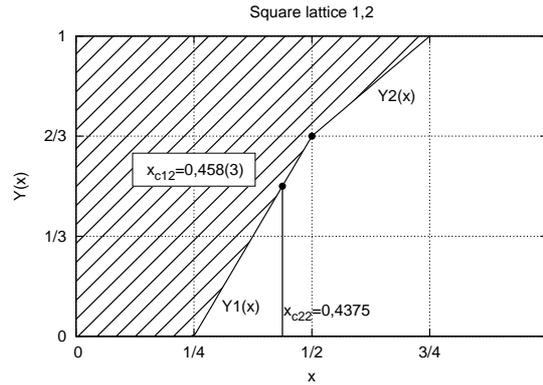


Рис. 3. Зависимость $Y(x)$ для квадратной 1,2 решётки размера $L_1 = 2$ представляется в виде двух прямых $Y_1(x)$ и $Y_2(x)$. Площадь над прямыми $Y_1(x) = (8x - 2)/3$ и $Y_2(x) = 4x/3$ равна $x_{c21} = 0,458(3)$. Прямая $Y_1(x)$ принимает значение 0,5 при $x_{c22} = 0,4375$

получим порог протекания квадратной 1,2 решётки $x_c = 0,40725616$. Заметим, что с большой точностью сумма порогов протекания для квадратной и квадратной 1,2 решёток равна единице: $x_c(\text{кв}) + x_c(\text{кв}1,2) = 1$.

Завершая рассмотрение метода двух решёток, в основе которого заложена линейная зависимость (0.1), заметим, что решётки, для которых получены пороги протекания здесь и в [1, 2], имеют координационные числа $Z = 4, 6$ и 8 . Легко проверить, что этот метод применим и для одномерной цепочки, то есть когда у каждого узла два ($Z = 2$) соседа. Можно сказать, что метод двух решёток применим при выполнении (1.3) и (1.4) для Z , образующих подгруппу чётных чисел с 2 до 8 (включительно) группы целых чисел.

§ 2. Идея Ходжа для изучения перколяции на большой решётке по перколяции на её элементарной ячейке

Вычисления x_c при помощи элементарной решётки (малого числа узлов или связей) известны как реализация *идеи подобия* (Каданова–Вильсона [3, 4]) перколяционного кластера вблизи критической точки в методе ренорм-групп [5, 6]. Для задачи узлов на треугольной решётке и для задачи связей на квадратной решётке метод ренорм-групп даёт точные значения — одинаковые для двух задач: $x_c = 0,5$. В задаче узлов на квадратной решётке $x_c = 0,61803$ [7]. Как видим, отличие составляет более 4%, что на порядки больше точности, позволяющей достичь методом компьютерного моделирования в модели градиентной перколяции [8] и методом двух решёток [1]. Не претендуя на точное решение, главной целью данной статьи являлось повышение точности оценки x_c по сравнению с известными методами и методом ренорм-групп в частности.

Неприводимая плоская кривая, задаваемая для конечной решётки по (1.1), при $x = x_c$ имеет вид:

$$Y(x_c, L) = \frac{1}{1 + e^{-S(x_c, L)}}, \quad \text{где} \quad S(x_c, L) = \sum a_i (x_c^i - x_{cL}^i). \quad (2.1)$$

Ясно, что даже при известной величине x_{cL} и известных коэффициентах a_i без каких-либо допущений (гипотез) решить (2.1) относительно x_c *невозможно*, так как неизвестна левая часть $Y(x_c, L)$. Поэтому мы обратимся к алгебраической геометрии, главным предметом изучения которой являются множества решений систем уравнений, задаваемых многочленами. В нашем случае (2.1) будет *полиномиальным* уравнением

$$a_0 + a_1 x_c + a_2 x_c^2 + \dots + a_n x_c^n = y(x_c), \quad (2.2)$$

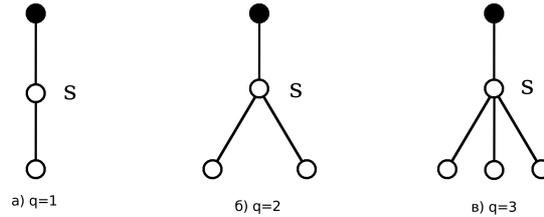


Рис. 4. Кирпичики Ходжа: узел s с q выходящими связями образует максимальный конечный кластер элементарных ячеек решётки Бёте.

где введены обозначения $a_0 = -\sum a_i x_{cL}^i$ и $y(x_c) = \ln \frac{Y(x_c, L)}{1 - Y(x_c, L)}$.

В 2011 году исполняется 70 лет сформулированной английским математиком В. Ходжем (William Vallance Douglas Hodge) гипотезы в алгебраической геометрии — *гипотезы Ходжа* ([9] и обзоры [10, 11]). Гипотеза Ходжа утверждает, что для некоторых *проективных алгебраических многообразий* (так называют множества, составленные из «кирпичиков» или кусочков, каждый из которых является множеством решений каких-либо полиномиальных уравнений) фигуры, называемые *циклами Ходжа*, фактически являются линейными комбинациями геометрических фигур, называемых *алгебраическими циклами* [12]. Если Гипотеза Ходжа верна, то изучение большого и сложного класса алгебраических многообразий фактически сводится к изучению гораздо более простых объектов.

Не вдаваясь в сложную математику *гипотезы*, в данной работе нам достаточно только идеи (далее *идея Ходжа*), которую мы сформулируем так:

Изучение множества решений полиномиального уравнения (2.1) для большой решётки можно свести к изучению решения уравнений, описывающих более простой объект.

(I)

Применительно к задаче оценки порога протекания бесконечной решётки x_c в качестве *более простого объекта* можно выбрать её *элементарную ячейку*, трансляцией которой в пространстве строится (по Ходжу можно сказать склеивается) бесконечная решётка.

При изучении решёточной элементарной ячейки её размер $L = const$ и поэтому (0.1) можно легко представить как $L|x_{cL} - x_c| = const$ или в удобном для дальнейшего виде:

$$1/2 + K(x_c - x_{cL}) = F, \quad (2.3)$$

тогда при известных значениях K и F можно найти порог протекания x_c . Отметим, что в (2.3) размер элементарной ячейки L вошёл в коэффициент K :

$$K \propto L, \quad (2.4)$$

а F — другая постоянная, которая должна зависеть от вида решётки или её элементарной ячейки.

Запишем левую часть (2.3) как уравнение прямой линии:

$$y(x) = 1/2 + K(x - x_{cL}) \quad (2.5)$$

и найдём то значение x_y , при котором $y(x_y) = x_y$:

$$x_y = \frac{Kx_{cL} - 1/2}{K - 1}. \quad (2.6)$$

Тогда (2.3) можно записать и через x_y :

$$x_y + K(x - x_y) = F. \quad (2.7)$$

Теперь попытаемся обосновать идею Ходжса. Для этого вернёмся к (1.1) и рассмотрим $S(x, L) = \sum a_i(x_i - x_{cL}^i)$ вблизи к x_{cL} . При малых $|x - x_{cL}|$ или при $x \approx x_{cL}$ сумму $S(x, L)$ можно представить одним слагаемым [13]:

$$S(x, L) = \sum a_i(x^i - x_{cL}^i) = (x - x_{cL})(a_1 + 2a_2x_{cL} + \dots + na_nx_{cL}^{n-1}) = A_L(x - x_{cL}). \quad (2.8)$$

Тогда для того, чтобы задать функцию $Y(x, L)$ при малых $|x - x_{cL}|$ достаточно двух параметров A_L и x_{cL} :

$$Y(x, L) = \frac{1}{1 + e^{-A_L(x - x_{cL})}}, \quad (2.9)$$

при этом A_L соответствует наклону K :

$$K = A_L/4 \quad (2.10)$$

касательной $y(x)$:

$$y(x) = 1/2 + K(x - x_{cL}) \quad (2.11)$$

к кривой $Y(x, L)$ в точке x_{cL} , так как $K(x) = (a_1 + 2a_2x + \dots + na_nx^{n-1})Y(x)(1 - Y(x))$. В общем случае вблизи критической точки $x \approx x_c$ для решётки с линейным размером L справедливо скейлинговое соотношение через критический индекс радиуса корреляции ν [14]:

$$|x - x_c|^{-\nu} \propto L \quad \text{или} \quad |x_{cL} - x_c|^{-\nu} \propto L \quad (2.12)$$

которые легко приводятся к виду (2.5) или (2.3), а запись

$$A_L \propto L \quad (2.13)$$

означает, что величина A_L растёт при увеличении размера решётки L . Для получения (2.13) достаточно того, что ν — положительная величина или более точно — порядка единицы.

