

Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет _____ Комп'ютерних наук _____
(повна назва)
Кафедра _____ Штучного інтелекту _____
(повна назва)
Рівень вищої освіти _____ другий (магістерський) _____
Спеціальність _____ 122 Комп'ютерні науки _____
(код і повна назва)
Тип програми _____ освітньо-професійна _____
(освітньо-професійна або освітньо-наукова)
Освітня програма _____ Науки про дані (Data Science) _____
(повна назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ:
Зав. кафедри _____
(підпис)
« _____ » _____ 20 ____ р.

ЗАВДАННЯ
НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

здобувачеві _____ Коржу Дмитру Володимировичу _____
(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи _____ Моделювання перколяційних явищ в мережевих структурах _____

затверджена наказом університету від 24 листопада 20 25 р. № 202Стз

2. Термін подання студентом роботи до екзаменаційної комісії 18 грудня 20 25 р.

3. Вихідні дані до роботи _____ Науково-технічні публікації, дані Інтернет-джерел щодо явища перколяції та його моделювання _____

4. Перелік питань, що потрібно опрацювати в роботі _____

1) Огляд предметної галузі _____

2) Дослідження параметрів кластеризації під час перколяційних процесів _____

3) Моделювання процесу перколяції _____

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№	Назва етапів роботи	Терміни виконання етапів роботи	Примітка
1	Отримання завдання на кваліфікаційну роботу	24.11.2025	виконано
2	Аналіз предметної області	27.11.2025	виконано
3	Постановка завдання та узгодження з керівником	28.11.2025	виконано
4	Дослідження поняття перколяції, видів перколяції, видів регулярних решіток	01.12.2025	виконано
5	Дослідження формування перколяційних кластерів	03.12.2025	виконано
6	Програмна реалізація перколяції на квадратній решітці, дослідження перколяційної кластеризації	06.12.2025	виконано
7	Оформлення пояснювальної записки	07.12.2025	виконано
8	Попередній захист	11.12.2025	виконано
9	Захист перед ЕК	18.12.2025	

Дата видачі завдання 24 листопада 2025 р.

Здобувач 
(підпис)

Керівник роботи _____ доц. Шергін В.Л.
(підпис) (посада, прізвище, ініціали)

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка: 68 с., 28 рис., 3 табл., 2 дод., 12 джерел.

ЗАДАЧА ВУЗЛІВ, ЗАДАЧА ЗВ'ЯЗКІВ, КЛАСТЕРИЗАЦІЯ,
ПЕРКОЛЯЦІЯ, РЕГУЛЯРНІ РЕШІТКИ, ФРАКТАЛИ, ФРАКТАЛЬНА
РОЗМІРНІСТЬ.

Об'єктом досліджень є перколяційні явища.

Предметом досліджень кваліфікаційної роботи є властивості кластерів, які формуються внаслідок перколяційних процесів.

Метою роботи є моделювання перколяції на регулярних решітках та в мережевих структурах, дослідження властивостей перколяційних кластерів.

ABSTRACT

Master's thesis contains: 68 p., 28 fig., 3 tabl., 2 ann., 12 references.

BOND PERCOLATION, CLUSTERIZATION, FRACTAL DIMENSION, FRACTALS, PERCOLATION, REGULAR LATTICES, SITE PERCOLATION.

The object of research is percolation phenomena.

The subject of research is the properties of clusters that are formed as a result of percolation processes.

The purpose of the work is to model percolation on regular lattices and on the network structures, to study the properties of percolation clusters.

ЗМІСТ

Вступ.....	7
1 Огляд предметної галузі	9
1.1 Поняття перколяції, види перколяції	9
1.2 Перколяційні кластери	14
1.3 Протікання як критичне явище.....	19
1.4 Пороги перколяції для регулярних решіток.....	23
2 Дослідження параметрів кластеризації під час перколяційних процесів	29
2.1 Оцінювання перколяційних параметрів решіток методом ренормалізації.....	29
2.2 Оцінювання порогу перколяції для трикутної решітки (задача вузлів)	35
2.3 Оцінювання порогу перколяції для квадратної сітки у задачі зв'язків	39
2.4 Формування кластерів, які перколюють.....	43
3 Моделювання процесу перколяції.....	47
3.1 Приклад застосування алгоритму кластеризації вузлів, які перколюють, для квадратної решітки	47
3.2 Моделювання перколяції на безмасштабних мережах	53
3.3 Програмна реалізація та результати моделювання перколяції на регулярних решітках.....	56
Висновки	61
Перелік джерел посилання	62
Додаток А Тексти програм.....	64
Додаток Б Відомість кваліфікаційної роботи.....	68

ВСТУП

Теорія перколяції є відносно молодого наукою. Її основні ідеї були сформульовані у 1957 р. у роботі англійських вчених Бродбента та Хаммерслі. Ця робота виникла в такий спосіб. У середині п'ятдесятих років Бродбент займався розробкою протигазових масок для шахт за завданням Британського об'єднання з дослідження застосування вугілля. При цьому він зіткнувся з цікавою проблемою та привернув до неї увагу математика Хаммерслі.

Основний елемент маски – це вугілля, через яке має проходити газ. У вугіллі є пори, що химерно з'єднуються один з одним, так що утворюється щось на кшталт заплутаного лабіринту. Газ може проникати у ці пори, адсорбуючись (осаджуючись) з їхньої поверхні. Виявилось, що якщо пори досить широкі і добре пов'язані один з одним, то газ проникає в глиб вугільного фільтра. У протилежному випадку газ не проникає далі за поверхню вугілля. Рух газу лабіринтом є процес нового типу, що істотно відрізняється від добре відомого у фізиці явища дифузії.

Бродбент і Хаммерслі назвали такі явища «процесами протікання» (англійською *percolation processes*). У буквальному перекладі слово *percolation* означає просочування, фільтрацію). Теорія, що вивчає такого роду явища, стала називатися теорією перколяції, або теорією протікання.

Явища, що описуються теорією протікання, відносяться до так званих критичних явищ. Ці явища характеризуються «критичною точкою», у якій властивості системи різко змінюються. До критичних явищ відносяться також фазові переходи другого роду (наприклад, перехід металу з нормального стану у надпровідний при зниженні температури). Фізика всіх критичних явищ дуже своєрідна і має спільні риси, найважливіша з яких полягає в тому, що поблизу критичної точки система як би розпадається на блоки з властивостями, причому розмір окремих блоків необмежено зростає

при наближенні до критичної точки.

Фізичні властивості завжди нерозривно пов'язані з геометрією. Найцікавіше те, що завдяки великим розмірам блоків, ця геометрія фактично не залежить від атомної структури речовини і тому має універсальні властивості, однакові для багатьох, абсолютно різних систем. Звідси, впливає універсальність фізичних властивостей, що виявляється в околиці критичних точок. Прямий зв'язок між фізикою і геометрією можна простежити у межах теорії протікання.

За роки, що минули з першої роботи Бродбента і Хаммерслі, з'ясувалося, що теорія протікання описує широке коло явищ, які стосуються фізики, хімії, інформатики. Ймовірно, найбільш розробленою в даний час сферою застосування теорії протікання є електричні властивості неупорядкованих систем, таких як аморфні напівпровідники, кристалічні напівпровідники з домішками або матеріали, що є сумішшю двох різних речовин – діелектрика і металу.

Втім, актуальність обраної теми обґрунтовується тим, що теорія перколяції стосується не тільки фізичних та хімічних явищ, а й процесів поширення та розповсюдження інформації, даних, комп'ютерних (та біологічних, таких як Ковід-19) вірусів.

Безумовно, найпростішим середовищем, у якому зручно досліджувати перколяцію, є двовимірні регулярні решітки, проте структура соціальних, соціально-економічних, технічних, інформаційних зв'язків є мережевою. Дослідження процесів протікання на мережевих структурах є актуальною задачею.

Для її виконання проводиться теоретичне дослідження поняття перколяції, комп'ютерне моделювання цього процесу як на регулярних двовимірних решітках, так і у випадкових мережах, зокрема безмасштабних.

Візуалізація отриманих результатів та їхній аналіз також розглядаються у даній кваліфікаційній роботі.

1 ОГЛЯД ПРЕДМЕТНОЇ ГАЛУЗІ

1.1 Поняття перколяції, види перколяції

Основною задачею, яка розглядається у кваліфікаційній роботі, є моделювання ефекту перколяції на двовимірних решітках.

Перколяція як процес може відображати та описувати безліч ситуацій та явищ; від моделювання напівпровідникових систем та вивчення надійності комп'ютерних мереж до моделювання епідемій у тваринному та людському світі. У фізиці та хімії явищем перколяції називається явище протікання чи не протікання рідин через пористі матеріали, електрики через суміш провідних та непровідних частинок та інші подібні процеси (рисунок 1.1).

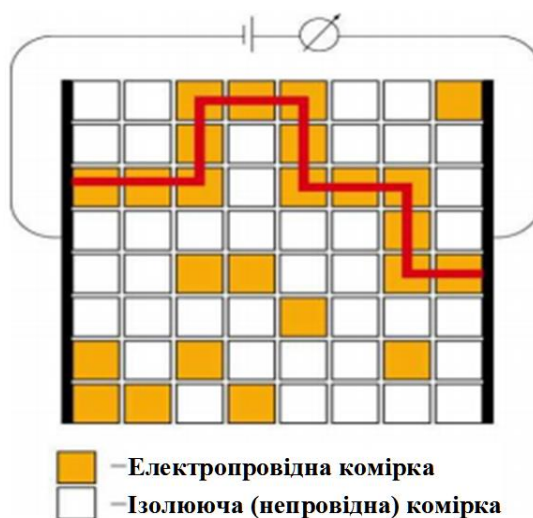


Рисунок 1.1 – Приклад перколяції в електричному ланцюзі

В 1957 вчені Бродбент і Хаммерслі опублікували статтю, в якій поділилися з читачами ідеєю імовірнісної формалізації процесу просочування води в перколяторі електричної кавоварки. Їх побудова була альтернативою класичному дифузійному опису поширення однієї фізичної субстанції, що умовно називається рідиною в іншій, умовно званої

середовищем. Так виникла нова теорія, названа згодом теорією перколяції чи протікання (від англійського дієслова *to percolate* – просочуватись, протікати). Заради справедливості варто відзначити, що вперше перколяційні ідеї були сформульовані ще в 1941 Флорі під час дослідження процесу полімеризації або гелеутворення. Перколяція представляє наочну модель неупорядкованого середовища.

Найпростішими задачами перколяції є перколяція на двовимірних регулярних решітках. Розглянемо квадратну решітку, кожен вузол якої зайнятий із ймовірністю p або порожній з ймовірністю $1 - p$. Ймовірність p можна інтерпретувати як частку (концентрацію) зайнятих вузлів при випадково-однорідному заповненні решітки. Порожні та зайняті вузли можуть відповідати найрізноманітнішим фізичним властивостям. Наприклад, у моделі пористого середовища, «зайнятими вузлами» вважаються пори, а «вільними» елементи твердої породи. Або можна вважати зайняті вузли провідниками електричного струму, а вільні – ізоляторами, як це і було показано на рисунку 1.1.

Нехай для наочності зайняті (чорні) квадратики на решітці 11×11 (рисунок 1.2) є провідниками, а порожні (жовті) – ізоляторами. Концентрація зайнятих вузлів становить $p = 0.3$. Природньо припустити, що електричний струм може текти лише між найближчими провідними осередками, що мають спільне ребро. Чотири найближчих сусіда для фіксованого вузла на квадратній решітці обведені білим. Синім кольором показаний максимальний за розміром провідний кластер.

Оскільки теорія перколяції оперує з ймовірнісними характеристиками, її висновки стають тим точнішими, що більше розміри системи. В той час як рисунок 1.2 грає допоміжну роль та демонструє невелику решітку, на рисунку 1.3 показано решітку розміром 120×120 з концентрацією провідних вузлів $p = 0.1$ (рисунок 1.3).

З рисунку 1.3 видно, що за малої концентрації ($p \ll 1$) провідні пікселі або ізольовані один від одного, або формують невеликі групи – кластери

найближчих сусідів (від англ. cluster – гроно). Два провідні вузли належать одному кластеру в тому і тільки тому випадку, коли вони пов'язані провідним ланцюжком найближчих сусідів. На рисунку 1.3, так як і на усіх подальших рисунках цього розділу, максимальний провідний кластер виділено синім кольором.

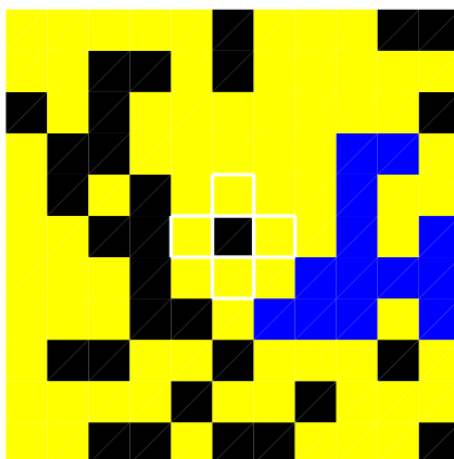


Рисунок 1.2 – Приклад задачі вузлів на ґратах 11×11

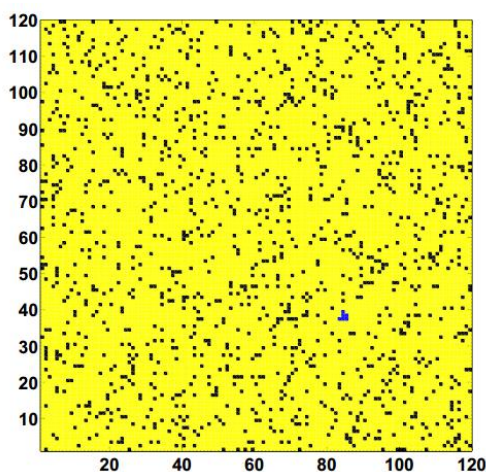


Рисунок 1.3 – Задача вузлів на квадратних ґратах ($n = 120$, $p = 0.1$)

При збільшенні концентрації зайнятих вузлів зростають і характерні розміри провідних кластерів. Так, на рисунку 1.4 та рисунку 1.5 показано решітку того ж розміру (120×120), що й на рисунку 1.3, але при

концентрації провідних вузлів, яка дорівнює, відповідно, $p = 0.4$ та $p = 0.55$. При $p \ll 1$ (зокрема, при $p = 0.1, 0.4, 0.55$) система в цілому демонструє діелектричні властивості, оскільки не існує ланцюгів, які б з'єднували протилежні сторони решітки.

