УДК 519.27

ОЦЕНКА ПОРОГА ПЕРКОЛЯЦИИ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЁТКЕ

Е.С. Антонова

308007, г. Белгород, ул. Студенческая, 14,
Белгородский государственный университет, кафедра теоретической физики
antonova_e_s@mail.ru

Рассматривается задача дискретной теории перколяции для набора независимых случайных величин $c(r) \in \{0, 1\}$, $r \in \mathbf{Z}^2$ на квадратной решётке (так называемая "задача узлов"). Предлагается способ вычисления нижней оценки порога c^* перколяции на основе последовательности уточняющихся верхних оценок числа непересекающихся путей на Z^2. Получен первый нетривиальный член этой последовательности, равный 0,41.

Ключевые слова: квадратная решётка, порог перколяции, нижняя оценка, непересекающиеся пути, максимальное собственное число

Введение

Задачи теории перколяции являются, с одной стороны, простейшими задачами статистической теории фазовых переходов, так как, ввиду отсутствия параметра температуры, они по свой сути носят чисто геометрический характер, а, с другой стороны, уже на примерах этих задач проявляются все математические сложности теории фазовых переходов [1]. Простейшими перколяционными задачами, поддающимися в настоящее время математической обработке, являются задачи на решётках Z^d, d= 2, 3,... (физическую интерпретацию имеют случаи d = 2, 3), на которых определена специальная структура связности (т.н. периодический граф)[2]. В работе изучается задача просачивания случайного бернуллиевского поля $\{\tilde{c}(r)\}$ на Z^2 (задача узлов) со структурой связности типа квадратной решётки. Распределение вероятностей в этой задаче полностью задаётся значением одного параметра концентрации c, который является вероятностью заполнения каждого из узлов, $\Pr\{\tilde{c}(r)=1\}=c$. Фазовая диаграмма статистической перколяционной системы, в этом случае, одномерна и характеризуется числом c^* – порогом перколяции, который имеет смысл точки фазового перехода. Основной проблемой теории является вычисление этого порога. Известно, что точки фазового перехода, и вообще фазовые диаграммы, как правило, не вычисляются статистическими методами точно. Поэтому возникает вопрос о построении алгоритма их приближённого вычисления. Однако, и такая задача оказывается математически очень сложной. В этой ситуации приобретают ценность точные априорные оценки точек фазового перехода. В настоящей работе предлагается способ получения последовательности нижних оценок порога перколяции и вычисляется первый член этой последовательности, который превосходит известную оценку, представленную в [3].

Задача узлов на квадратной решётке

Определим на подмножествах из Z^2 структуру связности посредством отношения соседства между парами точек (узлов) x и y из Z^2. Пару x, y будем называть соседями, если $\mathbf{y} = \mathbf{x} \pm \mathbf{e}_i$, i = 1, 2, $\mathbf{e}_1 = \langle 1, 0\rangle$, $\mathbf{e}_2 = \langle 0, 1\rangle$. Путём длины n на Z^2 будем называть всякую последовательность $\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n\rangle$, у которой каждая пара узлов

$\{x_i, x_{i+1}\}$, $i = 0, 1, ..., n-1$ является парой соседей. Множество $Y \subset Z^2$ называется связным, если для каждой пары точек $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$ из этого множества найдётся путь, полностью расположенный в Y и такой, что $\mathbf{x} = \mathbf{u}$, $\mathbf{x}_n = \mathbf{v}$. Определённая таким образом структура связанности на Z^2 называется квадратной решёткой.

Пусть на квадратной решётке определено случайное однородное бернуллиевское поле $\{\check{c}(\boldsymbol{r});\ \boldsymbol{r} \in Z^2\}$. Это означает, что все случайные величины статистически независимы и вероятность $\Pr\{\check{c}(\boldsymbol{r}) = 1\} = c > 0$ заполнения узла $\boldsymbol{r} \in Z^2$ не зависит от $\boldsymbol{r}$. Каждая случайная реализация $\check{c}(\boldsymbol{r})$, $\boldsymbol{r} \in Z^2$ взаимно однозначно порождает множество $\check{Y} = \{\boldsymbol{r}: \check{c}(\boldsymbol{r}) = 1\}$. Таким образом случайному бернуллиевскому полю на Z^2 сопоставляется случайное множество $\{\check{Y} \subset Z^2\}$ с реализациями из Z^2.

