

Анализ структуры перколяционного кластера

© П.В. Москалев

Воронежский государственный аграрный университет,
394087 Воронеж, Россия
e-mail: moskaleff@mail.ru

(Поступило в Редакцию 1 октября 2007 г.)

Рассмотрена реализация алгоритмов построения и анализа структуры кластеров для квадратной четырехсвязной решетки в задаче некоррелированной перколяции. С помощью модификации алгоритма повторной маркировки Хошена–Копельмана и принципа оптимальности Беллмана производится выделение подмножеств полной, внешней оболочки и скелета перколяционного кластера. На основе метода статистических испытаний продемонстрирован критический характер перколяционного процесса и проанализировано поведение массовой размерности для различных подмножеств перколяционного кластера.

PACS: 61.43.Bn, 64.60.Ak

Введение

Первые задачи теории перколяции были сформулированы в работах П. Флори (P. Flory) и У. Стокмайера (W. Stockmayer), исследовавших динамику образования гелей при полимеризации высокомолекулярных соединений [1,2]. Однако формирование собственного математического аппарата и терминологии в исследованиях процессов перколяции принято связывать с постановкой в 1957 г. С. Бродбентом (S. Broadbent) и Дж. Хаммерсли (J. Hammersley) задачи о начальной фазе течения некоторой жидкости через случайно-неоднородную пористую среду [3]. Формируемая в результате такого процесса совокупность узлов образует кластер, размеры и структура которого тесно связаны с характеристиками пористой среды.

Одним из важнейших понятий перколяционного процесса является понятие „вероятности протекания“, определяемой как вероятность того, что жидкость, инжектированная в произвольной точке области, достигнет точки, бесконечно удаленной от данной. Очевидно, что при вероятности протекания ниже критической процесс распространения жидкости будет ограничен некоторой конечной областью пористой среды. В наиболее простых случаях вероятность протекания может быть определена на основе априорных соображений, но в более общем случае ее определение для случайно-неоднородной пористой среды базируется на методе статистических испытаний Монте-Карло, эффективность которого напрямую зависит от характеристик алгоритмов, применяемых для построения и анализа структуры перколяционного кластера.

В настоящей работе рассматривается практическая реализация указанных алгоритмов в системе компьютерной математики и технических вычислений MATLAB® (The MathWorks, Inc.), обладающей развитыми средствами для работы с многомерными массивами данных, что делает ее весьма привлекательным инструментом для решения поставленной задачи.

1. Построение перколяционного кластера

Рассмотрим процесс построения перколяционного кластера из произвольной точки квадратной четырехсвязной решетки в рамках модели некоррелированной перколяции. Под перколяционным кластером здесь и далее будем понимать подмножество некоторого регулярного множества узлов, непрерывным образом связанных с начальным узлом (или некоторой их совокупностью). Среди множества алгоритмов, подходящих для решения данной задачи, наибольшей эффективностью, по мнению ряда авторов, отличается алгоритм, предложенный в различные годы Дж. Хаммерсли (J. Hammersley) [4], П. Лисом (P. Leath) [5] и З. Александровиц (Z. Alexandrowicz) [6].

Основная идея алгоритма состоит в следующем. Среди свободных достижимых узлов формируется некоторое начальное множество. Для каждого из начальных узлов выделяется множество соседних (периметр множества) и те узлы, которые являются достижимыми и не принадлежащими к какому-либо другому множеству, присоединяются к начальному. Затем выполняется построение периметра для нового начального множества, и процесс повторяется до исчерпания свободных узлов или достижения какого-либо узла из заданного множества.

