

ПЕРМСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

К. А. Эберт,
М. М. Бузмакова

**МОДЕЛИ ПЕРКОЛЯЦИИ И
ДЖЕММИНГА НЕТОЧЕЧНЫХ
ОБЪЕКТОВ НА КВАДРАТНОЙ
РЕШЕТКЕ**



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«ПЕРМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

К. А. Эберт, М. М. Бузмакова

**Модели перколяции и джемминга
неточечных объектов на квадратной
решетке**

Монография



Пермь 2024

УДК 51:001:004

ББК 32.813 + 6/8

Э132

Эберт К. А.

Э132 Модели перколяции и джемминга неточечных объектов на квадратной решетке [Электронный ресурс] : монография / К. А. Эберт, М. М. Бузмакова ; Пермский государственный национальный исследовательский университет. — Электронные данные. — Пермь, 2024. — 11,6 Мб ; 86 с. — Режим доступа: <http://www.psu.ru/files/docs/science/books/mono/Ebert-Buzmakova-Modeli-perkolyacii-i-dzhemminga-netochechnyh-obektov-na-kvadratnoj-reshetke.pdf>. — Заглавие с экрана.

ISBN 978-5-7944-4141-3

В монографии представлены материалы исследований авторов в области изучения процессов перколяции и джемминга k -меров и блоков на квадратной решетке.

Монография предназначена для научных и педагогических работников, преподавателей, аспирантов, магистрантов, студентов и всех, кто интересуется проблемами перколяции и джемминга неточечных объектов.

УДК 51:001:004

ББК 32.813 + 6/8

Издается по решению кафедры прикладной математики и информатики Пермского государственного национального исследовательского университета

Рецензенты: зав. кафедрой «Вычислительная математика, механика и биомеханика» Пермского национального исследовательского политехнического университета, профессор, д-р техн. наук **В. Ю. Столбов**;

доцент кафедры прикладной математики и информатики Астраханского государственного университета им. В. Н. Татищева, канд. физ.-мат. наук **В. А. Черкасова**.

© ПГНИУ, 2024

ISBN 978-5-7944-4141-3

© Эберт К. А., Бузмакова М. М., 2024

Оглавление

Стр.

Введение	5
Глава 1. Введение в теорию перколяции.	
Перколяция неточечных объектов	7
1.1. Понятие перколяции, перколяционная задача	7
1.2. Кластеры, перколяционный кластер. Критические показатели	15
1.3. Методика определения порога перколяции	20
1.4. Перколяция неточечных объектов	24
1.5. Явление джемминга	25
1.6. Методика определения порога джемминга	25
Глава 2. Перколяция и джемминг k-меров на квадратной решетке	26
2.1. Введение	26
2.2. Описание «классической» модели	29
2.3. Результаты моделирования	32
2.3.1. Перколяция линейных k -меров	32
2.3.2. Джемминг линейных k -меров, учет параметра упорядочивания	39
2.3.3. Перколяция и джемминг нелинейных k -меров	47
2.3.4. Перколяция линейных k -меров с учетом длины связи	50
2.3.5. Комбинированные модели	54

Глава 3. Перколяция и джемминг блоков на квадратной решетке	57
3.1. Введение	57
3.2. Описание «классической» модели	59
3.3. Результаты моделирования	63
3.3.1. Перколяция и джемминг блоков с периодическими граничными условиями .	63
3.3.2. Джемминг блоков с закрытыми граничными условиями	71
Заключение	75
Библиографический список	77

Введение

Развитие теории перколяции в последнее время вызывает интерес у многих исследователей. Ее популярность заключается в простоте постановки задач и легкости их применения в большом спектре прикладных исследований из совершенно разных областей наук. Так, например, перколяционные модели могут успешно применяться как для изучения структуры и свойств материалов, так и для процесса развития транспортных систем или распространения заболеваний.

Теория перколяции развивается в трех основных направлениях. Первым направлением является развитие самой теории, включающее изучение новых перколяционных моделей, в частности, определение значений порога перколяции и других характеристик. Ко второму направлению относят развитие новых и модификацию известных алгоритмов, применяемых при решении перколяционных задач, в том числе с использованием современных средств быстрых вычислений, например, параллельных. Третье направление посвящено прикладным аспектам перколяционных моделей, и исследователи из разных областей наук все чаще прибегают к методам теории перколяции.

Основанием для издания настоящей монографии послужило большое количество полученных авторами результатов в области моделирования перколяции неточечных объектов на квадратной и кубической решетках. Кроме того, при изучении перколяционных эффектов авторы сталкиваются еще с одним

интересным явлением — джеммингом, которое тоже заслуживает внимания. Подобными задачами занимаются и другие исследователи, но основной целью авторов в рамках данной работы является систематизация знаний в области теории перколяции, связанной с неточечными объектами. В частности, авторы рассматривают различные модели перколяции и джемминга k -меров и блоков на квадратной решетке. Материалы монографии актуальны для исследователей с точки зрения всех трех направлений ее развития, так как содержат и новые фундаментальные сведения теории, и описание эффективных используемых авторами алгоритмов, и разнообразие перколяционных моделей неточечных объектов на квадратной решетке, позволяющее их практически применять. Кроме того, материалы монографии можно использовать в качестве учебных материалов для студентов и аспирантов в области прикладной математики.

Монография состоит из трех основных глав. Первая глава знакомит читателей с общими понятиями и подходами теории перколяции. Также в данной главе приведены определения в области перколяции и джемминга неточечных объектов. Во второй главе описаны результаты исследований авторов по перколяции и джеммингу k -меров на квадратной решетке. Третья глава посвящена результатам исследований авторов по перколяции и джеммингу блоков на квадратной решетке.

Глава 1. Введение в теорию перколяции. Перколяция неточечных объектов

1.1. Понятие перколяции, перколяционная задача

Перколяция означает протекание, просачивание (от англ. percolation). Принято считать, что перколяция начала активно развиваться во второй половине прошлого века с публикации работы Д. Бродбента и Дж. Хаммерсли (1957 г.), посвященной процессам прохождения жидкостей через пористые среды [1]. Авторы поставили перколяционный процесс в противоположность диффузии (неупорядоченного движения в упорядоченной среде), как упорядоченное движение в неупорядоченной среде. Однако упоминается перколяционный процесс и в более ранних работах Флори (с 1941 г.) и Стокмайера (с 1943 г.), посвященных образованию гелей при полимеризации [2–6]. Более подробно с историей развития теории перколяции можно ознакомиться в работе [7].

Теория перколяции изучает образование связанных объектов в неупорядоченных средах. С математической точки зрения перколяцию можно сопоставить с теорией вероятностей на графах. С точки зрения физики, перколяционный процесс — это геометрический фазовый переход, где в первой фазе существует множество конечных связанных объектов, а во

второй связанные объекты образуют бесконечное множество. Таким образом, любая перколяционная задача рассматривает так называемый концентрационный фазовый переход, который называют перколяционным.

Рассмотрим простой пример перколяционной задачи на квадратной решетке, с помощью которой можно описать переход диэлектрик-проводник. Изначально имеется диэлектрик, представленный в виде простой квадратной решетки. Все ячейки (клетки, узлы) решетки пустые и являются непроводящими (рис. 1.1, слева).

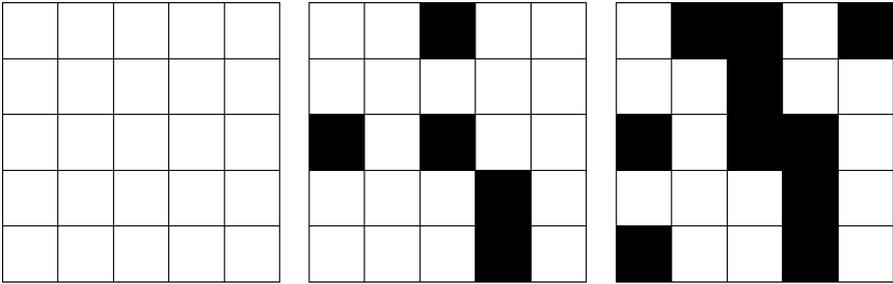


Рисунок 1.1. Пример возникновения перколяции на квадратной решетке

Далее начнем в этот диэлектрик добавлять случайным образом проводящие частицы — появляются проводящие ячейки черного цвета (рис. 1.1, в центре). Вопрос: чтобы решетка стала проводящей (как на рис. 1.1, справа), сколько нужно добавить проводящих ячеек? Ответом является значение некоторой критической концентрации проводящих ячеек, которую необходимо найти. Это, собственно, и является целью решения любой перколяционной задачи.

Перколяционные задачи классифицируются по разным критериям. Приведенный выше пример демонстрирует перколяцию на квадратной решетке. Решетки могут быть различных видов (треугольные, квадратные, гексагональные) и размерностей (двумерные, трехмерные). Также перколяцию можно рассматривать не на решетках, а в непрерывной среде — в континууме. Таким образом, существует два основных вида перколяционных задач: *решеточные* (дискретные) и *континуальные* (непрерывные). Примером континуальной перколяции (см. рис. 1.2) может служить перколяция кругов на плоскости.

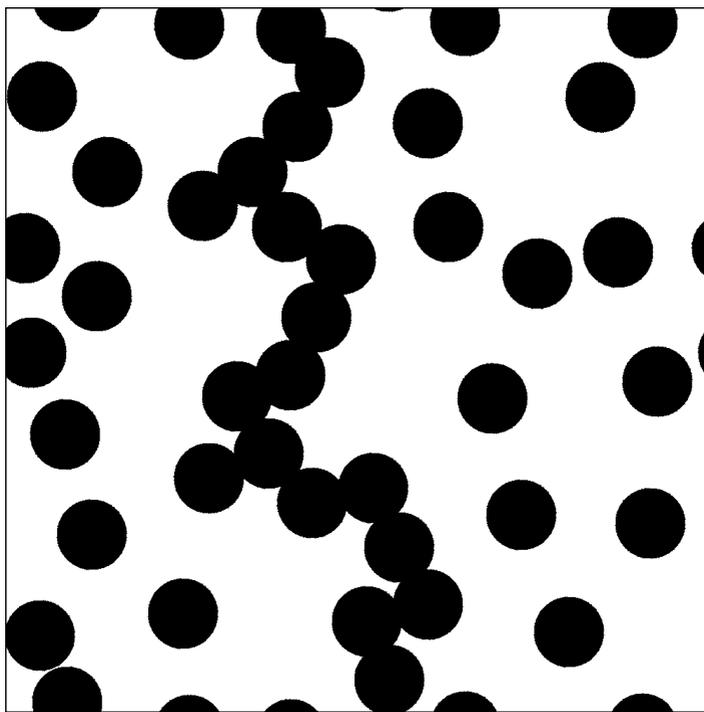


Рисунок 1.2. Пример континуальной перколяции кругов на плоскости

Перколяционная система может быть заполнена различными объектами. Так, например, если объектом является одна ячейка решетки, то речь идет о перколяции *точечных* объектов. Понятно, что с помощью такой модели можно изучать достаточно ограниченное количество реальных структур или процессов. Объекты могут быть *неточечными*, например, если рассмотреть на той же квадратной решетке в качестве объекта k подряд ее ячеек. Такие объекты принято называть k -мерами в теории перколяции. Или эти же k -меры в континууме — это отрезки фиксированной длины k . С помощью таких объектов круг изучаемых реальных структур и процессов значительно расширяется. Также исследуются перколяционные модели квадратов, прямоугольников, кругов, кубов, сфер, эллипсоидов и многих других объектов.

По способу распределения объектов в перколяционной системе модели бывает *случайными* и *коррелированными*. В первом случае объекты размещаются случайным образом, во втором — с использованием некоторых правил или закономерностей. Если распределение объектов случайно, то, как правило, оно должно являться равномерным. Кроме того, на объекты можно накладывать условия размещения относительно друг друга: пересечения или непересечения, частичного перекрытия (когда присутствуют твердая оболочка и пронизываемый слой) и др.

При решении перколяционных задач рассматриваются перколяционные системы конечного размера — некоторые ограниченные области. При размещении объектов важным является то, как будет размещаться объект, если он попадает на границу системы.

К примеру, в задаче требуется случайное равномерное распределение. Если отвергать объекты, которые попадают на границу рассматриваемой области, то получится структура с наиболее плотной упаковкой в середине и менее плотной по краям (закрытые граничные условия, см. рис. 1.3). Для решения этой проблемы в теории перколяции принято использовать различные граничные условия.

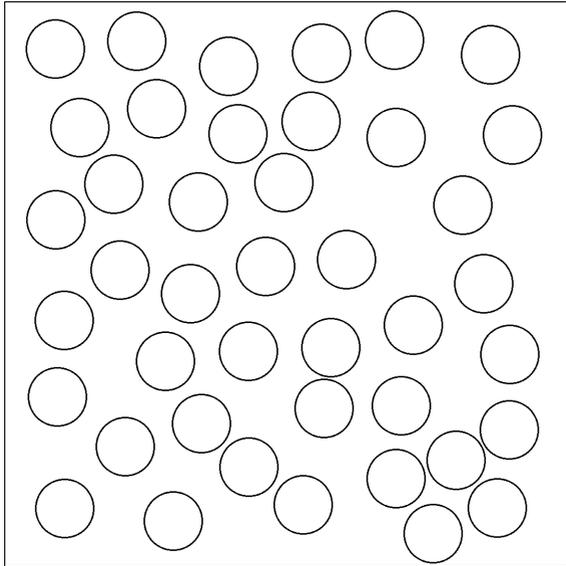


Рисунок 1.3. Использование закрытых граничных условий при размещении непересекающихся окружностей

Наиболее распространенными являются открытые граничные условия, периодические граничные условия и их возможные комбинации. При открытых граничных условиях к каждому граничному слою добавляются нулевые слои, все объекты размещаются на границах с той же вероятностью, что и в центре перколяционной системы, при пересечении с границей

они не отвергаются. В дальнейшем части объектов, попадающих в нулевые слои, обрезаются, а при расчете концентрации и кластерных характеристик учитываются только их части внутри перколяционной системы. В случае периодических граничных условий каждый объект размещается в системе по всем направлениям с периодом, равным линейному размеру системы.

Смешанные граничные условия представляют собой различные комбинации открытых и периодических, например, в одном направлении используются открытые граничные условия, а в другом направлении — периодические.

Примеры заполнения плоской системы объектами при использовании открытых и периодических граничных условий представлены на рис. 1.4 и 1.5.

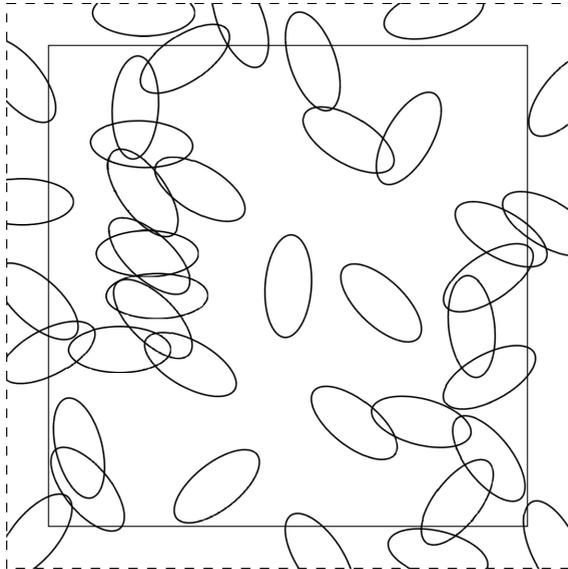


Рисунок 1.4. Использование открытых граничных условий при размещении пересекающихся эллипсов

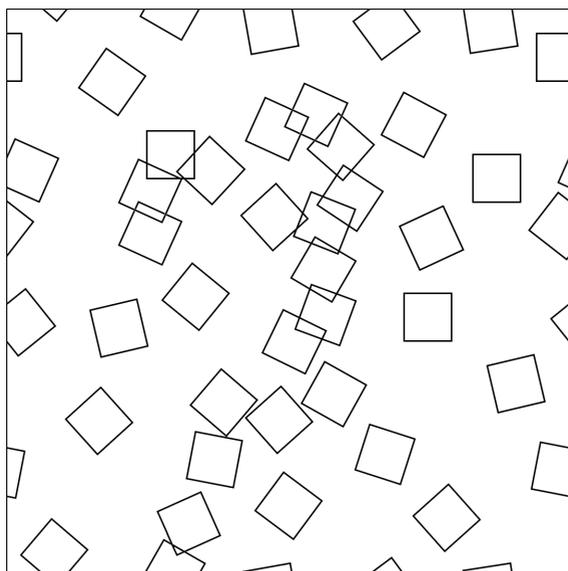


Рисунок 1.5. Использование периодических граничных условий при размещении пересекающихся квадратов

Перколяционные задачи классифицируются по способу объединения объектов в группы — *кластеры*. Пусть под объектом понимается некоторый *узел*. Узел может быть как ячейкой решетки, так и кругом на плоскости. Кроме того, возможно наличие *связи* между двумя узлами. Рассматриваются три вида перколяционных задач: *задача узлов*, *задача связей* и *смешанная задача*.

В задаче узлов два объекта принадлежат одному кластеру, если они являются соседними занятыми узлами, при этом критерии соседства могут быть разные в зависимости от поставленной задачи. В задаче связей, как правило, все узлы находятся в занятом состоянии, а два объекта принадлежат одному кластеру, если между ними существует связь.