Изменение функции $Y(x, L)$ от 0 до 1 определяет изменение симметрии решётки или перколяционный (геометрический) переход и если измерять ширину Δx этого перехода как

$$\Delta x = 1/K = 4/A_L, \quad (2.14)$$

то при $L \rightarrow \infty$ ширина перехода $\Delta x \rightarrow 0$, поэтому внутри интервала Δx кривую $Y(x, L)$ с большой точностью можно заменить её касательной (прямой) в точке $x = x_{cL}$ в виде (2.11). Другими словами, (2.9) для большой решётки с эквивалентом (2.11) и (2.5) для её элементарной ячейки отличаются только численными значениями K и x_{cL} , а при $x = x_c$ совпадают по виду с (2.3).

Известно [5, 6], что вероятность протекания $P(x, L)$ может быть выражена в виде скейлинга $P(x) \propto |x - x_c|^\beta$ при $L \rightarrow \infty$ или через $Y(x, L)$ как $P(x, L) = xY(x, L)$. На пороге протекания $P(x_c, L \rightarrow \infty) = 0$ или

$$Y(x_c, L \rightarrow \infty) = 0. \quad (2.15)$$

Однако для конечной решётки из (1.1) в приближении (2.9) следует, что $Y(x, L)$ принимает минимальное значение близкое к нулю (или экспоненциально малое) только в тривиальной точке $x = 0$. Это означает, что для конечной решётки $Y(x_c, L) = F \neq 0$ и можно ожидать, что выражение

$$Y(x_c, L) = F \quad (2.16)$$

может быть использовано для оценки порога протекания x_c (разумеется, при известной величине F), если линейность (0.1) нарушается. С другой стороны, как сказано выше, на графике

зависимости $x_{cL} = x_{cL}(1/L)$ для любой решётки конечного размера L (каковой является и её элементарная ячейка) можно соединить *прямой* линией точки $(1/L; x_{cL})$ и $(0; x_c)$, так как $x_{cL} \rightarrow x_c$ при $L \rightarrow \infty$. Поэтому для *элементарной ячейки* ограничения (1.3) и (1.4) для выполнения линейности (0.1) можно в дальнейшем не принимать во внимание. Тогда в выше приведённых формулах можно заменить L на N , так как $L \rightarrow \infty$ означает, что и полное число узлов в решётке $N \rightarrow \infty$. Предпочтительность такой замены объясняется тем, что разные N могут приводить к одинаковым L (например, квадратная ячейка с $N = 4$ узлами имеет такой же размер $L = 2$, как и простая кубическая ячейка с $N = 8$ узлами). При замене L на N (2.15) и (2.16) можно записать как

$$Y(x_c, N \rightarrow \infty) = 0 \quad (2.17)$$

для больших решёток и

$$Y(x_c, N) = F \quad (2.18)$$

для малых решёток. Напомним, что в (2.18) величина $Y(x_c, N)$ по-прежнему определяется по (2.2), а для выполнения (2.17) величина F в (2.18) должна быть порядка $1/N$:

$$F \propto 1/N. \quad (2.19)$$

Теперь встаёт вопрос: какую формулу надо применять для оценки порога протекания x_c — линейное выражение (2.3) или нелинейное (2.18)? Для ответа на этот вопрос введём критерий линейности (нелинейности) поведения $Y(x, N)$ в интервале *ширины перехода* Δx . Из выше-сказанных соображений следует, что если заметное изменение функции условной вероятности протекания $Y(x, N)$ происходит внутри Δx , то её можно заменить касательной (прямой) в точке x_{cL} . Заметное изменение $Y(x, N)$, будем характеризовать *относительной шириной кривой* Δx_N через величины N_{max} и N_{min} , о которых сказано в начале § 1, как

$$\Delta x_N = (N_{max} - N_{min})/N, \quad (2.20)$$

а отношение величин Δx_N и Δx может быть критерием для применения (2.3) или (2.16):

$$\epsilon = \Delta x_N / \Delta x = K \Delta x_N. \quad (2.21)$$

Будем считать, что если $\epsilon \leq 1$, то кривая $Y(x, N)$ узкая и её нелинейность незаметна, тогда применимо линейное выражение (2.3). Если же $\epsilon > 1$, то кривая $Y(x, N)$ широкая и её нелинейность заметна — это означает, что надо применять нелинейное выражение (2.18).

Таким образом, при $x = x_c$ полиномиальное уравнение (2.1) или (2.2) для решётки больших размеров сводится к уравнению её элементарной ячейки (2.3) или (2.18) в зависимости от ϵ . Поэтому *идея Ходжа*, казалось бы, вполне состоятельна для оценки порога протекания бесконечной решётки x_c на основе перколяционных свойств более простого объекта — её *элементарной ячейки*. Очевидно, для этого необходимо знание K и F . Если наклон $K(x)$ при известных коэффициентах a_i легко вычисляется, то определение F пока проблематично. Другими словами элементарная ячейка бесконечной решётки ещё не является *простым* (по Ходжу) объектом для решения нашей задачи. Очевидно более простой чем элементарная ячейка объект (в дальнейшем назовём его *кирпичиком Ходжа*) должен содержать и меньшее число узлов. Поэтому мы будем искать *кирпичик Ходжа* в самой элементарной ячейке.

§ 3. Перколяция элементарной ячейки по свойствам её «кирпичика» Ходжа

3.1. Уравнение критической точки. Если теперь применять *идею Ходжа* (I) для элементарной ячейки, то более *простым объектом* можно считать *узел* элементарной ячейки с выходящими из него *связями*. Узел s с q выходящими связями (рис. 4) будем называть *кирпичиком*

Ходжа (на рис. 4 белые узлы образуют кирпичик Ходжа). При этом $q = 1, 2, 3, \dots$ и имеет хорошо известную связь с координационным числом Z решётки Бёте

$$Z = q + 1, \quad (3.1)$$

то есть Z — это q выходящих из узла связей плюс одна входящая связь (на рис. 4 входящая в белый узел s связь направлена от черного узла).

По рис. 4 легко понять, что в случае решётки Бёте *кирпичики Ходжа* — это *конечные кластеры максимального размера* элементарных ячеек решётки Бёте (дерева Кэли). В элементарной ячейке интересующей нас кристаллографической решётки (далее просто «решётка» в отличие от «решётка Бёте») также можно обнаружить *кирпичик Ходжа* — конечный кластер максимального размера с q выходящими из узла s связями. Очевидно число узлов в кирпичике Ходжа равно N_{max} , то есть, как сказано выше, соответствует максимальному числу узлов-проводников, при котором соединяющий кластер может отсутствовать. Поэтому для элементарной ячейки любой решётки понятие кирпичик Ходжа будет универсальным, и в дальнейшем мы будем употреблять этот термин в вышеуказанном смысле. Однако число связей q , исходящих из узла *кирпичика Ходжа* решётки не всегда будет связано по (3.1), если считать, что мы изучаем элементарную ячейку только с внутренними связями. Более того, в элементарной ячейке решётки может и не быть узла, из которого исходят все Z связей, как в решётке Бёте. Например, в элементарной ячейке простой кубической решётки (ПК) из каждого узла исходит только три связи, а из узла *кирпичика Ходжа* элементарной ячейки ПК решётки — только две связи, тогда как для ПК решётки первое координационное число $Z = 6$.