Реализация данного алгоритма для построения перколяционного кластера из произвольной точки в окрестности центра квадратной четырехсвязной решетки приведена в листинге 1. В этой реализации используется идея повторной числовой маркировки узлов перколяционной решетки в процессе формирования кластера, в несколько другом контексте предложенная Дж. Хошеном (J. Hoshen) и Р. Копельманом (R. Kopelman) [7]. Функция "cluster2" использует в качестве входных данных размер решетки n и относительную долю открытых узлов $p = \text{const}$, построенную для всей решетки. В качестве выходных данных функция генерирует двумерную

Листинг 1. Построение перколяционного кластера для квадратной четырехсвязной решетки

```

1 function d = cluster2(n,p,a,ndat)
2 rand('state',ndat);           % Установка состояния п.с.п.
3 d = zeros(n,n,'uint8');       % Структурная матрица кластера
4 d(rand(n,n) < p) = 1;        % Пометка открытых узлов
5 d = expansion2(d,a,2);        % Расширение стартового множества

```

Листинг 2. Расширение исходного множества по открытым узлам квадратной четырехсвязной решетки

```

1 function d = expansion2(d,a,m)
2 s = size(a,1); d(a) = m;      % Кол-во и пометка стартовых узлов
3 n = size(d,1); nn = n*n;     % Размеры и кол-во узлов в области
4 while s > 0
5     j = 0; b = zeros(4*s,1);   % Кол-во и индексы новых узлов
6     for i = 1: s
7         k = mod(a(i),n);      % Вспомогательный индекс
8         c = a(i) - n;         % Индекс соседнего узла j-1
9                                 % Если узел находится внутри области и он открыт, то...
10        if c >= 1 & d(c) == 1; mark; end
11        c = a(i) + n;         % Индекс соседнего узла j+1
12        if c <= nn & d(c) == 1; mark; end; % См. стр. 9
13        c = a(i) - 1;         % Индекс соседнего узла i-1
14        if k ~= 1 & d(c) == 1; mark; end % См. стр. 9
15        c = a(i) + 1;         % Индекс соседнего узла i+1
16        if k ~= 0 & d(c) == 1; mark; end % См. стр. 9
17    end
18    a = b(1:j); s = j;        % Индексы добавленных узлов
19 end
20 function mark
21 d(c) = m;                    % Пометка нового узла
22 j = j + 1; b(j) = c;        % Индекс нового узла
23 end
24 end

```

матрицу заданного размера $(d_{i,j})_n$, которая содержит описание структуры перколяционного кластера

Ключевую роль в данной реализации играет функция "expansion2" (см. листинг 2). Эта функция выполняет итерационное „расширение“ стартового множества a_m , следуя по соседним открытым узлам перколяционной решетки. Заметим, что для получения более компактного кода в этой и последующих функциях используется реализованная в системе MATLAB возможность одномерной „линейной индексации“ для элементов многомерных массивов [8].

Основное отличие предложенного варианта от классических реализаций алгоритма Хошена–Копельмана состоит в использовании трех меток: "0" соответствует закрытому узлу; "1" — открытому узлу, не принадлежащему данному перколяционному кластеру; "2" — открытому узлу, принадлежащему данному кластеру. Это позволяет избавиться от дополнительной операции сравнения меток и повторной маркировки узлов при объединении частей единого кластера. Причины указанной особенности классических вариаций алгоритма Хошена–Копельмана, на взгляд автора, заключаются в их ориентировании на параллельное построение всех возможных кластеров в области перколяции. Однако

во многих прикладных задачах конфигурация узлов стартового множества определяется дополнительными соображениями и может быть известна еще „до опыта“. В этом случае наличие множественных меток вызовет затраты дополнительных временных ресурсов для их анализа и объединения.

Примеры построения перколяционных кластеров на четырехсвязной решетке размером $n = 50$ при различной доле открытых узлов p показаны на рис. 1. Для более наглядного сопоставления исходная последовательность псевдослучайных чисел, формирующая начальное распределение в структурной матрице $d_{i,j}$, была зафиксирована. Принадлежащие кластеру узлы обозначены черным цветом, не принадлежащие кластеру открытые узлы — светло-серым цветом, а закрытые узлы — белым цветом. Начальный узел перколяционного кластера обозначен символом "x" и расположен в точке с координатами (35, 22).