Критерии наличия связи также могут быть разные в зависимости от поставленной задачи. Смешанная задача объединяет задачу узлов и задачу связей, могут быть рассмотрены как свободные, так и занятые узлы и различные условия наличия связи между ними. Таким образом, комбинируя различные параметры перколяционной задачи, можно описать многие структуры и процессы в различных отраслях науки. Например, процессы гелеобразования, фильтрации, перехода диэлектрик-проводник, парамагнетик-ферромагнетик, образования трещин в горных породах, распространения пожаров, эпидемий и информации. Также исследуют структуру и свойства композитов, в том числе на микро- и наноуровне. Этот список можно продолжать и дальше, с каждым годом такие модели все больше и больше охватывают разные области современной науки. Более подробно с применением перколяционных моделей и теории перколяции в целом можно ознакомиться в книге [8].

Все рассматриваемые структуры и процессы с использованием перколяционных моделей объединяет наличие концентрационного перехода, такого критического состояния, при котором происходит скачкообразное изменение фазы (будь то изменение структуры, свойства или же возникновение нового свойства). Это называется *перколяционным переходом*, а критическая концентрация связанных объектов, при которой происходит такой переход, соответствует *порогу перколяции*.

Простые перколяционные задачи решаются аналитически, но для большинства моделей, способных описать реальные структуры и процессы, производятся численные расчеты с использованием методов Монте-Карло.

Можно выделить следующие этапы моделирования с применением методов теории перколяции:

1. Постановка задачи в области исследования.
2. Математическая постановка задачи.
3. Определение используемых алгоритмов.
4. Программная реализация.
5. Проведение численного эксперимента.
6. Обработка и анализ результатов.

Каждый этап решения задачи важен и включает в себя основные направления развития теории перколяции:

- получение новых фундаментальных знаний (разработка и исследование новых теоретических моделей);
- разработка эффективных алгоритмов, в том числе с применением параллельных вычислений;
- практическое применение перколяционных моделей.

1.2. Кластеры, перколяционный кластер.

Критические показатели

Основным объектом изучения в любой перколяционной задаче является *кластер*. Кластером называется группа объектов, объединенных по какому-либо критерию. Самым распространенным критерием принадлежности одному кластеру является близость объектов. Кроме него можно добавлять любые условия, требуемые в рамках конкретной модели.

Размером кластера является количество занятых узлов, ему принадлежащих. При малых долях заполнения объектами кластеров немного и они обычно единичные. При увеличении

доли заполнения количество кластеров постепенно увеличивается. Далее происходит слияние небольших кластеров в более крупные. Затем появляется минимум один кластер, который распространяется по всей системе. Такой кластер называется *перколяционным*. Если в системе существует хотя бы один перколяционный кластер, то говорят о наступлении перколяции. При дальнейшем увеличении числа объектов в системе, как правило, все оставшиеся кластеры присоединяются к перколяционному. Пример данного процесса продемонстрирован на рис. 1.6.

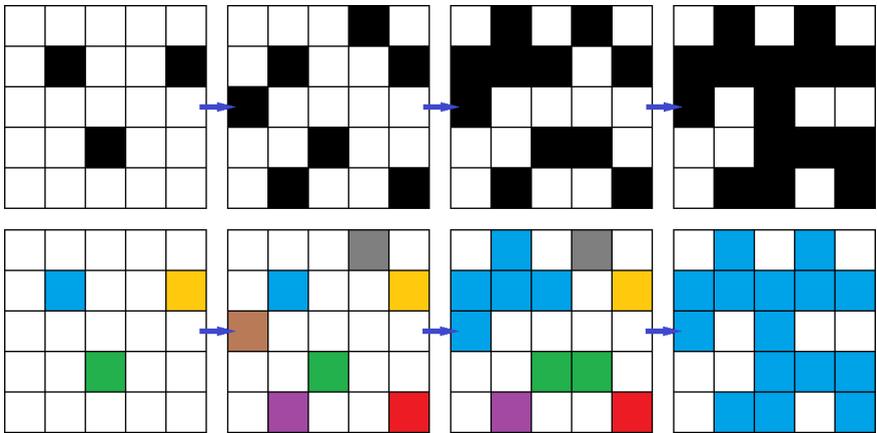


Рисунок 1.6. Образование кластеров при увеличении доли заполнения перколяционной системы объектами на простой квадратной решетке

Таким образом, при постоянном увеличении доли заполнения перколяционной системы объектами происходит перколяционный переход, который разделяет две фазы (поэтому его можно отнести к фазовым переходам). В первой фазе существуют только кластеры конечного размера, во второй фазе

помимо конечных кластеров присутствует, как минимум, один бесконечный (перколяционный кластер). Точка перколяционного перехода соответствует *порогу перколяции*. Нахождение порога перколяции является основной задачей для каждой перколяционной модели.

Перед тем, как перейти к методике определения порога перколяции, необходимо познакомиться с некоторыми характеристиками кластеров. Пусть N — это общее количество ячеек решетки, p — доля заполнения решетки объектами, N_s — количество кластеров размера s , $\langle N_s \rangle$ — среднее количество кластеров размера s (значения усредняются по количеству испытаний), тогда распределение кластеров по размерам [9; 10]:

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

доля занятых ячеек, принадлежащих кластерам размера s :

$$s \cdot n_s(p), \quad (1.2)$$

полная доля занятых ячеек:

$$\sum_s s \cdot n_s(p), \quad (1.3)$$

вероятность того, что случайным образом выбранная ячейка принадлежит кластеру размера s :

$$w_s = \frac{s \cdot n_s(p)}{\sum_s s \cdot n_s(p)}, \quad (1.4)$$

средний размер кластера:

$$S(p) = \sum_s s \cdot w_s, \quad (1.5)$$

мощность перколяционного кластера:

$$P_{\infty} = \frac{N_{\infty}}{N}. \quad (1.6)$$

Поведение среднего размера кластера и мощности перколяционного кластера схематично изображено на рис. 1.7.

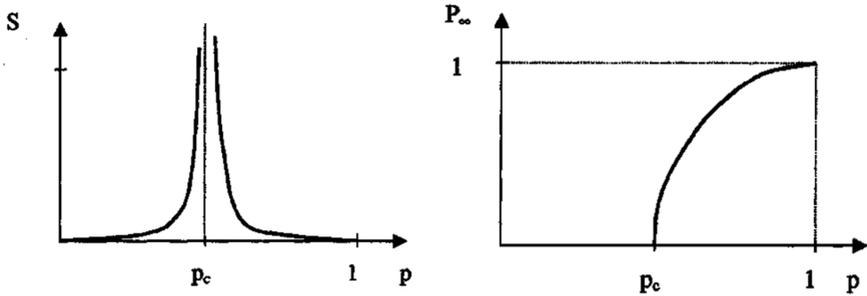


Рисунок 1.7. Схематичное изображение поведения среднего размера кластера (слева) и мощности перколяционного кластера (справа) [10]

Кроме мощности перколяционного кластера для исследователей интересны его структура и свойства. Фрактальная размерность d_f перколяционного кластера вычисляется следующим образом [9]:

$$d_f = d - \beta/\nu, \quad (1.7)$$

где d — размерность задачи, β и ν — универсальные критические показатели. Значения фрактальной размерности перколяционного кластера для задач разных размерностей приведены в табл. 1.1.

У перколяционного кластера также выделяют следующие подструктуры: остов (backbone), мертвые концы (dangling

Таблица 1.1. Значения фрактальной размерности перколяционного кластера

Размерность задачи d	Фрактальная размерность перколяционного кластера d_f
2	91/48 [11]
3	2.53 [9], 2.524 ± 0.008 [11]
4	3.06 [9]
5	3.54 [9]
≥ 6	4 [11]

ends), красные связи (red bonds), скелет (skeleton), оболочка (hull, external perimeter) и др. [9; 11].

Перколяция рассматривается как критическое явление. Многие важные характеристики кластеров вблизи критической концентрации (соответствующей порогу перколяции) ведут себя как показательные функции [10]:

$$S(p) \propto |p - p_c|^\gamma, \quad (1.8)$$

$$P_\infty(p) \propto |p - p_c|^\beta. \quad (1.9)$$

Критические показатели β , ν и γ (см. табл. 1.2) являются универсальными для все типов перколяционных задач, они связаны соотношением:

$$2 \cdot \beta + \gamma = \nu \cdot d. \quad (1.10)$$

Определение критических показателей для каждой конкретной перколяционной задачи служит демонстрацией правильного поведения среднего размера кластера и мощности перколяционного кластера. Это, в свою очередь, служит верификацией модели.

Таблица 1.2. Значения некоторых критических показателей [9]

Размерность задачи d	β	ν	γ
2	5/36	4/3	43/18
3	0.41	0.88	1.80
4	0.64	0.68	1.44
5	0.84	0.57	1.18
≥ 6	1	1/2	1

1.3. Методика определения порога перколяции

Эмпирически определение порога перколяции проводится следующим образом. Для каждого набора входных параметров перколяционной модели проводятся независимые испытания (минимум 1000). В каждом испытании формируется перколяционная система, заполненная объектами с заданным значением доли заполнения — концентрации p . Для каждого испытания выводится ответ — наступила перколяция или нет (то есть существует ли хотя бы один перколяционный кластер). Таким образом, для каждого значения концентрации имеется вероятность возникновения перколяционного кластера (рис. 1.8). Вероятности принимают значения от 0 до 1 при увеличении концентрации объектов в перколяционной системе. На рисунке видно, что зависимость можно представить в виде сигмоиды.

Аппроксимировать зависимость вероятности возникновения перколяционного кластера от концентрации можно и

другими функциями. Применение различных аппроксимирующих функций приводит к одним и тем же значениям порога перколяции с ошибкой, которая не превышает ошибку компьютерного эксперимента [12].

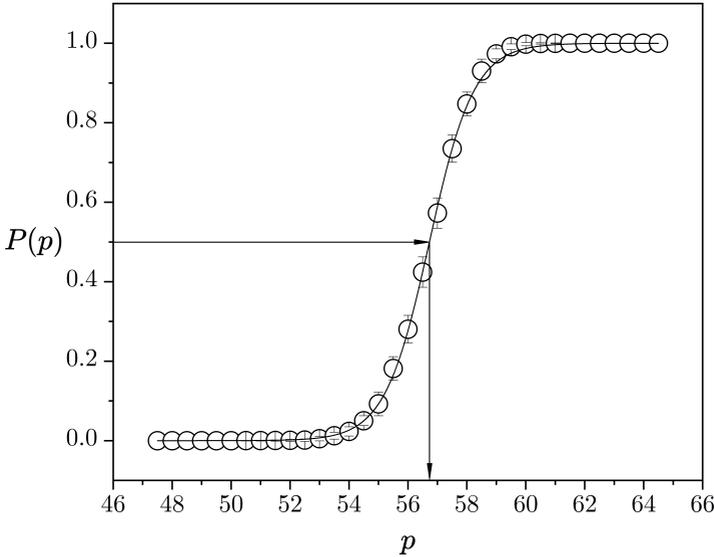


Рисунок 1.8. Вероятность возникновения перколяционного кластера

Большинство исследователей данные вычислительных экспериментов аппроксимируют следующей функцией:

$$P(p) = b + \frac{a - b}{1 + \exp\left[\frac{p - p_c(L)}{c}\right]}, \quad (1.11)$$

где p — концентрация объектов на решетке, $P(p)$ — вероятность возникновения перколяционного кластера, a, b и c — константы, причем $a = 0$ и $b = 1$, $p_c(L)$ — порог перколяции, полученный для конечной решетки с линейным размером L .

На рис. 1.8 можно заметить, что при каждой концентрации значение вероятности берется с некоторой погрешностью (дальнейшая аппроксимация проводится с ее учетом), которая считается стандартной методикой в теории вероятностей и математической статистике (см., например, [13]). Вначале для каждого значения вероятности возникновения перколяционного кластера вычисляется стандартное отклонение среднего. Затем с помощью критерия Стьюдента находится доверительный интервал, в который с некоторой вероятностью попадает значение вероятности возникновения перколяционного кластера.

Порог перколяции для конечной системы — это такая концентрация объектов на решетке, при которой с вероятностью 0.5 возникает перколяционный кластер. В зависимости от программы, в которой проводится аппроксимация, может получиться значение порога перколяции с ошибкой на порядок ниже ошибки исходных данных, потому что при вычислении ошибки результата учитываются не только ошибки исходных данных как веса, но и близость полученной кривой к экспериментальным данным [12].

Конечно, исследователю интересно значение порога перколяции для бесконечного случая. Определяется оно с помощью следующего подхода. Сначала необходимо получить значения порогов перколяции минимум для трех перколяционных систем конечного размера. Чем больше будет найдено таких значений для конечных систем, тем точнее будет значение для бесконечного случая. Минимум три берется в связи с тем, что далее полученные данные будут аппроксимироваться

прямой линией. В термодинамическом пределе (при $L \rightarrow \infty$) порог перколяции определяется с помощью скейлингового соотношения [9]:

$$|p_c(L) - p_c(\infty)| \propto L^{-1/\nu}, \quad (1.12)$$

где ν — уже известный критический показатель.

Пример нахождения порога перколяции для бесконечной системы показан на рис. 1.9. В данном случае получены пороги перколяции для трех конечных систем. Далее эти данные аппроксимируются прямой линией, где значение по оси ординат (p_c) в точке пересечения с осью абсцисс берется за значение порога перколяции для бесконечной системы.

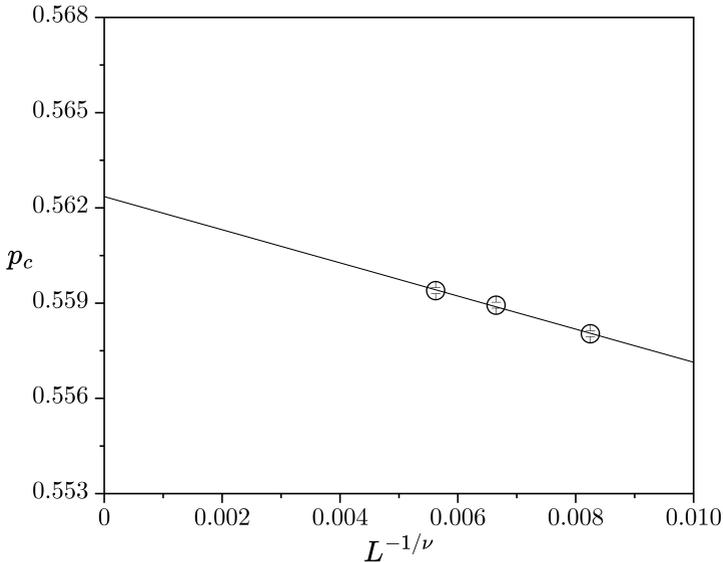


Рисунок 1.9. Определение порога перколяции в термодинамическом пределе

1.4. Перколяция неточечных объектов

При рассмотрении классической перколяции на простой квадратной решетке объектом является ячейка решетки. Такой объект принято считать *точечным*. При заполнении точечными объектами можно достичь стопроцентного наполнения перколяционной системы.

В последние годы исследователи вводят в рассмотрение так называемые *неточечные* объекты (см., к примеру, [14–18]), используя которые можно значительно расширить возможности перколяционных моделей.

Авторами настоящей работы исследованы различные перколяционные модели неточечных объектов на квадратной и кубической решетках, в частности:

- модель линейных k -меров на квадратной решетке;
- модель линейных k -меров с учетом упорядочивающего фактора на квадратной решетке;
- модель нелинейных k -меров на квадратной решетке;
- модели линейных и нелинейных k -меров с учетом длины связи на квадратной решетке;
- модель линейных k -меров с учетом упорядочивающего фактора и длины связи на квадратной решетке;
- модель линейных k -меров на кубической решетке;
- модель блоков (k^2 -меров) на квадратной решетке;
- модель блоков (k^3 -меров) на кубической решетке.

В данной монографии представлены результаты исследований перколяции различных неточечных объектов на квадратной решетке.

1.5. Явление джемминга

При моделировании перколяционной системы, заполненной неточечными объектами, может возникнуть ситуация, когда пустоты в системе еще есть, но их недостаточно для размещения очередного объекта. Такое явление называется *джеммингом* (от англ. jamming). Более того, возможно наступление джемминга в системе раньше перколяции (см. пункт 3.3.1). Максимальная концентрация объектов в системе называется *порогом джемминга*.

В этой работе представлены результаты исследований джемминга k и k^2 -меров на квадратной решетке.

1.6. Методика определения порога джемминга

Порог джемминга определяется следующим образом. Для набора входных параметров модели проводится N независимых испытаний. Результатом работы программы являются данные по максимально полученной концентрации объектов в каждом из N испытаний: p_1, p_2, \dots, p_N .

Оценивается значение порога джемминга по формуле

$$p_{jam} = \bar{p} \pm t_\gamma \frac{S}{\sqrt{N}}, \quad (1.13)$$

где $\bar{p} = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N p_i$ — среднее значение данных, t_γ — коэффициент Стьюдента (например, $t_\gamma = 2.58$ при надежности $\gamma = 0.99$),

$S = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (p_i - \bar{p})^2}$ — исправленное среднеквадратическое отклонение.