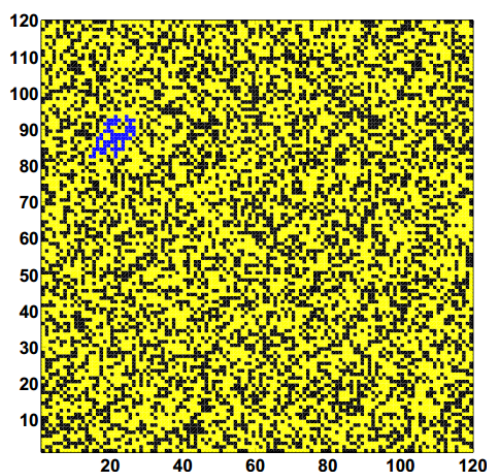


Рисунок 1.4 – Задача вузлів на квадратних ґратах ($n = 120, p = 0.4$)

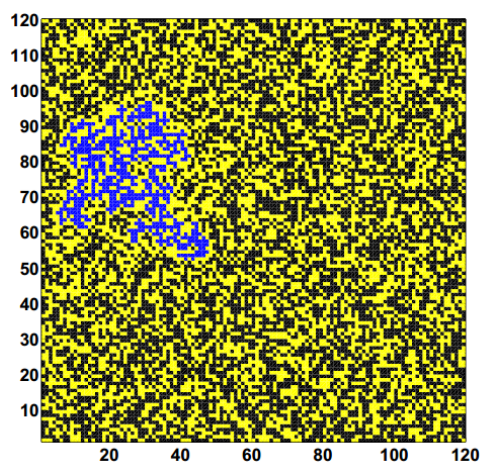


Рисунок 1.5 – Задача вузлів на квадратних ґратах ($n = 120, p = 0.55$)

Навпаки, як видно із рисунку 1.6, при $p \sim 1$ провідною виявляється переважна більшість вузлів, сині вузли формують гігантський провідний кластер, який забезпечує проходження електричного струму з одного боку решітки на інший.

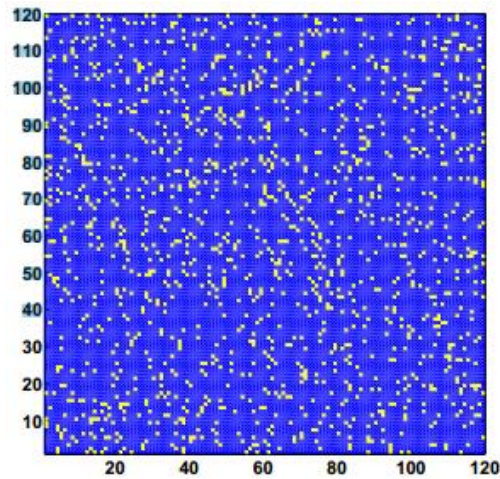


Рисунок 1.6 – Задача вузлів на квадратних ґратах ($n = 120$, $p = 0.9$)

Існує деяке критичне значення $p = p_c$, при якому відбувається перехід від діелектричного стану ($p < p_c$) до провідного при ($p > p_c$). Це критичне значення p_c називається порогом протікання (перколяції).

Порівнявши рисунок 1.3 та рисунок 1.6 (які відповідають значенням концентрації $p = 0.1$ і $p = 0.9$), можна побачити, що вони з точністю до заміни кольорів статистично ідентичні один одному. Справді, в умовах однорідності розподілу порожніх та зайнятих вузлів, система інваріантна щодо «перекрашування», тобто заміни порожніх вузлів зайнятими та навпаки при одночасній заміні ймовірності p на величину $1 - p$.

Іншими словами, з математичної точки зору немає жодної різниці між протіканням по зайнятих (чорним) вузлам від протікання по вільним (жовтим) вузлам. Слід підкреслити при цьому, що фізичні або прикладні аспекти протікання, зрозуміло, жорстко пов'язані з вибором типу вузлів: протікання провідних вузлів не ідентичне протіканню по вузлах-ізоляторах.

Для задачі вузлів на квадратній решітці поріг протікання приблизно дорівнює $p_c \approx 0.5926$. Близька до порога ситуація відображена на рисунку 1.7.

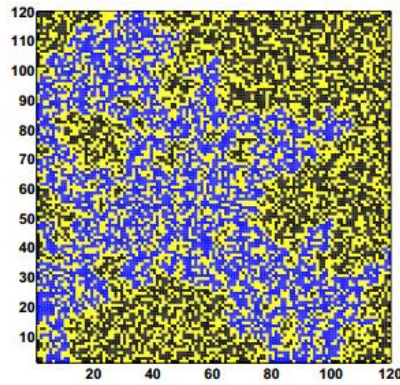


Рисунок 1.7 – Задача вузлів при концентрації провідних вузлів ($p = 0.59$) в околі критичної

1.2 Перколяційні кластери

На противагу звичайним фазовим перетворенням, де зміна фаз відбувається за деякої критичної температури, описаний вище перколяційний перехід є геометричним фазовим перетворенням.

Перколяційний фазовий перехід характеризується геометричними властивостями провідних кластерів поблизу $p = p_c$. При $p \ll 1$ існують тільки кластери невеликих розмірів. У міру зростання концентрації зайнятих вузлів середній розмір кластерів збільшується. При концентрації, наближеній до критичної, з'являється кластер, що зв'язує протилежні сторони решітки.

Такий кластер називають перколяційним (percolating) (сині пікселі на рисунку 1.7). У межі нескінченно протяжних ґрат перколяційний кластер називають нескінченним кластером (infinity cluster). Як видно із рисунку 1.8 з подальшим зростанням концентрації (p) частка вузлів, що належать перколяційному кластеру (щільність перколяційного кластера) зростає. У системі виникає перколяційна мережа, розміри дірок у якій скорочуються із збільшенням p . Відповідно, середній розмір кінцевих кластерів, які не належать перколяційному кластеру, зменшується і при $p \sim 1$ усі вузли належать, очевидно, лише одному кластеру.

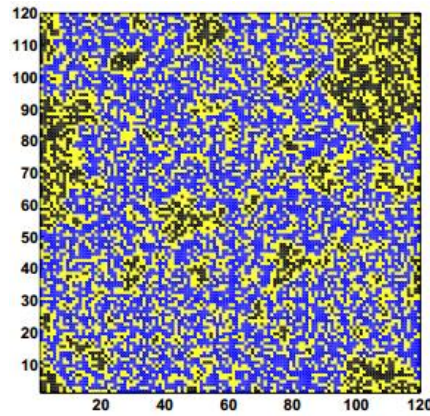


Рисунок 1.8 – Задача вузлів при концентрації провідних вузлів ($p = 0.62$)
більше критичної

З математичної точки зору кожен кластер є зв'язною компонентою всієї множини зайнятих вузлів, тому перколяційний кластер можна інтерпретувати як зв'язну підмножину всіх зайнятих вузлів решітки, якою ми можемо пройти, (або, як у прикладі, що розглядається, пропустити струм) з одного краю решітки на протилежний. У межі нескінченного розміру решітки нескінченим стає і перколяційний кластер.

Природньо характеризувати перколяційний кластер його потужністю, яка визначається як відношення кількості його вузлів, до повного числа вузлів решітки. Іншими словами, потужність перколяційного кластера – це просто ймовірність того, що вибраний навмання вузол ґрат належить перколяційному кластеру.

Потужність нескінченного кластера зазвичай позначається як P_∞ . Величину P_∞ називають ще ймовірністю протікання. Можна сказати, що перколяційний перехід пов'язаний з появою ненульової ймовірності протікання. Якщо $p < p_c$, то існують лише скінчені кластери, тому $P_\infty \approx 0$. При $p > p_c$, як побачимо у розділі 1.3, P_∞ збільшується як ступенева функція від p , що типово для звичайних фізичних фазових перетворень. Введемо функцію розподілу кластерів n_s за розмірами, точніше кажучи, за кількістю складових елементів (вузлів):

$$\langle p \rangle = \frac{\langle N_s \rangle}{N}, \quad (1.1)$$

де $\langle N_s \rangle$ – середнє число кластерів розмїру s ;

N – повне число комїрок решїтки, яка розглядається.

Величина $s \cdot n_s$ визначає питому (у перерахунку на одну комїрку сїтки) кїлькїсть комїрок, якї належать кластерам розмїру s . Очевидно, що:

$$\sum_{s=1}^{\infty} s n_s(p) = p. \quad (1.2)$$

їншими словами, ймовїрнїсть того, що вузол належить будь-якому кластеру, збїгається з ймовїрнїстю того, що вїн просто зайнятий.

Вище було розглянуто задачу вузлїв (site percolation), в якїй випадково зайнятими чи порожнїми виявлялися вузли ґрат. Якщо випадково вибирати стан ребер решїтки (наприклад, вважати ребра провїдними або непровїдними), вважаючи всї вузли провїдними, то отримаємо формулювання задачі зв'язкїв (bond percolation). Формулювання задачі зв'язкїв їлюструє рисунок 1.9.

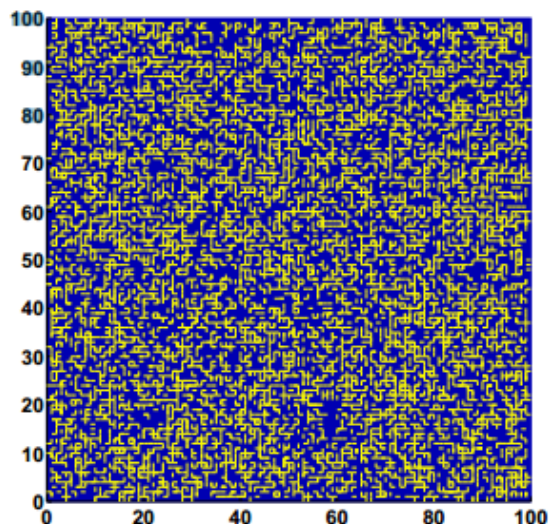


Рисунок 1.9 – Задача зв'язкїв на квадратнїй решїтцї (концентрацїя провїдних зв'язкїв нижче критичнїї)

Два зайнятих (провідних) зв'язки належать одному кластеру в тому і тільки тому випадку, коли вони пов'язані ланцюжком зайнятих (провідних) зв'язків. Критична концентрація зв'язків відокремлює фазу кластерів скінченного розміру від фази існування нескінченного кластера. Для квадратної решітки критична концентрація зв'язків дорівнює точно половині: $p_c = 1/2$.

Розглянемо структуру нескінченного кластера на порозі перколяції $p = p_c$. Типовий приклад двомірного нескінченного кластера показано на рисунку 1.10. Колір вузлів змінюється як періодична функція їхньої евклідової відстані від деякого вузла в центрі решітки. Можна бачити, що цей кластер містить дірки на всіх масштабах, подібно до серветки Серпінського (рисунок 1.11).

Перколяційний кластер (рисунок 1.10) є самоподібним на всіх лінійних масштабах, більших ніж період решітки і може розглядатися як фрактал. Фрактальна розмірність d_f описує як у середньому змінюється маса кластера M (число його елементів) усередині евклідової сфери зі зростанням її радіусу r :

$$M(r) = r^{d_f}. \quad (1.3)$$

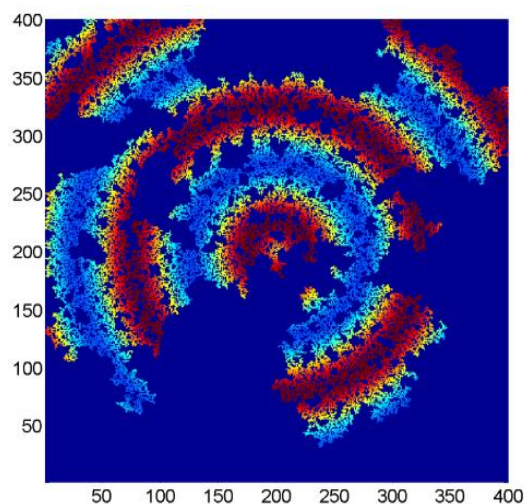


Рисунок 1.10 – Перколяційний кластер поблизу порогу протікання

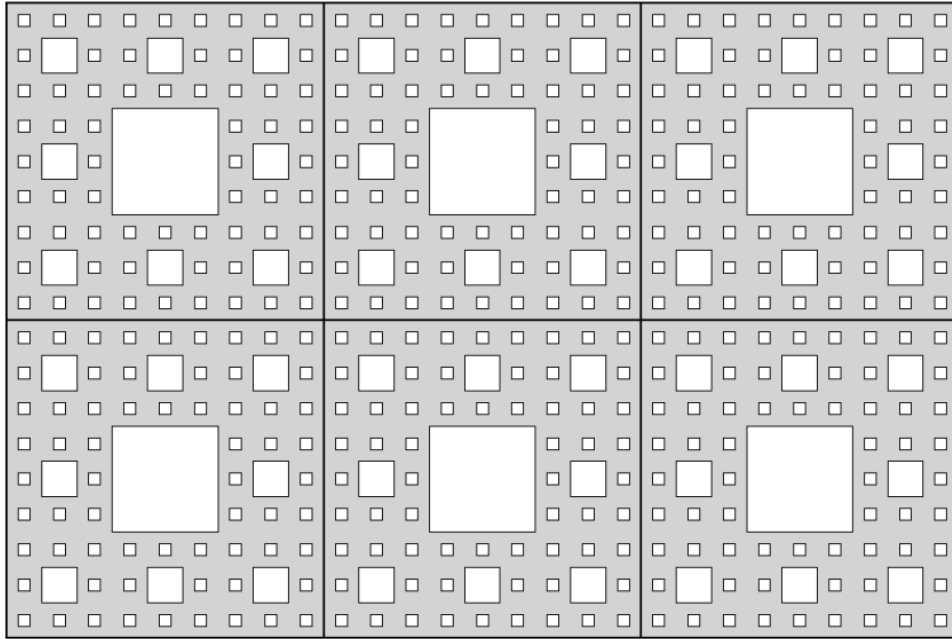


Рисунок 1.11 – Коврик Серпінського (типовий геометричний фрактал)

Відомо, що для звичайних плоских геометричних фігур (нефрактальних) маса (у моделюванні – це просто кількість пікселів розміром r) зростає як r^2 . Аналогічним чином, маса тривімірних тіл зростає як r^3 . Інакше кажучи, для звичайних геометричних об'єктів фрактальна розмірність є цілим числом, яке співпадає з розміром простору ($d = 2$, $d = 3$). В той же час фрактальні розмірності фракталів, зазвичай, є дрібними та меншими, ніж розмір простору. Наприклад, коврик Серпінського має $d_f = \frac{\ln 8}{\ln 3} \approx 1.893$.

Для випадкових фракталів $M(r)$ є результатом усереднення за багатьма різними конфігураціями нескінченного кластера або, що те ж саме, за багатьма сферами з різними центрами на одному ж тому самому нескінченному кластері. Вище та нижче порога перколяції середні розміри скінчених кластерів описуються кореляційною довжиною ξ . На порозі $p = p_c$ вона (тобто ξ) розходиться і дірки в нескінченному кластері виявляються на всіх масштабах. Вище порога ξ є середнім розміром дірок у нескінченному кластері. Оскільки ξ є скінченною, то самоподібність

нескінченного кластера розповсюджується лише на масштаби менші ніж ξ . Величину $\xi(p)$ можна інтерпретувати як типовий масштаб самоподібності, у межах якого нескінченний кластер демонструє фрактальні властивості. На масштабах, більших ніж ξ , структура нескінченного кластера втрачає самоподібність і стає однорідною.