Одной из наиболее универсальных характеристик перколяционного кластера является его „массовая фрактальная размерность“. Для перколяционного кластера на квадратной четырехсвязной решетке массовая фрактальная размерность определяется как коэффициент, пропорциональный отношению логарифма числа узлов

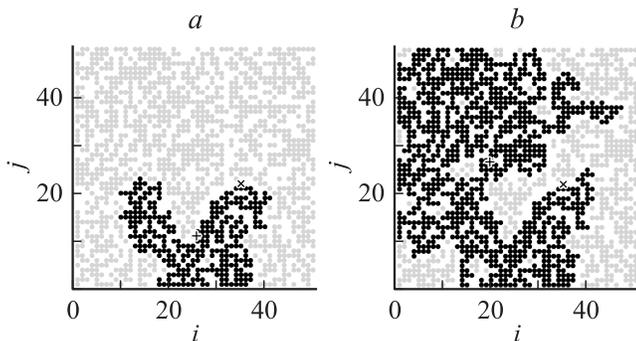


Рис. 1. Перколяционные кластеры на квадратной четырехсвязной решетке размером $n = 50$: a — при доле открытых узлов $p = 0.58$; b — при $p = 0.61$.

перколяционного кластера N , покрываемых квадратами заданного размера, к логарифму этого размера r :

$$N(r) \propto r^D \Rightarrow D \propto \frac{\ln N(r)}{\ln r}.$$

Центром симметрии для всех элементов покрывающего множества является „центр масс“ перколяционного кластера M_1 , координаты которого определяются как выборочные средние значения для координат узлов перколяционного кластера. Для кластеров, показанных на рис. 1, центры масс обозначены символом „+“ и расположены в точках с координатами $M_{1a}(25.75, 11.11)$ и $M_{1b}(19.74, 26.68)$.

На практике обычно используется оценка массовой размерности, вычисляемая с помощью метода наименьших квадратов. Для кластеров, показанных на рис. 1, оценки массовой размерности соответственно равны $D_{1a} = 1.558$ и $D_{1b} = 1.639$.

Сопоставление кластеров, показанных на рис. 1, демонстрирует критический характер перколяционного процесса, проявляющийся в резком увеличении размеров кластера при превышении долей открытых узлов p некоторого „порогового“ значения p_∞ . Так, для кластеров, показанных на рис. 1, при изменении доли открытых узлов в $p_b/p_a = 1.052$ раза среднее расстояние от центра масс до узлов перколяционного кластера изменилось в $\langle R \rangle_b/\langle R \rangle_a = 1.744$ раза.

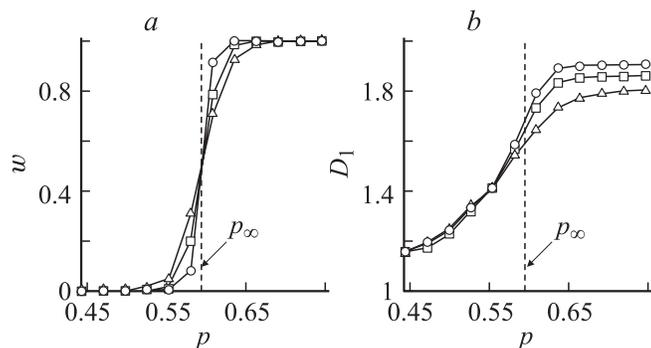


Рис. 2. Реализация зависимостей $w(p)$ и $D_1(p)$ для решеток различного размера $n \in \{50, 100, 200\}$.

При оценке по методу статистических испытаний вероятность возникновения кластера w , соединяющего левую и правую стороны квадратной четырехсвязной решетки, будет зависеть от размера решетки n и относительной доли открытых узлов p .

На рис. 2, a приведена оценка вероятности протекания w как функции относительной доли открытых узлов p и размера решетки n . Символами „ \triangle “ — показана зависимость для решетки размером $n = 50$, „ \square “ — для $n = 100$, а „ \circ “ — для $n = 200$. Оценка каждого значения $w(p, n)$ определялась как относительная частота для выборки из 500 псевдослучайных реализаций.

Как видно из рис. 2, a интервал по оси абсцисс, на котором функция $w(p)$ значительно отличается от нуля и единицы, сужается по мере роста n , стремясь к критическому значению $p_\infty = 0.5927\dots$ при $n \rightarrow \infty$, которое показано на рис. 2 пунктиром [9].

