МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Оренбургский государственный университет»

Кафедра радиофизики и электроники

В.В. ГУНЬКОВ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРКОЛЯЦИОННОГО КЛАСТЕРА

МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ
К ЛАБОРАТОРНОМУ ПРАКТИКУМУ

Рекомендовано к изданию Редакционно-издательским советом
государственного образовательного учреждения
высшего профессионального образования
«Оренбургский государственный университет»

Оренбург 2005

УДК 519.8 (076.5)
ББК 22.18 я73
Г 94

Рецензент
доктор физико-математических наук, профессор М.Г. Кучеренко

Гуньков В.В.
Г 94 **Моделирование перколяционного кластера [Текст]: методические указания к лабораторному практикуму / В.В. Гуньков. – Оренбург: ГОУ ОГУ, 2005.- 9с.**

Методические указания содержат необходимые теоретические сведения и задания для выполнения лабораторной работы.

Методические указания предназначены для выполнения лабораторного практикума по дисциплине “Математическое моделирование в физике” для студентов специальностей 013800 и 014000.

ББК 22.18 я73

1 Цель работы

Получить компьютерную реализацию перколяционного кластера. Провести численный эксперимент, имитирующий блуждание броуновской частицы по перколяционному кластеру. Определить коэффициент диффузии частицы в перколяционной системе.

2 Описание

Теория перколяции (синоним – теория протекания) возникла в 1957 году благодаря исследованиям математика Дж. Хаммерсли. В физике теория перколяции используется для описания и изучения процессов, происходящих в неоднородных средах с нерегулярной структурой.

Кластером в физике часто называют систему связанных атомов или молекул. Кластерные структуры возникают при «слипании» молекул в процессе конденсации жидкости, при коагуляции твердых частиц. Такие структуры являются переходными к макроскопической среде. Свойства вещества в таком состоянии качественно отличаются как от свойств отдельных составляющих кластер атомов, так и от макроскопической среды. Иногда кластером называют систему связанных мелкодисперсных частиц или пор (трещин) в твердом теле.

Рассмотрим построение кластера на сетке с квадратными ячейками. Такую сетку удобно представлять двумерным массивом. Будем строить кластер на сетке размером 50x50 ячеек средствами пакета Mathematica 5.1.

```
numx=50;numy=50;
m=Table[0,{i,numy},{j,numx}];
```

Ячейки могут находиться в двух состояниях: «пусто» или «занято». Условимся обозначать заполненную ячейку, присваивая соответствующему элементу массива значение 1, пустую – присваивая значение 0. Таким образом, приведенные выше строки помечают все ячейки сетки как пустые.

Каждая ячейка заполняется с некоторой вероятностью p независимо от состояния её соседей. В данной модели будем определять **кластер** как группу занятых ячеек решетки, связанных с ближайшими соседями по стороне ячейки. Таким образом, какие-либо две занятые ячейки принадлежат одному кластеру, если от одной до другой можно пройти по занятым ячейкам.

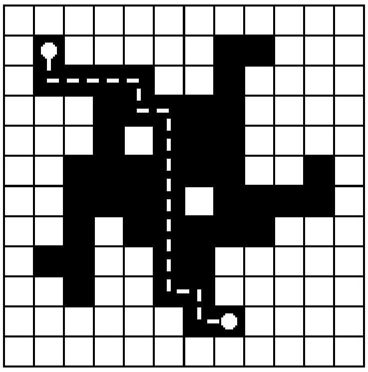

Рисунок 1 – Кластер

Просматривая последовательно все ячейки, будем заполнять их с вероятностью $p = 0.2$:

```
p = 0.2;
Do[Do[ If[Random[]>p,m[[i,j]]=1], {j,numx}],{i,numy}]
ListDensityPlot[-m, Mesh->False];
```

После выполнения этих строк появится рисунок, похожий на рисунок 2.

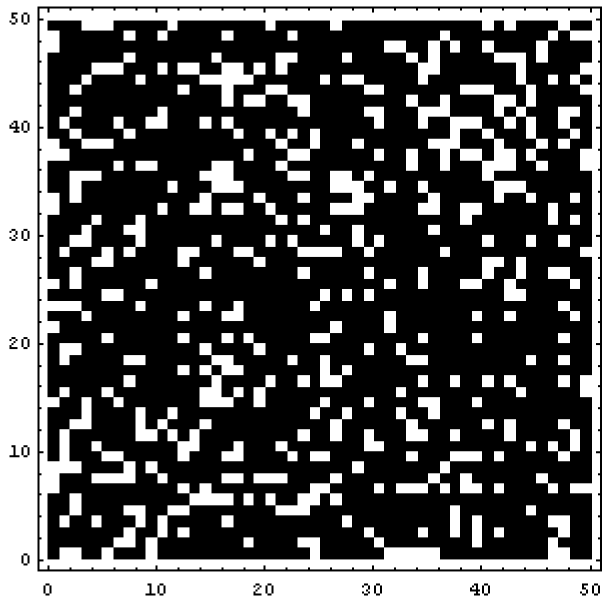

Рисунок 2 – Соединяющий кластер

Занятые ячейки здесь изображены черным цветом, свободные – белым. Как видим, почти все ячейки принадлежат одному кластеру, который соединяет одну сторону рассматриваемой области с другой. Такой кластер называется *соединяющим*.