Определение 1. *Поле $\{\check{c}(\boldsymbol{r});\ \boldsymbol{r} \in Z^2\}$ обладает перколяцией, если на реализациях $\check{Y}$, соответствующего ему случайного множества $\{\check{Y} \subset Z^2\}$ с ненулевой вероятностью $Q(c) > 0$ существует бесконечный несамопересекающийся путь с $x_0 = 0$.*

Существенно, что случайное бернуллиевское поле на Z^2 может обладать перколяцией только при значениях c, превосходящих некоторое число $0 < c^* < 1$, которое называется порогом перколяции. Порог перколяции определяется как $c^* = \inf\{c: Q(c) > 0\}$. Известна (см., например, [3]) априорная точная нижняя оценка порога c^*, $c^* > 1/3$ на квадратной решётке, а также приближённое числовое значение порога $c^* \approx 0,59$, полученное в результате компьютерного эксперимента. В настоящей работе мы получим более точную априорную нижнюю оценку для c^*.

Построение нижних оценок и задача перечисления непересекающихся путей

Заметим, что

$$Q(c) = \lim Q_n(c),\ n \longrightarrow \infty \tag{1}$$

где $Q_n(c)$ – вероятность существования несамопересекающегося пути длины n, который начинается в узле $\boldsymbol{r} = 0$. Пусть Γ_n – множество несамопересекающихся путей на Z^2 длины n, которые начинаются в нулевом узле. Уточним, что здесь и далее, под несамопересекающимся путём понимается такой, который не только не содержит повторения узлов в своём составе, то и не может быть спрямлён, т.е. на множестве узлов Y, входящих в его состав не может быть найден более короткий путь с той же конечной точкой.

Тогда,

$$Q_n(c) \le \sum_{\gamma \in \Gamma_n} Pr\{\gamma \subset Y\}. \tag{2}$$

Ввиду статистической независимости случайных величин $\check{c}(\boldsymbol{r})$, $\boldsymbol{r} \in Z^2$ и несамопересекаемости путей $\gamma \in \Gamma_n$, каждый член суммы (2) равен, $\Pr\{\gamma \in \Gamma_n\} = c^{n+1}$. Тогда $Q_n(c) \le c^{n+1}|\Gamma_n|$ и для равенства $Q_n(c) = 0$ необходимо, чтобы $c|\Gamma_n|^{1/n} < 1$, т.е.

$$C^* \ge \lim|\Gamma_n|^{-1/n},\ n \longrightarrow \infty \tag{3}$$

Тем самым, задача о нижней оценке порога перколяции сводится к оценке числа несамопересекающихся путей на Z^2, исходящих из фиксированной точки. Для приближённого вычисления с недостатком указанного предела воспользуемся следующей конструкцией. Обозначим $\Gamma^{(k)}_{nk}$ – множество путей длины nk, начинающихся в точке $\boldsymbol{r} = 0$, которые составлены из последовательного прохождения путей длины k, составляющих следующую последовательность:

$$\langle\langle 0, \mathbf{x}^{(1)}_1, \dots, \mathbf{x}^{(1)}_k\rangle, \langle \mathbf{x}^{(1)}_k, \mathbf{x}^{(2)}_{k+1}, \dots, \mathbf{x}^{(2)}_{2k}\rangle, \dots, \langle \mathbf{x}^{(n-1)}_{n(k-1)+1}, \mathbf{x}^{(n)}_{n(k-1)+1}, \dots, \mathbf{x}^{(n)}_{nk}\rangle\rangle, \tag{4}$$

причём все пути, входящие в эту последовательность, несамопересекающиеся. Кроме того, потребуем, чтобы каждая соседняя пара путей длины k в этой последовательности составляла несамопересекающийся путь длины $2k$.

Из данного определения следует, что $\Gamma^{(k)}_{nk} \supset \Gamma_{nk}$, и, следовательно, $|\Gamma^{(k)}_{nk}| \geq |\Gamma_{nk}|$. Перенумеруем все пути из множества Γ_k числами $\{1, ..., |\Gamma_k|\}$. Присвоим номера из этого же набора номеров каждому из путей, входящих в последовательность (4). А именно, каждому пути $\langle x^{(j)}_{jk}, x^{(j+1)}_{jk+1}, ..., x^{(j+1)}_{(j+1)k} \rangle$, сопоставим путь из Γ_k, получающийся параллельным переносом, при котором $x^{(j)}_{jk}$ переносится в точку 0. Тогда каждая последовательность (4) полностью описывается последовательностью номеров $\langle i_1, \ldots, i_n \rangle$, $i_s \in \{1, ..., |\Gamma_k|\}$, $s = 1, ..., n$. Условие непересекаемости двух следующих друг за другом путей с номерами s и $s+1$ в последовательности (4) выражается в том, чтобы номера i_s и i_{s+1} были допустимыми. В этом случае сопоставим такой паре число 1. В противном случае сопоставим паре i_s и i_{s+1} число 0, если соответствующие этим номерам пути

$$\langle x^{(s)}_{ks}, x^{(s+1)}_{ks+1}, ..., x^{(s+1)}_{k(s+1)} \rangle, \langle x^{(s+1)}_{k(s+1)}, x^{(s+2)}_{k(s+1)+1}, ..., x^{(s+2)}_{k(s+2)} \rangle,$$

пересекаются. Составим согласно введённым таким образом характеристикам пересечения двух соседних путей в последовательности (4) $\{0,1\}$-матрицу $\boldsymbol{S}$ размерности $|\Gamma_k|$ с матричными элементами $\boldsymbol{S}_{ij}$, равными 1 и 0 соответственно, в случаях пересечения и непересечения путей из $|\Gamma_k|$ с номерами i и j.