1.3 Протікання як критичне явище

Теорія критичних явищ має справу з макроскопічними статистичними системами, які знаходяться поблизу точки фазового переходу. Явища, які спостерігаються у цій ситуації, характеризуються великомасштабними нестійкостями, чи флуктуаціями. Як було вже згадано, появу в системі нескінченного кластера зв'язаних елементів можна розглядати як геометричний фазовий перехід: критична концентрація $p = p_c$ відокремлює фазу скінчених кластерів ($p < p_c$) від фази існування нескінченного кластера ($p > p_c$). Перколяційне перетворення багато в чому схоже на звичайні термодинамічні фазові переходи 2-го роду. Проведемо цю паралель з прикладу магнітного перетворення. Так, деякі матеріали демонструють за низьких температур спонтанну намагніченість $\mu > 0$ за відсутності зовнішнього магнітного поля (ферромагнітна фаза). При підвищенні температури спонтанна намагніченість, безперервно зменшуючись, зникає за деякої критичної температури $T = T_c$. При температурах вище за критичну $\mu = 0$, тобто настає парамагнітна фаза.

Магнітні матеріали представлені набором елементарних магнітних моментів (спинів). Взаємодія з-поміж них підтримує впорядкований стан, у якому напрями всіх спинів паралельні один одному. З іншого боку, термічні флуктуації руйнують порядок та підтримують стан, у якому орієнтації спинів випадкові. За низьких температур взаємодія магнітних моментів домінує – у системі виникає далекий порядок. Спонтанна намагніченість описує цей далекий лад і називається параметром порядку магнітного

переходу.

Зі збільшенням температури спонтанна намагніченість зменшується і поблизу T_c прагне нуля за ступеневим законом $\mu(T) \sim (T_c - T)^\beta$. Вище критичної температури теплова енергія домінує і лише скінчені кластери співспрямованих спинів можуть існувати. Їхня випадкова орієнтація забезпечує нульову спонтанну намагніченість.

У явищі протікання концентрація (p) зайнятих вузлів грає роль температури у термічних фазових переходах. Як і в термічних фазових переходах довгі кореляційні зв'язки контролюють перколяційне перетворення та поведінка значущих величин поблизу переходу описується ступеневими законами та критичними індексами.

Перколяційний перехід характеризується геометричними властивостями зв'язних кластерів поблизу $p = p_c$. Важливою величиною є ймовірність того, що вузол (або зв'язок) належить нескінченному кластеру. Якщо $p < p_c$, то існують тільки скінчені кластери і $P_\infty \approx 0$. При $p > p_c$, P_∞ поводить подібно до спонтанної намагніченості нижче T_c і збільшується з p за ступеневим законом:

$$p_\infty = (p - p_c)^\beta. \quad (1.4)$$

Так само, як і спонтанна намагніченість, значення P_∞ визначає порядок у перколяційній системі і може бути визначено як параметр порядку. Лінійні розміри скінчених кластерів нижче й вище за p_c характеризуються кореляційною довжиною. Кореляційна довжина ξ визначена як середня відстань між вузлами одного й того самого скінченного кластера. З наближенням p до p_c , ξ зростає за законом:

$$\xi = |p - p_c|^{-\nu}. \quad (1.5)$$

З однаковим показником ν нижче і вище порога (p_c). Середня

кількість вузлів (маса) скінченного кластера теж розходиться:

$$S = |p - p_c|^{-\gamma}, \quad (1.6)$$

знову ж таки з однаковим показником γ нижче і вище за поріг.

Для отримання S та ξ потрібно обчислення середніх по всіх скінчених кластерах на решітці. У магнітних системах величинам P_∞ та S відповідають спонтанна намагніченість μ і сприйнятливність.

Ще один критичний індекс характеризує поведінку функції розподілу кластерів за розмірами n_s . Залежність n_s від p має наступний вигляд:

$$n_s(p) = s^{-k} \exp\{-As|p - p_c|^{-\delta}\}. \quad (1.7)$$

Показник δ визначає характерний найбільший розмір скінчених кластерів. Кластери розміром $s_c \sim |p - p_c|^{-\delta}$ називаються критичними. Кластери з $s > s_c$ експоненційно малоімовірні. А от розподіл кластерів з числом елементів $s \ll s_c$, як видно, демонструє скейлінгову поведінку:

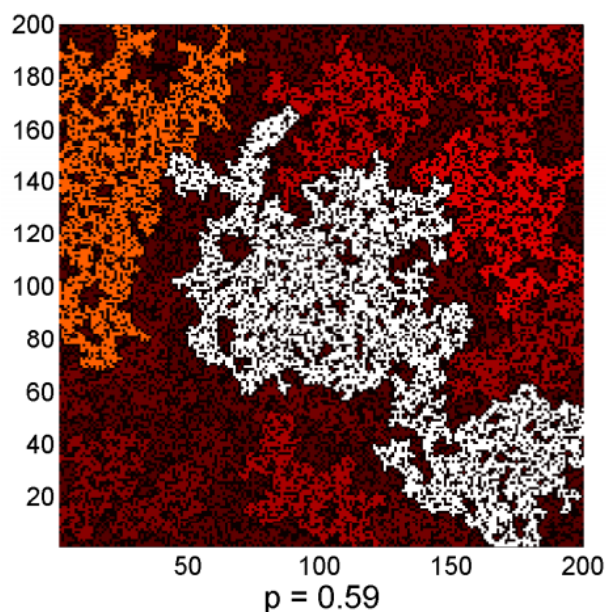
$$n_s(p) = s^{-k}. \quad (1.8)$$

На рисунку 1.12 представлена ілюстрація задачі перколяції вузлів у безпосередній близькості від порога, при цьому кластери різних розмірів пофарбовані в різні кольори (чим більшим є кластер, тим тепліший і світліший відтінок). Максимальний кластер виділений білим.

Показники β , ν та γ (таблиці 1.1) описують критичну поведінку типових величин, пов'язаних з перколяційним переходом та називаються критичними індексами. Ці індекси універсальні і не залежать ані від структурних особливостей решітки (квадратна або трикутна і т.д.), ані від типу протікання (по вузлам, по зв'язкам або континуальне), а залежать тільки від розмірності простору.

Таблиця 1.1 – Критичні індекси перколяційного переходу

Перколяція	$d = 2$	$d = 3$	$d = 4$	$d = 5$	$d > 6$
Індекс параметра порядку, β	5/36	0.417 ± 0.003	0.5	0.7	1
Індекс радіусу кореляції, ν	4/3	0.875 ± 0.008	0.7	0.6	1/2
Середня кількість елементів у кластері, γ	43/18	1.795 ± 0.005	1.8	1.6	1

Рисунок 1.12 – Задача вузлів на квадратній решітці 200×200

Ця властивість універсальності є характерною рисою фазових переходів другого роду, де параметр порядку безперервно зникає в критичній точці. Наприклад, спонтанна намагніченість всіх тривимірних магнітних матеріалів описується тим самим індексом β незалежно від кристалічної структури і типу взаємодії між сусідніми спінами. Слід зауважити, що всі показники визначені в межі нескінченно великих систем. В обмеженій системі (на решітці скінченного розміру) P_∞ , наприклад, не обов'язково дорівнює нулю нижче за поріг перколяції p_c .

1.4 Пороги перколяції для регулярних решіток

Від чого залежить поріг протікання у задачі зв'язків? Якщо всі зв'язки цілі, то кожен вузол пов'язаний з іншими вузлами, де число найближчих сусідів (z) сильно змінюється від ґрат до ґрат. При заданій частці цілих зв'язків x кожен вузол у середньому пов'язаний з $z \cdot x$ іншими вузлами. Можна висловити наступну гіпотезу: чи може величина zx , яка є середньою кількістю вузлів, з якими пов'язаний кожен вузол, містити інформацію, достатню для того, щоб сказати, чи є на решітці протікання чи ні? В такому разі жодної додаткової інформації про властивості решітки, окрім числа z , і не треба, тобто протікання виникає у всіх решіток при тому самому значенні величини zx .

Перевірити це дуже просто. Потрібно для всіх решіток з відомими порогами протікання задачі зв'язків обчислити добуток $z \cdot x_{зв}$. Якщо він виявиться універсальним, тобто однаковим для всіх решіток (чи хоча б приблизно однаковим), то висловлена гіпотеза вірна, або наближено вірна.

Відповідні дані зібрані у таблиці 1.2.

Таблиця 1.2 – Добуток $zx_{зв}$ для регулярних решіток

Тип ґрат	z	$x_{зв}$	$zx_{зв}$
Плоскі решітки ($d = 2$)			
Квадратна	4	0.5	2.0
Трикутна	6	0.35	2.1
Шестикутна	3	0.65	2.0
Об'ємні решітки ($d = 3$)			
Проста кубічна	6	0.25	1.5

Продовження таблиці 1.2

Об'ємноцентрована кубічна	8	0.18	1.4
Гранецентрована кубічна	12	0.12	1.4
Типу алмазу	4	0.39	1.6

Видно, що з похибкою менше ніж 10%, для плоских решіток справедлива формула:

$$zx_{зв} = 2, \quad (1.9)$$

а для об'ємних (тривимірних) решіток:

$$zx_{зв} = 1,5. \quad (1.10)$$

Таким чином, гіпотеза про універсальність середньої кількості зв'язків на вузол, необхідного для виникнення протікання, не є точною, але виконується наближено. Якщо взяти до уваги, що як у групі плоских сіток, так і в групі тривимірних кожна з величин z та $x_{зв}$, варіюється принаймні вдвічі, то точність, з якою в кожній групі величина $zx_{зв}$ є постійною (1.9), (1.10), можна вважати високою.

Отже, щоб приблизно оцінити поріг протікання задачі зв'язків, достатньо знати число найближчих сусідів і скористатися формулою (1.9) у разі двовимірних (пласких) ґрат і (1.10) у разі об'ємних ґрат. Поріг протікання задачі зв'язків найбільш чутливий до кількості саме найближчих сусідів та значно менш чутливий до всіх інших властивостей решітки (зокрема, до кількості сусідів другого порядку).

Розберемо тепер схему такого самого типу для задачі вузлів. Природно спочатку випробувати попередній варіант, тобто подивитися, як

змінюється від решітки до решітки величина $zx_{\text{вуз}}$. Легко переконатися, що вона змінюється майже так само, як кожна з величин z та $x_{\text{вуз}}$ окремо. Цьому не слід дивуватися: у задачі зв'язків добуток $zx_{\text{зв}}$ має чіткий фізичний зміст – середня кількість цілих (провідних) зв'язків, що припадає на один вузол. У разі задачі вузлів зв'язок працює тільки якщо він з'єднує два чорних (провідних) вузли, а во всіх інших випадках зв'язок є марним, тобто від його наявності нічого не змінюється. Саме тому добуток $zx_{\text{вуз}}$ ніякого особливого сенсу не має.

У 1970 р. американські фізики Шер і Заллен запропонували інший спосіб оцінки порога протікання завдання вузлів. Їхня ідея полягала в тому, щоб співставити кожному вузлу певну частку простору. Після цього можна стверджувати, що протікання по чорним (або білим) вузлам виникає, коли частка простору, зайнята цими вузлами, перевищує деяке критичне значення. В свою чергу це значення слабо залежить від типу решітки.

Уявимо навколо кожного вузла решітки кулю (або коло у разі плоскої решітки) з радіусом, рівним половині відстані до найближчого сусіда. При цьому кулі (кола), побудовані навколо сусідніх вузлів, торкаються одна одної (рисунки 1.13). Білому вузлу припишемо білу кулю, а чорному вузлу – чорну. Якщо два білих вузли пов'язані один з одним, то між ними є шлях по білих кулях, які торкаються одна одну. Тому виникнення протікання означає появу шляхів нескінченної довжини по білих кулях, які торкаються одна одну.

Шер і Заллен припустили, що протікання виникає в тому випадку, коли частка повного об'єму (площі), займана білими кулями (у плоскому випадку колами), перевищить деяке критичне значення, яке не залежить від типу ґрат. Щоб перевірити це припущення, потрібно обчислити частки об'єму (f), які займають білі кулі при $x = x_{\text{вуз}}$, для різних ґрат з відомими значеннями $x_{\text{вуз}}$ та порівняти їх один з одним. Таким чином, необхідно порахувати частку обсягу, займаного білими кулями у разі, коли всі кулі –

білі. Цю величину позначають літерою f і називають коефіцієнтом заповнення простору.

Коефіцієнт заповнення істотно залежить від типу решітки. Щоб знайти частку об'єму, заповненого білими кулями при $x < 1$, потрібно помножити коефіцієнт заповнення на частку білих куль. Отже, частка об'єму, заповненого білими кулями, дорівнює $f \cdot x$. На порозі перколяції вона дорівнює $f x_{\text{вуз}}$.

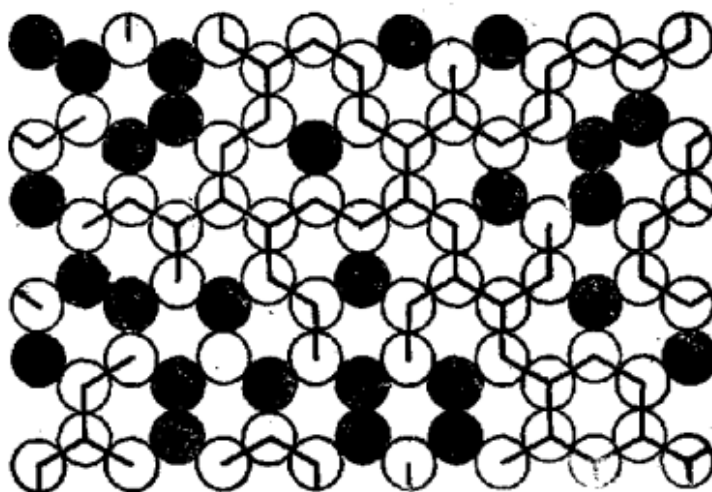


Рисунок 1.13 – Покриття колами шестикутньої решітки

Коефіцієнти заповнення для різних решіток наведені у таблиці 1.3.

Щоб уявити, як вони отримані, обчислимо цю величину для шестикутньої решітки, зображеної на рисунку 1.13. Можна обчислити, що на кожен вузол цієї решітки припадає частка загальної площі решітки, яка дорівнює $\frac{3\sqrt{3}}{4}a^2$, де a – сторона шестикутника. Частка площі, зайнята колами, дорівнює відношенню площі одного кола до площі, що припадає на один вузол:

$$f = \frac{\frac{\pi a^2}{4}}{\frac{3\sqrt{3}}{4}a^2} = \frac{\pi}{3\sqrt{3}} \approx 0.6046. \quad (1.11)$$

Аналогічним чином обчислюються коефіцієнти заповнення для інших решіток, причому, як видно з таблиці 1.3 вони варіюються в широких межах. Можна бачити, що з точністю близько 10–15% справедливі формули:

$$f \cdot x_{\text{вуз}} = 0.5, \quad (1.12)$$

для плоских (двовимірних) решіток, та:

$$f \cdot x_{\text{вуз}} = 0.16, \quad (1.13)$$

для об'ємних (тривимірних) решіток.