На рис. 2, b приведена зависимость оценки массовой фрактальной размерности перколяционных кластеров от относительной доли открытых узлов $D_1(p)$ при различных размерах решетки. Все основные обозначения идентичны использованным на рис. 2, a . Оценка каждого значения $D_1(p, n)$ определяется как среднее для выборки из 500 псевдослучайных реализаций. При этом ошибка среднего значения достигает максимума в окрестности критического значения $p = p_\infty$ и не превышает величины $\varepsilon(D_1) \leq 0.014$.

Как видно из рис. 2, b , графики зависимостей $D_1(p)$ при фиксированных значениях n имеют монотонно возрастающий характер с точкой перегиба в окрестности критического значения $p = p_\infty$ и наибольшим значением при $n \rightarrow 1-0$. Причем наибольшее значение массовой фрактальной размерности $\max(D_1)$ для реализаций перколяционного кластера зависит от размера решетки n и ограничено сверху размерностью области перколяции; в нашем случае это означает, что $\max(D_1) \rightarrow 2$ при $n \rightarrow \infty$.

2. Структура перколяционного кластера

Благодаря статистическому самоподобию исходного распределения случайной величины перколяционный кластер является ярким примером стохастически самоаффинного фрактального множества, в котором можно выделить ряд подмножеств.

По числу связей множество узлов перколяционного кластера можно разделить на подмножество внутренних узлов, имеющих по четыре связи, и подмножество узлов периметра или „оболочки“ кластера, имеющих по три и менее связи с кластером, благодаря соседству с закрытыми узлами или внешней границей решетки. Подмножество узлов оболочки, в свою очередь, подразделяется на подмножества узлов внешней и внутренней оболочек кластера. Подмножество узлов внутренней оболочки

отличается от внешней тем, что соседствует с закрытыми узлами, образующими изолированные кластеры, не связанные с внешней границей решетки.

Распространив идею анализа числа связей с отдельных узлов на их подмножества, можно прийти к разделению перколяционного кластера на „остов“ и „ветви“. Для отделения ветви от остальной части перколяционного кластера достаточно удалить только один узел. Та часть перколяционного кластера, которая остается после удаления всех ветвей, и называется его остовом. Для выделения ветвей перколяционного кластера П. Грассбергер (P. Grassberger) в 1992 г. [10] предложил алгоритм на основе широко известного „правила левой руки“. Здесь имеется в виду способ, в соответствии с которым для отыскания выхода из лабиринта необходимо двигаться по нему, непрерывно держа левую руку на стене. Причем, если какая-либо часть перколяционного кластера является ветвью, то связывающий ее с остальным кластером узел будет пройден дважды в противоположных направлениях.

Понятия остова и ветвей перколяционного кластера играют важную роль в моделировании процесса „инвазивной“, или вытесняющей перколяции, рассматривающей процесс вытеснения из пористой среды одной из двух несмешивающихся жидкостей. Очевидно, что при отсутствии сжимаемости и постоянных характеристиках пористой среды вытесняющая жидкость будет распространяться только по остову, не проникая в ветви перколяционного кластера. Однако учет сжимаемости или зависимости проницаемости пористой среды от давления делает подразделение структуры перколяционного кластера на остов и ветви малоэффективным, так как процесс выделения ветвей достаточно трудоемок, а их численность и характеристики будут сильно зависеть от динамики моделируемого процесса.

С этой точки зрения более продуктивным представляется анализ структуры перколяционного кластера на основе идеи минимизации перемещения по кластеру, или кратчайшего пути. Объединение кратчайших путей, соединяющих выделенный узел со всеми остальными узлами перколяционного кластера, формирует полный „скелет“ этого кластера. Фиксация длины кратчайших путей позволяет из полного множества выделить подмножества частичных скелетов заданного радиуса, а анализ частоты использования узлов кластера во множестве кратчайших путей позволит выделить ту его часть, из которой вытеснение жидкости будет происходить в первую очередь.

2.1. Оболочка перколяционного кластера

Задача выделения полной оболочки перколяционного кластера не вызывает особой сложности и базируется на ее определении. В рамках рассмотренного алгоритма для выполнения этой задачи достаточно на последнем этапе выделить индексы всех „2“, соседствующих с „0“

или лежащих на границах области, и полученные элементы пометить „3“.