Вернёмся к решётке Бёте (рис. 4) и увидим, что задача связей (bond problem) для этой решётки сводится к задаче узлов (site problem) при замене связи соответствующим узлом. Для примера рассмотрим рис. 4б. Здесь четыре узла (включая чёрный узел) соединяются тремя связями, которые мы заменяем узлами и, сводя задачу связей к задаче узлов, из трёх узлов получаем *кирпичик Ходжа*. Теперь этот кирпичик сам является элементарной ячейкой решётки Бёте в задаче связей приведённой к задаче узлов. Однако решётка Бёте имеет то преимущество, что для этой решётки, известно точное значение порога протекания *одинаковое для задачи узлов и задачи связей*:

$$x_c = 1/(Z - 1) = 1/q, \quad (3.2)$$

где по-прежнему $q = Z - 1$ числу связей, исходящих из узла согласно (3.1). Поэтому элементарная ячейка решётки Бёте (теперь неважно в какой задаче) с $N = Z$ узлами и её *кирпичик Ходжа* совпадают.

Построим графики условной вероятности протекания $Y(x)$ *кирпичиков Ходжа* решёток Бёте изображённых на рис. 4 для $q = 2$ и $q = 3$. Из простейших графиков на рис. 5 можно увидеть, что при $q > 1$ зависимости $Y(x)$ имеют точку излома при $x_Y = Y_x$, то есть при

$$x_Y = Y(x_Y) \quad \text{или} \quad x_Y = 2/(q + 1) = 2/Z \quad (3.3)$$

и имеют наклон $k_0 = 2$, а выше точки излома $x > x_Y$ наклон меняется на $k = 1$. Нас будет интересовать участок $Y(x)$ с $k_0 = 2$, включая точку излома x_Y .

Для того, чтобы записать выражение, из которого можно вычислить порог протекания решётки Бёте, используем (3.2), (3.3) и графики $Y(x)$ для *кирпичика Ходжа* решёток Бёте по рис. 5. Запишем уравнение прямой $Y(x)$, имеющей наклон k и проходящей через точку излома $x_Y = Y(x_Y)$:

$$Y(x) = Y(x_Y) + k(x - x_Y), \quad (3.4)$$

которое допускает *параметризацию*

$$x = 1/(Z - 1) = 1/q, \quad Y(x) = 1/Z, \quad x_Y = Y(x_Y) = 2/Z, \quad k = K = (Z - 1)/(Z - 2). \quad (3.5)$$

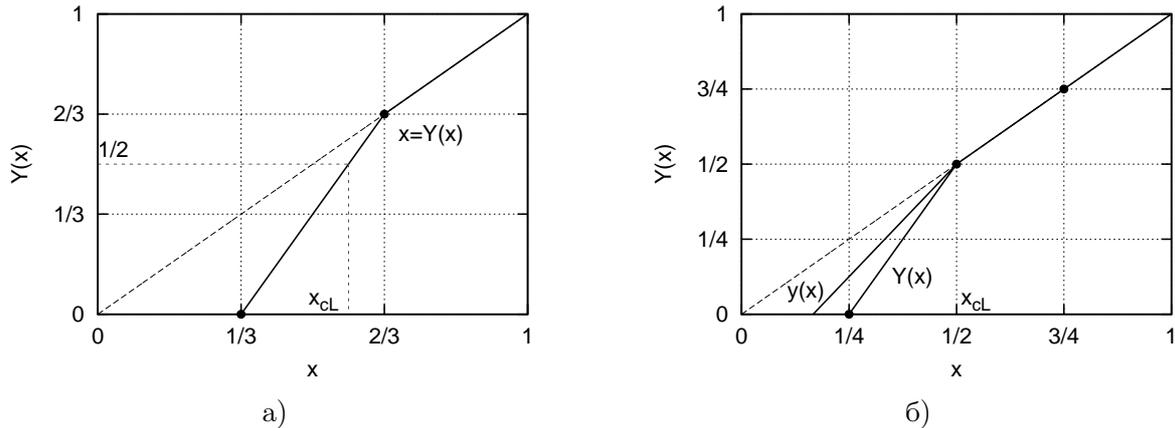


Рис. 5. Графики $Y(x)$ для кирпича Ходжа решёток Бёте: (а) $Y(x)$ для $q = 2$. Наклон $k = (Z - 1)/(Z - 2)$ ниже точки излома совпадает с $k_0 = 2$; (б) $Y(x)$ для $q = 3$. Наклон $k = (Z - 1)/(Z - 2) = 3/2$ ниже точки излома не совпадает с k_0

Параметризация (3.5) для (3.4) позволяет находить порог протекания решётки Бёте по формуле (3.2) и к связи (3.1) между Z и x_c получить возможные значения F :

$$F = Y(x_c) = 1/Z = x_c/(1 + x_c). \quad (3.6)$$

Так как $Y(x_{cL}) = 1/2$ (например, для $q = 2$ и $q = 3$ можно найти $x_{cL} = 7/12$ и $x_{cL} = 1/2$ соответственно), то (3.4) при $x = x_c$ можно представить согласно связи (2.5) и (2.7) как

$$Y(x_c) = 1/2 + k(x_c - x_{cL}) = F \quad \text{и} \quad Y(x_c) = Y(x_Y) + k(x_c - x_Y) = F, \quad (3.7)$$

где возможные значения k и F соответствуют (3.5) и (3.6).

Выше мы рассматривали кирпичик Ходжа как элементарную ячейку с $N_{min} = 2$, $N_{max} = (Z - 1) = q$ и $N = Z$. Учитывая параметризацию (3.5), при $N = Z$ прямая (3.4) может быть представлена и как $Y(x) = (N_{min}/N) + k[x - (N_{min}/N)]$, а при $x = x_c$ в виде

$$Y(x_c) = F = (N_{min}/N) + k[x_c - (N_{min}/N)] = 1/N \quad (3.8)$$

Элементарные ячейки изучаемых нами решёток (ОЦК, ГЦК и шестиугольная) имеют одинаковое значение $N_{min} = 3$. Поэтому мы рассмотрим элементарную ячейку решётки Бёте (на рис. 4 все конфигурации с чёрным узлом), для которой $N_{min} = 3$, при этом $N_{max} = Z = q + 1$ и $N = Z + 1$. Оказывается, что порог протекания x_c , величина которого независимо вычисляется по-прежнему по (3.2), определяется также из (3.8) и также при $k = K = (Z - 1)/(Z - 2)$. Другими словами, для определения порога протекания бесконечной решётки по её элементарной ячейке мы используем свойства *кирпичика Ходжа* последней, то есть необходимые k и F для элементарной ячейки мы принимаем такие же как у её *кирпичика Ходжа*. Теперь два выражения по (3.7) с учётом параметризации (3.5) и $x_Y = Y(x_Y)$ можно записать в обобщённой форме

$$C + K(x_c - D) = F. \quad (3.9)$$

Назовём (3.9) *уравнением критической точки* для вычисления порога протекания x_c и конкретизируем идею Ходжа I как