Таблиця 1.3 – Добутки $f x_{\text{вуз}}$ для регулярних решіток

Тип решітки	f	$x_{\text{вуз}}$	$f x_{\text{вуз}}$
<i>Плоскі решітки ($d = 2$)</i>			
Квадратна	0.79	0.59	0.47
Трикутна	0.91	0.5	0.46
Шестикутна	0.61	0.7	0.43
<i>Об'ємні решітки ($d = 3$)</i>			
Проста кубічна	0.52	0.31	0.16
Об'ємноцентрована кубічна	0.68	0.25	0.17
Гранецентрована кубічна	0.74	0.20	0.15
Типу алмазу	0.34	0.43	0.15

Оскільки обчислити коефіцієнт заповнення f порівняно просто, то формули (1.12)–(1.13) дають можливість оцінити поріг протікання задачі вузлів для будь-яких регулярних решіток.

Різниця між перколяцією по вузлах та по зв'язках проілюстрована на рисунку 1.14.

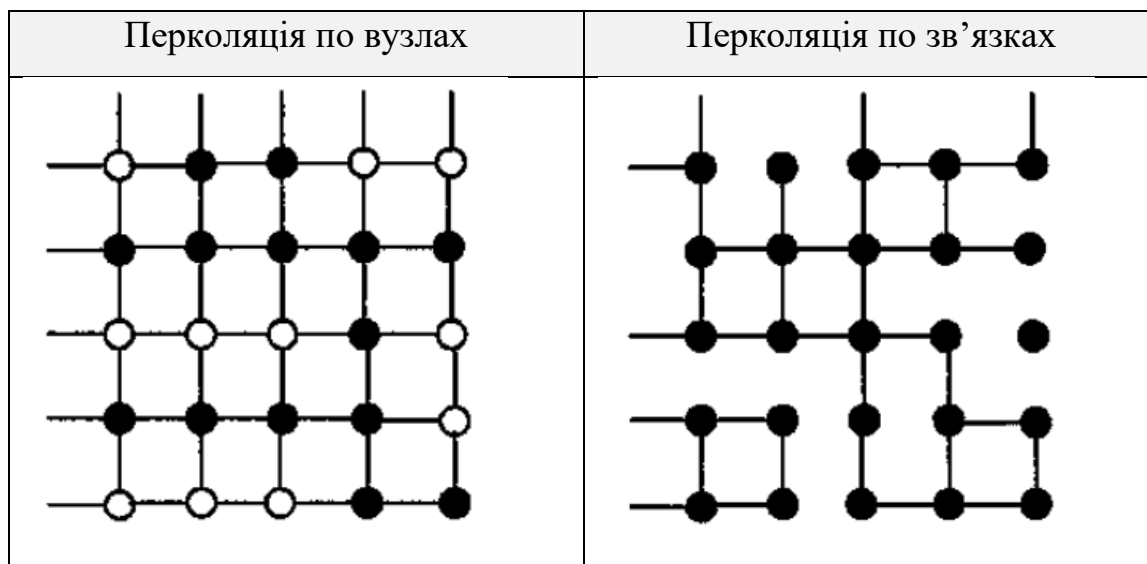


Рисунок 1.14 – Види перколяції на квадратній решітці

Легко зрозуміти, що критична частка обсягу, заповнена білими кулями, необхідна для протікання, монотонно зменшується зі збільшенням розмірності простору. В одновимірному просторі, тобто в лінійному ланцюжку вузлів, протікання по білих вузлах неможливе при будь-якій ненульовій концентрації чорних вузлів, бо навіть один чорний вузол запирає шлях протікання. У плоскій (двовимірній) решітці з'являється можливість обходу чорних вузлів, а в тривимірній (об'ємній) таких можливостей ще більше, оскільки обхідні шляхи не обмежені площиною.

2 ДОСЛІДЖЕННЯ ПАРАМЕТРІВ КЛАСТЕРИЗАЦІЇ ПІД ЧАС ПЕРКОЛЯЦІЙНИХ ПРОЦЕСІВ

2.1 Оцінювання перколяційних параметрів решіток методом ренормалізації

Добре вивченими та важливими у практичному відношенні є перколяційні мережі.

Розглянемо одну з найбільш простих постановок перколяційної задачі: дана квадратна сітка (нескінченна), кожен зв'язок якої має опір r_1 . Такий зв'язок зручно назвати чорним. Випадковим чином чорні (тобто ті, які проводять струм) зв'язки розриваються. Умовно назвемо такі розірвані зв'язки білими. Тоді розрив означає, що чорні зв'язки замінюються на білі з опором $r_2 = \infty$. Необхідно знайти таку концентрацію чорних зв'язків p_c , при якій (та вище якої) існує зв'язний шлях за чорними зв'язками, за яким можна дістатися з однієї нескінченно віддаленої сторони сітки до іншої. Тобто без перестрибування через білий зв'язок. Така зв'язна частина, яка тягнеться на нескінченність, називається нескінченним кластером.

Звичайно, реальна решітка (сітка) завжди кінцева, тому мається на увазі, що її розмір набагато більше так званої кореляційної довжини. В цьому разі структури чорних зв'язків, отримані в результаті різних реалізацій випадкового розриву зв'язків, матимуть одні й ті самі властивості, а ймовірність якихось вироджених розподілів чорних зв'язків зневажливо мала.

Тут має місце аналогія з випадковим розподілом молекул газу у певній ємності: ймовірність того, що в одній половині ємності збереться весь газ, настільки мало ймовірна, що ніколи не береться до уваги. В той же час, якщо молекул лише дві, то ця ймовірність дорівнює $1/4$.

Окрім геометричної постановки задачі перколяції – виникнення нескінченного чорного кластера, можна запропонувати і фізичну

постановку цієї задачі, наприклад, про протікання струму по чорних зв'язках. Чорні зв'язки проводять струм, білі ні. Необхідно визначити опір (провідність) сітки в цілому.

За умови $p > p_c$ провідність всієї сітки в цілому (G) не дорівнює нулю, бо струм знаходить свій шлях від одного контакту на «нескінченності» до протилежного серед зв'язки чорного нескінченного кластера. Якщо ж $p < p_c$, то $G = 0$ і відповідно опір всієї сітки $R = 1/G = \infty$.

Звичайно, протікання розглядається не тільки саме на двовимірній квадратній решітці. Досліджуються будь-які розмірності (наприклад, тривимірні) та типи решіток (наприклад, трикутні, шестикутні). Ці решітки можуть мати як детерміновану структуру зв'язків, так і стохастичну. Крім того, розглядають не тільки задачу зв'язків, а також й задачу вузлів (коли всі зв'язки є провідними, проте деякі вузли випадковим чином вирізані).

Задача перколяції, яка з'явилася під час розгляду прикладної інженерної проблеми щодо протікання газу або рідини через пористий (вугільний) фільтр, є одним з найбільш простих та наочних прикладів теорії фазових переходів другого роду та критичних явищ. Так, багато характеристик, які описують геометричні та фізичні властивості перколяції поблизу порога протікання p_c , поводяться універсальним чином, тобто описуються критичними індексами, чисельне значення яких не залежить від виду сітки.

Розглянемо деякі геометричні характеристики перколяційної сітки. Таких геометричних характеристик багато – середня кількість кластерів розміру s , розподіл кластерів за розмірами, середній розмір кластера, потужність нескінченного кластера, характеристики різних частин нескінченного кластера, остовного дерева (скелета), кінців, що висять тощо.

Розглянемо найбільш значущі з цих характеристик. По-перше, це розподіл скінчених кластерів за розміром, тобто кількість n_s кластерів з s вузлів (зв'язків), що припадають на один вузол (зв'язок) решітки.

Друга характеристика вдало підходить на роль параметра порядку,

тобто потужності нескінченного кластера, це ймовірність того, що довільний вузол (зв'язок) належить нескінченному кластеру. Ця ймовірність p_{inf} виражається через n_s , для цього достатньо врахувати, що ймовірність потрапити на чорний вузол (p) є сума ймовірності потрапити на нескінченний кластер або на будь-який скінчений:

$$p_{inf} + \sum_s s n_s = p, \quad (2.1)$$

звідки випливає, що:

$$p_{inf} = p - \sum_s s n_s. \quad (2.2)$$

Поблизу порога протікання потужність нескінченного кластера поводитья аналогічно до параметра порядку в теорії фазових переходів другого роду:

$$p_{inf} = (p - p_c)^\beta. \quad (2.3)$$

Роль, аналогічну до температури (T) та критичної температури (T_c) у фазових переходах, в задачах перколяції виконують концентрація p добре перколюючих зв'язків/вузлів (чорні) та поріг протікання p_c .

Позначимо ступінь близькості до порогу протікання величиною:

$$\tau = \frac{p - p_c}{p_c}. \quad (2.4)$$

Розглянуту аналогію між фазовою теорією переходів і теорією протікання можна поглибити, ввівши в теорію протікання аналог безрозмірного магнітного поля – h . У геометричних характеристиках перколяційних систем, які аналізуються, це призводить до досить

оригінального підходу: вводиться так званий демон Кастеляйна-Фортуїна чорний вузол поза решіткою, пов'язаний з кожним чорним вузлом решітки з ймовірністю $1 - \exp(-h)$. Аналог вільної енергії в теорії фазових переходів може бути записаний у вигляді:

$$G(\tau, h) = \sum_s n_s \exp(-hs), \quad (2.5)$$

де $\exp(-hs) = (e^{-h})^s$ – частка кінцевих кластерів із s вузлів, у яких жоден з цих вузлів не пов'язаний з демоном Кастеляйна-Фортуїна.

Згідно з теорією фазових переходів, параметр порядку може бути знайдений з G як похідна по полю h при $h = 0$:

$$\left. \frac{\partial G}{\partial h} \right|_{h=0} = -\eta. \quad (2.6)$$

З (2.5) можна отримати, що:

$$\left. \frac{\partial G}{\partial h} \right|_{h=0} = - \sum_s s n_s e^{-hs} \Big|_{h=0} = - \sum_s s n_s, \quad (2.7)$$

що дає головну (сингулярну) частину виразу (2.2):

$$p_{\text{inf}} = p - \sum_s s n_s = p - \left. \frac{\partial G}{\partial h} \right|_{h=0}. \quad (2.8)$$

При нульовому полі ($h = 0$) параметр порядку p_{inf} нижче порога протікання (тобто при $p < p_c$) дорівнює нулю, що повністю аналогічно ситуації в теорії фазових переходів: при $T > T_c$ феромагнітний стан (намагніченість $m \neq 0$) перетворюється на парамагнітний ($m = 0$). При $h \neq 0$ та при $T > T_c$ є ненульовий параметр порядку (2.5) викликаний зовнішнім магнітним полем h і тому пропорційний йому. Легко побачити,

що введення демона Кастеляйна-Фортуїна також залишає параметр порядку теорії протікання p_{inf} не рівним нулю нижче за поріг протікання, тобто і при $p < p_c$ існує нескінченний кластер, величина якого пропорційна h . Та дійсно, за умови $p < p_c$ формально нескінченного чорного кластера не існує, але якщо $h \neq 0$ та при цьому $h \ll 1$, то кожен чорний вузол пов'язаний з іншим через демона Кастеляйна-Фортуїна з ймовірністю:

$$1 - \exp(-h) \approx 1 - (1 - h) = h, \quad (2.9)$$

пропорційною полю h .

Що як раз і означає існування нескінченного кластера, пропорційного h :

$$\Pr(p < p_c) = h. \quad (2.10)$$

Якщо проаналізувати фізичні характеристики у теорії протікання, то це дозволяє набагато наочнішим чином пояснити основні закономірності фазових переходів. Припустимо, що чорні зв'язки в перколяційній мережі мають опір $r_1 \geq 0$, а розірвані (білі) – $r_2 = \infty$. При розмірах решітки $L \gg \xi$ набагато більше так званого кореляційного радіусу ξ вплив конкретної реалізації випадкового розподілу чорних та білих зв'язків (випадкової реалізації структури) стає несуттєвим і тоді повний опір R стає добре визначеною величиною. Для того щоб абстрагуватись від конкретного розміру сітки (L) зручно перейти від опору всієї решітки (R) до питомої ефективної провідності – σ_e :

$$R = \frac{1}{\sigma_e} \cdot \frac{L}{L^{d-2}}, \quad (2.11)$$

де $d = 2, 3 \dots$ – це розмірність простору сітки.

За визначенням, на розмірах порядку та більше кореляційного радіусу

всі властивості сітки в цілому (в даному випадку питома ефективна провідність) однакові, відповідно повинні бути однакові й основні елементи перколяційної структури.

В якості параметру порядку, який описує фазовий перехід, зручно ввести величину пропорційну до ефективної провідності σ_e . Так само як і для параметра порядку p_{inf} , ефективна провідність σ_e при $p > p_c$ не дорівнює нулю, а нижче за цей поріг дорівнює нулю ($\sigma_e = 0 | p < p_c$). Таке становище легко пояснити: вище за поріг протікання p_c струм може протікати від одного контакту до іншого проходячи по чорних (провідних) зв'язках. Це якраз й означає, що існує нескінченний чорний кластер.

При $p < p_c$ існують тільки скінчені кластери з розміром менше кореляційної довжини, вони ізольовані один від одного ($r_2 = \infty$) і тому струм через сітку пройти не може. Таким чином при $r_2 = \infty$ та $p < p_c$ ефективна провідність $\sigma_e = 0$. А якщо r_2 велике, але скінчене (тобто $r_2 \gg 1$), то струм зможе протікати від одного скінченного кластера до іншого. При цьому, звичайно ж провідність сітки σ_e буде пропорційна до h та за умови $h \rightarrow 0$ ефективна провідність також прямуватиме до 0 ($\sigma_e \rightarrow 0$). В таких умовах немає необхідності вводити демона Кастеляйна-Фортуїна; його роль відіграють білі зв'язки з великим, але скінченим опором. Роль зовнішнього поля в такому відіграє відношення $h = r_1/r_2 \ll 1$.

Критичну поведінку поблизу порога протікання p_c демонструє не тільки щільність нескінченного кластера, але і багато інших важливих перколяційних характеристик мережі, наприклад, кореляційна довжина (ξ), яка розходиться при наближенні до p_c :

$$\xi = (p - p_c)^{-\nu}, \quad (2.12)$$

де ν – критичний індекс кореляційної довжини.