Покажем, что число $|\Gamma^{(k)}_{nk}|$ определяется максимальным собственным числом $\lambda_*(k)$ матрицы $\boldsymbol{S}$. Пусть $\Gamma^{(k)}_{nk}(i)$ – множество путей из Γ_k таких, которые заканчиваются путём длиной k, имеющим номер i в нумерации путей из Γ_k. Тогда

$$|\Gamma^{(k)}_{nk}| = \sum_{i=1}^{|\Gamma_k|} |\Gamma^{(k)}_{nk}(i)|. \tag{5}$$

С другой стороны,

$$|\Gamma_{n(k+1)}(i)| = \sum_{j=1}^{|\Gamma_k|} \boldsymbol{S}_{ij} |\Gamma^{(k)}_{nk}(j)| \tag{6}$$

и $|\Gamma_k(i)| = 1$. Отсюда следует, что

$$|\Gamma_{nk}| = \sum_{j=1, i=1}^{|\Gamma_k|} (\boldsymbol{S}^{n-1})_{ij}.$$

Обозначим $\boldsymbol{a}_m$ – собственные векторы матрицы $\boldsymbol{S}$ и $\lambda_m(k)$ – соответствующие собственные числа (с учётом кратности), m = 1, ..., $|\Gamma_k|$. Тогда, разлагая каждый из векторов

$\langle \delta_{ij}; i = 1, \ldots, |\Gamma_k| \rangle, j = 1, \ldots, |\Gamma_k|$, получим

$$\langle \delta_{ij}; i = 1, \ldots, |\Gamma_k| \rangle = \sum_{m=1}^{|\Gamma_k|} \alpha^{(j)}_m \boldsymbol{a}_m,$$

$$|\Gamma^{(k)}_{nk}| = \sum_{j=1, i=1}^{|\Gamma_k|} [\lambda_m(k)]^{(n-1)} \alpha^{(j)}_m (\boldsymbol{a}_m)_i.$$

Отсюда следует, что имеет место асимптотическое соотношение

$$|\Gamma^{(k)}_{nk}| \sim \text{const}\, \lambda_*^{n-1}(k),$$

что даёт нам формулу

$$\lim |\Gamma^{(k)}{}_{nk}|^{1/n} = \lambda_*(k), \quad . n \longrightarrow \infty \tag{7}$$

Так как $|\Gamma^{(k)}{}_{nk}| \geq |\Gamma_{nk}|$, то на основании (3) и (7) получаем нижнюю оценку для порога перколяции

$$C^* \geq \lambda_*^{-k}(k), \tag{8}$$

справедливую при любом значении $k \in N$.

Вычисление нижней оценки первого порядка

Заметим, что при $k = 1$ матрица S имеет порядок 4. Занумеровав её векторы единичного сдвига: $\mathbf{e}_1$ – 1, $\mathbf{e}_2$ – 2, ($-\mathbf{e}_1$) - 3, ($-\mathbf{e}_2$) – 4, получим следующую матрицу:

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

Её максимальное собственное значение совпадает с максимальным собственным значением 2×2 -матрицы $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$, которое определяется из уравнения $\lambda^2 - 2\lambda - 3 = 0$. Следовательно, оно равно 3. Тогда, на основании (8), имеем $\lambda_* \geq 1/3$. Эта соответствует оценке, представленной в [3].

Найдём теперь нижнюю оценку порога перколяции, следующую из формулы (8) при $k = 2$.

Составим матрицу S, соответствующую этому случаю, и подсчитаем максимальное собственное число $\lambda_*(2)$. При $k= 2$ имеется 12 элементов $\langle 0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle$ множества Γ_2, где пары $\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle$ принадлежат множеству пар $\{\langle \eta_i\mathbf{e}_i, \eta_j\mathbf{e}_j \rangle;\ \eta_i, \eta_j \in \{\pm1\};\ i, j = 1, 2\}$. Перенумеруем элементы этого множества следующим образом:

$\langle \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_1 \rangle$ - 1, $\langle \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2 \rangle$ - 2, $\langle \mathbf{e}_1, -\mathbf{e}_2 \rangle$ - 3, $\langle \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_2 \rangle$ - 4,
$\langle \mathbf{e}_2, -\mathbf{e}_1 \rangle$ - 5, $\langle \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 \rangle$ - 6, $\langle -\mathbf{e}_1, -\mathbf{e}_1 \rangle$ - 7, $\langle -\mathbf{e}_1, -\mathbf{e}_2 \rangle$ - 8,
$\langle -\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2 \rangle$ - 9, $\langle -\mathbf{e}_2, -\mathbf{e}_2 \rangle$ - 10,
$\langle -\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 \rangle$ - 11, $\langle -\mathbf{e}_2, -\mathbf{e}_1 \rangle$ - 12.