Изучение множества решений полиномиального уравнения (2.1) сводится к изучению множества решений уравнения критической точки (3.9)

(II)

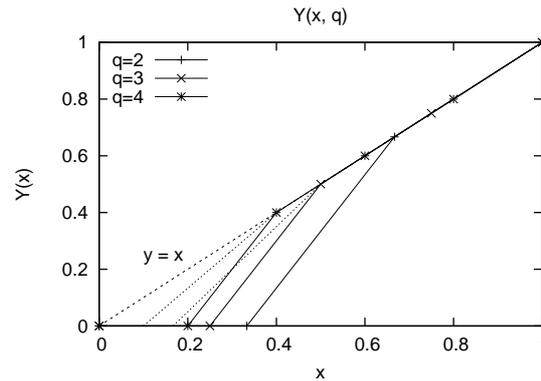


Рис. 6. Для всех Z (или $q = Z - 1$, показано для $q = 2, 3$ и 4) решётки Бёте наклон прямых $Y(x)$ равен $k_0 = 2$ (сплошные линии). Графики $Y(x)$ должны сменить собственный наклон — чтобы получить правильные значения $x_c = 1/(Z - 1)$. Прямые $Y(x)$ отображаются в прямые $y(x)$ с наклоном $K = (Z - 1)/(Z - 2)$ (штриховые линии). При $q = 2$ прямая $y(x)$ совпадает с $Y(x)$

Ясно, что множество решений (3.9) определяется возможными значениями коэффициентов C , K , D и F . Поэтому перейдём к их изучению.

3.2. Возможные значения коэффициентов, входящих в уравнение критической точки. Исходя из параметризации (3.5) и двух выражений по (3.7) выпишем возможные значения (комбинации) для коэффициентов C , K , D и F :

$$C = 2/Z, x_Y, 1/2, \quad (3.10)$$

$$K = k_0 = 2, k \neq k_0, (Z - 1)/(Z - 2), \quad (3.11)$$

$$D = 2/Z, x_Y, x_{cL}, \quad (3.12)$$

$$F = 1/Z, x_c/(1 + x_c), \quad (3.13)$$

при этом для *кирпичика Ходжа* ячейки Бёте допускается и

$$Z = N. \quad (3.14)$$

Величина K в (3.9) имеет смысл наклона графика $Y(x)$ при $x < x_Y$. Как сказано выше и построением графиков (рис. 6) можно убедиться, что для всех Z (или q) решётки Бёте наклон прямых $Y(x)$ равен $k_0 = 2$. Однако только при $Z = 3$ возможная величина $K = (Z - 1)/(Z - 2)$ равна 2. Величина $K \neq 2$ для $Z \geq 4$, и не совпадает с собственным наклоном $k_0 = 2$ графика $Y(x)$. Это происходит тогда, когда из узла *кирпичика Ходжа* выходит более двух связей, и графики $Y(x)$ должны сменить собственный наклон — чтобы получить правильные значения x_c по (3.2) при параметризации (3.5). Таким образом, прямые $Y(x)$ отображаются (рис. 6) в прямые $y(x)$ с наклоном $K = (Z - 1)/(Z - 2)$ при $Z \geq 4$.

Если из узла *кирпичика Ходжа* произвольной решётки выходит не более двух связей, то следует ожидать, что $K \neq 2$ (или не следует ожидать, что собственный наклон графиков $Y(x)$ будет равен 2), а будет соответствовать собственному наклону k собственного графика $Y(x)$ произвольной решётки. Этим объясняется появление второго возможного значения $K = k \neq k_0$ в (3.11). Третье возможное значение $K = (Z - 1)/(Z - 2)$ соответствует параметризации (3.5).

Проверка простыми расчётами показывает, что решения (3.9) нет для решётки Бёте в виде $x = x_c = 1/(Z - 1) = 1/q$ при всех возможных K по (3.11) и при всех возможных F по (3.13) для $q > 4$, если $C = 1/2$ и $D = x_{cL}$. То есть пару $C = 1/2$ и $D = x_{cL}$ можно применять в (3.9) только для числа $q \leq 3$, исходящих из узла *кирпичика Ходжа*.

Обозначим максимальное число связей, выходящих из какого-то узла элементарной ячейки, через Q . Очевидно, для решётки Бёте $Q = Z$. Выше сказано, что не у всех решёток с

координационным числом Z элементарные ячейки имеют хотя бы один узел, из которого выходило бы Z связей, как у решётки Бёте, то есть возможен случай $Q < Z$. Поэтому для таких решёток не имеют смысла те возможные значения коэффициентов C , K , D и F , которые явно выражаются через Z , в этом случае Z следует заменить на N согласно (3.14).

Число возможных уравнений вида (3.9) можно получить перемножением числа возможных комбинаций каждого из коэффициентов. Следует ожидать, что уравнений будет больше (гораздо больше) одного. Однако вышеприведённые ограничения на коэффициенты должны уменьшать (вплоть до одного) возможное число *уравнений критической точки*, а среднее значение получаемых решений x_{ci} можно считать порогом протекания изучаемой решётки.

Уравнение *критической точки* (3.9) и возможные значения для коэффициентов C , K , D и F по (3.10)–(3.13) получены при изучении свойств «кирпичика» Ходжа элементарной ячейки решётки Бёте, поэтому эту простую математическую модель мы в дальнейшем будем называть моделью ячейки решётки Бёте — или кратко *модель решётки Бёте*.

В вышеприведённой *модели решётки Бёте* точка излома (перегиба) находится на прямой $y(x) = x$, что является важным свойством для некоторых решёток. Например, свойство $Y(x_{cL}) = x_{cL} = Y(x_Y) = x_Y = x_c$ точки перегиба для треугольной решётки, у которой координационное число $Z = 6$ (см. §1), можно использовать для выбора возможного значения F .

В треугольной решётке в задаче узлов в записи $Y(x_c) = C + K(x_c - x_Y)$ величина $K(x_c - x_Y) = 0$ при любом K , что даёт по (3.9) $2/Z = x_c/(1 + x_c)$. При $Z = 6$ получаем порог протекания треугольной решётки в задаче узлов. Таким образом, в (3.9) величина $F = x_c/(1 + x_c)$ в том случае, если излом (перегиб) зависимости $Y(x)$ происходит при $Y(x_Y) = x_Y$ или при $Y(x_{cL}) = 1/2$.

Продемонстрируем выбор C , K , D и F и оценку величины порога протекания x_c на примере уже известного результата — элементарного кубика ПК решётки [2]. Согласно таблице на с. 36 в [1] для элементарной ячейки размера $L_1 = 2$ величины $N_{min} = 3$ и $N_{max} = 4$, тогда относительная ширина кривой по (2.20) $\Delta x_N = 1/4$ и $K = A_L/4 = 2 \ln(9/2)$ определяют критерий $\epsilon = K \Delta x_N < 1$. Это означает, что вид (3.9) согласно (2.3) будет при $C = 1/2$ и $D = x_{cL}$:

$$1/2 + K(x - x_{cL}) = F. \quad (3.15)$$

Решением трёх уравнений вида

$$Y_i(x_i) = \frac{1}{1 + e^{-S_i(x_i)}}, \quad (3.16)$$

в [2] получено $x_{cL} = 0,39890852$, $a_1 = A_L = 8 \ln(9/2)$, $a_2 = 0$ (точно).