Критичним чином поводитьься і питома ефективна провідність ρ_e . Поблизу порога протікання має місце співвідношення:

$$\rho_e = \begin{cases} \rho_1 \tau^{-t}, & p > p_c, \\ \rho_2 \tau^q, & p < p_c. \end{cases} \quad (2.13)$$

Аналогія між фазовим переходом другого роду та перколяційним переходом проявляється тут у тому, що в той час як критична температура T_c та пороги протікання p_c для кожного матеріалу, або, відповідно, решітки мають своє індивідуально чисельне значення, то критичні індекси (β, ν, q) є універсальними. Ці критичні індекси залежать тільки від розмірності простору ($d = 2, 3, \dots$), але не залежать від типу решітки.

2.2 Оцінювання порогу перколяції для трикутної решітки (задача вузлів)

Розглянемо питання застосування ренорм-групового методу обчислення критичних індексів.

Поблизу порога протікання структура зв'язних частин перколяційної мережі (нескінченний кластер при $p > p_c$, та «решіткові звірі» при $p < p_c$) мають фрактальну структуру, тобто є статистично самоподібними.

Таким чином, переходячи від одного масштабу до іншого та вимагаючи масштабної інваріантності, можна отримати наближене значення критичних індексів. Розглянемо декілька прикладів використання методу ренорм-групового аналізу для обчислення порогів протікання (p_c) та критичного індексу (ν) кореляційної довжини.

Почнемо з обчислення порогу перколяції для трикутної решітки у задачі вузлів. Для зручності будемо застосовувати терміни протікання струму: провідний вузол (чорний) проводить струм, не провідний (білий) не проводить, всі зв'язки провідні. На рисунку 2.1 показано процес ренормалізації трикутної решітки з провідними (чорними) та непровідними (білими) вузлами, з розміром трикутної комірки рівним b . Вузли ренормованої решітки відповідають трикутним коміркам первісної

решітки (таким, що заповнені сірим кольором). Деякі з нових вузлів будуть провідними (чорні трикутники), а деякі – непровідні (білі). Після визначення, які з них є провідними, а які – ні, можна зобразити нову, ренормовану, решітку у звичайному вигляді (вузли – чорні або білі кола). Розмір комірки нової решітки становитиме $b_{rg} = b\sqrt{3}$.

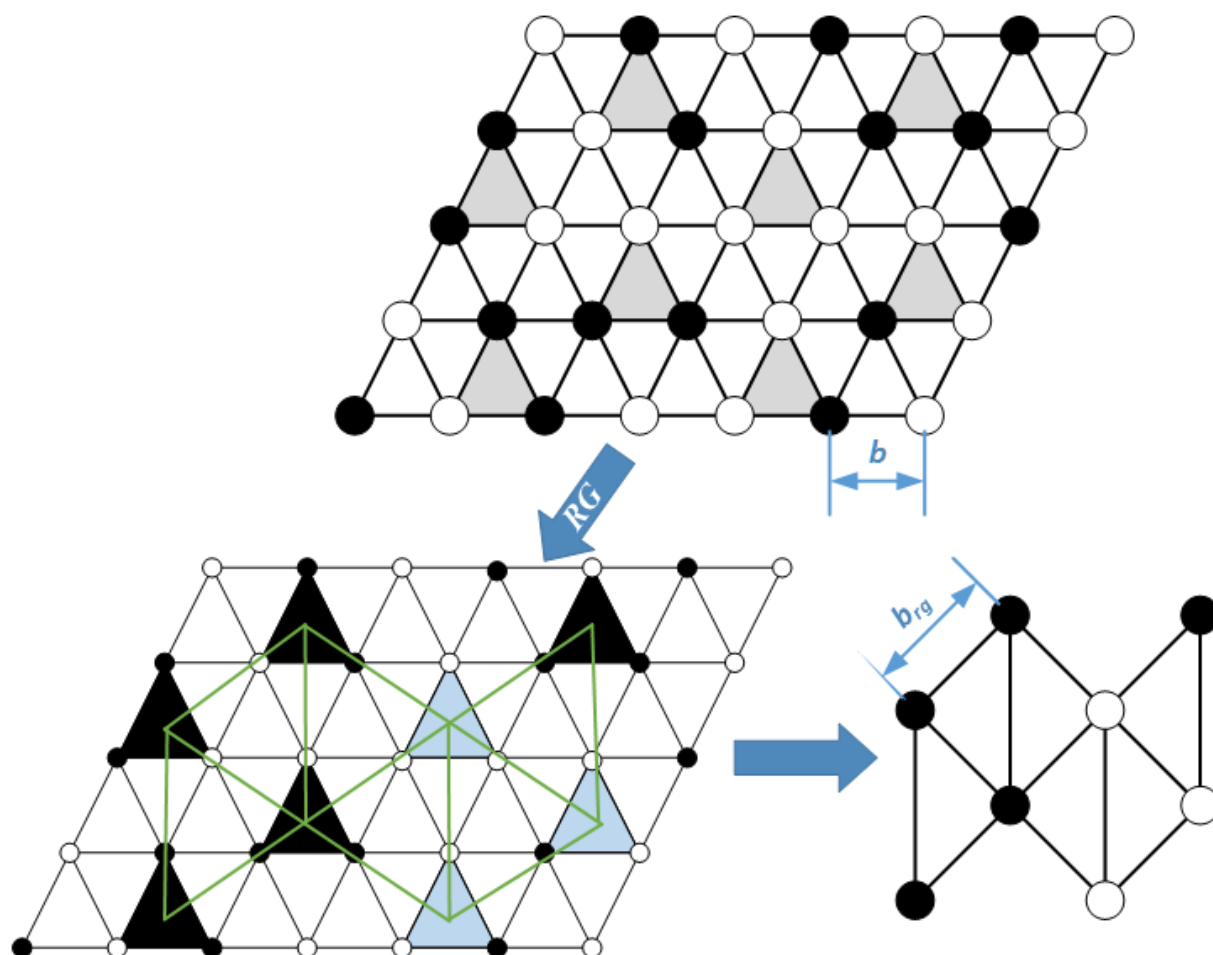


Рисунок 2.1 – Ренормалізація трикутної решітки

Правила перетворення вузлів є дуже простими: якщо у трикутника первісної решітки 2 або 3 вузла чорні, то він переходить у чорний вузол ренормованої решітки. Інакше (0 чи 1 чорний вузол) трикутник перетворюється на білий, непровідний вузол ренормованої решітки (рисунок 2.2).

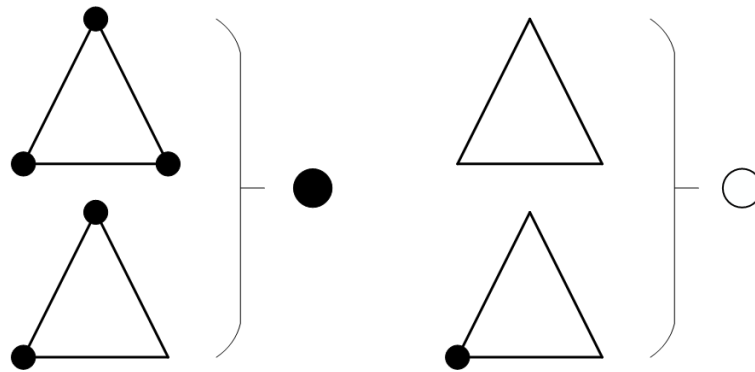


Рисунок 2.2 – Правила перетворення вузлів при ренормалізації трикутньої сітки

Ймовірність чорного вузла в первісній трикутній решітці дорівнює p , тому ймовірність зустріти у новій ренормованій решітці провідний, чорний, вузол дорівнює $p^3 + 3p^2(1 - p)$, де перший доданок «зобов'язаний» своїм походженням трикутнику із трьома чорними вузлами, а другий – із двома. Оскільки розташування чорних та білих вузлів у другому випадку можливо трьома різними способами, то другий доданок має множник 3. Таким чином, ймовірність зустріти чорний вузол у ренормованій решітці (p_{rg}) дорівнює:

$$p_{rg}(p) = p^3 + 3p^2(1 - p). \quad (2.14)$$

Якщо мережа знаходиться на порозі протікання, то після ренорм-групового перетворення вона залишається на цьому ж порозі:

$$p_{rg}(p_c) = p_c. \quad (2.15)$$

Сенс (2.15) полягає в тому, що значення p_c є нерухомою точкою цього перетворення. Тоді з рівняння (2.14) отримуємо:

$$p_c = p_c^3 + 3p_c^2(1 - p_c). \quad (2.16)$$

Рівняння (2.16) має три рішення: $p_c = 0$, $p_c = 1$, $p_c = 1/2$. Перші два з них тривіальні – повністю біла або повністю чорна решітка залишається

такою. Третє рішення:

$$p_c = 1/2, \quad (2.17)$$

і є шуканим порогом протікання трикутної решітки для задачі вузлів.

У цьому прикладі, на відміну від багатьох інших, значення порогу перколяції, отримане ренорм-груповим методом, збігається із точним значенням цього порогу.

Тепер перейдемо до пошуку критичного індексу кореляційної довжини. Нехай на деякій решітці $\xi = \xi_0 |p - p_c|^{-\nu}$ в околу точки $p = p_c$. Тоді в ренормованій решітці $\xi_{rg} = \xi_0 |p_{rg} - p_c|^{-\nu}$ та $\xi_{rg} = \xi/a$, де $a = b_{rg}/b$.

Таким чином:

$$a |p_{rg} - p_c|^{-\nu} = |p - p_c|^{-\nu}, \quad (2.18)$$

звідки для критичного індексу отримаємо вираз:

$$\frac{1}{\nu} = \frac{\ln \frac{p_{rg} - p_c}{p - p_c}}{\ln a} = \frac{\ln \lambda}{\ln a}, \quad \text{де} \quad \lambda = \frac{p_{rg}(p) - p_c}{p - p_c}. \quad (2.19)$$

Спрямовуючи концентрацію провідних вузлів до порогової ($p \rightarrow p_c$), можна записати:

$$\lambda = \lim_{p \rightarrow p_c} \frac{p_{rg}(p) - p_c}{p - p_c} = \left. \frac{dp_{rg}}{dp} \right|_{p=p_c}, \quad (2.20)$$

і отримаємо простий вираз для оцінки критичного індексу:

$$v = \frac{\ln a}{\ln \left(dp_{rg} / dp \Big|_{p=p_c} \right)}. \quad (2.21)$$

Раніше, для трикутної решітки було отримано залежність $p_{rg}(p)$ у формі (2.14), звідки випливає, що:

$$\frac{dp_{rg}}{dp} = \frac{d}{dp} \left(-2p^3 + 3p^2 \right) = -6p^2 + 6p. \quad (2.22)$$

Підставивши до (2.22) знайдене значення p_c (2.17) та враховуючи, що $a = b_{rg}/b = \sqrt{3}$, з формули (2.21) отримаємо шукану оцінку критичного індексу:

$$v = \frac{\ln a}{\ln \left(-6p_c^2 + 6p_c \right)} = \frac{\ln 3}{2 \cdot \ln(3/2)} \approx 1.355. \quad (2.23)$$

Точне значення критичного індексу для цієї решітки дорівнює $v = 4/3 \approx 1.333$), таким чином застосування методу ренорм-групи дає досить гарне наближення.

2.3 Оцінювання порогу перколяції для квадратної сітки у задачі зв'язків

Однією з головних труднощів застосування ренорм-групового методу є визначення ренормалізованої комірки та вимог щодо протікання крізь неї. У трикутній решітці цій труднощі не було, бо комірка була трикутною та перколяція визначалася наявністю двох чи трьох чорних вузлів при довільному їх розташуванні. У випадку квадратної решітки потрібен більш акуратний та складний аналіз. Під кластером, який перколює, можна

розуміти як кластер, який протікає зверху вниз, так і той, що з'єднує ліво і право. Визначимось, що будемо розглядати протікання зліва направо. Тоді в якості комірки квадратної решітки можна вибрати конфігурацію, зображену на рисунку 2.3. Згідно з умовами задачі зв'язків всі вузли є провідними, а кожен із зв'язків є провідним з ймовірністю $p > 0$.



Рисунок 2.3 – Ренорм-перетворення комірки квадратної решітки

В результаті ренормалізації комірка (рисунок 2.3) перетворюється на один зв'язок, при цьому коефіцієнт масштабування дорівнює $a = b_{rg}/b = 2$.

На рисунку 2.4 показані всі провідні конфігурації (тобто такі, які забезпечують протікання зліва направо). Ймовірності виникнення кожної з них також вказані.

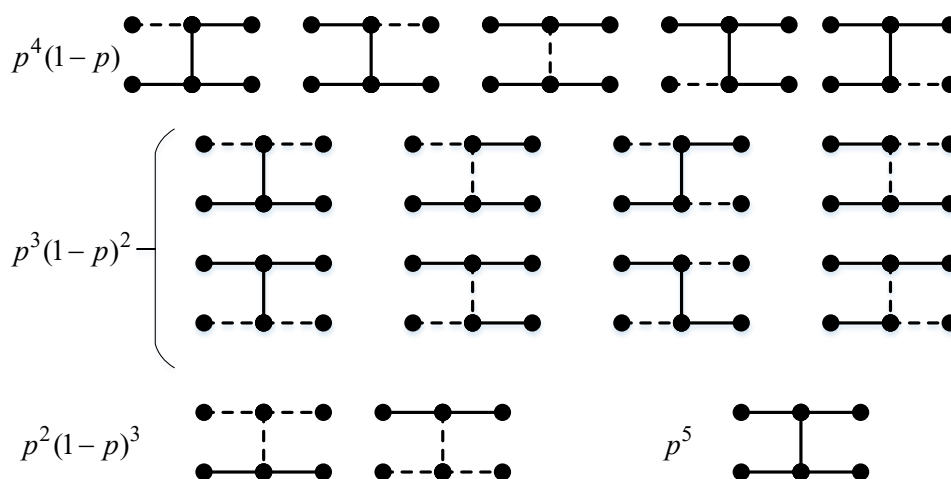


Рисунок 2.4 – Провідні конфігурації та ймовірності їх виникнення

Таким чином, ймовірність отримати після ренормалізації таку конфігурацію, яка є провідною, дорівнює:

$$p_{rg} = p^5 + 5p^4(1-p) + 8p^3(1-p)^2 + 2p^2(1-p)^3 - 2p^5 - 5p^4 + 2p^3 + 2p^2. \quad (2.24)$$

Підставивши в праву та ліву частини $p_{rg} = p = p_c$, легко переконатися, що

$$p_c = 1/2, \quad (2.25)$$

є рішенням рівняння.

Відразу можна обчислити і критичний індекс кореляційної довжини. Беручи похідну по p в точці $1/2$, знаходимо:

$$\lambda = p'_{rg} \Big|_{p=1/2} = (10p^4 - 20p^3 + 6p^2 + 4p) \Big|_{p=1/2} = \frac{13}{8}. \quad (2.26)$$

Та згідно з (2.21) отримаємо:

$$v = \frac{\ln a}{\ln \lambda} = \frac{\ln 2}{\ln(13/8)} \approx 1.428. \quad (2.27)$$

Точне значення критичного індексу кореляційної довжини для квадратної решітки у задачі зв'язків складає $v = 4/3 \approx 1.333$.