Выделение внешней оболочки перколяционного кластера несколько сложнее и предусматривает:

- построение кластера, обозначаемого меткой „2“ для заданного стартового множества;
- построение полной оболочки кластера, обозначаемой меткой „3“;
- обозначение всех узлов, не принадлежащих кластеру, меткой „1“;
- начиная с каждой из „1“ на внешних границах выполняется построение кластера, обозначаемого меткой „0“;
- все узлы полной оболочки, соседствующие с „0“, обозначаются меткой „4“.

В результате последовательное объединение узлов, обозначенных метками „4“, „3“ и „2“, образует соответственно внешнюю, полную оболочку и внутренность перколяционного кластера. Реализация данного алгоритма представлена в листинге 3.

Заметим, что вложенная функция „ptrr“ служит для „стирания“ всех внутренних узлов в переданной ей копии структурной матрицы $d_{i,j}$, не затрагивая узлов внешнего периметра. В результате выражение „find(ptrr(d) == 1)“ возвращает линейные индексы множества открытых узлов по внешнему периметру области перколяции.

Результаты анализа структуры оболочки кластеров, ранее показанных на рис. 1, приведены на рис. 3. Узлы внешней оболочки перколяционного кластера обозначены черным цветом, объединение черных узлов с темно-серыми соответствует его полной оболочке. Внутренние узлы перколяционного кластера обозначены светло-серым цветом, а не принадлежащие кластеру узлы — белым цветом.

Легко заметить, что центры масс внешней M_2 и полной M_3 оболочек, обозначение на рис. 3 символами „x“ и „+“ соответственно, испытывают малые вариации относительно центров масс полных кластеров: a — $M_{2a}(25.82, 11.62)$ и $M_{3a}(25.77, 11.16)$; b — $M_{2b}(22.41, 25.29)$ и $M_{3b}(19.72, 26.38)$.

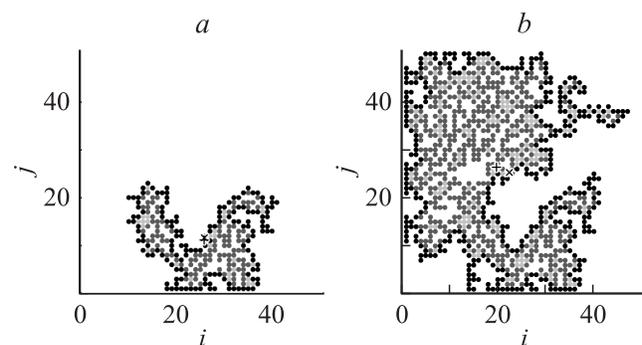


Рис. 3. Оболочки перколяционных кластеров на квадратной четырехсвязной решетке размером $n = 50$: a — при доле открытых узлов $p = 0.58$; b — при $p = 0.61$.

Листинг 3. Выделение оболочки перколяционного кластера для квадратной четырехсвязной решетки

```

1 function d = hull2(n,p,a,ndat)
2 d = cluster2(n,p,a,ndat)      % Построение кластера
3 nn = n*n; n1 = nn - n;      % Вспомогательные индексы
4 mark(2,0,3);                 % Выделение полной оболочки
5 d(d == 0) = 1;              % Открытие закрытых узлов
6 a = find(prtr(d) == 1);      % Поиск стартовых узлов
7 d(a) = 0;                    % Пометка стартовых узлов
8 d = expansion2(d,a,0);       % Расширение стартового множества
9 mark(3,0,4);                 % Выделение внешней оболочки
10 function da = prtr(da)      % Вложенная функция prtr
11 da(2:n-1,2:n-1) = 0;       % Стирание внутренних меток
12 end
13 function mark(la,lb,lc)     % Вложенная функция mark
14 i = find(d == la);         % Поиск узлов с меткой "la"
15 for j = 1: length(i)       % Для найденных узлов:
16     k = mod(i(j),n);       % Вспомогательный индекс
17                             % Если узел внутри области и есть метка "lb"
18                             % среди соседей, или узел на границе, то...
19     if (i(j)+n <= nn & d(i(j)+n) == lb) | ...
20         (i(j)-n >= 1 & d(i(j)-n) == lb) | ...
21         (k ~= 0 & d(i(j)+1) == lb) | ...
22         (k ~= 1 & d(i(j)-1) == lb) | ...
23         (i(j) <= n) | (i(j) > n1) | (k <= 1)
24         d(i(j)) = lc;      % Замена метки на "lc"
25     end
26 end
27 end
28 end