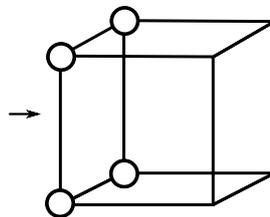


Рис. 7. Максимальный конечный кластер (четыре белых узла) простой кубической решётки. Добавление пятого белого узла переведёт максимальный конечный кластер в соединяющий (слева направо) кластер

Значение $a_2 = 0$, говорит о том, что в точке x_{cL} зависимость $Y(x)$ имеет перегиб, поэтому $F = x_c/(1 + x_c)$. По рис. 7 видно, что из каждого узла *кирпичика Ходжа* (число узлов-проводников равно четырём, так как добавление пятого узла переводит максимальный конечный кластер в соединяющий) исходит 2 связи (не более). Тогда коэффициент K должен быть

равен собственному наклону $K = k = A_L/4 = 2 \ln(9/2)$ и для оценки x_c можно записать (3.9) как

$$1/2 + A_L/4(x_c - x_{cL}) = x_c/(1 + x_c), \quad (3.17)$$

которое имеет единственный корень в интервале $0 < x < 1$ равный $x_c = 0,31168652$.

Теперь перейдем согласно цели нашей статьи к оценке порогов протекания ОЦК, ГЦК и шестиугольной решёток.

§ 4. Оценка порога протекания ОЦК решётки в задаче узлов

Для элементарной ячейки ОЦК решётки ($N = 9$ и $Z = 8$) в задаче узлов, как видно из рис. 8, значение $N_{min} = 3$, а $N_{max} = 8$, тогда относительная ширина кривой по (2.20) будет $\Delta x_N = 5/9$. Для протекания, например, слева направо, необходимы три проводящих узла, поэтому минимальное нетривиальное значение $x_1 = 3/9$, а максимальное $x_6 = 8/9$. Шесть нетривиальных значения $Y_i(x_i)$ для $x_i = 3/9, 4/9, \dots, 8/9$, подсчитанные без помощи вычислительной техники, занесём в таблицу:

x_i	3/9	4/9	5/9	6/9	7/9	8/9
$Y_i(x_i)$	4/21	8/21	34/63	6/9	7/9	8/9

Для проверки правильности расчётов $Y_i(x_i)$ воспользуемся алгоритмом, предложенным в [1], и получим $a_1 = 78,51790582$; $a_2 = -213,96117368$; $a_3 = 325,22487280$; $a_4 = -259,56481082$; $a_5 = 86,52226693$ и $x_{cL} = 0,52521884$, при которых наклон кривой $K(x_{cL}) \approx 1,3506$ определяет критерий *линейности* кривой $Y(x, N)$ по (2.21) $\epsilon = K \Delta x_N < 1$. Это означает, что вид (3.9) согласно (2.3) должен быть как

$$1/2 + K(x - x_{cL}) = F. \quad (4.1)$$

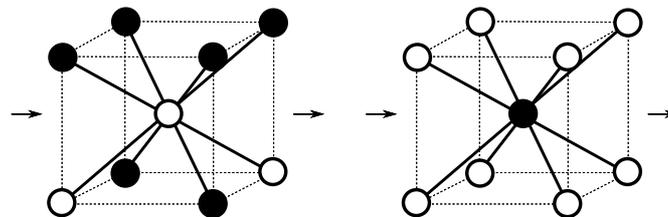


Рис. 8. Элементарная ячейка ОЦК решётки, число узлов $N = 9$, максимальное число связей исходящих хотя бы из одного узла ячейки $Q = Z = 8$. Стрелкой показано направление протекания. Проводящие узлы (узлы-проводники) — белые. (а) $N_{min} = 3$. (б) центральный заблокированный (черный) узел даёт конфигурацию, при которой отсутствует протекание слева направо, $N_{max} = 8$

По рис. 8 видно, что из узла кирпичика Ходжа исходит 4 связи (более 2), поэтому $K = (Z - 1)/(Z - 2)$. Так как в случае $q > 3$ связей, исходящих из узла *кирпичика Ходжа*, пару $C = 1/2$ и $D = x_{cL}$ нельзя использовать в (3.9), то (4.1) заменяем на

$$x_y + (Z - 1)/(Z - 2)(x - x_y) = F. \quad (4.2)$$

Здесь учтено, что $K = (Z - 1)/(Z - 2)$ и допускает запись через Z , так как в элементарной ячейке ОЦК решётки есть один узел, из которого выходит ровно $Q = Z = 8$ связей.

Построим график $Y(x, L)$ (рис. 9 а) и поставим задачу определить $x_Y = Y_x$ как координату точки излома прямой, то есть кривую мы заменяем двумя прямыми: прямой $y = x$ и прямой, проходящей через точку $(2/9; 0)$ и (как будет показано ниже) через точку б (рис. 9б). Для этого

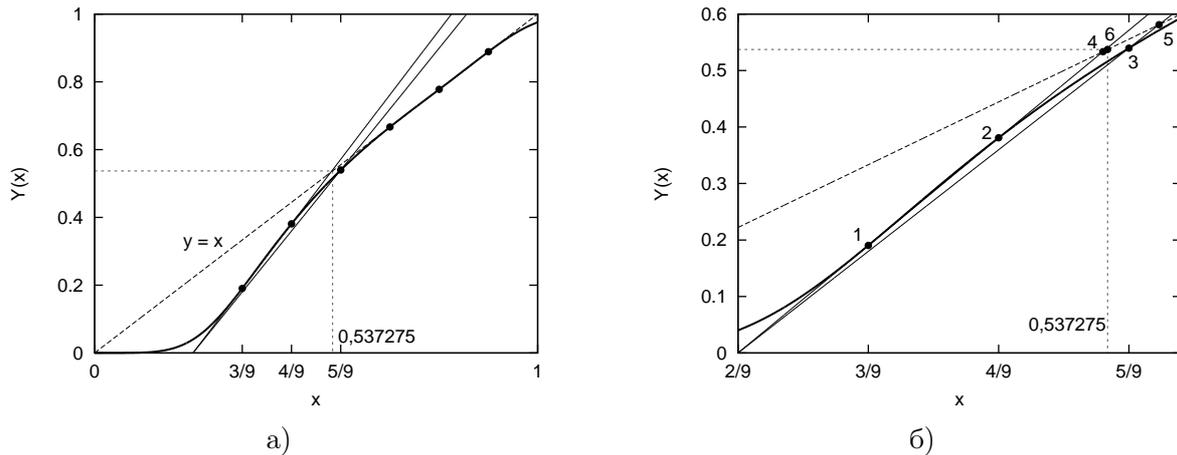


Рис. 9. а) поведение условной вероятности протекания $Y(x)$ элементарной ОЦК решётки близко к поведению условной вероятности протекания $Y(x)$ кирпичиков Ходжа элементарных решёток Бёте по рис. 5 и рис. 6. б) имеющая больший вес точка 4, построена при помощи прямой, проходящей через две нетривиальные точки — 1 и 2. Имеющая меньший вес точка 5, построена при помощи одной нетривиальной точки — 3. Координата усреднённой точки $x_6 = x_Y$

через точки 1 и 2 (рис. 9б), имеющие соответственно координаты $(3/9; 4/21)$ и $(4/9; 8/21)$, одновременно лежащие на прямой, исходящей из точки $(2/9; 0)$, и кривой $Y(x, L)$, проведём прямую, которая пересечёт линию $y = x$ в точке 4. Найдём координату x этой точки $x_4 = 8/15 = 0,5(3)$. Далее, через точку 3 $(5/9; 34/63)$, лежащую на кривой $Y(x, L)$, и точку $(2/9; 0)$ проведём прямую, которая пересечёт линию $y = x$ в точке 5. Найдём координату x этой точки $x_5 = 68/117 = 0,581196$. Точка 4 имеет больший вес, так как она построена при помощи двух нетривиальных точек, а точка 5 при помощи одной нетривиальной точки. Координату x_6 средней точки, которая и будет координатой искомой точки x_Y , запишем как

$$x_Y = x_4 + p_4(x_5 - x_4), \quad (4.3)$$

где p_4 — вес точки 4. Рассчитаем p_4 по геометрической вероятности попадания x_Y в интервал между x_4 и x_5 как

$$p_4 = (x_5 - x_4)/x_5. \quad (4.4)$$

После расчёта получим $x_Y = x_6 = 0,53727501$. Теперь зависимость $Y(x)$ для элементарной ячейки ОЦК решётки имеет точку излома при $x_Y = Y(x_Y)$, тогда $F = x_c/(1 + x_c)$ и порог протекания ОЦК решётки при $K = (Z - 1)/(Z - 2) = 7/6$ оценивается решением (4.2) как $x_c = x_c(bcc) = 0,24595716$.

