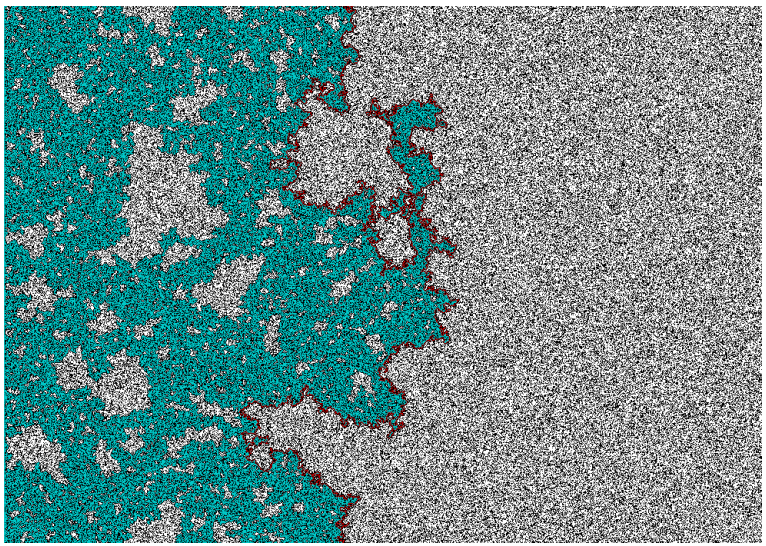
Теорія перколяції (протікання). Алгоритм Гошена-Копельмана

- У фізиці, хімії та матеріалознавстві перколяція (від лат. *percolare* – «фільтрувати, просочуватися крізь») відноситься до руху та фільтрації рідин крізь пористі матеріали.
- Назва теорії, що відображає її мету, походить з такої задачі. Нехай в пористий матеріал заливається рідина. Чи просочиться вона крізь мережу пор аж до протилежного боку?
- Математично цю фізичну задачу моделюють d-вимірною мережею на ґратці розмірністю L^d вузлів. Сусідні вузли сполучені між собою шляхами, які можуть з імовірністю p бути відкритими. Яка ймовірність того, що в системі існує наскрізний ланцюжок відкритих шляхів? Особливо цікава поведінка при великих L. Поставлена так задача, що отримала назву перколяції зв'язків (bond percolation), була сформульована Бродбентом та Гаммерслі в 1950-х, після чого почалося й продовжується її дослідження фізиками та математиками.

Дещо по іншому формулюється задача перколяції вузлів (site percolation).
Припускається, що вузол може бути з імовірністю p заповненим. В протилежному випадку він є порожнім. Питання не змінюється: яка імовірність існування наскрізного (заповненого) кластеру?

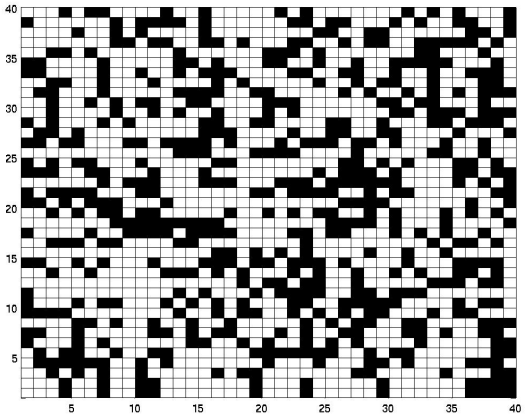
Приклад – фронт перколяції на квадратній ґратці з $p = 0.593$ (близькокритичне значення).