Глава 2. Перколяция и джемминг k -меров на квадратной решетке

2.1. Введение

В главе рассмотрены модели перколяции и джемминга k -меров на квадратной решетке, а также их различные модификации.

Попытки моделирования перколяции и джемминга k -меров предпринимались многими исследователями. Стоит отметить, что исследованию перколяции узлов ($k = 1$) ученые уделяют особое внимание, поскольку получению оценок порога перколяции $p_{c, k=1}(\infty)$ посвящено много работ. Некоторые из таких оценок приведены в таблице ниже.

Таблица 2.1. Значения порогов перколяции при $k = 1$ для бесконечных систем

$p_{c, k=1}(\infty)$	Источник
0.593(1)	[19]
0.59274621(13)	[20]
0.593(2)	[21]
0.59274598(4)	[22]
0.59274605(3)	[23]
0.5927	[24]
0.59274601(2)	[25]
0.59274605079210(2)	[26]
0.592746050786(3)	[27]

В табл. 2.2 приведены известные значения порогов перколяции при различных k .

Таблица 2.2. Значения порогов перколяции при различных k для бесконечных систем

k	p_c			
	[19]	[28]	[21]	[24]
2	0.561(1)	0.562	0.564(2)	0.5619
3	—	0.528	0.529(2)	0.52797
4	0.504(3)	0.504	0.504(2)	0.5050
5	—	0.490	0.491(2)	0.48997
6	—	0.479	0.480(2)	0.48026
7	—	—	0.472(2)	0.47600
8	0.470(1)	0.474	0.469(2)	0.4697
9	—	—	0.467(2)	0.4668
10	—	0.467	0.466(2)	—
11	—	—	0.465(2)	—
12	—	—	0.465(2)	—
13	—	—	0.464(2)	—
14	—	—	0.464(2)	—
15	—	—	0.463(2)	—
16	0.463(1)	—	—	0.4638
20	—	—	—	—
24	0.466(1)	—	—	—
32	0.471(1)	—	—	0.4748
40	0.484(6)	—	—	—
64	—	—	—	0.4928
128	—	—	—	0.5115
256	—	—	—	0.53

В таблицах 2.3–2.4 приведены известные значения порогов джемминга при различных k .

Таблица 2.3. Значения порогов джемминга при $k = 2$

$p_{jam, k=2}$	Источник
0.9068	[29]
0.906873(138)	[30]
0.90677(6)	[31]
0.906820(2)	[32]
0.906823(2)	[33]
0.906	[28]
0.9062	[34]

Таблица 2.4. Значения порогов джемминга при различных $k = 2^n$ [34]

n	p_{jam}	n	p_{jam}
2	0.8094	10	0.6592
3	0.7479	11	0.6596
4	0.7103	12	0.6575
5	0.6892	13	0.6571
6	0.6755	14	0.6561
7	0.6686	15	0.6548
8	0.6628	16	0.6545
9	0.6618	17	0.6487

Также известны значения порогов джемминга с учетом параметра упорядочивания при $k = 2, 3, 4, 8, 16, 32, 64$ и 128 [35] (подробнее об этом см. в пункте 2.3.2).

2.2. Описание «классической» модели

На квадратной решетке k -мер представляет собой k подряд занятых узлов в горизонтальном или вертикальном направлениях. k -меры случайным образом равномерно распределены на всей решетке и не могут пересекаться между собой. Используются периодические граничные условия по двум направлениям.

Заполнение решетки k -мерами, разбиение на кластеры и поиск перколяционного кластера (см. рис. 2.1 и 2.2) реализуются по алгоритмам, описанным в [36, с. 24]. Для максимальной упаковки используется улучшенная версия алгоритма, представленного в [37]. Ниже приведено описание без учета периодических граничных условий:

1. $k\text{mersNumPacked}$ — это количество упакованных k -меров. Выбирается количество попыток упаковки $NumOfAttempts$. Рекомендуемое значение — L^2/k (количество k -меров, теоретически уместяющихся при неслучайной упаковке на решетке).
2. Для каждого i от 1 до $NumOfAttempts$ производится попытка упаковать k -мер со случайно сгенерированными координатами начала x и y , где $1 \leq x, y \leq L$. Для этого, если узел решетки $[x][y]$ не занят, генерируется направление k -мера: горизонтальное или вертикальное. Далее в зависимости от направления рассматриваются узлы: $[x + 1][y]$, $[x + 2][y]$, ..., $[x + k - 1][y]$ или $[x][y + 1]$, $[x][y + 2]$, ..., $[x][y + k - 1]$. Если при проверке узлы оказываются также свободными, то все k

узлов, образующих k -мер, помечаются как занятые, k -мер считается упакованным, $kmersNumPacked$ увеличивается на единицу.

3. Формируется множество из свободного пространства на решетке, которое можно заполнить k -мерами. Создается список *CrdForPack*, элементы которого содержат 3 поля: x, y и $orientation = \{0, 1\}$ (координаты начала k -мера и его направление, ноль соответствует горизонтальному направлению k -мера, а единица — вертикальному). Далее каждый узел решетки проверяется, является ли он свободным. Если текущий узел свободен (начало k -мера), то производится дополнительная проверка еще $k-1$ узлов в обоих направлениях (как в пункте 2). Если остальные узлы в каком-то направлении оказываются свободными, то координаты текущего узла с соответствующим направлением помещаются в список *CrdForPack*.
4. Для каждого i от 1 до *CrdForPack.Count* произвольным образом выбирается элемент от *CrdForPack*[0] до *CrdForPack*[*CrdForPack.Count* - i] включительно под номером *NumOfCrd*. Далее производится попытка упаковать k -мер с координатами начала и направлением, которые хранятся в элементе *CrdForPack*[*NumOfCrd*]. Элемент списка под номером *NumOfCrd* меняется с элементом под номером *CrdForPack.Count* - i .
5. Итоговая концентрация k -меров на решетке находится по формуле $p = kmersNumPacked \times k/L^2$.

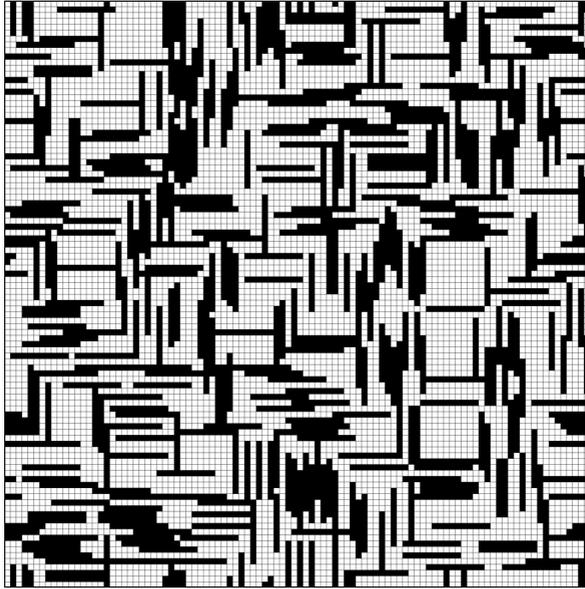


Рисунок 2.1. Распределение 10-меров, $L = 100$, $p = 0.4$

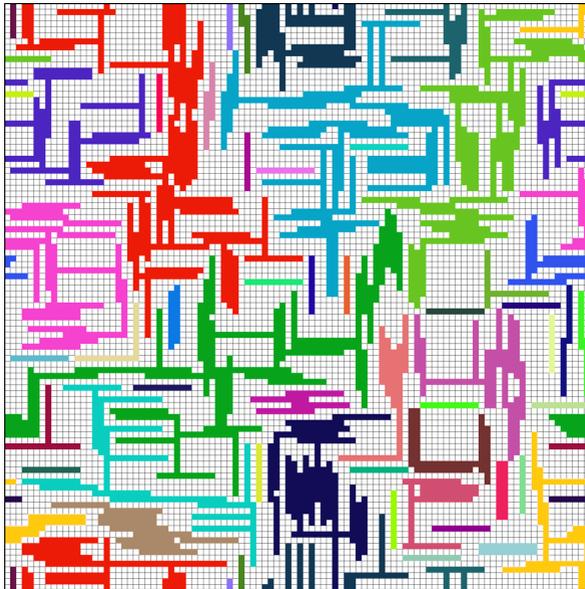


Рисунок 2.2. То же распределение с разбиением на кластеры

2.3. Результаты моделирования

В каждом из проведенных экспериментов по вычислению порога перколяции было минимум 10 уровней концентрации объектов. Для каждого уровня концентрации проводилось 1000 независимых испытаний (там, где это не указано).

2.3.1. Перколяция линейных k -меров

В ходе компьютерного моделирования определены значения порогов перколяции при $k = 1$ для различных длин решеток (см. табл. 2.5 и рис. 2.3). Количество независимых испытаний (N) было выбрано таким образом, чтобы один эксперимент проводился на стационарном компьютере за удовлетворительное время. В термодинамическом пределе порог перколяции оказался равным $p_{c, k=1}(\infty) = 0.59276 \pm 0.00002$. Стоит отметить, что скейлинг был произведен по следующим значениям: $p_{c, k=1}(3000), p_{c, k=1}(4000), \dots, p_{c, k=1}(10000)$ — рис. 2.4. Оценка порога перколяции при $k = 1$ совпадает в пределах погрешности с теми, которые приведены в табл. 2.1, или близка к ним.

Аналогичным способом были получены значения порогов перколяции для бесконечных систем при $k = 2, 3, \dots, 10$. Для этого были проведены вычислительные эксперименты на решетках с линейным размером $L = 600k, 800k$ и $1000k$, а затем определены пороги перколяции для этих решеток при каждом k (табл. 2.6). Далее на основе полученных значений были так же определены и соответствующие значения в термодинамическом пределе (табл. 2.7).

Таблица 2.5. Значения порогов перколяции
при $k = 1$ для различных L

L	p_c	N
10	0.4745(3)	100 000 000
15	0.4987(2)	50 000 000
20	0.5141(2)	10 000 000
30	0.5326(2)	5 000 000
40	0.5432(1)	5 000 000
50	0.5506(1)	2 000 000
60	0.55576(9)	2 000 000
70	0.55966(8)	1 000 000
80	0.56272(8)	1 000 000
90	0.56520(8)	500 000
100	0.56725(6)	100 000
200	0.57744(4)	25 000
400	0.58361(2)	25 000
600	0.58599(2)	20 000
800	0.58731(2)	10 000
1000	0.58814(2)	10 000
2000	0.59002(1)	5 000
3000	0.590723(7)	5 000
4000	0.591102(4)	5 000
5000	0.591363(5)	5 000
6000	0.591549(6)	2 000
7000	0.591670(6)	2 000
8000	0.591771(4)	1 000
9000	0.591864(4)	1 000
10000	0.591931(4)	1 000

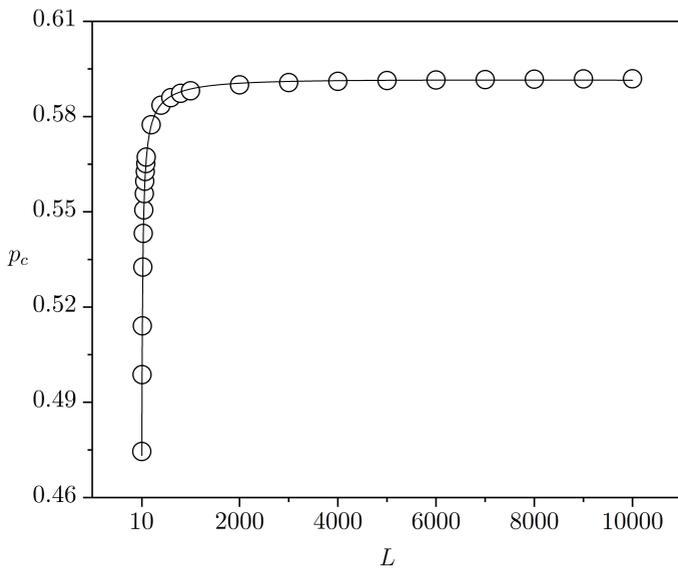


Рисунок 2.3. Значения порогов перколяции при $k = 1$ для различных L

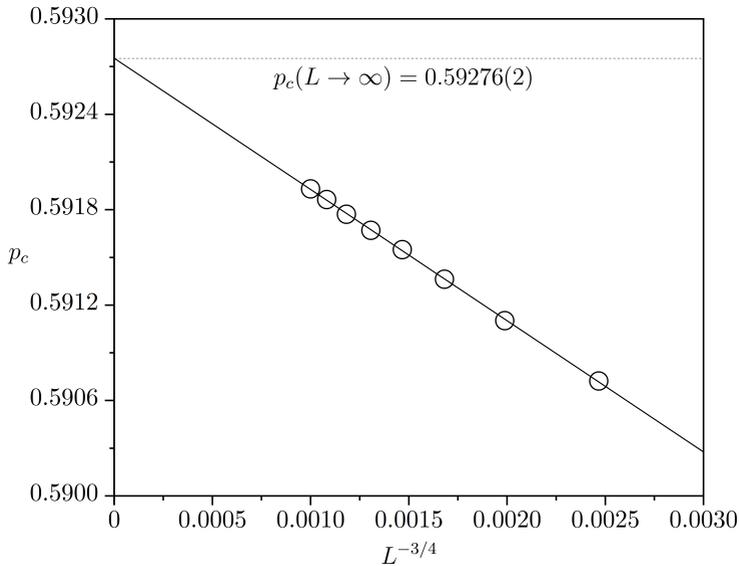


Рисунок 2.4. Определение порога перколяции при $k = 1$ в термодинамическом пределе

Таблица 2.6. Значения порогов перколяции при $k = 2, 3, \dots, 10$ для решеток конечного размера

k	$p_c(600k)$	$p_c(800k)$	$p_c(1000k)$
2	0.55737(3)	0.55833(2)	0.55882(2)
3	0.52425(2)	0.52496(2)	0.52538(2)
4	0.50170(1)	0.50233(1)	0.50273(1)
5	0.48694(1)	0.48752(1)	0.48792(1)
6	0.47734(1)	0.47789(1)	0.47828(1)
7	0.47110(2)	0.47164(2)	0.47198(1)
8	0.46703(1)	0.46751(2)	0.46784(1)
9	0.46438(2)	0.46486(2)	0.46523(1)
10	0.46269(1)	0.46319(1)	0.46353(1)

Таблица 2.7. Значения порогов перколяции при $k = 2, 3, \dots, 10$ для бесконечных систем

k	$p_c(\infty)$
2	0.56194(2)
3	0.52782(6)
4	0.50494(1)
5	0.49001(5)
6	0.48028(7)
7	0.47387(1)
8	0.46956(5)
9	0.46701(10)
10	0.46532(4)

По тому же принципу были получены значения порогов перколяции для бесконечных систем при следующих k : 11, 12, ..., 20, 25, 50 и 100 (см. табл. 2.8–2.13). Результаты показывают, что убывание порога перколяции происходит до определенного значения, которое достигается при $k = 14$, а далее происходит его возрастание (рис. 2.5).

Таблица 2.8. Значения порогов перколяции при $k = 11, 12, \dots, 16$ для решеток конечного размера [36, с. 35]

k	$p_c(5000)$	$p_c(6000)$	$p_c(7500)$
11	0.46107(1)	0.46154(2)	0.46193(2)
12	0.46041(2)	0.46084(2)	0.46126(3)
13	0.46004(3)	0.46044(2)	0.46090(3)
14	0.45997(2)	0.46036(3)	0.46080(2)
15	0.45991(2)	0.46037(3)	0.46092(2)
16	0.46022(2)	0.46068(2)	0.46120(2)

Таблица 2.9. Значения порогов перколяции при $k = 11, 12, \dots, 16$ для бесконечных систем [36, с. 35]

k	$p_c(\infty)$
11	0.46432(21)
12	0.46365(6)
13	0.46332(6)
14	0.46313(6)
15	0.46375(14)
16	0.46395(7)

Таблица 2.10. Значения порогов перколяции
при $k = 17, 18, 19$ и 20
для решеток конечного размера

k	$p_c(300k)$	$p_c(400k)$	$p_c(500k)$
17	0.46061(2)	0.46130(2)	0.46180(2)
18	0.46116(2)	0.46188(2)	0.46234(1)
19	0.46176(2)	0.46248(2)	0.46297(1)
20	0.46240(2)	0.46315(2)	0.46359(1)

Таблица 2.11. Значения порогов
перколяции при $k = 17, 18, 19$ и 20
для бесконечных систем

k	$p_c(\infty)$
17	0.46432(11)
18	0.46487(2)
19	0.46553(6)
20	0.46618(8)

Таблица 2.12. Значения порогов перколяции
при $k = 25, 50, 75$ и 100
для решеток конечного размера [36, с. 35]

k	$p_c(7500)$	$p_c(9000)$	$p_c(10000)$
25	0.46600(3)	0.46654(1)	0.46673(1)
50	0.48022(4)	0.48088(3)	0.48138(3)
75	0.48982(5)	0.49078(3)	0.49116(3)
100	0.49646(5)	0.49777(6)	0.49844(4)

Таблица 2.13. Значения порогов перколяции при $k = 25, 50, 75$ и 100 для бесконечных систем [36, с. 35]

k	$p_c(\infty)$
25	0.4698(1)
50	0.4860(5)
75	0.4969(4)
100	0.50667(3)

Немонотонное поведение порога перколяции при увеличении k можно объяснить тем, что у более длинных k -меров в большей степени выражена способность к агломерации [36] (см. рис. 2.8).