```

Как показывают численные эксперименты, для оценок массовой фрактальной размерности внешней D_2 и полной D_3 оболочек перколяционных кластеров выполняется неравенство $D_2 < D_3$, действительно: a — $D_{2a} = 1.571$ и $D_{3a} = 1.685$; b — $D_{2b} = 1.623$ и $D_{3b} = 1.727$. При этом общий характер зависимости массовой фрактальной размерности для оболочек перколяционных кластеров от относительной доли открытых узлов $D_{2,3}(p)$ при различных размерах решетки n аналогичен приведенному на рис. 2, b .

2.2. Скелет перколяционного кластера

Для анализа скелета перколяционного кластера воспользуемся идеей, на основе которой Р. Беллман (R. Bellman) построил метод динамического программирования [11]. Применительно к поставленной задаче данная идея, называемая также принципом оптимальности, может быть сформулирована так: „часть кратчайшего пути от любой его точки до начала сама является кратчайшим путем, заканчивающимся в данной точке“. При перколяции на симметричной ортогональной решетке номер текущей итерации оказывается равным кратчайшему расстоянию от всех узлов текущего периметра до начального узла.

Использование этих соображений в задаче о построении перколяционного кластера позволяет выделить

структуру его скелета, если на каждой итерации сохранить:

1) расстояние от каждого достижимого узла текущего периметра кластера до его начала;

2) ссылку на предыдущий узел кластера, для которого данный узел периметра является достижимым.

На следующем этапе для каждого из узлов перколяционного кластера восстанавливается его кратчайший путь, а в структурной матрице $d_{i,j}$ накапливается информация о частоте использования узлов кластера в множестве всех возможных кратчайших путей. Реализация указанного алгоритма представлена в листинге 4.

Функция "expansion2s" практически полностью повторяет функцию "expansion2", показанную в листинге 2. Отличие состоит в использовании структурной матрицы скелета $t_{i,j,k}$ в качестве входной и выходной переменной и в реализации вложенной функции "mark", которая показана в листинге 5.

В приведенных листингах размерность матрицы $t_{i,j,k}$ равна $n \times n \times 2$. В каждой ячейке первого слоя матрицы $t_{i,j,1}$ сохраняется информация о линейном индексе предыдущего узла по кратчайшему пути к старту, а в каждой ячейке второго слоя $t_{i,j,2}$ — информация о частоте использования данного узла перколяционного кластера в множестве кратчайших путей.

На рис. 4 представлены результаты анализа скелета перколяционных кластеров, ранее показанных на рис. 1.

Листинг 4. Выделение скелета перколяционного кластера для квадратной четырехсвязной решетки

```

1 function d = skeleton2(n,p,a,ndat)
2 rand('state',ndat);           % Установка состояния п.с.п.
3 d = zeros(n,n,'uint16');      % Структурная матрица кластера
4 t = zeros(n,n,2,'uint16');    % Структурная матрица скелета
5 d(rand(n,n) < p) = 1;        % Пометка открытых узлов
6 t = expansion2s(t,d,a,2);     % Расширение стартового множества
7 d(:) = 0; d(a) = 1;          % Очистка структурной матрицы
8 n2 = n*n+1: n*n*2;           % Вспомогательные индексы
9 for r = 1: max(max(t(n2)))    % Для радиусов от 1 до max:
10     i = find(t(n2) == r);    % Поиск узлов с радиусом r
11     d(i) = d(i) + 1;         % Увеличение частоты узлов
12     for j = 1: length(i)     % Для узлов с радиусом r:
13         k = t(i(j));        % Индекс следующего узла
14         for s = 1: r        % Для узлов по пути к старту:
15             d(k) = d(k)+1;  % Увеличение частоты узла
16             k = t(k);        % Индекс следующего узла
17         end
18     end
19 end