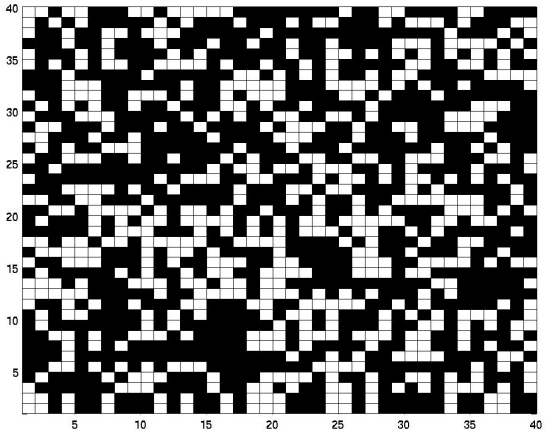
- Застосування теорії перколяції: матеріалознавство, стійкість матеріалів (у т.ч. радіаційна), нафтова промисловість, побудова мереж (інтернет), вірусологія, екологія (лісові пожежі), харчова промисловість (фільтрація кави, випічка, ...)

- Найважливіше питання з боку всіх застосувань:
  За яких значень p у системі з'являється наскрізний кластер?

p=0.4



p=0.6



На це питання однозначним чином можна відповісти лише в термодинамічній границі ($L \to \infty$):

1) якщо $p < p_c$ – є лише кластери скінченних розмірів;
2) якщо $p > p_c$ – є один наскрізний кластер;

- Як визначити критичне значення p_c – поріг перколяції (percolation threshold)?

→ Для більшості геометрій ґраток точних аналітичних відповідей немає. Застосовують чисельний аналіз.

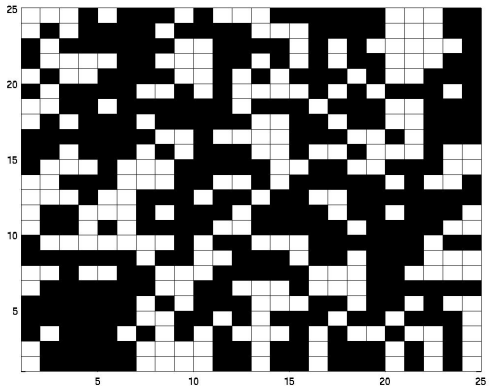
- Для систем скінченного розміру (тобто в більшості чисельних розрахунків) додатково визначають імовірність протікання:

$$\pi(p, L)$$

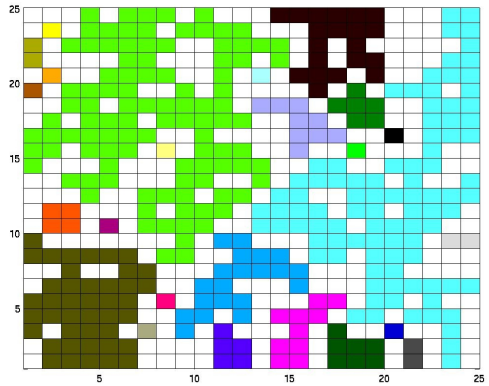
– імовірність, того, що в конкретному випадку ми отримаємо наскрізний кластер.

- Як найефективніше проаналізувати кластерізацію? Як виявити наскрізний кластер?

→ У бінарному поданні – візуально досить складно.
Але існує багато алгоритмів для ефективного розрізнення кластерів.



p=0.6



- У рамках цього курсу ми детально опрацюємо алгоритм Гошена–Копельмана (1976 р.). *