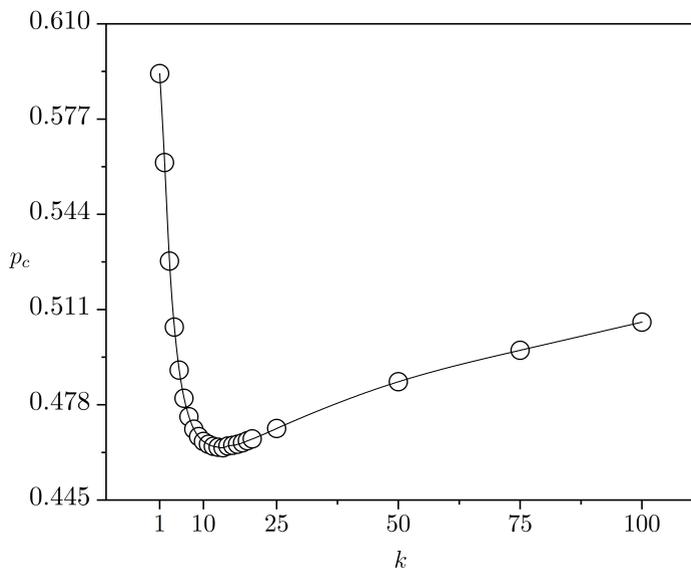


Рисунок 2.5. Интерполяция значений порогов перколяции при $1 \leq k \leq 100$

2.3.2. Джемминг линейных k -меров, учет параметра упорядочивания

Форма осаждаемых объектов имеет значительное влияние на величину как порога перколяции, так и порога джемминга. k -мер — пример объекта анизотропной формы. Степень анизотропии распределения объектов в системе может быть охарактеризована параметром упорядочивания η , который равен нулю для k -меров со случайной ориентацией и равен единице для ориентированных k -меров вдоль одного направления.

Примеры максимального заполнения квадратной решетки k -мерами при $\eta = 0$ и 1 представлены на рис. 2.6 и 2.7. В табл. 2.14 приведены результаты экспериментов при $k = 2$ для различных длин решеток. Значения порогов джемминга совпадают с точностью до 5 знаков. Это говорит о том, что порог джемминга в рассматриваемой модели с периодическими граничными условиями не зависит от длины решетки.

Для 2-меров наиболее точными оценками порогов джемминга являются значения: $p_{jam} = 0.9068216 \pm 0.0000002$ при $\eta = 0$ и $p_{jam} = 0.8646647 \pm 0.0000002$ при $\eta = 1$.

В табл. 2.15–2.18 приведены результаты серий экспериментов при $3 \leq k \leq 1000$ с различными соотношениями L/k . Пороги джемминга в обоих случаях $\eta = 0$ и 1 монотонно убывают с увеличением k (рис. 2.9 и 2.10).

При $k = 2, 3$ и 4 в неупорядоченных системах ($\eta = 0$) k -меры упаковываются более плотно по сравнению с полностью упорядоченными ($\eta = 1$), однако при $k \geq 5$ наблюдается противоположное поведение.

Оценки при $k \rightarrow \infty$ получены путем линейной экстраполяции. В случае $\eta = 0$ были экстраполированы значения порогов джемминга при $100 \leq k \leq 1000$ от $k^{-1/1.44}$ (рис. 2.11), а в случае $\eta = 1$ значения при $10 \leq k \leq 1000$ от $k^{-1/0.989}$ (рис. 2.12).

Таблица 2.14. Значения порогов джемминга при $k = 2$ для различных L

L	p_{jam}		N
	$\eta = 0$	$\eta = 1$	
100	0.9068216(6)	0.8646647(7)	100 000 000
200	0.9068217(3)	0.8646648(4)	100 000 000
300	0.9068215(7)	0.8646646(7)	10 000 000
400	0.9068219(7)	0.8646645(8)	5 000 000
500	0.9068221(6)	0.8646650(7)	4 000 000
600	0.9068212(7)	0.8646647(8)	2 000 000
700	0.9068215(6)	0.8646649(7)	2 000 000
800	0.9068217(8)	0.8646641(9)	1 000 000
900	0.9068217(7)	0.8646644(8)	1 000 000
1000	0.9068216(2)	0.8646647(2)	10 000 000
2000	0.9068217(3)	0.8646645(3)	1 000 000
4000	0.9068217(4)	0.8646645(4)	200 000
5000	0.9068216(3)	0.8646649(3)	200 000
6000	0.9068218(3)	0.8646646(4)	100 000
8000	0.9068216(3)	0.8646648(3)	100 000
10000	0.9068216(3)	0.8646646(3)	40 000
20000	0.9068217(3)	0.8646647(4)	10 000
40000	0.9068220(5)	0.8646649(6)	1 000

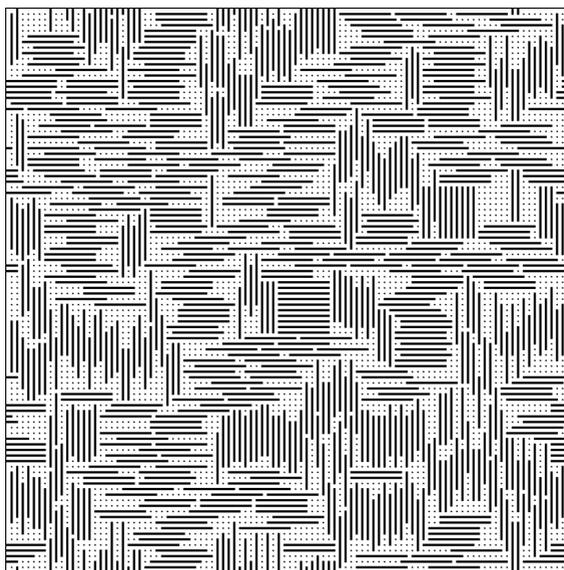


Рисунок 2.6. Джемминг 10-меров со случайной ориентацией, $L = 100$

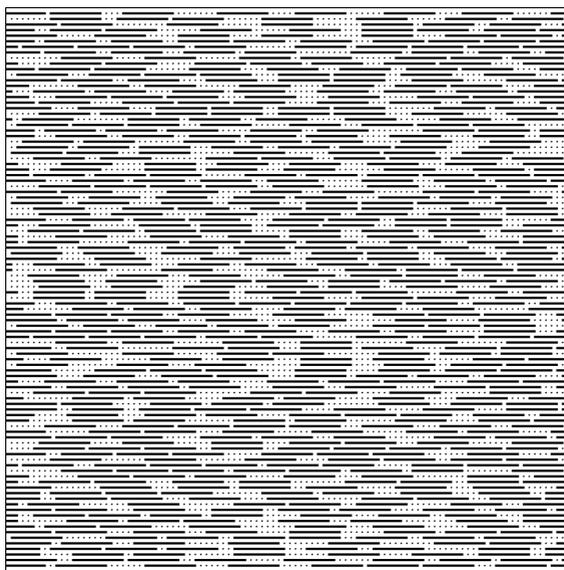


Рисунок 2.7. Джемминг ориентированных 10-меров, $L = 100$

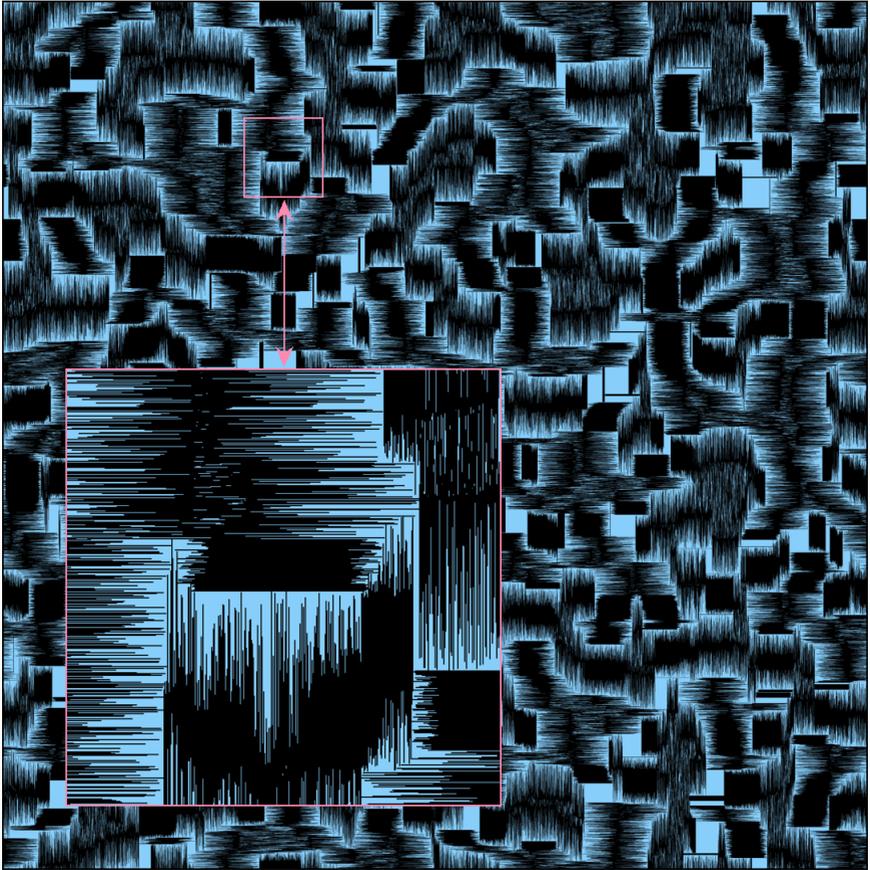


Рисунок 2.8. Джемминг 200-меров со случайной ориентацией, $L = 5000$

При $k \rightarrow \infty$ оценки порогов джемминга получены следующие: $p_{jam, k=\infty} = 0.65613 \pm 0.00003$ для k -меров со случайной ориентацией и $p_{jam, k=\infty} = 0.74761 \pm 0.00002$ для ориентированных k -меров. Полученные оценки совпадают в пределах погрешности с известными значениями или близки к ним: 0.583(10) [38], 0.660(2) [39], 0.655(9) [35] ($\eta = 0$), 0.747(2) [35], 0.7475979202534... [40] ($\eta = 1$).

Таблица 2.15. Значения порогов джемминга
при $k = 3, 4, \dots, 10, L/k = 5000, N = 10000$

k	P_{jam}	
	$\eta = 0$	$\eta = 1$
3	0.8465873(6)	0.8236528(6)
4	0.8103985(6)	0.8038935(5)
5	0.7866274(5)	0.7922761(5)
6	0.7698684(5)	0.7846302(4)
7	0.7573989(5)	0.7792174(4)
8	0.7477328(5)	0.7751850(4)
9	0.7399995(5)	0.7720638(3)
10	0.7336573(5)	0.7695772(3)

Таблица 2.16. Значения порогов джемминга
при $k = 11, 12, \dots, 20, L/k = 2500, N = 1000$

k	P_{jam}	
	$\eta = 0$	$\eta = 1$
11	0.728349(3)	0.767550(2)
12	0.723837(3)	0.765865(2)
13	0.719942(3)	0.764441(2)
14	0.716548(3)	0.763225(2)
15	0.713554(3)	0.762170(2)
16	0.710895(3)	0.761251(2)
17	0.708514(3)	0.760440(1)
18	0.706369(3)	0.759719(1)
19	0.704422(3)	0.759077(1)
20	0.702648(3)	0.758496(1)

Таблица 2.17. Значения порогов джемминга
при $k = 25, 30, 40, \dots, 100, L/k = 500, N = 1000$

k	P_{jam}	
	$\eta = 0$	$\eta = 1$
25	0.695684(16)	0.756305(7)
30	0.690806(17)	0.754846(6)
40	0.684325(16)	0.753025(5)
50	0.680176(16)	0.751935(5)
60	0.677265(17)	0.751210(4)
70	0.675066(16)	0.750692(4)
80	0.673369(16)	0.750305(4)
90	0.671989(17)	0.750005(3)
100	0.670839(16)	0.749762(3)

Таблица 2.18. Значения порогов джемминга
при $k = 200, 300, \dots, 1000, L/k = 50, N = 1000$

k	P_{jam}	
	$\eta = 0$	$\eta = 1$
200	0.66522(17)	0.748674(23)
300	0.66304(18)	0.748318(19)
400	0.66179(17)	0.748144(16)
500	0.66088(18)	0.748027(14)
600	0.66045(17)	0.747952(13)
700	0.65989(18)	0.747905(12)
800	0.65959(17)	0.747868(11)
900	0.65936(17)	0.747841(10)
1000	0.65915(17)	0.747816(10)

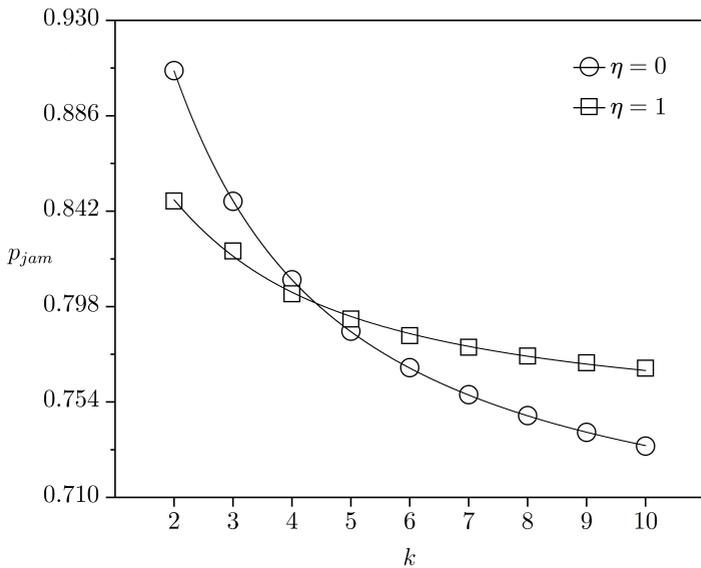


Рисунок 2.9. Значения порогов перколяции при $k = 2, 3, \dots, 10$ в случае $\eta = 0$ и $\eta = 1$

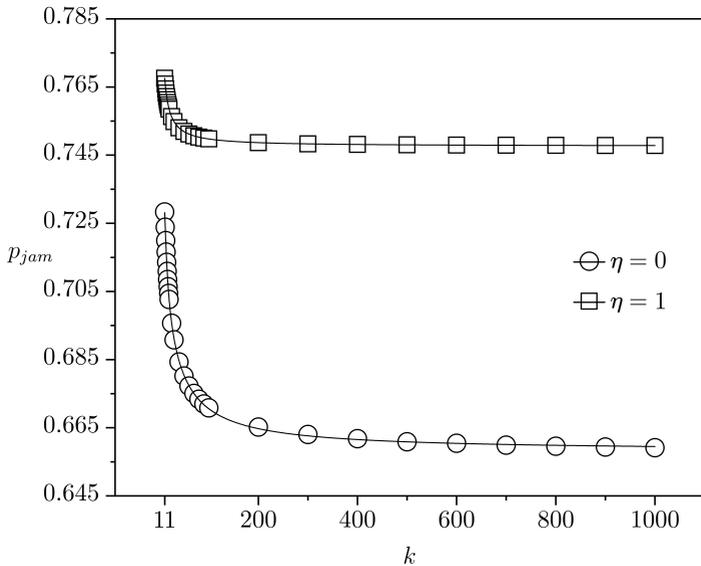


Рисунок 2.10. Значения порогов перколяции при $11 \leq k \leq 1000$ в случае $\eta = 0$ и $\eta = 1$

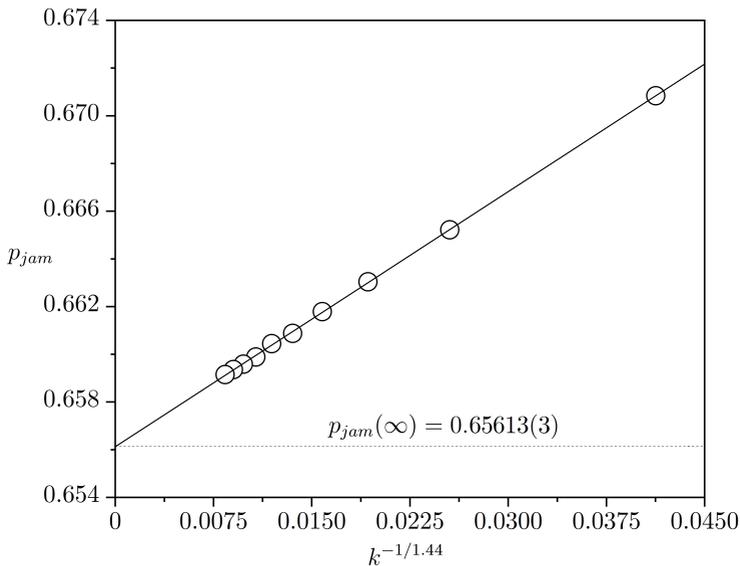


Рисунок 2.11. Экстраполяция порогов джемминга при $100 \leq k \leq 1000$, $\eta = 0$

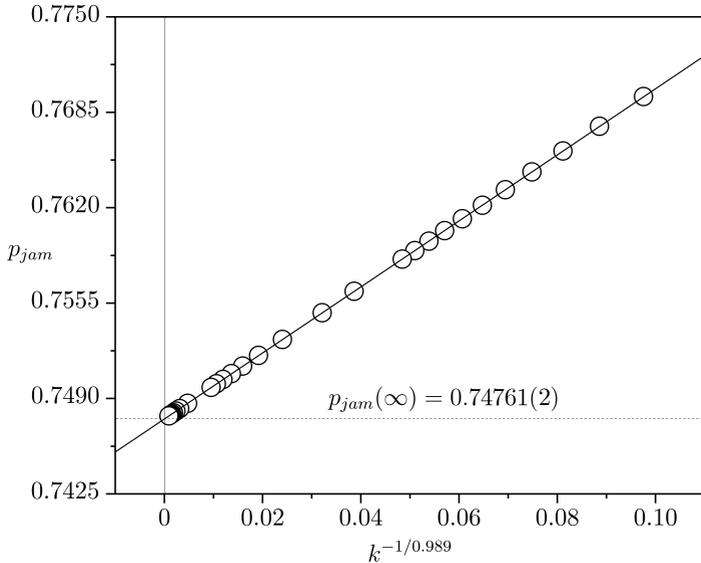


Рисунок 2.12. Экстраполяция порогов джемминга при $10 \leq k \leq 1000$, $\eta = 1$

2.3.3. Перколяция и джемминг нелинейных k -меров

Эта модификация «классической» модели была предложена в [41]. В ней помимо линейных k -меров рассматриваются нелинейные. На рис. 2.13 представлены два типа нелинейных k -меров. В модель добавляется параметр nl (nonlinear), обозначающий долю нелинейных k -меров на решетке. Каждый из типов равновероятен, также нелинейные k -меры могут быть любой ориентации.