```

Листинг 5. Вложенная функция маркировки структурных матриц и сохранения координат новых узлов кластера

```

20 function mark                % Вложенная функция mark
21 d(c) = m;                     % Пометка нового узла
22 j = j + 1; b(j) = c;          % Индекс нового узла
23 t(c) = a(i);                 % Индекс старого узла
24 t(nn+c) = t(nn+a(i)) + 1;    % Расстояние до старта
25 end

```

Черный цвет на рис. 4 соответствует наибольшей частоте использования данного узла во множестве кратчайших путей, а белый цвет — наименьшей частоте. Различные оттенки серого линейно распределены по промежуточным частотам от наибольшей до наименьшей.

При нахождении массовой фрактальной размерности скелета перколяционного кластера необходимо учесть, что некоторые его узлы используются во множестве кратчайших путей чаще других. В этом случае координаты центра масс скелета перколяционного кластера

$(i_c; j_c)$ могут быть записаны в виде:

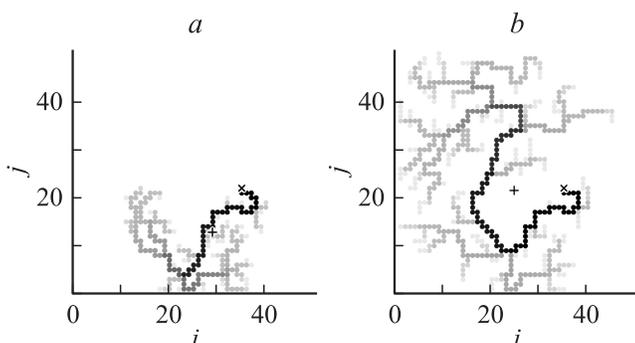
$$i_c = \frac{1}{n_c} \sum_{k=1}^m i_k n_k; \quad j_c = \frac{1}{n_c} \sum_{k=1}^m j_k n_k; \quad n_c = \sum_{k=1}^m n_k,$$

где $k = 1, 2, \dots, m$ — индексы узлов перколяционного кластера; i_k, j_k, n_k — координаты и частота использования k -го узла кластера во множестве кратчайших путей. Кроме того, вместо определения числа узлов перколяционного кластера N , покрываемых квадратами заданного размера r , будет вычисляться суммарная частота использования этих узлов во множестве кратчайших путей:

$$N(r) = \sum_{\substack{i_l \leq i_k \leq i_u \\ j_l \leq j_k \leq j_u}} n_k,$$

где индекс „ l “ соответствует координатам левого нижнего угла покрывающего квадрата $(i_c - \frac{r}{2}; j_c - \frac{r}{2})$, а индекс „ u “ — координатам его правого верхнего угла $(i_c + \frac{r}{2}; j_c + \frac{r}{2})$.

Сравнение рис. 1 и 4 показывает, что центры масс скелетов M_4 , обозначенные на рис. 4 символами „+“, смещены относительно центров масс перколяционных кластеров M_1 в направлении, близком к направлению на начальный узел: $a — M_{4a}(28.92, 12.82)$; $b — M_{4b}(24.63, 21.54)$.

**Рис. 4.** Скелеты перколяционных кластеров на квадратной четырехсвязной решетке размером $n = 50$: a — при доле открытых узлов $p = 0.58$; b — при $p = 0.61$.

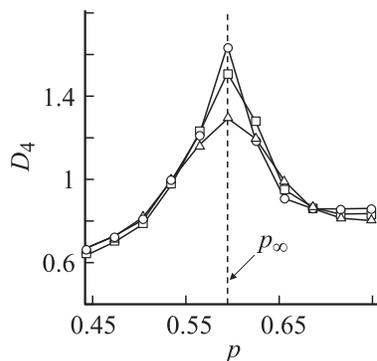


Рис. 5. Реализация зависимости $D_4(p)$ для решеток различного размера $n \in \{50, 100, 200\}$.