§ 5. Оценка порога протекания ГЦК решётки в задаче узлов

Для элементарной ГЦК решётки ($N = 14$, $Z = 12$) в задаче узлов, как видно по рис. 10, значение $N_{min} = 3$, а $N_{max} = 10$, тогда относительная ширина кривой по (2.20) будет $\Delta x_N = 1/2$. Для расчётов $Y_i(x_i)$ воспользуемся алгоритмом, предложенным в [2], и сведём в таблицу все нетривиальные значения $Y_i(x_i)$:

x_i	3/14	4/14	5/14	6/14	7/14	8/14	9/14	10/14
$Y_i(x_i)$	9/91	314/1001	1168/2002	2381/3003	3144/3432	2924/3003	1990/2002	1000/1001

затем рассчитаем значения a_i : $a_1 = 33,48196132$; $a_2 = 100,45365139$; $a_3 = -896,20969426$; $a_4 = 2670,20388648$; $a_5 = -4123,356973$; $a_6 = 3380,05569359$; $a_7 = -1156,51381171$, а также $x_{xL} = 0,33432157$, при которых наклон кривой $K(x_{cL}) \approx 3,7730$ определяет критерий *нелинейности* кривой $Y(x, N)$ по (2.21) $\epsilon = K\Delta x_N > 1$. Это означает, что вид (3.9) согласно (2.18)

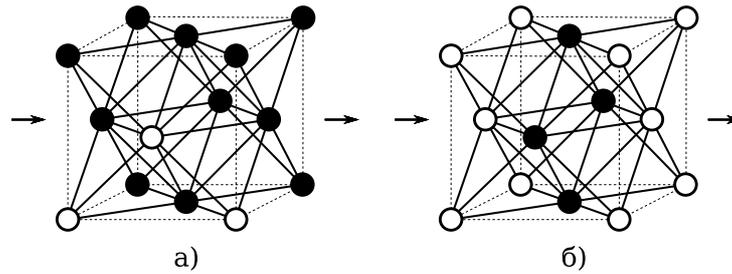


Рис. 10. Элементарная ячейка ГЦК решётки число узлов $N = 14$. Координационное число для этой решётки $Z = 12$. Максимальное число связей, исходящих из узла $Q < Z$ ($8 < 12$). Стрелкой показано направление протекания. Проводящие узлы (узлы-проводники) — белые. а) $N_{min} = 3$. б) Четыре заблокированных (центральных по боковым граням куба) узла (черные) дают конфигурацию, при которой отсутствует протекание слева направо, $N_{max} = 8$

должен быть как $Y(x_c, N) = F$ или

$$Y(x_c, N) = \frac{1}{1 + e^{-S(x_c, N)}} = F, \quad (5.1)$$

где $S(x_c, N) = \sum a_i(x_c^i - x_{cL}^i)$ определяется при помощи полученных выше семи коэффициентов a_i и x_{cL} . Далее, точка P (рис. 11) перегиба кривой $Y(x, L)$ с координатами $x = 0,31118201$ и $Y(0,31118201) = 0,41115986$ говорит о том, что $x_Y \neq Y(x_Y)$, то есть в *уравнении критической точки* правая часть $F \neq x_c/(1 + x_c)$. Поэтому следовало бы ожидать, второе возможное значение $F = 1/Z$. Однако Z следует заменить на $N = 14$, так как $Q < Z$ по рис. 10. Теперь решая уравнение (5.1) численно при $F = 1/14$, получим первую оценку $x_c = 0,19937567$.

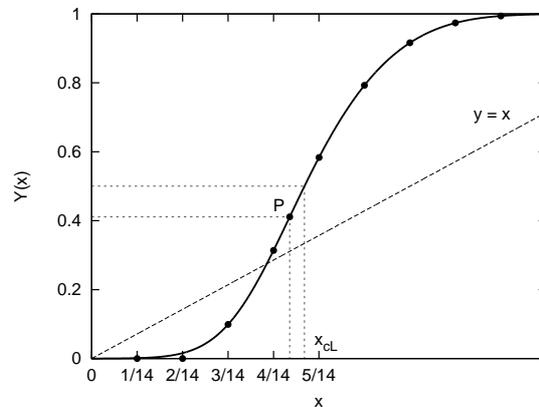


Рис. 11. Поведение условной вероятности протекания $Y(x, N)$ элементарной ГЦК решётки. Точка P перегиба кривой $Y(x, N)$ с координатами $x = 0,31118201$ и $Y(0,31118201) = 0,41115986$ говорит о том, что $x_Y \neq Y(x_Y)$

Так как $x_c < x_1 = 3/14$, то полученное значение x_c находится за пределами нетривиальных значений x , или там где функция $Y(x, N) = 1/(1 + e^{-S(x_c, N)})$ по (1.1) ведёт себя как экстраполирующая функция, а значит, возможно, и неточно. Поэтому полученная оценка x_c нуждается в поправке (на рис. 12 мы обозначим первую оценку x_c как $x_1 = x_c = 0,19937567$). Для этого будем исходить из следующего. Полагаем, что между нетривиальной точкой $x = 3/14$ и ближайшей к ней тривиальной $x = 2/14$ (там, где $Y(x = 2/14) = 0$) существует точная кривая $Y_0(x, N)$, соединяющая (рис. 12) точки $(2/14; 0)$ и $(3/14; 9/91)$. Для этой кривой должно выполняться вышесказанное $Y_0(x_c, N) = F = 1/14$. Это означает, что вторая оценка x_c будет

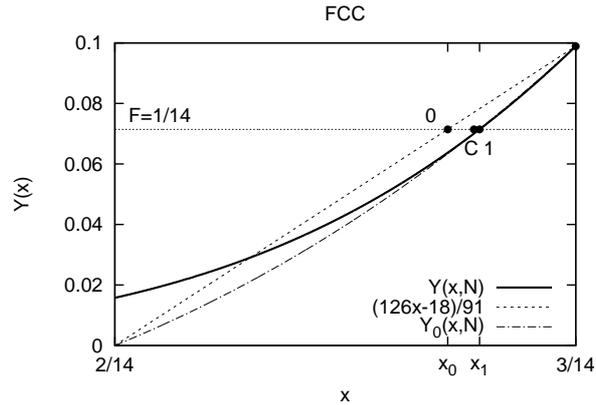


Рис. 12. Экстраполирующее поведение функции $Y(x, N) = 1/(1 + e^{-S(x, N)})$ за пределами нетривиальных значений x (сплошная кривая). Первая оценка порога протекания $x_1 = x_c = 0,19937567$ — координата точки пересечения горизонтальной прямой $F = 1/14$ с экстраполирующей функцией $Y(x, N)$. Нулевая оценка порога протекания $x_0 = x_c = 0,19(4)$ — координата точки пересечения горизонтали $F = 1/14$ с прямой $Y_{00}(x, N) = (126x - 18)/2$ (штриховая), соединяющей точки $(2/14; 0)$ и $(3/14; 9/91)$. Вторая оценка x_c — координата точки пересечения горизонтали $F = 1/14$ с предполагаемой точной кривой $Y_0(x, N)$ (штрих-пунктирная) в точке C