Не завжди метод ренормгрупи дає такі гарні результати. Для уточнення необхідно брати великі розміри ренормуючої комірки, наприклад, замість комірки розміром $b = 2$ брати комірку з $b = 5$. На перший погляд, таке уточнення не представляє значного ускладнення. Однак, насправді це не просто значне, а суттєво значне ускладнення, тому що замість $2^5 = 32$ комбінацій чорних та білих зв'язків матимемо $2^{25} \approx 3 \cdot 10^7$ комбінацій. Серед яких потрібно буде обрати ті, які провідні, а потім ще й знайти ймовірність їх появи.

Важливою характеристикою процесів перколяції є розподіл розміру кластерів n_s як функції від їх розміру s . Згідно з теорією критичних явищ,

цей розподіл суттєво залежить від співвідношення густини (p) об'єктів, які перколюють, та порогового значення цієї густини (p_c), але не залежить ані від виду перколяції (по вузлах, чи по зв'язках), ані від типу решітки. Більше того, самі решітки не обов'язково мають бути регулярними; регулярність можна замінити на статистичну просторову однорідність. Поблизу порогу перколяції цей розподіл є ступеневим:

$$n_s = |p - p_c|^{2-\nu}, \quad (2.28)$$

що вказує на фрактальні властивості структури решітки. Приклад такого розподілу показаний на рисунку 2.5.

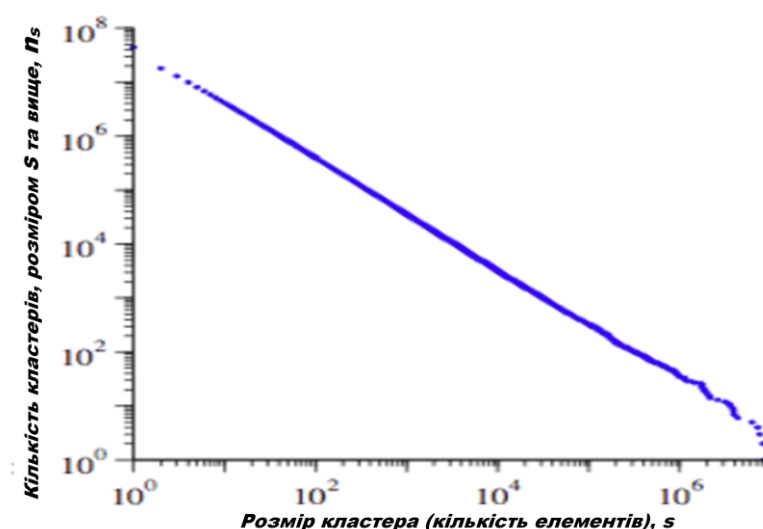


Рисунок 2.5 – Розподіл кластерів за розміром на порозі перколяції

При цьому розмір найбільшого кластера має наступний кусково-неперервний розподіл:

$$M(L) \begin{cases} \ln(L), & p < p_c, \\ L^D, & p = p_c, \\ L^d, & p > p_c, \end{cases} \quad (2.29)$$

де L – геометричний розмір решітки,

d – евклідова (цілочисельна) розмірність простору,

D – фрактальна розмірність, яка залежить лише від геометричної та дорівнює $D = 91/48 \approx 1.89$ для $d = 2$.

2.4 Формування кластерів, які перколюють

Розглядаючи мінімізацію обчислювальної складності як головну вимогу до алгоритму моделювання, вибір пав на алгоритм Хошена-Копельмана [6], який використовує багаторазове маркування кластерів. Згідно з цим алгоритмом при поданні перколяційної решітки у вигляді масиву з N елементів (комірок) потрібно пройти по ньому лише двічі: перший раз відбувається розстановка первинних міток, перевірка їх на хибність, і, відповідно, запис істинного значення кожної хибної клітини, другий раз хибні мітки замінюються на відповідні їм істинні. Таким чином, обчислювальна складність алгоритму дорівнює $T(N) \approx 2N$.

Якщо решітка є двовимірною (квадратною, трикутною, шестикутною тощо), то кількість комірок (N) пропорційна квадрату лінійного розміру (n) решітки ($N \sim n^2$). Тоді обчислювальна складність алгоритму Хошена-Копельмана становить:

$$T(n) = O(n^2). \quad (2.30)$$

Нехай порожні («білі», непровідні) комірки решітки позначені нулем, а заповнені («чорні», провідні) – одиницею. У процесі кластеризації чорні комірки будуть сгруповані у кластери з номерами від 2 до деякого максимального значення. Можна вважати, що комірки, марковані одиницею, – це такі, які ще не кластеризовані (непроглянуті). Процес сканування називається растровим скануванням. У процесі кластеризації використовується допоміжний динамічний масив (вектор) «справжніх

номерів» кластерів (з нульовими початковими значеннями та поточним розміром 2). Його максимальний розмір дорівнює $\lfloor N/2 \rfloor$, але зазвичай він суттєво менше. Індекс цього масиву відповідає номеру кластера, а значення елемента за індексом – є «справжнім номером» кластера: якщо це значення дорівнює нулю, то індекс кластера є справжнім його номером, а якщо воно відрізняється від нуля (більше нуля), то індекс кластера є хибним номером, а наближеним до істинного є якраз значення масиву за цим індексом.

Відповідно до алгоритму, маркування кластерів здійснюється у три етапи з двома проходами по решітці:

Первинне маркування. Послідовно скануються комірки решітки. Порожні («білі», непровідні, нульові) комірки пропускаються. Заповнені («чорні», провідні, одиничні) маркуються наступним чином:

- якщо всі сусідні комірки відносяться до кластерів 0 або 1 (тобто або білі, або ще не проглянуті), то присвоюємо поточній клітині номер лічильника вектору «справжніх номерів» кластерів, лічильник інкрементуємо. Таким чином ця комірка стане першим представником нового кластеру;

- якщо хоча б одна з сусідніх комірок маркована (номер її кластера більше одиниці), то шукається найменший з номерів кластерів цих сусідів. Саме він й буде номером кластера поточної комірки. При цьому слід встановити це значення ще й в якості справжнього номеру кластерів, до яких відносяться інші марковані сусіди поточної комірки.

Після завершення первинного маркування кожна чорна комірка решітки буде маркована номером кластеру, до якого ця комірка відноситься. Але цей номер може бути справжнім, або хибним. Тому слід виправити всі хибні номери на справжні згідно з значеннями масива справжніх номерів. Але при цьому слід розуміти, що хибні номери в масиві справжніх номерів можуть утворювати ланцюги.

Оновлення масиву справжніх номерів. На цьому етапі переглядається масив справжніх номерів (`num`) з метою усунення ланцюгових посилань.

Якщо поточний елемент цього масива є нульовим, то його індекс (`ind`) є справжнім номером відповідного кластеру, і тоді нічого робити з таким елементом не треба. Якщо ж елемент ненульовий, то його індекс не є справжнім номером кластера. Ним може бути ненульове значення елемента. Але в той же час воно також може бути хибним номером. Для того щоб усунути цей ланцюг хибних посилань треба звертатись до масиву аж поки не отримаємо справжній номер (тобто поки значення масиву не стане нульовим) (лістинг 2.1).

Лістинг 2.1 – Програмний код

```
i = ind;
while num[i]<>0
    i = num[i];
num[ind] = i;
```

Отримане значення індексу буде справжнім номером кластеру номер `ind`.

Вторинне маркування. Під час цього етапу відбувається виправлення хибних номерів кластерів на справжні. Скануючи комірки решітки, ми перевіряємо, чи є їхня мітка (номер кластеру) хибною, і якщо так, то виправляємо на справжню. Для цього звертаємось до масиву справжніх номерів, використовуючи первинну мітку комірки в якості індексу. Якщо відповідний елемент масиву нульовий, то ця мітка є справжньою. Інакше справжнім номером кластеру є якраз це значення елемента масиву. Воно й встановлюється як виправлена мітка комірки.

Важливою особливістю етапу вторинного маркування є можливість його значного пришвидшення за рахунок використання групових (масових) присвоєвань. В цьому випадку сканується не масив комірок, а масив справжніх номерів кластерів. Якщо номер кластера є хибним, то для всіх комірок решітки він замінюється на справжній за допомогою функції (методу) `find` та операції групового присвоєвання:

`grid[find(grid==i)]=num[i];` Такий підхід є набагато більш швидкодіючим, ніж традиційне «ручне» сканування масиву комірок звичайним чи подвійним циклом `for` з індивідуальною заміною міток.

Ще одним кроком до підвищення швидкодії та, головним чином, спрощення програмної реалізації алгоритму Хошена-Копельмана для регулярних решіток (трикутних, шестикутних та інших, але особливо для прямокутних) є додавання до решітки фіктивного білого лівого стовпця та фіктивного білого верхнього рядка. Завдяки цьому усувається необхідність врахування відсутності лівого чи верхнього сусіда для комірок, розташованих у лівому стовпці та верхньому рядку. Інакше кажучи, всі комірки з індексами рядків та стовпців від 1 до n будуть мати рівно одного сусіда ліворуч та одного вище.

3 МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ПЕРКОЛЯЦІЇ

3.1 Приклад застосування алгоритму кластеризації вузлів, які перколюють, для квадратної решітки

Розглянемо квадратну решітку (*grid*) розміром 6×6 (рисунок 3.1). Додамо до неї фіктивні нульовий стовпець та рядок (для наочності залиті світло-коричневим кольором). Чорні вузли (комірки) є провідними (такими що перколюють) та мають початкову мітку 1. Білі вузли (як реальні, так і фіктивні) мають мітку 0.

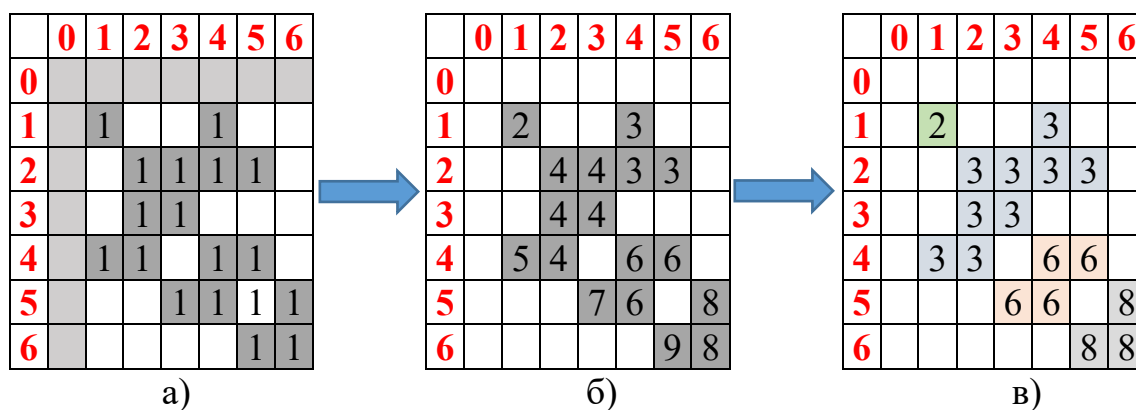


Рисунок 3.1 – Кластеризація перколюючих вузлів на квадратній решітці

Алгоритм Хошена-Копельмана починається з первинного маркування вузлів (комірок). Решітка сканується починаючи з елемента `grid[1][1]`.

`grid[1][1]` чорна (одинична), у неї немає кластеризованих сусідів зліва та вище, тому маркуємо цю комірку значенням 2, додаємо до масиву справжніх номерів елемент з індексом 2 (та значенням 0) та інкрементуємо лічильник.

`grid[1][2]` та `grid[1][3]` білі (нульові). Пропускаємо їх.

`grid[1][4]` чорна, ситуація аналогічна з `grid[1][1]` (маркованих сусідів зліва та вище немає, тому маркуємо значенням 3, додаємо елемент

num[3] та інкрементуємо лічильник).

grid[1][5], grid[1][6] та grid[2][1] білі; пропускаємо.

grid[2][2] чорна, починаємо новий кластер (4).

grid[2][3] чорна, комірка зліва вже маркована (4), тому призначаємо поточній комірці значення 4.

grid[2][4] чорна. Обидва сусіди (зліва та вище) марковані (4 та 3). Обираємо найменший з цих номерів (3), маркуємо комірку та присвоюємо це значення четвертому елементу масиву справжніх номерів (num[4]=3). Це означає, що мітка 4 є хибною, а справжнім номером кластеру для елементів, які помічені значенням 4 є 3. Інакше кажучи, мітки 4 та 3 позначають один й той же самий кластер.

grid[2][5] чорна, мітка копіюється з комірки ліворуч (3).

grid[2][6] та grid[3][1] білі.

grid[3][2] чорна, мітка копіюється з верхнього сусіда (4).

grid[3][3] чорна, обидва сусіда мають мітку 4, тому й ця отримує 4.

grid[3][4], grid[3][5], grid[3][6] білі.

grid[4][1] чорна, сусіди не марковані, починаємо новий кластер (5).

grid[4][2] чорна, ситуація аналогічна до grid[2][4]. Мітка – 4, кластер 5 – хибний (його «справжній» номер – 4).

grid[4][3] біла.

grid[4][4] чорна, сусіди не марковані, новий кластер (6).

grid[4][5] чорна, марка позичається у сусіда ліворуч (6).

grid[4][6], grid[5][1], grid[5][2] білі.

grid[5][3] чорна, сусіди не марковані, новий кластер (7).

grid[5][4] чорна, сусіди марковані різними мітками, ситуація аналогічна до grid[2][4]. Мітка – 6, кластер 7 – хибний (його справжній номер – 6).

grid[5][5] біла.

grid[5][6] чорна, сусіди не марковані, новий кластер (8).

`grid[6][1]`, `grid[6][2]`, `grid[6][3]`, `grid[6][4]` білі.

`grid[6][5]` чорна, сусіди не марковані, новий кластер (9).

`grid[6][6]` чорна, обидва сусіда марковані, мітка – 8, кластер 9 – хибний, його справжній номер – 8.

Після первинного маркування всі чорні вузли розподілені по кластерам (рисунок 3.1). Вони мають мітки від 2 до 9, проте не всі вони є справжніми. Вигляд масиву справжніх номерів (`num`) показаний на рисунку 3.2. Можна бачити, що справжніми є тільки мітки 2, 3, 6, 8. При цьому масив `num` має не тільки прості (одинарні) посилання (4 на 3, 7 на 6, 9 на 8), а й ланцюгову: мітка 5 не є справжньою, але й мітка `num[5]` (=4) також не справжня. Під час другого етапу усуваються подібні ланцюгові посилання, та в результаті буде винайдено справжню мітку кластера 5 – це значення 3 (рисунок 3.2).