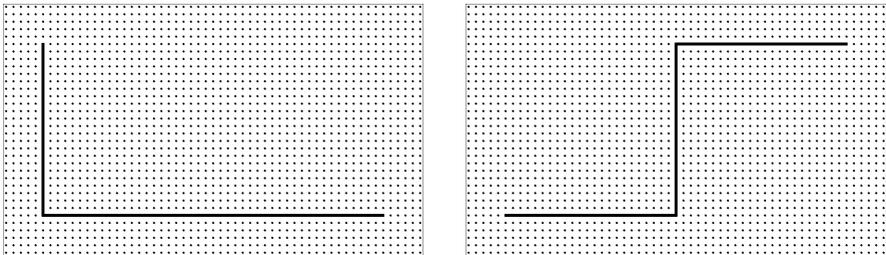


Рисунок 2.13. Два типа нелинейных k -меров, $k = 70$

Пример структуры, содержащей нелинейные k -меры, представлен на рис. 2.14.

Моделирование для данной модификации было проведено со следующими параметрами: $L = 5000$, $k = 100$. Доля нелинейных 100-меров варьировалась от 0.2 до 1. Результаты приведены в табл. 2.19. Они показывают, что порог перколяции уменьшается при увеличении доли нелинейных k -меров.

В [37] установлено, что добавление нелинейных k -меров уменьшает также и порог джемминга. Увеличение доли нелинейных k -меров способствует более равномерному распределению объектов на решетке при их максимальной упаковке [36] (см. рис. 2.15 и 2.16).

Проведение экспериментов с нелинейными k -мерами занимает наибольшее время в сравнении с остальными по той причине, что такие k -меры при заполнении решетки склонны к частому пересечению уже с ранее упакованными [36].

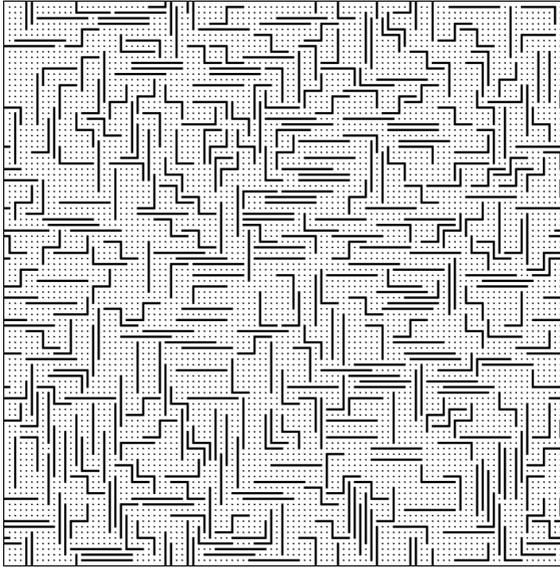


Рисунок 2.14. Распределение 10-меров на квадратной решетке, $L = 100$, $nl = 0.5$, $p = 0.4$

Таблица 2.19. Значения порогов перколяции с различными долями нелинейных 100-меров

nl	$p_c(5000)$
0.2	0.38004(5)
0.4	0.32001(5)
0.6	0.27963(4)
0.8	0.25086(5)
1.0	0.23192(4)

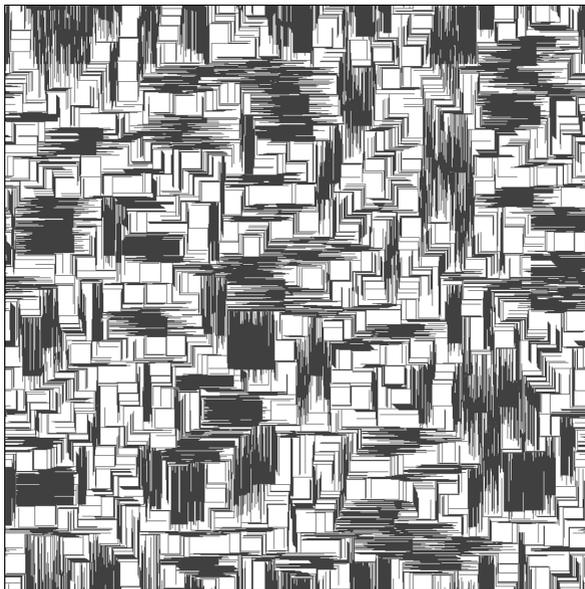


Рисунок 2.15. Джемминг 100-меров, $L = 1000$, $nl = 0.4$

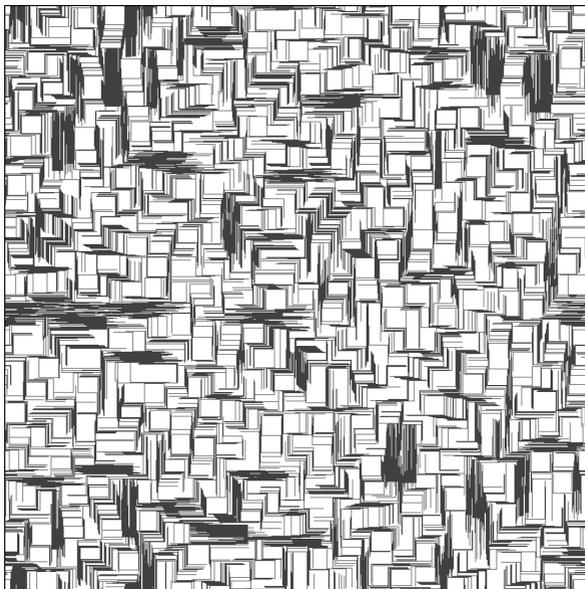


Рисунок 2.16. Джемминг 100-меров, $L = 1000$, $nl = 0.8$

2.3.4. Перколяция линейных k -меров с учетом длины связи

Модификация с учетом длины связи была предложена в [42]. Длина связи bd (bond distance) обозначает расстояние в узлах от k -мера, которое образует проникающую оболочку (рис. 2.17).

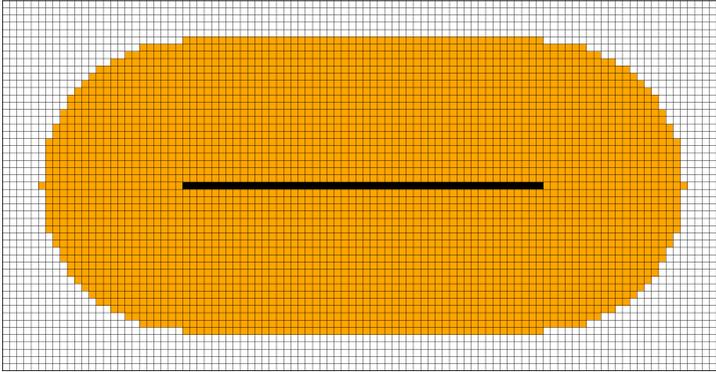


Рисунок 2.17. Проникаемая оболочка у 50-мера, $bd = 20$

В стандартной модели связанными (соседними) k -мерами считаются те, которые соприкасаются между собой. В модели с учетом длины связи k -меры являются связанными, если их проникаемые оболочки соприкасаются или пересекаются (рис. 2.18).

Так как рассматриваемая модель дискретная, то на концах k -мера расчет длины связи происходит следующим образом (приводится алгоритм без учета периодических граничных условий):

1. Пусть $[x][y]$ — координаты любого из концов некоторого k -мера.

2. Стартует двойной цикл: для каждого i от $x - bd$ до $x + bd$, для каждого j от $y - bd$ до $y + bd$. Если текущий узел $[i][j]$ не занят (проверяется, что он не является частью другого k -мера), то для него вычисляется расстояние по формуле $(i - x)^2 + (j - y)^2$. Если это расстояние меньше или равно bd^2 , то узел $[i][j]$ помечается принадлежащим проницаемой оболочке k -мера.

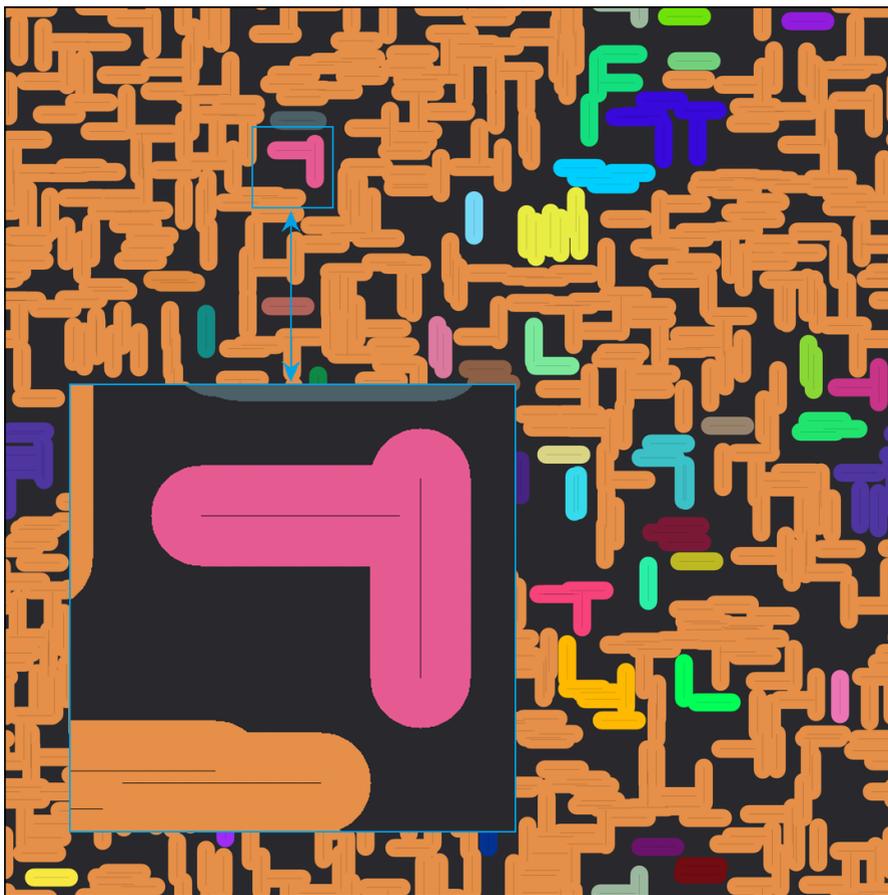


Рисунок 2.18. Разбиение 200-меров на кластеры с учетом длины связи, $L = 5000$, $bd = 50$, $p = 0.006$

Таблица 2.20. Значения порогов перколяции при $k = 100$ и различных bd для решеток конечного размера

bd	$p_c(5000)$	$p_c(7500)$	$p_c(10000)$
2	0.13413(4)	0.13602(4)	0.13702(2)
5	0.05570(2)	0.05665(2)	0.05717(1)
10	0.02746(1)	0.02796(1)	0.02820(1)
15	0.01822(1)	0.01854(1)	0.01875(1)
20	0.01357(1)	0.01384(1)	0.01400(1)
25	0.01068(1)	0.01093(1)	0.01107(1)
50	0.004675(4)	0.004832(2)	0.004905(2)
75	0.002662(4)	0.002754(1)	0.002815(1)
100	0.001707(1)	0.001774(1)	0.001823(1)

Таблица 2.21. Значения порогов перколяции при $k = 100$ и различных bd для бесконечных систем

bd	$p_c(\infty)$
2	0.14129(5)
5	0.05932(1)
10	0.02931(1)
15	0.01951(5)
20	0.01463(2)
25	0.01164(1)
50	0.00525(2)
75	0.00303(2)
100	0.00199(2)

Моделирование для данной модификации было проведено при $k = 100$ на решетках с линейным размером $L = 5000, 7500$ и 10000 . Длина связи варьировалась от 2 до 100 узлов. Результаты моделирования приведены в табл. 2.20. На основе порогов перколяции для решеток конечного размера определены соответствующие значения для бесконечных систем (табл. 2.21).

На рис. 2.19 изображена зависимость порога перколяции от длины связи у 100-меров (на график добавлено значение $p_c(\infty) = 0.50667(3)$ из табл. 2.12, которое соответствует случаю $bd = 0$). Порог перколяции значительно уменьшается при увеличении длины связи.

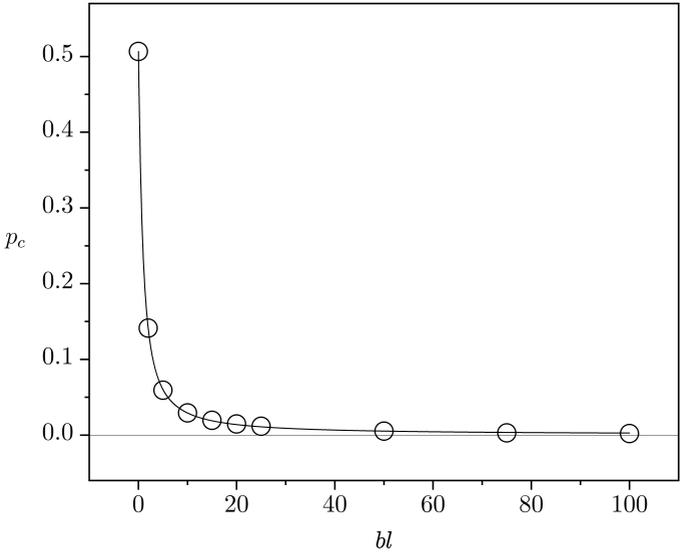


Рисунок 2.19. Зависимость порога перколяции от длины связи у 100-меров

2.3.5. Комбинированные модели

Модель, сочетающая в себе добавление нелинейных k -меров и учет длины связи, была предложена в [43]. Пример структуры с нелинейными k -мерами и учетом длины связи представлен на рис. 2.20.



Рисунок 2.20. Разбиение нелинейных 100-меров на кластеры с учетом длины связи,

$$L = 5000, nl = 0.5, bd = 10, p = 0.025$$

Эта модель подробно изучена для 100-меров в [36]. По результатам экспериментов сделан следующий вывод. При различных долях нелинейных 100-меров с увеличением длины связи порог перколяции закономерно уменьшается. Минимальное значение порога перколяции при длине связи в 2 узла достигается в случае $nl = 0.75$ (при наибольшей доле нелинейных k -меров). Далее с увеличением длины связи минимум смещается в сторону уменьшения доли нелинейных 100-меров. При длине связи в 30 узлов минимальное значение порога перколяции достигается уже в случае $nl = 0$. Это означает, что при определенной длине связи (примерно равной 30% от длины 100-мера, так как не были получены результаты при $bd = 26, 27, 28$ и 29) перколяция раньше наступает в тех системах, в которых 100-меры все прямые.

Перколяция ориентированных k -меров с учетом длины связи была рассмотрена в статье [44] и также более подробно изучена в [36]. Пороги перколяции при $k = 100$ и различных значениях длины связи оказались больше порогов перколяции, которые были получены для 100-меров со случайной ориентацией (см. пункт 2.3.4). Однако, как оказалось, для систем с ориентированными k -мерами характерно возникновение нескольких перколяционных кластеров. На рис. 2.21 представлен пример такой системы, в которой образуется 4 перколяционных кластера, они выделены белым цветом, а все остальные кластеры — синим.

При моделировании помимо поиска перколяционных кластеров дополнительно производился подсчет их количества. Было проанализировано влияние размера системы, длины

k -меров и длины связи на количество образующихся перколяционных кластеров. Количество в значительной степени зависит от длины k -меров: чем длиннее k -меры, тем в среднем образуется больше перколяционных кластеров. Также количество сильно зависит от длины связи. В экспериментах на решетке с линейным размером $L = 20000$ установлено, что максимальное количество достигается при $2 \leq bd < 5$.