Оценки массовой фрактальной размерности для скелетов перколяционных кластеров D_4 , показанных на рис. 4, несколько ниже аналогичных оценок для самих кластеров $D_4 < D_1$: $D_{4a} = 1.097$ и $D_{4b} = 1.382$.

Зависимости массовой фрактальной размерности для скелетов перколяционных кластеров от относительной доли открытых узлов $D_4(p)$ при различных размерах решетки n имеют ярко выраженные максимумы при $p = p_\infty$ (рис. 5). Объем выборки и все основные обозначения идентичны применяемым на рис. 2, b. При этом ошибка среднего значения также достигает максимума в окрестности критического значения и не превышает $\varepsilon(D_4) \leq 0.029$.

Вне окрестности критического значения массовая фрактальная размерность скелета D_4 оказывается не только ниже размерности кластера D_1 , но и существенно ниже единицы. Сопоставление зависимостей $D_4(p)$ при различных размерах решетки n показывает, что амплитуда максимума возрастает с ростом размера решетки n , но сама „область влияния“ максимума сужается. В то же время приращение амплитуды максимума $D_4(p_\infty)$ при возрастании n со 100 до 200 почти вдвое меньше приращения амплитуды при возрастании n с 50 до 100. Этот факт вполне укладывается в рамки предположения о том, что амплитуда максимума $D_4(p_\infty)$ ограничена сверху при $n \rightarrow \infty$.

Заключение

Процедура построения перколяционного кластера представляет собой динамический процесс, целиком определяемый локальными свойствами перколяционной решетки. В то же время выделение структурных элементов построенного кластера оказывается невозможным без привлечения дополнительной информации, которая определяется уже глобальными свойствами этой решетки. С этой точки зрения использование принципа оптимальности Беллмана позволяет получить требуемую глобальную информацию при сравнительно малых дополнительных затратах. Весьма показательно,

как привлечение глобальной информации о частоте использования отдельных узлов перколяционного кластера позволяет выявить перестройку его скелета в области критических значений на рис. 5, практически незаметную на рис. 2, b.

Как видно из приведенных листингов, все обсуждаемые в настоящей работе функции достаточно компактны и „прозрачны“ для понимания, что издает немаловажную роль в поисковых исследованиях, когда основное внимание сосредоточено на изучаемом явлении, а не на особенностях реализации используемых алгоритмов. Помимо этого для симметричных ортогональных решеток все указанные функции допускают вполне тривиальное обобщение на случай трех и более пространственных измерений. Это позволяет говорить о достаточной эффективности предложенных реализаций в практике прикладного моделирования.

Список литературы

- [1] Flory P.J. // J. Am. Chem. Soc. 1941. Vol. 63. P. 3083–3100.
- [2] Stockmayer W.H. // J. Chem. Phys. 1943. Vol. 11. P. 45–55.
- [3] Broadbent S.R., Hammersley J.M. // I. Crystals and Mazes. Proc. Cambridge Philos. Soc. 1957. Vol. 53. P. 629–641.
- [4] Hammersley J.M., Handscomb D.C. Monte Carlo Methods. London: Methuen & Co., 1964. 107 p.
- [5] Leath P.L. // Phys. Rev. B. 1976. Vol. 14. P. 5046–5055.
- [6] Alexandrowicz Z. // Phys. Lett. A. 1980. Vol. 80. N 4. P. 284–286.
- [7] Hoshen J., Kopelman R. // Phys. Rev. B. 1976. Vol. 14. P. 3438–3445.
- [8] MATLAB: Programming. http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/pdf_doc/matlab/matlab_prog.pdf.
- [9] Федер Е. Фракталы / Пер. с англ. М.: Мир, 1991. 254 с. (Feder J. Fractals. NY: Plenum Press, 1988. 283 p.)
- [10] Grassberger P. // J. Phys. A. 1992. Vol. 25. P. 5475–5484.
- [11] Беллман Р. Динамическое программирование. М.: ИЛ, 1960. 400 с. (Bellman R.E. Dynamic Programming. Princeton: Princeton University Press, 1957. 366 p.)