Перебором вариантов, устанавливаем для каких двух последовательных пар имеет место 1, т.е. они могут последовательными парами, составляющими путь $\gamma \in \Gamma^{(2)}{}_{2n}$, и для каких пар реализуется 0, т.е. они не могут следовать друг за другом в пути $\gamma \in \Gamma^{(2)}{}_{2n}$. В результате получаем, что соответствующая указанной нумерации 12×12 – матрица S имеет следующую блочную структуру

$$\begin{pmatrix} A & B & 0 & C \\ C & A & B & 0 \\ 0 & C & A & B \\ B & 0 & C & A \end{pmatrix}$$

из 3×3 – матриц А, В, С. Эти $\{0, 1\}$ – матрицы имеют следующий явный вид.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Нам необходимо вычислить максимальное собственное число матрицы S. Симметричная блочная структура матрицы S и неотрицательность её элементов позволяют утверждать, что максимальное собственное число матрицы S совпадает с максимальным собственным числом матрицы, имеющей вдвое меньший порядок, которая является суммой двух соседних блоков, так как уравнение для собственного вектора (a,b), где a и b – шестикомпонентные векторы, имеет вид

$$S\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

и оно эквивалентно двум уравнениям

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & A \end{pmatrix} a + \begin{pmatrix} 0 & C \\ B & 0 \end{pmatrix} b = \lambda a, \quad \begin{pmatrix} 0 & C \\ B & 0 \end{pmatrix} a + \begin{pmatrix} A & B \\ C & A \end{pmatrix} b = \lambda b,$$

из которых следует

$$\begin{pmatrix} A & B+C \\ B+C & A \end{pmatrix} (a+b) = \lambda(a+b)$$

уравнение для собственного вектора описанной выше матрицы. Эта матрица также обладает симметричной блочной структурой и неотрицательными элементами. Поэтому, рассуждая точно так же, приходим к выводу, что её максимальное собственное значение равно максимальному собственному значению матрицы, которая получается из неё суммированием двух соседних блоков, т.е. для определения этого собственного значения необходимо решить спектральное уравнение для 3×3 – матрицы (A+B+C),

$$\det(A+B+C-\lambda) = \det \begin{pmatrix} 3-\lambda & 2 & 2 \\ 2 & 2-\lambda & 1 \\ 2 & 1 & 2-\lambda \end{pmatrix} = 0.$$

Оно имеет следующий канонический вид:

$$\lambda^3 - 7\lambda^2 + 7\lambda - 1 = 0.$$

На основе этого уравнения, получаем $\lambda_* < 5{,}9$.

Следовательно, на основании (8) получаем следующую гарантированную нижнюю оценку для порога перколяции

$$C^* \geq 0{,}41.$$

Литература

1. Меньшиков М.В., Молчанов С.А., Сидоренко А.Ф. Теория перколяции и некоторые приложения // Итоги науки и техники: Сер. «Теор. вер., мат. стат. и теор. кибер.». – М.: ВИНИТИ, 1986. – Т. 24. – С.53-110.

2. Kesten H. Percolation Theory for Mathematicians. – Boston: Birkhauser, 1982. – 320 p. (Кестен Х. Теория просачивания для математиков. – М.: Мир, 1986. – 324 с.)

3. Малышев М.А., Меньшиков М.В., Петрова Е.В. Введение в теорию вероятностей. – М.: МГУ, 1997. – 120 с.

THE ESTIMATION OF THE SQUARE LATTICE PERCOLATION THRESHOLD

E.S. Antonova

308007, Belgorod, Studencheskaya str., 14, Belgorod State University

The discrete percolation problem for the collection of independent random values $c(r) \in \{0, 1\}$, $r \in \mathbf{Z}^2$ on the square lattice (vertex problem) is considered. The calculation method for the percolation threshold c^* low estimate is proposed. It is done on the basis of the sequence upper estimations of the path number. These paths are not intersected on Z^2. The first nontrivial term of this sequence is obtained. It is equal to 0,41.

Key words: square lattice, percolation threshold, low estimation, nonintersecting paths, maximal eigenvalue.