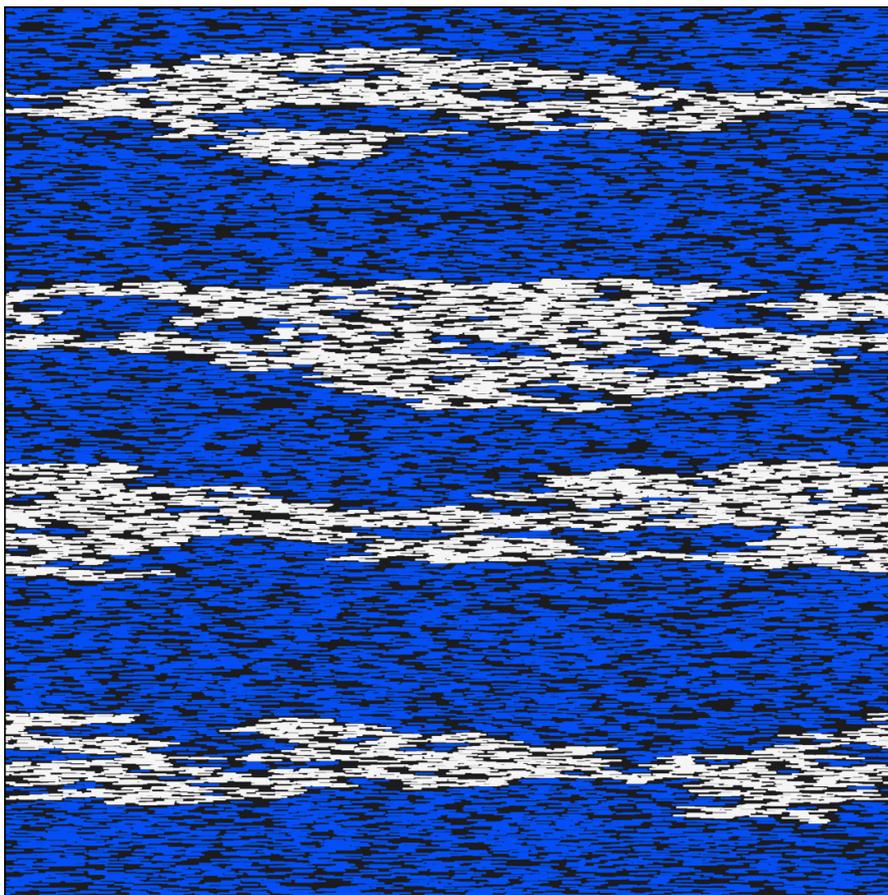


Рисунок 2.21. Разбиение ориентированных 100-меров на кластеры с учетом длины связи, $L = 5000$, $bd = 5$, $p = 0.08$

Глава 3. Перколяция и джемминг блоков на квадратной решетке

3.1. Введение

Блоком называется объект типа k^n , где k — длина стороны блока, n — размерность решетки. Для двумерного случая блок — это k^2 -мер (квадрат, плитка), для трехмерного — это k^3 -мер (куб).

Двумерные модели перколяции и джемминга блоков (дискретные и непрерывные) изучены в работах [45–51]. В табл. 3.1 и 3.2 приведены известные значения порогов перколяции и джемминга при различных k .

Таблица 3.1. Значения порогов перколяции при $k = 2$ и 3

k	p_c	
	[47]	[51]
2	0.601(7)	0.60355(8)
3	0.621(6)	0.63110(9)

Важно отметить, что М. Накамурой были исследованы модели джемминга [46] и перколяции [47] блоков с использованием закрытых граничных условий. Пункт 3.3.2 посвящен анализу того, как порог джемминга зависит от длины решетки в зависимости от типа граничных условий. С целью сравнения были проведены эксперименты для модели с периодическими

граничными условиями (пункт 3.3.1) и для модели с закрытыми граничными условиями (пункт 3.3.2) при тех же значениях L и k , что и в статье [46] (повторены эксперименты лишь при следующих k : 6, 8, 10, 15, 20 и 30).

Таблица 3.2. Значения порогов джемминга при различных k

k	P_{jam}			
	[46]	[48]	[49]	[51]
2	0.749(1)	0.747943(37)	0.74793(1)	0.74794(1)
3	0.681(1)	—	0.67961(1)	0.67960(1)
4	0.646(1)	0.647927(22)	0.64793(1)	0.64793(1)
5	0.628(1)	—	0.62968(1)	0.62965(3)
6	0.620(1)	—	—	0.61771(3)
7	—	—	—	0.60940(3)
8	0.603(1)	0.603355(55)	—	0.60330(4)
10	0.593(1)	—	0.59476(4)	0.59469(4)
14	—	—	—	0.58521(4)
15	0.583(1)	—	—	—
16	—	0.582223(39)	—	—
20	0.578(1)	—	0.57807(5)	0.57815(4)
30	0.574(1)	—	—	0.57269(4)
32	—	0.571916(27)	—	—
40	—	—	—	0.56992(5)
50	—	—	0.56841(10)	0.56857(7)
60	—	—	—	0.56763(7)
64	—	0.567077(40)	—	—
100	—	—	0.56516(10)	0.56515(7)

3.2. Описание «классической» модели

На квадратной решетке блок представляет собой $k \times k$ занятых узлов. Блоки случайным образом равномерно распределены на всей решетке и не могут пересекаться между собой. Используются периодические граничные условия по двум направлениям.

NumOfPackedBlocks — это количество упакованных блоков. Заполнение решетки осуществляется следующим образом:

1. Изначально все узлы решетки свободны, их количество равно $L \times L$. *NumOfPackedBlocks* = 0.
2. Производится попытка упаковать блок со случайно сгенерированными координатами первой вершины x и y , где $1 \leq x, y \leq L$. Для этого, если текущий узел решетки $[x][y]$ не занят, рассматриваются узлы $[x+k][y]$, $[x][y+k]$ и $[x+k][y+k]$. Причем если $x+k > L$, то вместо узла $[x+k][...]$ рассматривается узел $[x+k-L][...]$ и аналогично в случае $y+k > L$ — описанным образом происходит учет периодических граничных условий. Если при проверке узлы в остальных вершинах блока оказываются также свободными, то все $k \times k$ узлов, образующих блок, помечаются как занятые, блок считается упакованным, *NumOfPackedBlocks* увеличивается на единицу.
3. Второй пункт выполняется до тех пор, пока не будет достигнута необходимая концентрация блоков на решетке.

Разбиение на кластеры и поиск перколяционного кластера (см. рис. 3.1 и 3.2) реализуются по алгоритмам, описанным в [36, с. 26]. Для максимальной упаковки используется улучшенная версия алгоритма, представленного в [52]:

1. Решетка заполняется блоками до некоторой концентрации. Для этого выбирается количество попыток упаковки $NumOfAttempts$. Далее для каждого i от 1 до $NumOfAttempts$ производится попытка упаковать блок — пункт 2 предыдущего алгоритма.
2. Формируется множество из свободного пространства на решетке, которое можно заполнить блоками. Создается список для хранения координат $CrdForPack$, элементы которого содержат 2 поля: x и y . Далее каждый узел решетки проверяется, является ли он свободным. Если текущий узел свободен (первая вершина блока), то производится дополнительная проверка еще трех узлов — остальных вершин. Если остальные вершины оказываются свободными, то координаты текущего узла помещаются в список $CrdForPack$.
3. Для каждого i от 1 до $CrdForPack.Count$ произвольным образом выбирается элемент от $CrdForPack[0]$ до $CrdForPack[CrdForPack.Count - i]$ включительно под номером $NumOfCrd$. Далее производится попытка упаковать блок с первой вершиной в узле с координатами $CrdForPack[NumOfCrd]$. Элемент списка $CrdForPack$ под номером $NumOfCrd$ меняется с элементом под номером $CrdForPack.Count - i$.
4. Итоговая концентрация $p = NumOfPackedBlocks \times k^2 / L^2$.

Примеры максимального заполнения блоками квадратной решетки представлены на рис. 3.3 и 3.4.

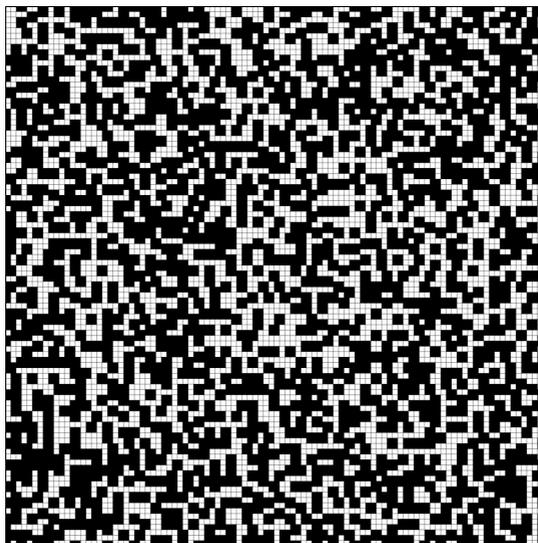


Рисунок 3.1. Распределение 2^2 -меров, $L=100$, $p=0.6$

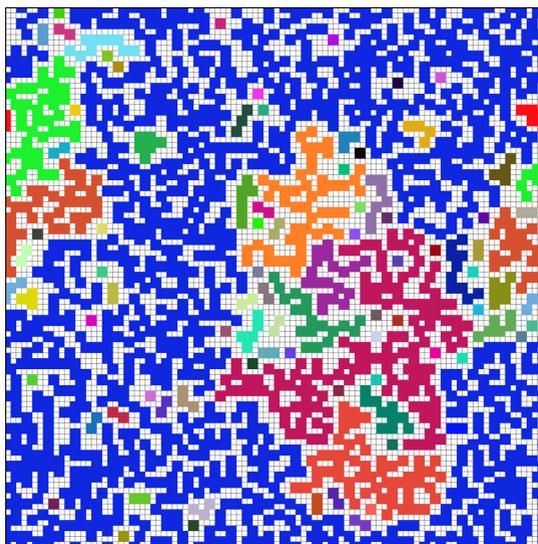


Рисунок 3.2. То же распределение с разбиением на кластеры

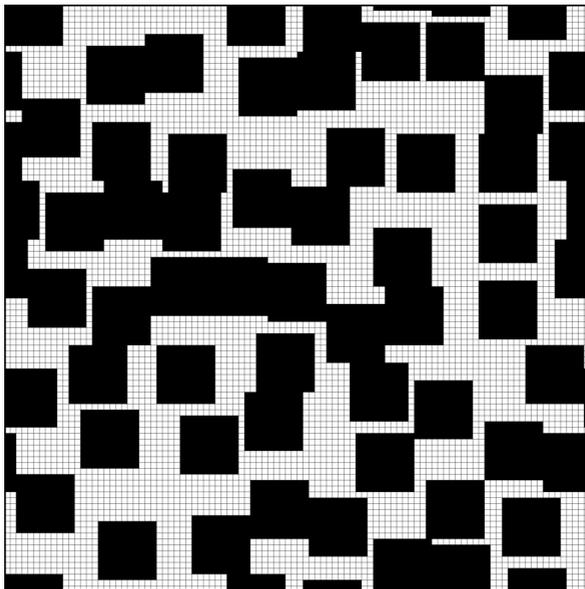


Рисунок 3.3. Джемминг 10^2 -меров, $L = 100$

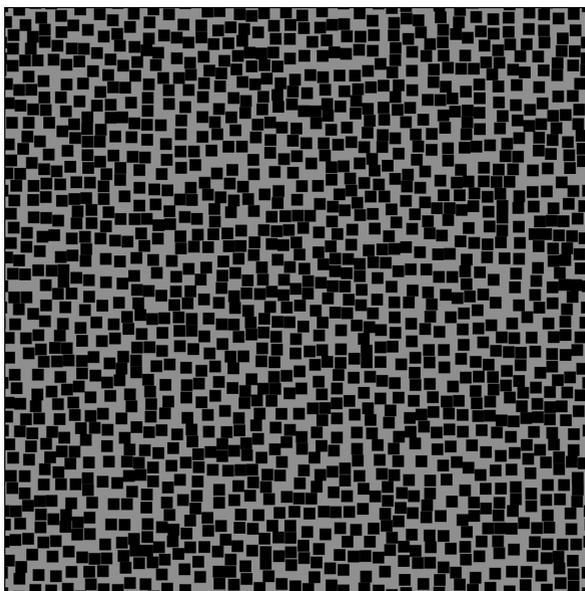


Рисунок 3.4. Джемминг 10^2 -меров, $L = 5000$

3.3. Результаты моделирования

3.3.1. Перколяция и джемминг блоков с периодическими граничными условиями

В ходе моделирования определены значения порогов перколяции при $k=2, 3$ для различных соотношений L/k (табл. 3.3 и рис. 3.5). В термодинамическом пределе пороги перколяции оказались равными $p_{c, k=2}(\infty) = 0.60308 \pm 0.00001$ и $p_{c, k=3}(\infty) = 0.63065 \pm 0.00001$ (рис. 3.6). Полученные оценки близки к тем, которые приведены в табл. 3.1.

Таблица 3.3. Значения порогов перколяции при $k=2, 3$ для различных L/k

L/k	$p_{c, k=2}$	$p_{c, k=3}$	N
100	0.58354(4)	0.61350(4)	200 000
200	0.59145(3)	0.62044(2)	200 000
300	0.59451(2)	0.62312(2)	100 000
400	0.59616(2)	0.62459(2)	100 000
600	0.59798(2)	0.62618(2)	50 000
800	0.59897(1)	0.62705(1)	40 000
900	0.59932(1)	0.62735(1)	20 000
1000	0.59961(1)	0.62761(1)	20 000
2000	0.601000(5)	0.628841(6)	5 000
3000	0.601557(6)	0.629325(6)	4 000
4000	0.601834(4)	0.629578(6)	4 000
5000	0.602036(5)	0.629742(3)	4 000
6000	0.602169(4)	0.629864(3)	2 000
7000	0.602264(3)	0.629945(4)	2 000

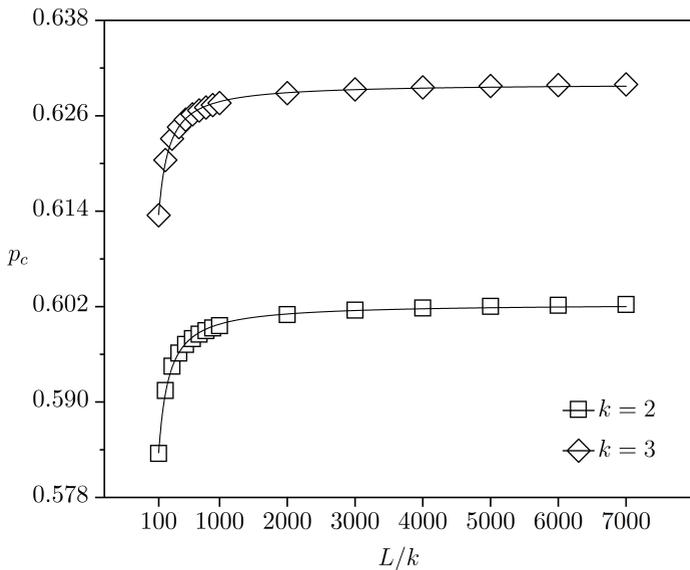


Рисунок 3.5. Значения порогов перколяции при $k = 2$ и 3 для различных L/k

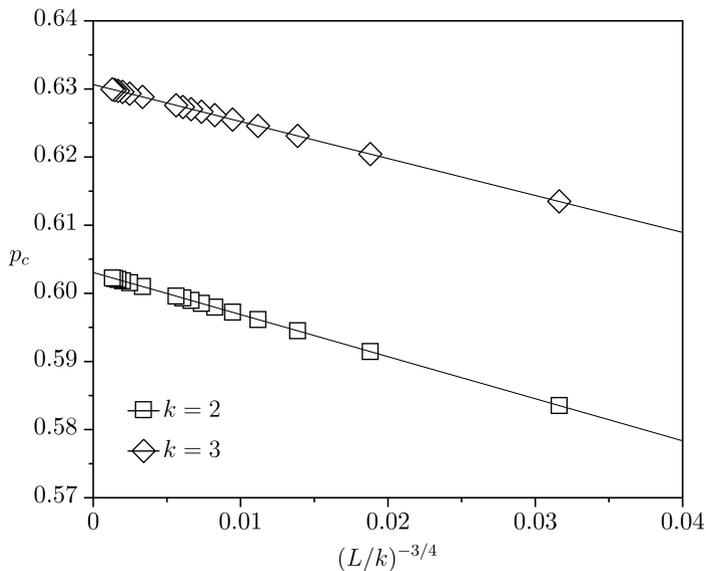


Рисунок 3.6. Определение порогов перколяции при $k = 2$ и 3 в термодинамическом пределе

При $k \geq 4$ на достаточно больших решетках перколяция не возникает. Это объясняется тем, что необходимая для перколяции концентрация объектов больше, чем максимально возможная. На рис. 3.7 продемонстрировано, что даже при максимальном заполнении решетки из блоков образуются кластеры лишь конечного размера. Причины этого подробно изучены в [51].