Індекс	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Значення після первинного маркування	0	0	0	0	3	4	0	6	0	8
Значення після оновлення	0	0	0	0	3	3	0	6	0	8

Рисунок 3.2 – Масив справжніх номерів кластерів під час маркування

На етапі остаточного маркування всі хибні мітки замінюються на справжні. Як було встановлено вище, для цього доцільно використовувати групове присвоювання та функцію `find`. Остаточний результат показаний на рисунку 3.1.в. Якщо впорядкувати номери кластерів за їх розміром, то отримаємо кластеризацію, показану на рисунку 3.3. Можна бачити, що було отримано один кластер з 9 вузлів, один з чотирьох, один з трьох та один з поодинокого вузла.

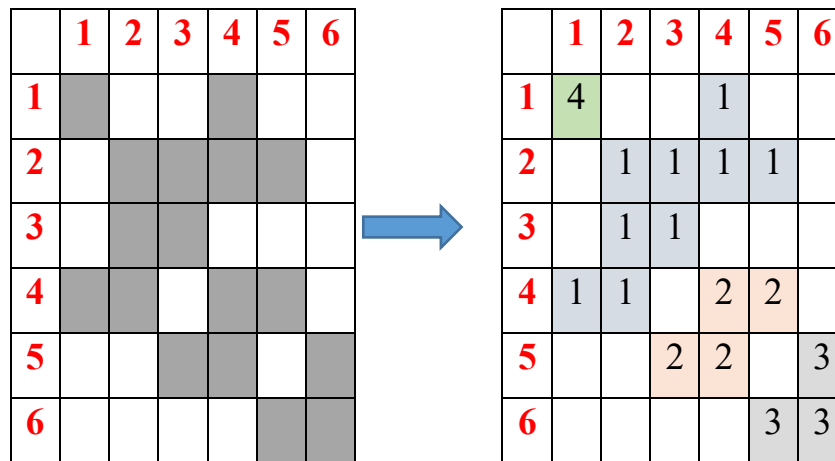


Рисунок 3.3 – Маркування кластерів за їх розміром у задачі вузлів

Для кластеризації вузлів решітки у задачі зв'язків алгоритм Хошена-Копельмана необхідно трохи модифікувати. По-перше, кластера номер 0 тепер не існує (оскільки всі вузли чорні). По-друге, немає необхідності в допоміжних (нульових) рядку та стовпці. По-третє, для кожного вузла (комірки) мають бути задані кольори зв'язків з лівим та вищим вузлами. Вважатимемо нульовий колір відсутністю зв'язка, а одиницю – наявністю. Зрозуміло, що зв'язки вгору для вузлів першого рядка та ліворуч для вузлів першого стовпця є нульовими. По-четверте, під час первинного маркування аналізується не колір сусідніх комірок, а кольори зв'язків з ними.

Нехай решітка (`grid`) має той самий розмір 6×6 , що й раніше. Припустимо, що конфігурація зв'язків має такий вигляд, як показано на рисунку 3.4. Для наочності чорні (одиничні) зв'язки показані зеленим кольором.

Скануємо решітку, починаючи з елемента `grid[1][1]`. Обидва його зв'язки нульові (це завжди так, бо він не має сусідів ані зліва, ані вище), тому призначаємо цьому вузлу новий кластер – 2 (рисунок 3.5).

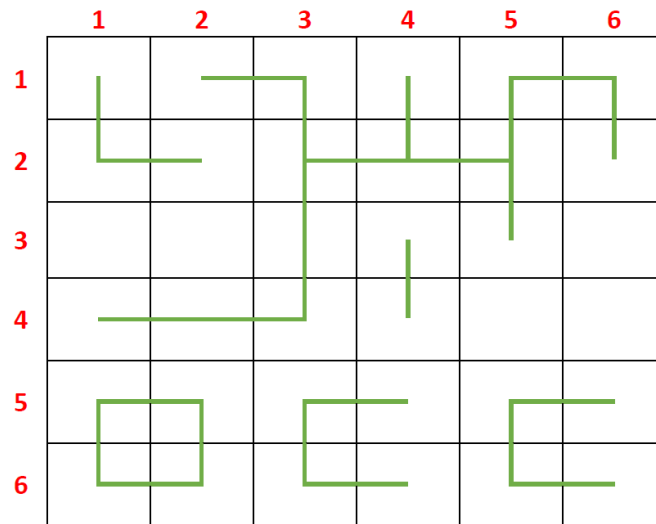


Рисунок 3.4 – Початкова решітка для задачі зв'язків

	1	2	3	4	5	6
1	2	3	3	4	5	5
2	2	2	3	3	3	5
3	6	7	3	8	3	9
4	10	10	3	8	11	12
5	13	13	14	14	15	15
6	13	13	14	14	15	15

Рисунок 3.5 – Результат первинного маркування у задачі зв'язків

`grid[1][2]` також не має ненульових зв'язків вгору чи ліворуч. Тому початкуємо новий кластер (3);

`grid[1][3]` має провідний (ненульовий, чорний, тобто зелений) зв'язок з сусідом ліворуч. Переймаємо номер кластера від цього сусіда (3);

`grid[1][4]`, `grid[1][5]` – нові кластери (4 та 5);

`grid[1][6]` – переймаємо номер кластера від лівого сусіда (5);

`grid[2][1]` – переймаємо номер кластера від верхнього сусіда (2);

`grid[2][2]` – переймаємо номер кластера від лівого сусіда (2);

`grid[2][3]` – переймаємо номер кластера від верхнього сусіда (3);

`grid[2][4]` – є зв'язки з обома сусідами. Переймаємо найменший з номерів їх кластерів (3), а більший (4) помічаємо міткою 3 у масиві справжніх номерів;

`grid[2][5]` – ситуація, аналогічна попередній. Номер кластера – 3, а кластер 5 мітимо 3 у масиві справжніх номерів;

`grid[2][6]` – переймаємо номер кластера від верхнього сусіда (5);

`grid[3][1]`, `grid[3][2]` – започатковуємо кластери 6 та 7;

`grid[3][3]` – переймаємо номер кластера від верхнього сусіда (3);

`grid[3][4]` – новий кластер (8);

`grid[3][5]` – переймаємо номер кластера від верхнього сусіда (3);

`grid[3][6]`, `grid[4][1]` – нові кластери (9 та 10);

`grid[4][2]` – переймаємо номер кластера від лівого сусіда (10);

`grid[4][3]` – переймаємо номер кластера від верхнього сусіда (3), а кластер лівого (10) помічаємо 3 як хибний;

`grid[4][4]` – переймаємо номер кластера від верхнього сусіда (8);

`grid[4][5]`, `grid[4][6]`, `grid[5][1]` – нові кластери (11,12,13);

`grid[5][2]` – переймаємо номер кластера від лівого сусіда (13);

`grid[5][3]` – новий кластер (14);

`grid[5][4]` – переймаємо номер від лівого сусіда (14);

`grid[5][5]` – новий кластер (15);

`grid[5][6]` – переймаємо номер від лівого сусіда (15);

`grid[6][1]` – переймаємо номер від верхнього сусіда (13);

`grid[6][2]` – сусіди відносяться до одного кластеру (13), переймаємо цей номер, при цьому масив справжніх номерів не чіпаємо;

`grid[6][3]` – переймаємо номер від верхнього сусіда (14);

`grid[6][4]` – переймаємо номер від лівого сусіда (14);

`grid[6][5]` – переймаємо номер від верхнього сусіда (15);

`grid[6][6]` – переймаємо номер від лівого сусіда (15).

Після первинного маркування оновлюємо масив справжніх номерів.

Номери 4, 5, 10 є хибними. Справжній номер цих кластерів – 3. В даному прикладі ланцюгів хибних номерів не було, тому масив не зміниться.

Під час остаточного маркування змінюємо хибні мітки (4, 5, 10) на відповідну їм справжню (3) та отримаємо результуючу кластеризацію (рисунок 3.6).

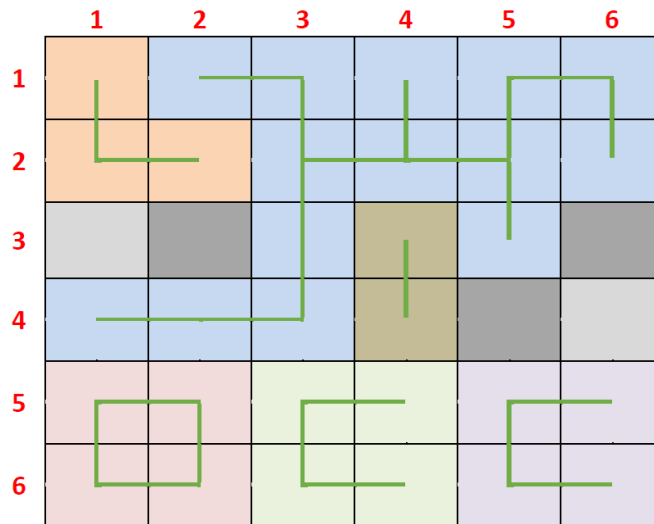


Рисунок 3.6 – Результуюча кластеризація вузлів у задачі зв’язків

У прикладі, який розглядався, фактична густина зв’язків ($p = 26/60$) була досить близька до критичного значення (2.25) $p_c = 1/2$. Через це на решітці майже сформувався гігантський кластер; легко бачити, що кластер 3 (показаний блакитним кольором на рисунку 3.6) містить біля 40% всіх вузлів, забезпечує протікання в горизонтальному напрямку та майже забезпечує у вертикальному.

3.2 Моделювання перколяції на безмасштабних мережах

Згідно з класичною постановкою задач перколяції, носієм перколяції зазвичай є регулярні решітки, двовимірні, тривимірні, інколи розглядаються решітки більшої розмірності. З точки зору теорії графів такі структури є

найпростішими. Втім, відомо, що у більшості випадків соціальні, соціально-економічні, інформаційні, технічні, біологічні зв'язки мають характер складних мереж. Характерними властивостями складних мереж є:

- великий розмір;
- динамічність у часі (зазвичай – зростання);
- випадковий характер зв'язків;
- неоднорідність вузлів;
- відносно велика густина зв'язків, що призводить до наявності

гігантського кластеру.

При цьому статистичні властивості складних мереж мають не дуже велике розмаїття. Так, відомо, що більшість (хоч і далеко не всі) складні мережі є безмасштабними (інваріантними до масштабу, *scale-free networks*). Розподіл вузлів за кількістю зв'язків у таких мережах асимптотично ступеневий:

$$\Pr(k) \approx C \cdot k^{-\gamma} \quad \text{при } k \rightarrow \infty. \quad (3.1)$$

Тобто, ймовірність того, що вузол матиме k сусідів, пропорційна до $k^{-\gamma}$ і ця залежність тим точніша, чим більшим є k . Параметр γ називається показником скейлінгу та зазвичай знаходиться у межах $\gamma \in (2;3]$. Приклад розподілу (3.1), показаний на рисунку 3.7.

Назва «безмасштабні» зумовлена тим, що якщо «прорідити» мережу, вилучивши вузли, які мають ступінь, меншу ніж k_0 , то розподіл ступенів тих вузлів, які залишились, буде задовільняти такому ж самому закону розподілу (3.1) з таким же самим значенням показника скейлінгу γ . І це буде вірно для довільних значень k_0 .

Інакше кажучи, якщо на графіку частотного розподілу вилучити числові позначення на вісях, то неможливо буде встановити, чи відноситься він до первісної мережі, чи до прорідженої.

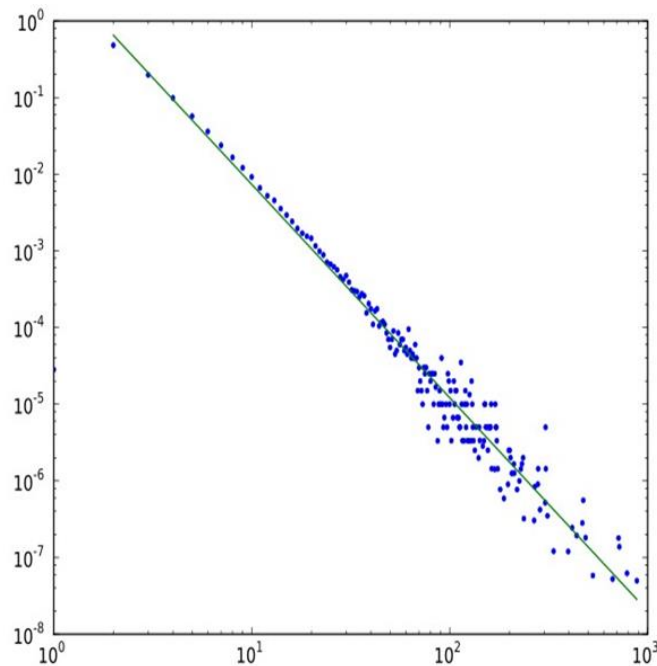


Рисунок 3.7 – Розподіл вузлів безмасштабної мережі за кількістю зв’язків

Найбільш відомою з моделей безмасштабних мереж є модель Барабаші-Альберт (розроблена у 1999р. Альбертом-Ласло Барабаші та Рекою Альберт). Ця модель імплементована у багатьох бібліотеках, зокрема у NetworkX є функція `barabasi_albert_graph`.

Мережа Барабаші-Альберт повністю зв’язна, тобто є одним кластером. У класичному варіанті середня кількість зв’язків вузла становить $m = 4$, втім найбагатший вузол має (у середньому) $m_{max} \approx 2\sqrt{\pi n}$ зв’язків (де n – загальна кількість вузлів у мережі).

Для того, щоб «розвалити» безмасштабну мережу на окремі кластери треба зробити «білими» (тобто непровідними) дуже значну частку первісних вузлів або зв’язків. При цьому результат (особливо для задачі вузлів) буде суттєво залежати не тільки від цієї частки, а й від стану найбагатших вузлів. Таке дослідження виходить далеко за межі даної кваліфікаційної роботи.

Проте, в роботі було поставлено та вирішено задачу адаптації алгоритма Хошена-Копельмана до мережі Барабаші-Альберт.

Структура зв'язків цієї мережі може бути подана або у вигляді матриці суміжності, або як список списків суміжних вузлів. Цей список (або матрицю) доцільно впорядкувати за спаданням кількості зв'язків у вузла. Тоді під час первинного маркування треба просто послідовно проглядати цей список, переймаючи найменший номер кластера серед вже маркованих сусідів та розповсюджуючи цей номер на немаркованих. При цьому, як завжди, необхідно підтримувати та обробляти список справжніх номерів кластерів.

Варто зазначити, що за результатами тестування через наявність вузлів великого ступеню алгоритм Хошена-Копельмана оброблює безмасштабні мережі навіть швидше, ніж двовимірні квадратні решітки з аналогічною кількістю вузлів.

3.3 Програмна реалізація та результати моделювання перколяції на регулярних решітках

В якості програмного середовища для імплементації алгоритмів, досліджених у кваліфікаційній роботі, було обрано MATLAB.