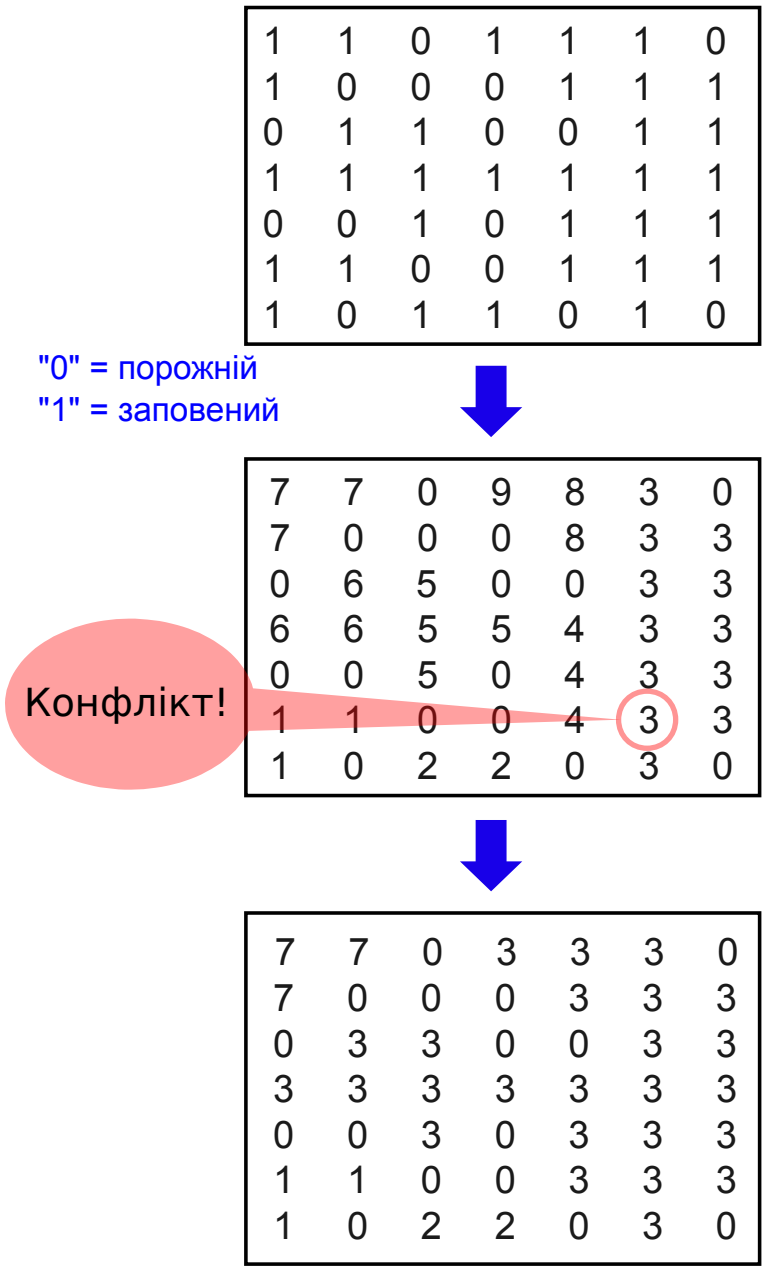
* **Hoshen, J.; Kopelman, R. (1976). "Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm". Phys. Rev. B. 14 (8): 3438–3445.**

Алгоритм Гошена–Копельмана:

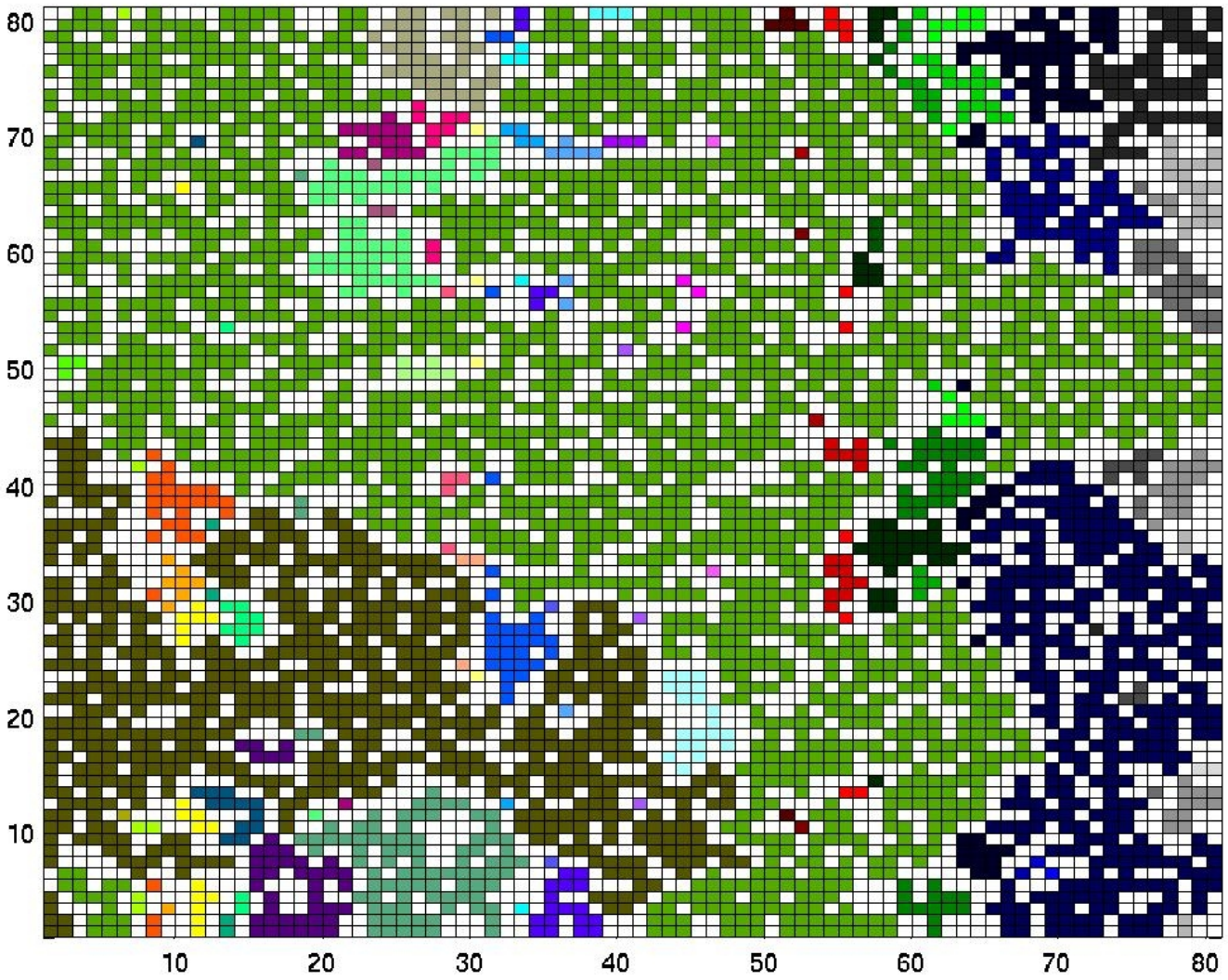
- Починаємо з випадкової конфігурації на ґратці (1 і 0 розподілені випадково відповідно до обраного p).
- Послідовно перебираємо вузли (наприклад, зліва-направо нижній рядок, потім рядок вище).
- Першому заповненому вузлу вішаємо кластерний ярлик «1».
- Якщо наступний заповнений вузол з'єднаний з кластером (перевіряємо лише попередніх сусідів) – той самий ярлик; якщо ні – $n+1$.
- Порожні вузли залишаємо «0».
- У разі «конфлікту» (два сусіди мають різні ярлики) – вішаємо менший ярлик.
- Також зберігаємо окремо «коректний» ярлик (proper label).

→ У разі «конфлікту» оновлюємо «коректний» ярлик.

- Після проходження всієї ґратки замінюємо ярлики на «коректні» ярлики на всіх вузлах.



Приклад з наскрізним кластером:



p=0.6

Кількісні характеристики кластерізації та перколяції в цілому:

- s – розмір кластеру (кількість вузлів у кластері).
- n_s – середня кількість кластерів (розміру s), що припадає на вузол ґратки.
- Тоді
$$\sum_s s n_s = p \qquad \text{– імовірність приналежності до будь-якого кластеру.}$$
- Таким чином можна визначити середній розмір кластеру (за винятком наскрізного, що позначимо $'$ у знаках суми)
$$S(p) = \frac{\sum' s^2 n_s}{\sum' s n_s}.$$
Ця характеристика має розбіжність з наближенням p до критичного значення, $p \to p_c$. Це є зручною ознакою критичного режиму протікання.
- Ще одна важлива кількісна характеристика – $P_\infty(p)$ – імовірність того, що заповнений вузол входить до наскрізного кластеру.