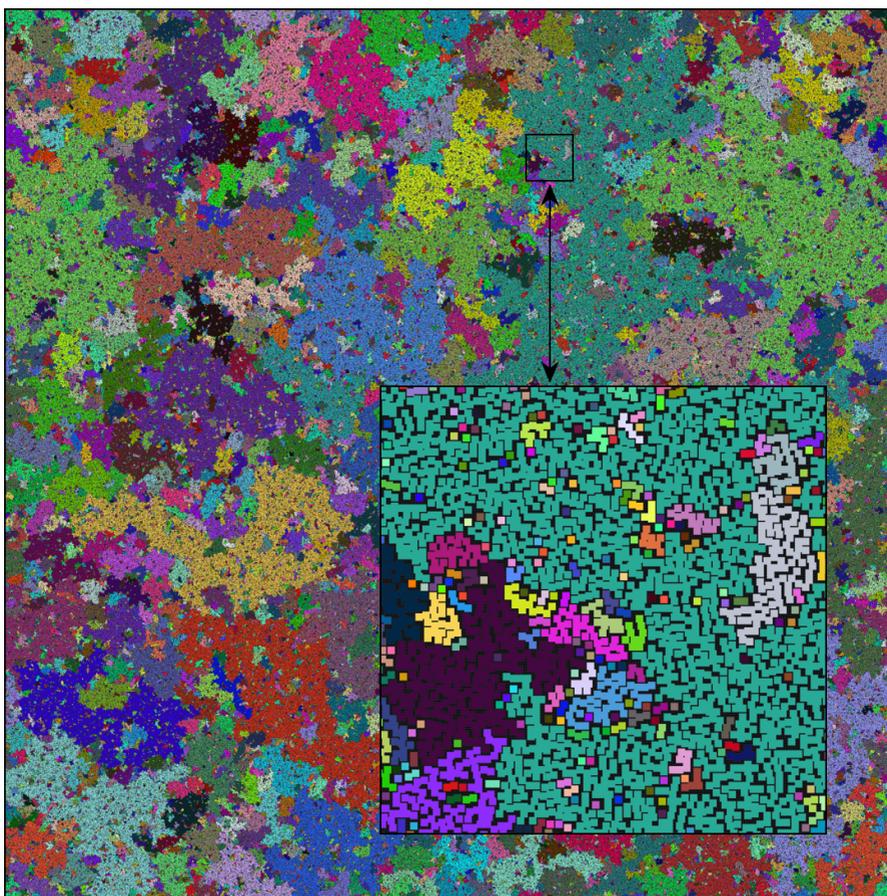


Рисунок 3.7. Джемминг 4^2 -меров с разбиением на кластеры, $L = 5000$

В табл. 3.4 приведены результаты экспериментов при $k = 2$ для различных длин решеток. Значения порогов джемминга совпадают с точностью до 5 знаков. Это говорит о том, что порог джемминга в рассматриваемой модели с периодическими граничными условиями не зависит от длины решетки, как и в случае с k -мерами (см. главу 2). Наиболее точной оценкой порога джемминга при $k = 2$ является значение $p_{jam, k=2} = 0.7479321 \pm 0.0000001$.

В табл. 3.5–3.8 приведены результаты серий экспериментов с различными соотношениями L/k . Количество испытаний в этих сериях было следующее: $N = 50000$.

Таблица 3.4. Значения порогов джемминга при $k = 2$ для различных L

L	p_{jam}	N
500	0.7479321(5)	20 000 000
600	0.7479323(6)	10 000 000
700	0.7479326(5)	10 000 000
800	0.7479322(5)	10 000 000
900	0.7479321(4)	10 000 000
1000	0.7479321(1)	100 000 000
2000	0.7479321(6)	1 000 000
4000	0.7479325(7)	200 000
5000	0.7479321(5)	200 000
6000	0.7479323(5)	200 000
8000	0.7479319(5)	100 000
10000	0.7479321(6)	40 000
20000	0.7479320(6)	10 000

Таблица 3.5. Значения порогов
 джемминга при $k=3, 4, \dots, 10$,
 $L/k = 5000$

k	p_{jam}
3	0.6795958(5)
4	0.6479268(5)
5	0.6296706(5)
6	0.6178004(5)
7	0.6094663(5)
8	0.6032943(5)
9	0.5985401(5)
10	0.5947657(5)

Таблица 3.6. Значения порогов
 джемминга при $k=11, 12, \dots, 20$,
 $L/k = 2500$

k	p_{jam}
11	0.591697(1)
12	0.589153(1)
13	0.587010(1)
14	0.585180(1)
15	0.583599(1)
16	0.582220(1)
17	0.581006(1)
18	0.579930(1)
19	0.578968(1)
20	0.578105(1)

Таблица 3.7. Значения порогов
 джемминга при $k = 25, 30, 40, \dots, 100$,
 $L/k = 500$

k	p_{jam}
25	0.574837(5)
30	0.572673(5)
40	0.569981(5)
50	0.568373(5)
60	0.567302(5)
70	0.566544(5)
80	0.565976(5)
90	0.565534(5)
100	0.565185(5)

Таблица 3.8. Значения порогов
 джемминга при $k = 200, 300, \dots, 1000$,
 $L/k = 50$

k	p_{jam}
200	0.56358(5)
300	0.56306(5)
400	0.56282(5)
500	0.56264(5)
600	0.56254(5)
700	0.56245(5)
800	0.56242(5)
900	0.56237(5)
1000	0.56232(5)

На рис. 3.8 изображена зависимость порога джемминга от k . На нем представлены все значения при $2 \leq k \leq 1000$ и их аппроксимация следующей функцией:

$$p_{jam}(k) = A + B/k + C/k^2, \quad (3.1)$$

где $A = 0.56201 \pm 0.00001$, $B = 0.3162 \pm 0.0002$, $C = 0.1107 \pm 0.0007$.

Порог джемминга монотонно убывает при увеличении k . Из (3.1) может быть получена оценка порога джемминга при $k \rightarrow \infty$: $p_{jam, k=\infty} = A = 0.56201 \pm 0.00001$. Оценку при $k \rightarrow \infty$ также можно получить путем линейной экстраполяции значений порогов джемминга при $10 \leq k \leq 1000$ от $k^{-1/0.979}$: $p_{jam, k=\infty} = 0.56203 \pm 0.00001$ (рис. 3.9).

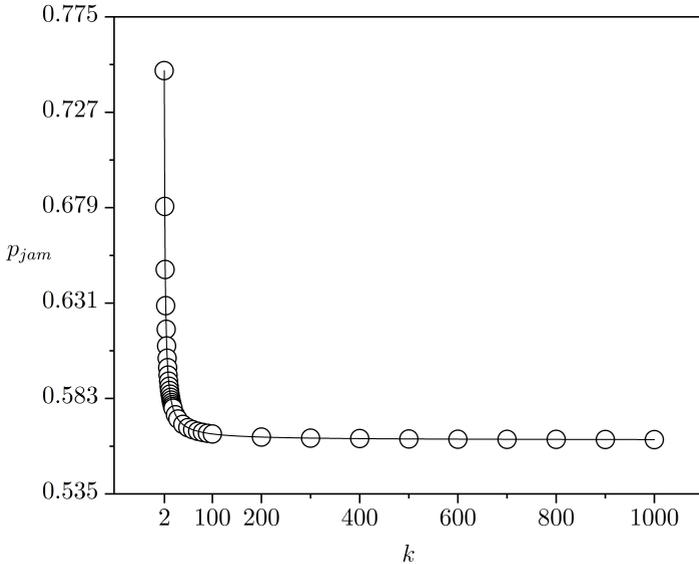


Рисунок 3.8. Аппроксимация порогов джемминга при различных k функцией (3.1)

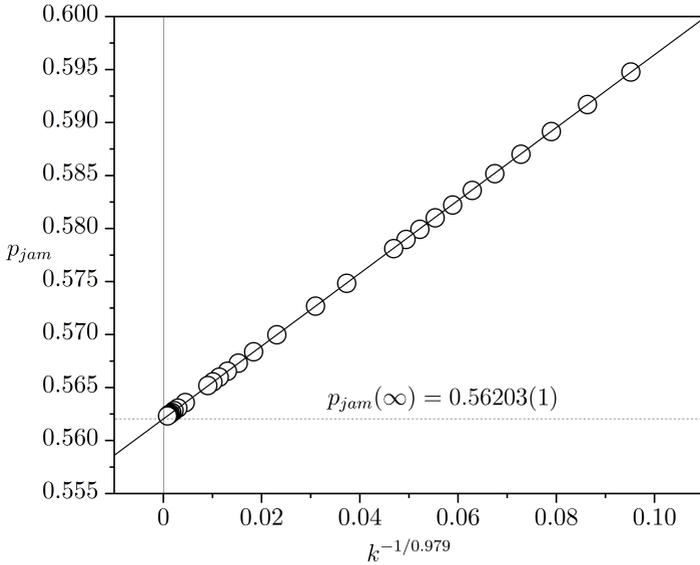


Рисунок 3.9. Экстраполяция порогов джемминга при $10 \leq k \leq 1000$

Оценки совпадают в пределах погрешности с известными значениями или близки к ним: 0.562(2) [45], 0.564(1) [46], 0.562009(4) [48], 0.5620(2) [49], 0.5625(5) [50], 0.5623(3) [51].

При сравнении с оценками порога джемминга для линейных k -меров (как со случайной ориентацией, так и ориентированных) можно сделать вывод о том, что блоки $k \times k$ при заполнении решетки упаковываются менее плотно, так как $p_{jam, \eta=0} = 0.6562 \pm 0.0001$ и $p_{jam, \eta=1} = 0.74761 \pm 0.00001$ при $k \rightarrow \infty$ (см. пункт 2.3.2).

3.3.2. Джемминг блоков с закрытыми граничными условиями

Анализ результатов моделирования из [46] показывает, что при использовании закрытых граничных условий на небольших решетках (см. рис. 3.10) блоки упаковываются с меньшей плотностью (что, вероятно, относится и к другим объектам).

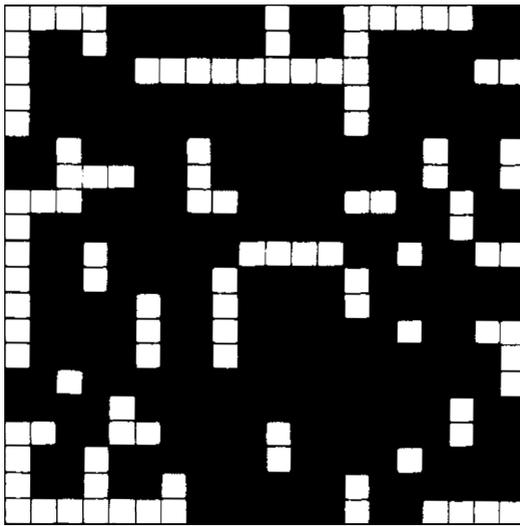


Рисунок 3.10. Джемминг 2^2 -меров с закрытыми граничными условиями, $L = 20$ [46]

Так как в модели с периодическими граничными условиями порог джемминга не зависит от длины решетки (причем как для k -меров, так и для блоков — см. пункт 2.3.2 и подраздел 3.3), возникает интерес повторить некоторые из экспериментов, поставленных Накамурой в [46]. Им были найдены оценки порогов джемминга при $k = 1, 2, \dots, 6, 8, 10, 15, 20$ и 30.

Каждое значение было получено при экстраполяции результатов моделирования для конечных небольших решеток. Пороги джемминга для этих решеток вычислялись как среднее по пятидесяти независимым испытаниям.

Пример максимального заполнения блоками средней по размеру решетки при использовании закрытых граничных условий представлен на рис. 3.11.

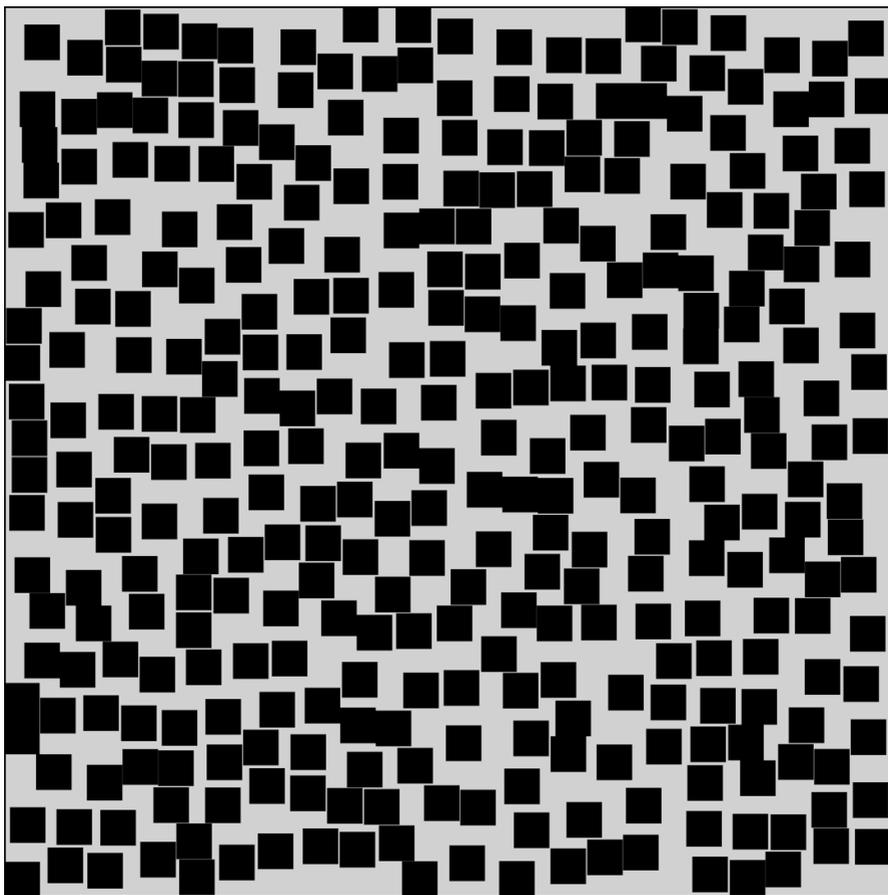


Рисунок 3.11. Джемминг 200^2 -меров с закрытыми граничными условиями, $L = 5000$

В табл. 3.9 приведены результаты экспериментов при $k = 6, 8, 10, 15, 20$ и 30 для различных длин решеток. Количество испытаний в каждом эксперименте было следующее: $N = 1000000$. С ростом длины решетки порог джемминга действительно увеличивается.

Оценки порогов джемминга получены путем линейной экстраполяции, также как и в [46]: от k/L — рис. 3.12. Эти оценки при каждом k (табл. 3.10) близки к тем, которые получены ранее для модели с периодическими граничными условиями (см. табл. 3.5–3.7).

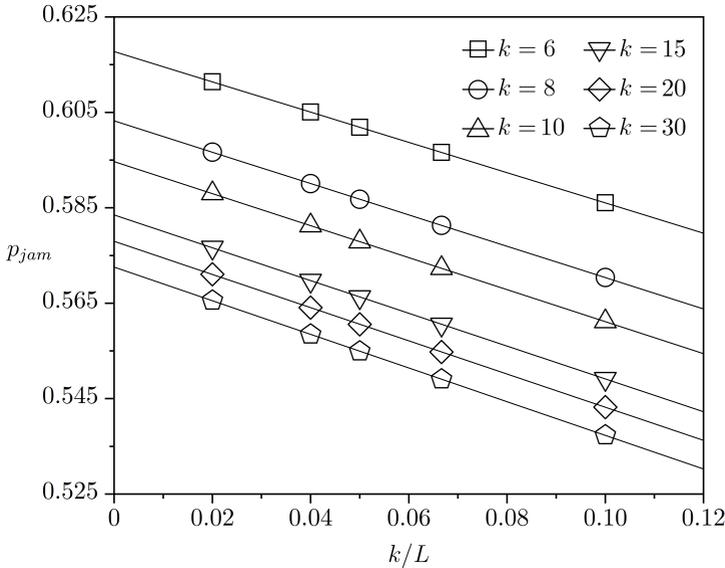


Рисунок 3.12. Экстраполяция порогов джемминга при $k = 6, 8, 10, 15, 20$ и 30

Таким образом, порог джемминга в модели с закрытыми граничными условиями зависит от длины решетки (в отличие от модели с периодическими граничными условиями).

Таблица 3.9. Значения порогов джемминга при $k = 6, 8, 10, 15, 20$ и 30
для решеток конечного размера

k	$p_{jam}(10k)$	$p_{jam}(15k)$	$p_{jam}(20k)$	$p_{jam}(25k)$	$p_{jam}(50k)$
6	0.58604(7)	0.59661(4)	0.60187(3)	0.60506(2)	0.61141(1)
8	0.57039(7)	0.58133(4)	0.58679(3)	0.59008(2)	0.59668(1)
10	0.56117(6)	0.57232(4)	0.57791(3)	0.58127(2)	0.58800(1)
15	0.54918(6)	0.56055(4)	0.56630(3)	0.56976(2)	0.57667(1)
20	0.54324(6)	0.55478(4)	0.56057(3)	0.56408(2)	0.57107(1)
30	0.53734(6)	0.54906(4)	0.55492(3)	0.55847(2)	0.56556(1)

Таблица 3.10. Соответствующие
значения для бесконечных систем

k	$p_{jam}(\infty)$
6	0.61773(1)
8	0.60322(2)
10	0.59467(2)
15	0.58346(5)
20	0.57796(4)
30	0.57255(3)

Заключение

Основную часть монографии составляют достойного внимания результаты исследований по перколяции и джеммингу неточечных объектов (k -меров и блоков) на квадратной решетке. Главными из них являются следующие.