Пакет MATLAB (скорочення від MATrix LABoratory) був розроблений фірмою The MathWorks Inc. (США, м.Нейтик, шт.Массачусетс) є інтерактивною системою для виконання інженерних та наукових розрахунків. Сьогодні MATLAB використовується у понад 70 провідних університетах світу, таких широко відомих науково-дослідних центрів, як НАСА, Національна лабораторія в Лос-Аламосі, Стенфордському дослідному інституті та ін.

У MATLAB інтегрований потужний математичний апарат, що дозволяє розв'язувати складні задачі та, зокрема, знаходити рішення:

- лінійних та нелінійних алгебраїчних рівнянь та систем;
- задачі Коші та крайових задач для диференціальних рівнянь;
- диференціальних рівнянь у часткових похідних;

- задач статистичної обробки даних (обчислення статистичних параметрів, інтерполяція, апроксимація, згладжування тощо);
- задач лінійної алгебри (операції з матрицями та векторами);
- задач пошуку екстремумів функціональних залежностей.

MATLAB надає користувачеві потужні засоби графічного подання інформації (візуалізація функцій, що залежать від однієї змінної, полярних графіків, графіків поверхонь, карт ліній рівня, векторних полів тощо). Пакет має засоби анімації, що дозволяє розглядати часову еволюцію математичних моделей в динаміці і т.д. Крім того, у MATLAB інтегрований математичний апарат, який реалізує символні обчислення.

Обчислювальна потужність MATLAB поєднується з простотою вивчення та освоєння її вхідної мови, яку, зважаючи на принцип безпосереднього виконання, можна порівняти з мовою програмування BASIC. Фактично MATLAB є мовою програмування високого рівня для наукових та технічних розрахунків. Він включає практично всі відомі на сьогоднішній день методи чисельної математики.

Програмна реалізація алгоритму Хошена-Копельмана для кластеризації решіток, які перколюють, представлена у додатку А. Було реалізовано три підзадачі: кластеризація вузлів у задачі вузлів на двовимірній решітці, кластеризація вузлів у задачі зв'язків на двовимірній решітці, та кластеризація вузлів у задачі зв'язків на безмасштабній мережі Барабаші-Альберт.

Було докладно досліджено задачу перколяції вузлів на квадратній решітці. Вибір саме цієї решітки був зумовлений наочністю візуалізації результатів.

Розглядалась решітка розміром 512×512 вузлів (пікселів) з початковою концентрацією провідних (чорних) вузлів $p = 0.4$ (рисунок 3.8). Потім випадковим чином деякі білі вузли поступово перетворювались на чорні.

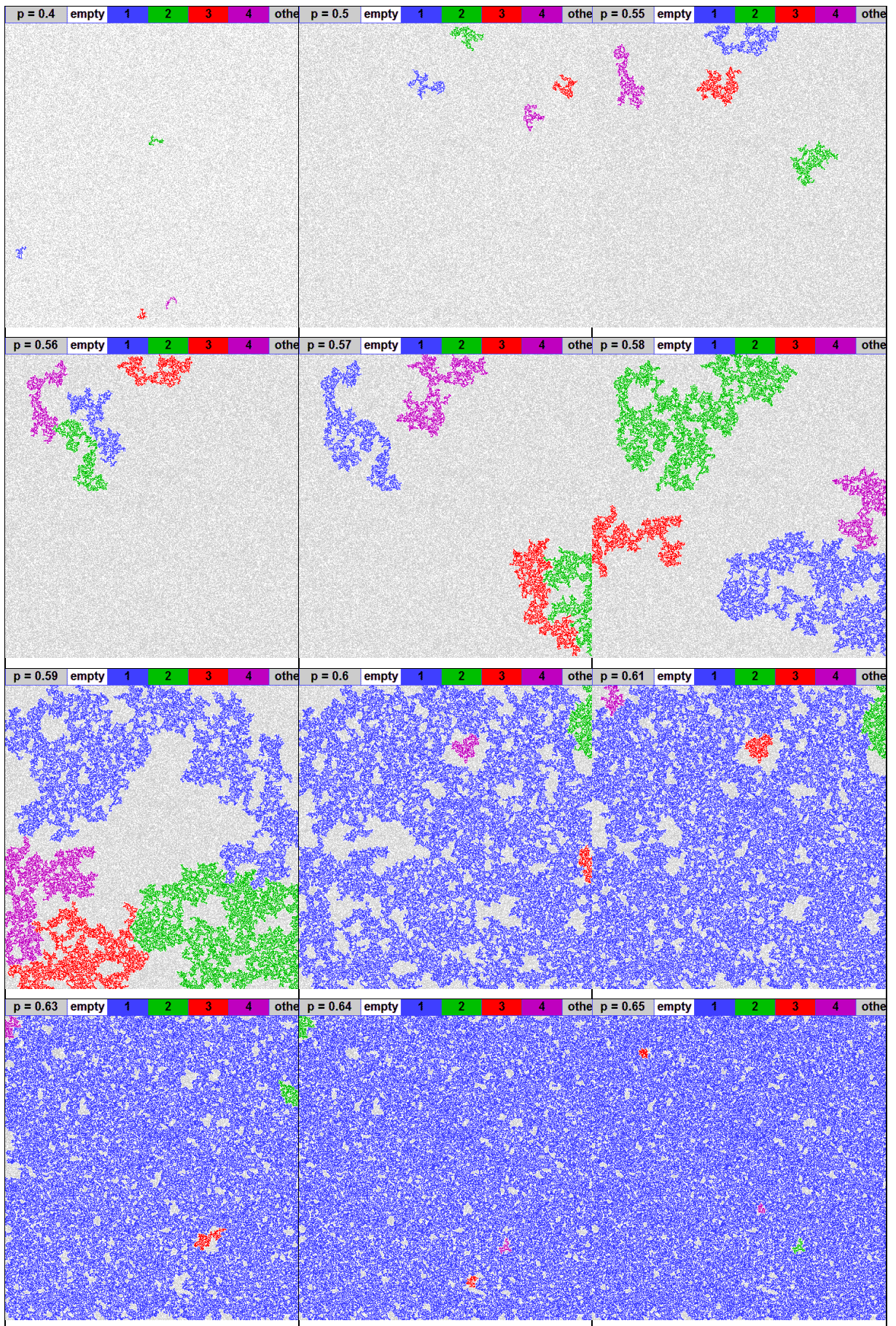


Рисунок 3.8 – Перколяція на квадратній решітці 512×512 (задача вузлів)

Для наочності візуалізації результатів пікселі найбільшого (за кількістю вузлів) кластеру відображались синім кольором, другого за розміром – зеленим, третього – червоним, четвертого – бузковим кольором. Інші провідні пікселі – чорні, непровідні – білі.

Згідно з результатами моделювання, можна бачити, що між значеннями $p = 0.59$ та $p = 0.60$ відбувся фазовий перехід – виник гігантський кластер (синій), який охоплює більшість вузлів решітки та забезпечує протікання крізь неї у будь-якому напрямку. Це повністю відповідає теорії перколяції, за якою критичне значення дорівнює $p_c \approx 0.5927$. У закритичній області гігантський кластер поступово поглинає всі інші (рисунок 3.9).

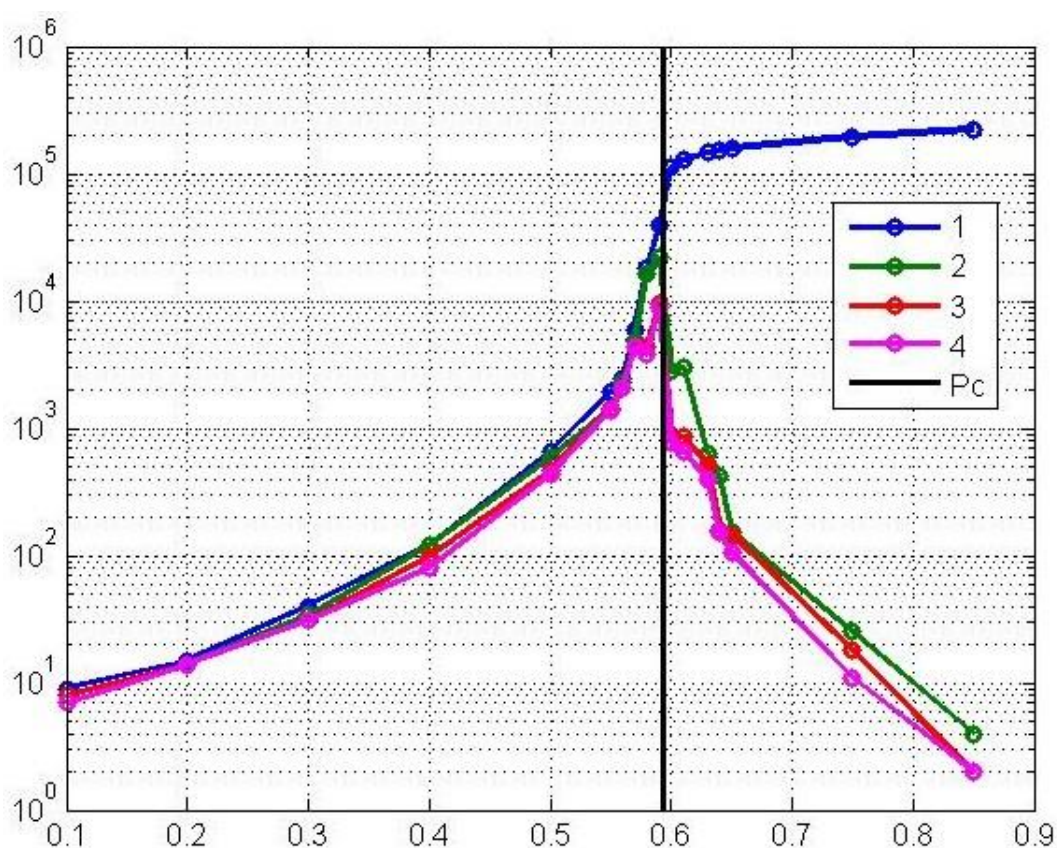


Рисунок 3.9 – Залежність розміру чотирьох найбільших кластерів від густини вузлів, які перколюють (задача вузлів на квадратній решітці

512 × 512)

Характерною ознакою досягнення порогу перколяції є співвідношення між розмірами першого та другого (та більш дрібних) кластерів. У передкритичній області ($p < p_c$) вони синхронно та монотонно зростають. Після досягнення порогової концентрації провідних вузлів розмір всіх кластерів, крім гігантського, швидко спадає (бо їх поглинає гігантський). Отримана залежність (рис.3.9) є дуже чіткою та може бути використана в якості експериментального метода оцінювання порогової концентрації p_c .

Працездатність реалізації алгоритма Хошена-Копельмана для кластеризації вузлів була перевірена і для задачі зв'язків (на цій же решітці), а також для задачі вузлів на безмасштабному графі.

ВИСНОВКИ

Теорія перколяції є відносно молодого наукою. Її основні ідеї були сформульовані у 1957 р. у роботі англійських вчених Бродбента та Хаммерслі. У буквальному перекладі слово percolation означає протікання, просочування, фільтрацію.

Явища, що описуються теорією протікання, відносяться до так званих критичних явищ. Ці явища характеризуються «критичною точкою», у якій властивості системи різко змінюються. Такі явища широко відомі у фізиці, хімії. Наприклад, до критичних явищ відносяться переходи металу з нормального стану у надпровідний при зниженні температури, або перехід від магнітних до парамагнітних властивостей при високій температурі. Найважливішою рисою критичних явищ є те, що поблизу критичної точки система як би розпадається на блоки (кластери).

Актуальність обраної теми обґрунтовується тим, що теорія перколяції стосується не тільки фізичних та хімічних явищ, а й процесів поширення та розповсюдження інформації, даних, комп'ютерних (та біологічних, таких як Ковід-19) вірусів.

Безумовно, найпростішим середовищем, у якому зручно досліджувати перколяцію, є двовимірні регулярні решітки, проте структура соціальних, соціально-економічних, технічних, інформаційних зв'язків є мережевою. Було проведено теоретичне дослідження поняття та процесів перколяції.

Для виконання практичної частини роботи було програмно реалізовано алгоритм кластеризації вузлів та проведено комп'ютерне моделювання перколяції як на регулярних двовимірних решітках, так і у випадкових безмасштабних мережах.

Було здійснено наочну візуалізацію отриманих результатів та проведено їхній аналіз.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Broadbent S. R., Hammersley J. M. Percolation processes. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. 1957. Vol. 53, no. 3. P. 629–641. URL: <https://doi.org/10.1017/s0305004100032680> (date of access: 01.12.2025).
2. Снарський А., Ланде Д. Моделювання складних мереж. Київ : Київ. політехн. ін-т, 2015. 212 с.
3. Hassan M. K., Rahman M. M. Percolation on a multifractal scale-free planar stochastic lattice and its universality class. *Physical Review E*. 2015. Vol. 92, no. 4. URL: <https://doi.org/10.1103/physreve.92.040101> (date of access: 01.12.2025).
4. Тарасевич Ю.Ю. Перколяція, теорія, додатки, алгоритми. 2002. 112 с.
5. Spontaneous recovery in dynamical networks / A. Majdandzic et al. *Nature Physics*. 2013. Vol. 10, no. 1. P. 34–38. URL: <https://doi.org/10.1038/nphys2819> (date of access: 01.12.2025).
6. Bollobás B., Riordan O. Sharp thresholds and percolation in the plane. *Random Structures and Algorithms*. 2006. Vol. 29, no. 4. P. 524–548. URL: <https://doi.org/10.1002/rsa.20134> (date of access: 01.12.2025).
7. Newman M. E. J., Ziff R. M. Efficient Monte Carlo Algorithm and High-Precision Results for Percolation. *Physical Review Letters*. 2000. Vol. 85, no. 19. P. 4104–4107.
8. Grimmett G. R., Marstrand J. M. The supercritical phase of percolation is well behaved. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences*. 1990. Vol. 430, no. 1879. P. 439–457. URL: <https://doi.org/10.1098/rspa.1990.0100> (date of access: 01.12.2025).
9. Brunk N. E., Twarock R. Percolation Theory Reveals Biophysical Properties of Virus-like Particles. *ACS Nano*. 2021. Vol. 15, no. 8. P. 12988–12995.

10. Newman M. E. J. Spread of epidemic disease on networks. *Physical Review E*. 2002. Vol. 66, no. 1.

11. Parshani R., Buldyrev S. V., Havlin S. Critical effect of dependency groups on the function of networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2010. Vol. 108, no. 3. P. 1007–1010. URL: <https://doi.org/10.1073/pnas.1008404108> (date of access: 01.12.2025).

12. Герасімчук М. Д., Лазарєв Ю. Ф., Толочко Т. О. Моделювання систем у середовищі MATLAB-SIMULINK. Київ : НТУУ «КПІ», 2006. 175 с.