находиться на горизонтали $F = 1/14$ между первой оценкой x_1 и, названной нами, нулевой оценкой x_0 , о которой будет сказано чуть ниже:

$$x_c = x_1 - p_1(x_1 - x_0), \quad (5.2)$$

где p_1 — вес первой оценки x_1 , а $x_0 = 0,19(4)$ — есть та самая нулевая оценка порога протекания x_c , получаемая в нулевом приближении при решении уравнения

$$Y_{00}(x_0, N) = F = (126x_0 - 18)/2 = 1/14, \quad (5.3)$$

где $Y_{00}(x, N) = (126x - 18)/2$ — уравнение *прямой*, соединяющей точки $(2/14; 0)$ и $(3/14; 9/91)$ и в нулевом приближении описывающая функцию $Y(x, N)$ в экстраполируемой области. Рассчитаем p_1 по геометрической вероятности попадания второй оценки x_c в интервал между x_0 и x_1 как

$$p_2 = (x_1 - x_0)/x_1. \quad (5.4)$$

Точка 1 имеет *большой вес*, так как она принадлежит *кривой*, построенной при помощи 8 нетривиальных точек, а точка 0 принадлежит *прямой* построенной при помощи лишь одной нетривиальной точки. Порог протекания ГЦК решётки при второй оценке (или после поправки) оценивается теперь по (5.2) как $x_c = x_c(fcc) = 0,19925370$.

§ 6. Оценка порога протекания шестиугольной решётки в задаче узлов

Координационное число для шестиугольной решётки $Z = 3$. В структуре «медовых сот» (рис. 13) можно обнаружить элементарную ячейку с $Z = 3$ связями — по рис. 13 это узлы, пронумерованные как 1, 2, 3 и 4. Узлы 2, 3 и 4 образуют кирпичик Ходжа. Для элементарной ячейки шестиугольной решётки ($N = 4$, $Z = 3$) в задаче узлов, как видно по рис. 4б, значение $N_{max} = N_{min} = 3$. Ширина кривой по (2.20) будет $\Delta x_N = 0$, а критерий $\epsilon = K \Delta x_N = 0 < 1$, тогда функция $Y(x)$ при любом наклоне K будет линейной. Это означает, что вид (3.9) согласно (2.3) будет при $C = 1/2$ и $D = x_{cL}$:

$$1/2 + K(x_c - x_{cL}) = F. \quad (6.1)$$

Легко рассчитать всего одну нетривиальную точку: $Y(x_{cL}) = 1/2$ при $x_{cL} = 3/4$ (на рис. 14 обозначим её как P). Из узла кирпичика Ходжа исходит $q = 2$ связи (не более), поэтому возможные значения $K = k_0 = k = (Z - 1)/(Z - 2) = 2$ соответствуют собственному наклону k прямой $Y(x)$ по рис. 1. Как видим, K выражается через Z , так как число максимальных связей Q , выходящих из узла по рис. 4б, равно координационному числу Z . Единственная нетривиальная точка $P(3/4; 1/2)$ при наклоне $k = 2$ лежит на прямой $Y(x) = 2x - 1$ и не может считаться точкой излома, поэтому в уравнении критической точки правая часть $F \neq x_c/(1 + x_c)$. Тогда при $K = 2$ остается вариант $F = 1/Z = 1/3$ и первое возможное значение порога протекания шестиугольной решётки по (6.1) оценивается как $x_{c1} = 2/3$.

Найдем второе возможное значение x_c из следующих соображений. Критерий $\epsilon = 0$ говорит о том, что функция $Y(x)$ при любом наклоне k будет линейной. Тогда при $x < x_P$ (ниже P) наклон $k = 2$ прямой $Y(x) = 2x - 1$ можно изменить так, чтобы точка P стала точкой излома, при этом необходимо сохранить возможное значение $K = (Z - 1)/(Z - 2)$, чтобы не противоречить параметризации (3.5), из которой следует $x = 1/(Z - 1)$. В принятой нами модели решётки Бёте $x_c = 1/(Z - 1)$, тогда возникает ещё одно возможное значение K :

$$K = 1/(1 - x_c). \quad (6.2)$$

Поскольку точка P теперь является точкой излома, то $F = x_c/(1 + x_c)$ и (3.9) можно записать в виде

$$1/2 + \frac{1}{1 - x_c}(x_c - x_{cL}) = x_c/(1 + x_c). \quad (6.3)$$

Квадратное уравнение (6.3) имеет единственный корень в интервале $0 < x < 1$ равный $x_c = (3 + \sqrt{33})/12 = 0,72871356$ (с принятой в статье точностью) при условии существования вещественного корня

$$x_{cL} \geq 0,46410162, \quad (6.4)$$

которое говорит о том, что для выше рассмотренных решёток (ПК и ГЦК) вид (6.3) неприменим, поскольку все они имеют значение $x_{cL} < 0,4$. Что касается ОЦК решётки, то мы выяснили (см. § 4), что пару $C = 1/2$ и $D = x_{cL}$ нельзя использовать в (3.9), так как число исходящих из узла кирпичика Ходжа $q > 3$.

Итак, мы получили возможные значения порога протекания для шестиугольной решётки $x_{c1} = 2/3$ и $x_{c2} = (3 + \sqrt{33})/12 = 0,72871356$. Вычисляя «популярные» средние — арифметическое среднее, геометрическое среднее и гармоническое среднее для x_{c1} и x_{c2} — получим соответственно: 0,69769011; 0,69700003; 0,69631062. Из них выберем геометрическое среднее в качестве оценки порога протекания шестиугольной решётки: $x_c = 0,69700003$, которое оказалось ближе всего к результату 0,697043(3) в [16].

§ 7. Обсуждение результатов

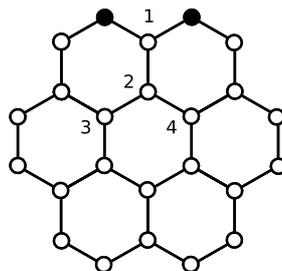


Рис. 13. Элементарная ячейка шестиугольной решётки с $Z = 3$ связями в структуре «медовых сот» — это узлы 1, 2, 3 и 4. Узлы 2, 3 и 4 образуют *кирпичик Ходжа*

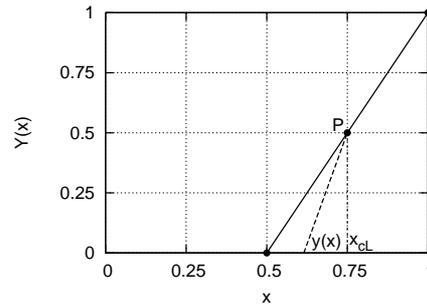


Рис. 14. Зависимость $Y(x) = 2x - 1$ для шестиугольной решётки с $Z = 3$ представляется в виде прямой (сплошная) без излома с одной нетривиальной точкой $P(1/2; 3/4)$. График $Y(x)$ при $x < x_P$ должен сменить собственный наклон — чтобы точка P стала точкой излома или прямая $Y(x)$ отображается теперь в прямую (штриховая) линию $y(x)$ с наклоном $K = 1/(1 - x_c)$ согласно связи $1/(1 - x_c) = (Z - 1)/(Z - 2)$

Для достижения цели данной статьи — оценки порога протекания x_c бесконечной решётки на основе информации о перколяционных свойствах элементарной ячейки — использовалась введённая в [1] функция условной вероятности протекания решётки $Y(x, L)$ по (1.1). Относительно неизвестной величины $x = x_c$ вид (1.1) приводится к полиномиальному уравнению (2.1), которое в общем случае не разрешается без каких-либо допущений (гипотез).