Розглянемо одновимірний випадок:

- Імовірність виявлення кластеру саме розміру s: $(1-p)p^s(1-p)$.
- Цей кластер може починатись на будь-якому з L вузлів, тому $Lp^s(1-p)^2$.
- Звідси в розрахунку на вузол: $n_s = p^s(1-p)^2$.
- Середній розмір кластеру:
$$S(p) = \frac{\sum s^2 p^s (1-p)^2}{\sum s p^s (1-p)^2} = \frac{\sum s^2 p^s}{\sum s p^s} = \frac{\sum s(s-1)p^s}{\sum s p^s} + 1 = \frac{2p}{1-p} + 1 = \frac{1+p}{1-p}.$$
Вочевидь, $S(p)$ має розбіжність лише за $p = 1$. Це має сенс, бо наскрізний кластер в одновимірному випадку буде лише коли всі вузли заповнені.

Критична поведінка:

- Перколяція є прикладом геомеричного фазового переходу.
- Тому за $p = p_c$ буде спостерігатись характерна критична поведінка кореляційної довжини ξ.
- Якщо ввести $G(r)$ – імовірність того, що два заповнені вузли на відстані r належать до одного кластеру, то за $p \neq p_c$:

$$G(r) \sim \exp(-r/\xi).$$

- Сама ж кореляційна довжина буде мати розбіжність за $p = p_c$. Її критична поведінка в околі критичної точки:

$$\xi \sim |p - p_c|^{-\nu}.$$

- Так само і середній розмір кластеру:

$$S(p) \sim |p - p_c|^{-\gamma}.$$

- Як і ймовірність того, що заповнений вузол входить до наскрізного кластеру:

$$P_\infty(p) \sim (p - p_c)^{\beta}.$$

Усі перелічені степеневі закономірності виконуються строго тільки для нескінченних систем.

- Критичні експоненти $\{\nu, \gamma, \beta, \ldots\}$ підкорюються законам універсальності, таким чином залежать тільки від вимірності простору d (на відміну від значень p_c, що залежить також від геометрії гратки: $p_c \approx .5927$ для квадратної, $p_c = 1/2$ для трикутної тощо)

Універсальність:

- У дво- та тривимірному просторі встановлено наступні значення експонент:

	Функціональний вигляд	Експонента	$d = 2$	$d = 3$
Параметр порядку	$P_\infty(p) \sim (p - p_c)^\beta$	β	5/36	0.41
Середній розмір кластеру	$S(p) \sim \lvert p - p_c \rvert^{-\gamma}$	γ	43/18	1.80
Кореляційна довжина	$\xi \sim \lvert p - p_c \rvert^{-\nu}$	ν	4/3	0.88
Кількість кластерів на вузол	$n_s \sim s^{-\tau}$	τ	187/91	2.18

- Існують також додаткові співвідношення між експонентами, наприклад за $d \leq 6$ (hyperscaling):

$$2\beta + \gamma = \nu d.$$

Масштабування зі скінченних розмірів (finite-size scaling):

- Як побачити критичну поведінку за скінченних розмірів системи?
- Система з лінійними розмірами L природньо обмежує кореляційну довжину

$$L \gtrsim \xi \sim \lvert p - p_c \rvert^{-\nu}.$$

- Таким чином, мають прояв ефекти скінченності для наступних p в околі p_c:

$$\lvert p - p_c \rvert \sim L^{-1/\nu}.$$

Зокрема, $S(p)$ не буде мати розбіжності, а буде скінченний максимум:

$$S(p \approx p_c) \sim L^{\gamma/\nu}.$$

Проводячи розрахунки за різних L можна визначити критичні експоненти.

- Ще один приклад: визначення критичного значення p_c.
  Для скінченної системи можна виходити з наступного закону масштабування:

$$\pi(p, L) = g((p - p_c)L^{1/\nu}).$$

  Це приводить до співвідношення

$$\langle p(L) \rangle - p_c \sim L^{-1/\nu}.$$

  В двовимірному випадку, наприклад, $\nu = 4/3$, тому можна визначити p_c за достатньої кількості наборів вимірювань і різних L.