Для линейных k -меров в ходе моделирования определены значения порогов перколяции для бесконечных систем при $k = 1, 2, \dots, 20, 25, 50, 75$ и 100 . Порог перколяции убывает с увеличением k до некоторого значения (которое достигается при $k = 14$), затем происходит его возрастание.

Также для линейных k -меров определены значения порогов джемминга при $k = 2, 3, \dots, 20, 25, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900$ и 1000 как для k -меров со случайной ориентацией, так и для ориентированных k -меров. Получены оценки порогов джемминга при $k \rightarrow \infty$: $p_{jam, k=\infty} = 0.65613 \pm 0.00003$ для k -меров со случайной ориентацией и $p_{jam, k=\infty} = 0.74761 \pm 0.00002$ для ориентированных.

Рассмотрены модификации «классической» модели. Первая подразумевает, что помимо линейных k -меров на решетке присутствуют также нелинейные. Выявлено, что добавление нелинейных 100-меров уменьшает как порог перколяции, так и порог джемминга.

Вторая модификация учитывает длину связи у k -меров. Длина связи — это расстояние от k -мера, образующее проникаемую оболочку. При увеличении длины связи порог перколяции у 100-меров уменьшается в значительной степени.

Исследована модель, которая сочетает в себе добавление нелинейных k -меров и учет длины связи. Установлено, что при длине связи, равной примерно 30% от длины 100-мера, перколяция наступает раньше в случае абсолютно прямых 100-меров.

Исследована также модель перколяции ориентированных k -меров с учетом длины связи. Пороги перколяции при различных значениях длины связи у ориентированных 100-меров оказались больше порогов перколяции, полученных для 100-меров со случайной ориентацией. Однако главной особенностью систем с ориентированными k -мерами является возникновение нескольких перколяционных кластеров.

Для блоков в ходе моделирования определены значения порогов перколяции для бесконечных систем при $k = 2$ и 3 : $p_{c, k=2}(\infty) = 0.60308 \pm 0.00001$, $p_{c, k=3}(\infty) = 0.63065 \pm 0.00001$. При $k \geq 4$ перколяция отсутствует на больших решетках. Даже при максимальном заполнении системы 4^2 -мерами в ней образуются лишь кластеры конечного размера.

Для блоков найдены значения порогов джемминга при $k = 2, 3, 4, \dots, 20, 25, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700, 800, 900$ и 1000 . Получена оценка порога джемминга при $k \rightarrow \infty$: $p_{jam, k=\infty} = 0.56203 \pm 0.00001$. Блоки в сравнении с k -мерами (как со случайной ориентацией, так и ориентированными) упаковываются менее плотно при $k \rightarrow \infty$.

В модели с периодическими граничными условиями порог джемминга не зависит от длины решетки (как для k -меров, так и для блоков). Однако на небольших решетках при использовании закрытых граничных условий объекты упаковываются менее плотно.

Библиографический список

1. *Broadbent, S. R.* Percolation Processes. I. Crystals and mazes [Текст] / S. R. Broadbent, J. M. Hammersley // Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. — 1957. — Vol. 53, no. 3. — P. 629—641. — DOI: 10.1017/S0305004100032680.
2. *Flory, P. J.* Molecular Size Distribution in Three Dimensional Polymers. I. Gelation [Текст] / P. J. Flory // Journal of the American Chemical Society. — 1941. — Vol. 63. — P. 3083—3090. — DOI: 10.1021/ja01856a061.
3. *Flory, P. J.* Molecular Size Distribution in Three Dimensional Polymers. II. Trifunctional Branching Units [Текст] / P. J. Flory // Journal of the American Chemical Society. — 1941. — Vol. 63, no. 11. — P. 3091—3096. — DOI: 10.1021/ja01856a062.
4. *Flory, P. J.* Molecular Size Distribution in Three Dimensional Polymers. III. Tetrafunctional Branching Units [Текст] / P. J. Flory // Journal of the American Chemical Society. — 1941. — Vol. 63, no. 11. — P. 3096—3100. — DOI: 10.1021/ja01856a063.
5. *Stockmayer, W. H.* Theory of Molecular Size Distribution and Gel Formation in Branched-Chain Polymers [Текст] / W. H. Stockmayer // The Journal of Chemical Physics. — 1943. — Vol. 11, no. 2. — P. 45—55. — DOI: 10.1063/1.1723803.

6. *Stockmayer, W. H.* Theory of Molecular Size Distribution and Gel Formation in Branched Polymers II. General Cross Linking [Текст] / W. H. Stockmayer // The Journal of Chemical Physics. — 1944. — Vol. 12, no. 4. — P. 125—131. — DOI: 10.1063/1.1723922.
7. *Сонин, А. А.* К истории исследования явления перколяции [Текст] / А. А. Сонин // Жидкие кристаллы и их практическое использование. — 2016. — Т. 16, № 1. — С. 97—104. — DOI: 10.18083/LCAppl.2016.1.97.
8. *Sahimi, M.* Applications Of Percolation Theory [Текст] / M. Sahimi. — London, 2023. — 258 p. — DOI: 10.1007/978-3-031-20386-2.
9. *Stauffer, D.* Introduction to percolation theory [Текст] / D. Stauffer, A. Aharony. — London, 2003. — 181 p.
10. *Тарасевич, Ю. Ю.* Перколяция: теория, приложения, алгоритмы [Текст] / Ю. Ю. Тарасевич. — Москва : Едиториал УРСС, 2002. — 112 с.
11. *Bundle, A.* Fractals and Disordered Systems [Текст] / A. Bundle, S. Halvin. — 1996. — 408 p. — DOI: 10.1007/978-3-642-84868-1.
12. *Бузмакова, М. М.* Перколяция сфер в континууме [Текст] / М. М. Бузмакова // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. — 2012. — Т. 12, вып. 2. — С. 48—56.
13. *Фадеева, Л. Н.* Теория вероятностей и математическая статистика [Текст] / Л. Н. Фадеева, А. В. Лебедев. — Москва : Рид Групп, 2011. — 496 с.

14. Percolation of aligned dimers on a square lattice [Текст] / V. A. Cherkasova [et al.] // The European Physical Journal B. — 2010. — Vol. 74. — P. 205—209. — DOI: 10.1140/epjb/e2010-00089-2.
15. *Tarasevich, Y. Y.* Percolation of linear k -mers on square lattice: From isotropic through partially ordered to completely aligned state [Текст] / Y. Y. Tarasevich, N. I. Lebovka, N. V. Laptev // Physical Review E. — 2012. — Vol. 86, no. 6. — DOI: 10.1103/PhysRevE.86.061116.
16. Jamming and percolation in generalized models of random sequential adsorption of linear k -mers on a square lattice [Текст] / N. I. Lebovka [и др.] // Physical Review E. — 2015. — Т. 92, № 6. — DOI: 10.1103/PhysRevE.92.062116.
17. Percolation and jamming of linear k -mers on square lattice with defects: Effect of anisotropy [Текст] / Y. Y. Tarasevich [et al.] // Physical Review E. — 2015. — Vol. 92, no. 6. — DOI: 10.1103/PhysRevE.91.012109.
18. Electrical conductivity of a monolayer produced by random sequential adsorption of linear k -mers onto a square lattice [Текст] / Y. Y. Tarasevich [et al.] // Physical Review E. — 2016. — Vol. 94, no. 4. — DOI: 10.1103/PhysRevE.94.042112.
19. *Leroyer, Y.* Monte Carlo analysis of percolation of line segments on a square lattice [Текст] / Y. Leroyer, E. Pomiers // Physical Review B. — 1994. — Vol. 50, no. 5. — P. 2795—2799. — DOI: 10.1103/PhysRevB.50.2795.

20. *Newman, M. E. J.* Efficient Monte Carlo Algorithm and High-Precision Results for Percolation [Текст] / M. E. J. Newman, R. M. Ziff // Physical Review Letters. — 2000. — Vol. 85, no. 19. — P. 4104—4107. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.85.4104.
21. *Cornette, V.* Percolation of polyatomic species on a square lattice [Текст] / V. Cornette, A. J. Ramirez-Pastor, F. Nieto // The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems. — 2003. — Vol. 36. — P. 391—399. — DOI: 10.1140/epjb/e2003-00358-1.
22. *Lee, M. J.* Pseudo-random-number generators and the square site percolation threshold [Текст] / M. J. Lee // Physical Review E. — 2008. — Vol. 78, no. 3. — DOI: 10.1103/PhysRevE.78.031131.
23. *Feng, X.* Percolation transitions in two dimensions [Текст] / X. Feng, Y. Deng, H. W. J. Blote // Physical Review E. — 2008. — Vol. 78, no. 3. — DOI: 10.1103/PhysRevE.78.031136.
24. Impact of defects on percolation in random sequential adsorption of linear k -mers on square lattice [Текст] / Y. Y. Tarasevich [et al.] // Physical Review E. — 2015. — Vol. 91, no. 1. — DOI: 10.1103/PhysRevE.91.012109.
25. *Jacobsen, J. L.* High-precision percolation thresholds and Potts-model critical manifolds from graph polynomials [Текст] / J. L. Jacobsen // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. — 2014. — Vol. 47, no. 13. — DOI: 10.1088/1751-8113/47/13/135001.

26. *Jacobsen, J. L.* Critical points of Potts and $O(N)$ models from eigenvalue identities in periodic Temperley–Lieb algebras [TekCT] / J. L. Jacobsen // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. — 2015. — Vol. 48, no. 45. — DOI: 10.1088/1751-8113/48/45/454003.
27. *Mertens, S.* Exact site-percolation probability on the square lattice [TekCT] / S. Mertens // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. — 2022. — Vol. 55, no. 33. — DOI: 10.1088/1751-8121/ac4195.
28. *Vandewalle, N.* A new universality for random sequential deposition of needles [TekCT] / N. Vandewalle, S. Galam, M. Kramer // The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems. — 2000. — Vol. 14. — P. 407—410. — DOI: 10.1007/s100510051047.
29. *Nord, R. S.* Irreversible immobile random adsorption of dimers, trimers, ... on 2D lattices [TekCT] / R. S. Nord, J. W. Evans // The Journal of Chemical Physics. — 1985. — Vol. 82, no. 6. — P. 2795—2810. — DOI: 10.1063/1.448279.
30. *Nord, R. S.* Irreversible random sequential filling of lattices by Monte Carlo simulation [TekCT] / R. S. Nord // Journal of Statistical Computation and Simulation. — 1991. — Vol. 39, no. 4. — P. 231—240. — DOI: 10.1080/00949659108811358.
31. *Oliveira, M. J. de.* Anisotropic random sequential adsorption of dimers on a square lattice [TekCT] / M. J. de Oliveira, T. Tome, R. Dickman // Physical Review A. — 1992. — Vol. 46, no. 10. — P. 6294—6299. — DOI: 10.1103/PhysRevA.46.6294.

32. *Wang, J.-S.* Kinetics and Jamming Coverage in a Random Sequential Adsorption of Polymer Chains [Текст] / J.-S. Wang, R. B. Pandey // Physical Review Letters. — 1996. — Vol. 77, no. 9. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.1773.
33. *Gan, C. K.* Extended series expansions for random sequential adsorption [Текст] / C. K. Gan, J.-S. Wang // Journal of Chemical Physics. — 1997. — Vol. 108, no. 7. — P. 3010—3012. — DOI: 10.1063/1.475687.
34. *Slutskii, M. G.* Percolation and jamming of random sequential adsorption samples of large linear k -mers on a square lattice [Текст] / M. G. Slutskii, L. Y. Barash, Y. Y. Tarasovich // Physical Review E. — 2018. — Vol. 98, no. 6. — DOI: 10.1103/PhysRevE.98.062130.
35. Random sequential adsorption of partially oriented linear k -mers on a square lattice [Текст] / N. I. Lebovka [et al.] // Physical Review E. — 2011. — Vol. 84, no. 6. — DOI: 10.1103/PhysRevE.84.061603.
36. *Боков, К. А.* Решеточные перколяционные модели структуры полимера, модифицированного углеродными нанотрубками: магистерская диссертация [Текст] / К. А. Боков. — Пермь, 2020. — 168 с.
37. *Боков, К. А.* Джемминг k -меров разной формы на квадратной решетке [Текст] / К. А. Боков, М. М. Бузмакова // Математика и междисциплинарные исследования — 2019: материалы Всероссийской научно-практической конференции молодых ученых с международным участием. — Пермь, 2019. — С. 50—54.

38. *Manna, S. S.* Random sequential adsorption: line segments on the square lattice [Текст] / S. S. Manna, S. N. M. // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 1991. — Vol. 24, no. 12. — DOI: 10.1088/0305-4470/24/12/003.
39. Adsorption of line segments on a square lattice [Текст] / B. Bonnier [et al.] // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. — 1994. — Vol. 49, no. 1. — P. 305—312. — DOI: 10.1103/PhysRevE.49.305.
40. Decimal expansion of Renyi's parking constant [Электронный ресурс]. — URL: <https://oeis.org/A050996> (дата обр. 19.12.2023).
41. *Bokov, K. A.* The Modeling of the Polymer's Thin Film, Modified by Carbon Nanotubes, this Using of the percolation theory's methods [Текст] / K. A. Bokov, M. M. Buzmakova // Journal of Physics: Conference Series. — 2019. — Vol. 1189. — DOI: 10.1088/1742-6596/1189/1/012012.
42. *Боков, К. А.* Моделирование нанокompозита, получаемого путем модификации эпоксид-полимера наночастицами [Текст] / К. А. Боков, М. М. Бузмакова // Высокие технологии, определяющие качество жизни: материалы II международной научной конференции. — Пермь, 2018. — С. 154—156.
43. *Боков, К. А.* Перколяционная модель структуры тонкой пленки эпоксидной смолы, модифицированной углеродными нанотрубками, с учетом межфазных областей [Текст] / К. А. Боков, М. М. Бузмакова // XXX Международная инновационная конференция молодых ученых

и студентов (МИКМУС - 2018): Сборник трудов конференции. — 2019. — С. 537—540.

44. *Bokov, K. A.* The Percolation Model of the Structure of the Polymer Nanocomposite, Containing the Carbon Nanotubes, with the Orient Factor Availability [Текст] / K. A. Bokov, M. M. Buzmakova // Journal of Physics: Conference Series. — 2020. — Vol. 1439. — DOI: 10.1088/1742-6596/1439/1/012027.
45. *Feder, J.* Random sequential adsorption [Текст] / J. Feder // Journal of Theoretical Biology. — 1980. — Vol. 87, no. 2. — P. 237—254. — DOI: 10.1016/0022-5193(80)90358-6.
46. *Nakamura, M.* Random sequential packing in square cellular structures [Текст] / M. Nakamura // Journal of Physics A: Mathematical and General. — 1986. — Vol. 19, no. 12. — P. 2345—2351. — DOI: 10.1088/0305-4470/19/12/020.
47. *Nakamura, M.* Percolational and fractal property of random sequential packing patterns in square cellular structures [Текст] / M. Nakamura // Physical Review A. — 1987. — Vol. 36, no. 5. — P. 2384—2388. — DOI: 10.1103/PhysRevA.36.2384.
48. *Brosilow, B. J.* Random sequential adsorption of parallel squares [Текст] / B. J. Brosilow, R. M. Ziff, D. R. Vigil // Physical Review A. — 1991. — Vol. 43, no. 2. — P. 631—638. — DOI: 10.1103/PhysRevA.43.631.
49. *Privman, V.* Continuum limit in random sequential adsorption [Текст] / V. Privman, J.-S. Wang, P. Nielaba // Physical

- Review B. — 1991. — Vol. 43, no. 4. — P. 3366—3372. — DOI: 10.1103/PhysRevB.43.3366.
50. *Dickman, R.* Random sequential adsorption: Series and virial expansions [Текст] / R. Dickman, J.-S. Wang, I. Jensen // The Journal of Chemical Physics. — 1991. — Vol. 94, no. 12. — P. 8252—8257. — DOI: 10.1063/1.460109.
51. Jamming and percolation for deposition of k^2 -mers on square lattices: A Monte Carlo simulation study [Текст] / A. J. Ramirez-Pastor [et al.] // Physical Review E. — 2019. — Vol. 99, no. 4. — DOI: 10.1103/PhysRevE.99.042131.
52. *Боков, К. А.* Компьютерное моделирование джемминга для перколяционной задачи Накамуры [Текст] / К. А. Боков, М. М. Бузмакова // Математические методы и информационно-технические средства: материалы XV Всероссийской научно-практической конференции. — 2019. — С. 27—31.

Научное издание

Эберт Кирилл Александрович
Бузмакова Мария Михайловна

**Модели перколяции и джемминга
неточечных объектов на квадратной решетке**

Монография

Редактор: *Н. И. Стрекаловская*
Корректор: *А. В. Цветкова*
Компьютерная верстка: *К. А. Эберт*

Объем данных: 11,6 Мб

Подписано к использованию: 06.08.2024

Размещено в открытом доступе на сайте www.psu.ru
в разделе НАУКА / Электронные публикации
и в электронной мультимедийной библиотеке ELiS

Управление издательской деятельности
Пермского государственного
национального исследовательского университета
614068, г. Пермь, ул. Букирева, 15