На основе *идеи* Ходжа из алгебраической геометрии было показано, что изучение множества решений полиномиального уравнения для большой решётки сводится к изучению решения уравнения для *кирпичика Ходжа*. Для решётки Бёте *кирпичиком Ходжа* оказался максимальный конечный кластер элементарной решётки.

Изучение перколяционных свойств *кирпичика Ходжа* на основе графиков поведения $Y(x)$ решётки Бёте позволило получить (названное нами) *уравнение критической точки* (3.9) для оценки x_c больших решёток. Таким образом, в модели *кирпичика Ходжа* решётки Бёте (или кратко в *модели решётки Бёте*) проводилась оценка порога протекания x_c бесконечной решётки на основе информации о перколяционных свойствах её элементарной ячейки.

Для получения этой информации, в частности коэффициентов C , K , D и F , входящих в *уравнение критической точки* (3.9), необходимо знать графическое поведение зависимости $Y(x, L)$, поэтому предложенный в статье метод, скорее можно назвать графическим, чем аналитическим. Преимущество этого метода в том, что для оценки x_c используется только одна решётка — элементарная ячейка с числом узлов N .

Отметим, что уравнение (3.9) относительно порога протекания x_c записывается для ПК решётки как

$$1/2 + A_L/4(x_c - x_{cL}) = x_c/(1 + x_c), \quad (7.1)$$

для ОЦК решётки в виде

$$x_y + (Z - 1)/(Z - 2)(x_c - x_y) = x_c/(1 + x_c), \quad (7.2)$$

для ГЦК решётки как

$$Y(x_c, N) = \frac{1}{1 + e^{-S(x_c, N)}} = 1/N, \quad (7.3)$$

и для шестиугольной решётки два уравнения в виде

$$1/2 + K(x_c - x_{cL}) = 1/Z \quad \text{и} \quad 1/2 + [1/(1 - x_c)](x_c - x_{cL}) = x_c/(1 + x_c). \quad (7.4)$$

Из (7.1)–(7.4) видно, что ни одно уравнение не повторяется — уравнения отличаются хотя бы одним коэффициентом C , K , D или F . По-видимому, в этом проявляется индивидуальность перколяционной геометрии каждой решётки.

Полученные в § 4–§ 6 оценки порогов протекания отличаются от полученных в компьютерном эксперименте: не более чем на 0,002% от $x_c = 0,2459615(10)$ в [15] для ОЦК, не более чем на 0,009% от $x_c = 0,1992365(10)$ в [15] для ГЦК и не более чем на 0,007% от $x_c = 0,697043(3)$ в [16] для шестиугольной решёток.

§ 8. Выводы

1. Вычисленный порог протекания $x_c = 0,40725616$ квадратной 1,2 решётки *методом двух решёток* в задаче узлов практически совпадает с известным значением 0,407355 в [17], полученным компьютерным моделированием.
2. На основе идеи *Ходжа* из алгебраической геометрии разработана *модель решётки Бёте* для оценки порога протекания бесконечной решётки по свойствам её элементарной ячейки.
3. Оценки порогов протекания в модели решётки Бёте $x_c = 0,24595716$ для ОЦК, $x_c = 0,19925370$ для ГЦК и $x_c = 0,69700003$ для шестиугольной решёток в задаче узлов практически совпадают с известными значениями, полученными компьютерным моделированием.

Авторы благодарны профессору Е. Л. Тонкову и профессору В. В. Васькину за поддержку, конструктивное обсуждение и критические замечания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Галлямов С.Р., Мельчуков С.А. Об одном методе расчёта порогов протекания квадратной и алмазной решёток в перколяционной задаче узлов // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2009. Вып. 4. С. 33–44.
2. 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.
3. Kadanoff L.P., Jotze W., Hamblen D., Hecht R., Lewis E.A.S, Palciauskas V.V., Rayl M., Swift J., Aspres D., Kane J. Static Phenomena Near Critical Points: Theory and Experiment // Rev. Mod. Phys. 1967. Vol. 39. № 2. P. 395–431
4. Wilson K.G. Renormalization group and critical phenomena // Phys. Rev. B. 1971. Vol. 4. № 9. P. 3174–3183.
5. Федер Е. Фракталы. М.: Мир, 1991.
6. Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. М.: Едиториал УРСС, 2002. С. 52–58.
7. Gould H., Tobochnik J. An introduction to computer simulation methods application to physical systems. Addison–Wesley Publication Company: Reading, 1988. (Русский перевод: Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике: в 2 ч. Ч. 2. М.: Мир, 1990. 400 с.)
8. Ziff R.M., Sapoval B. The efficient determination of the percolation threshold by a frontier generating walk in a gradient // J. Phys. A: Math. Gen. 1986. Vol. 19. P. L1169–L1172.
9. Hodge W.V.D. The theory and applications of harmonic integrals. Cambridge, 1952.
10. Shioda T. What is known about the Hodge conjecture? // Advanced studies in Pure Math. 1983. Vol. 1. P. 55–68.
11. Steenbrink J.H.M. Some remarks about the Hodge conjecture // Lect. Notes Math. 1987. Vol. 1246. P. 165–175.
12. Краснов В.А. Алгебраические циклы на вещественном алгебраическом GM -многообразии и их приложения // Изв. РАН. Сер. матем. 1993. Т. 57. № 4. С. 153–173.

13. Галлямов С.Р., Мельчуков С.А. О критических индексах в трёхмерной перколяции в задачах узлов и твёрдых сфер // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2010. Вып. 2. С. 76–67.
14. Stauffer D., Aharony A. Introduction to percolation theory. London: Tailor & Francis, 1992.
15. 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.
16. Suding P.N., Ziff R.M. Site percolation thresholds and universal formulas for the Archimedean lattices // Phys. Rev. E. 1999. Vol. 60. № 1. P. 275–283 .
17. Grassberger P. On the spreading of two-dimensional percolation // J. Phys. 1985. Vol. A18. P. L215–L219.

Поступила в редакцию 17.09.11

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

Hodge's idea in percolation: percolation threshold estimation by the unit cell

We consider a percolation problem of knots. The percolation threshold of triangular lattice $x_c = 1/2$ was confirmed by the two lattices method and percolation threshold of quadratic 1,2 lattice $x_c = 0.40725616$ was obtained.

We propose the method based on Hodge's idea from algebraic geometry to estimate the percolation threshold x_c of the infinite lattice by percolation properties of its unit sell. The model of unit cell of Bete lattice was studied and in the following it was applied for estimation of percolation thresholds of body-centered and face-centered cubic lattices in the three-dimensional case and of hexagonal lattice in the planar case. As a result of estimation the values of $x_c(bcc) = 0.24595716$ for BCC, $x_c(fcc) = 0.19925370$ for FCC and $x_c = 0.69700003$ for hexagonal lattices were obtained.

Keywords: percolation, percolation threshold, unit cell, Hodge's idea, site problem.

Mathematical Subject Classifications: 60K35, 82B43

Галлямов Сергей Рафаэлович, старший научный сотрудник, лаборатория нелинейного анализа, Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.

E-mail: galses@uni.udm.ru

Мельчуков Сергей Анатольевич, старший преподаватель, кафедра высокопроизводительных вычислений и параллельного программирования, Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.

E-mail: sam@parc.uni.udm.ru

Gallyamov Sergei Rafaelovich, Senior Researcher, Udmurt State University, ul. Universitetskaya, 1, Izhevsk, 426034, Russia

Mel'chukov Sergei Anatol'evich, Lecturer, Udmurt State University, ul. Universitetskaya, 1, Izhevsk, 426034, Russia