Задание 1. *Повторите выполнение приведенных выше строк несколько раз и, изменяя вероятность заполнения ячеек от 0 до 1, попытайтесь* *определить, при каком пороговом значении p возникает соединяющий кластер.*

Соединяющий кластер, полученный при пороговом значении *p*, *называют кластером на пороге протекания* или *перколяционным кластером*.

Для автоматизации поиска порогового значения *p* нам необходимо, во-первых, научиться определять наличие протекания. Воспользуемся методом многократной маркировки кластеров Хошена и Копельмана.

Рассмотрим матрицу

8	8		10	4	4	
8				9	4	4
	7	4			4	4
7	7	6	6	4	4	4
		6		5	4	4
2	2			5	4	4
2		3	3		4	

Для определения принадлежности ячеек к кластерам будем присваивать ячейкам кластерные метки. Двигаясь из нижнего левого угла вправо, просматриваем последовательно все ячейки. Ячейка (1,1) занята – присваиваем ей метку 2. Следующая ячейка пустая, поэтому не маркируется. Следующей занятой ячейкой является ячейка (3,1). Так как соседняя ячейка слева пустая, присваиваем ей следующую допустимую метку: 3. Следующая за ней ячейка (4,1) соприкасается слева с помеченной ячейкой, поэтому присваиваем ей такую же метку, как у предыдущей: 3. Все остальные ячейки первой строки маркируются по этому правилу.

В системе «Mathematica 5» эти действия реализуются следующей последовательностью команд:

```
mark = 2;
If[m[[1,1]] == 1, m[[1,1]] = mark ];
Do[
  If[m[[1,j]] != 0,
    If[m[[1,j-1]] != 0,
      m[[1,j]] = m[[1,j-1]],
      mark = mark+1; m[[1,j]] = mark ]],
  {j,2,numx}]
```

Двигаясь по второй строке, проверяем наличие соседей у занятых ячеек слева и снизу. Если соседние ячейки не заняты, присваиваем рассматриваемой занятой ячейке следующую допустимую метку. Если занята только одна соседняя ячейка, присваиваем рассматриваемой ячейке метку соседней. В случае, если заняты одновременно ячейки и снизу, и слева, необходимо выбрать наименьшую из меток соседей. Такая ситуация впервые встречается в ячейке (6,2): слева имеется занятая ячейка, помеченная 5, снизу – ячейка с меткой 4. Необходимо выбрать метку 4 и в дальнейшем все время метку 5 заменять на метку 4.

Для запоминания меток, подлежащих замене, вводится одномерный массив **index**. Количество элементов массива должно заведомо превышать количество возможных меток, в большинстве случаев можно предполагать, что меток будет не больше **numx*numy*p**. Изначально каждому элементу массива **index** присваивается его порядковый номер:

```
index=Table[i,{i,numx numy p}];
```

Если необходимо запомнить, что, например, вместо метки 5 нужно использовать метку 4, в массиве **index** элементу номер 5 присваивается значение 4.

Ниже приведен цикл, который просматривает все ячейки и проводит их предварительную индексацию.

```
Do[
  If[m[[i,1]]!=0,
    If[m[[i-1,1]]!=0,
      m[[i,1]]=index[[m[[i-1,1]]]],
      mark=mark+1;m[[i,1]]=mark]];

  Do[
    If[m[[i,j]]!=0,
      If[m[[i-1,j]]!=0&&m[[i,j-1]]!=0,
        m[[i,j]]=
              index[[Min[m[[i-1,j]],m[[i,j-1]]]]];
          index[[Max[m[[i-1,j]],m[[i,j-1]]]]]=
              Min[m[[i-1,j]],m[[i,j-1]]],
        If[m[[i,j-1]]!=0,
          m[[i,j]]=index[[m[[i,j-1]]]],
          If[m[[i-1,j]]!=0,
            m[[i,j]]=index[[m[[i-1,j]]]],
            mark=mark+1;m[[i,j]]=mark]]]],
    {j,2,numx}],
  {i,2,numy}]
```

При выполнении этой программы может возникнуть ситуация, когда в массиве **index** содержится информация о последовательном переобозначении меток. Например, метку 11 нужно помечать как 7, метку 7 – как 5, метку 5 – как четыре. Поэтому на данном этапе необходимо пересмотреть массив **index** для устранения последовательных ссылок.

```
Do[index[[i]]=index[[ index[[i]] ]],{i,numx numy p}]
```

Теперь производим финальную переиндексацию меток:

```
Do[
  Do[
    If[m[[i,j]]!=0,
     m[[i,j]]=index[[m[[i,j]]]]],
    {j,numx}],
  {i,numy}]

ListDensityPlot[Sin[100*m^2], ColorFunction->(Hue[#]&),
    Mesh->False]
```

По окончании работы рассмотренной программы на экране появится изображение квадрата с выделенными на нем кластерами. В качестве примера ниже приведен рисунок 3, полученный при p=0,4.

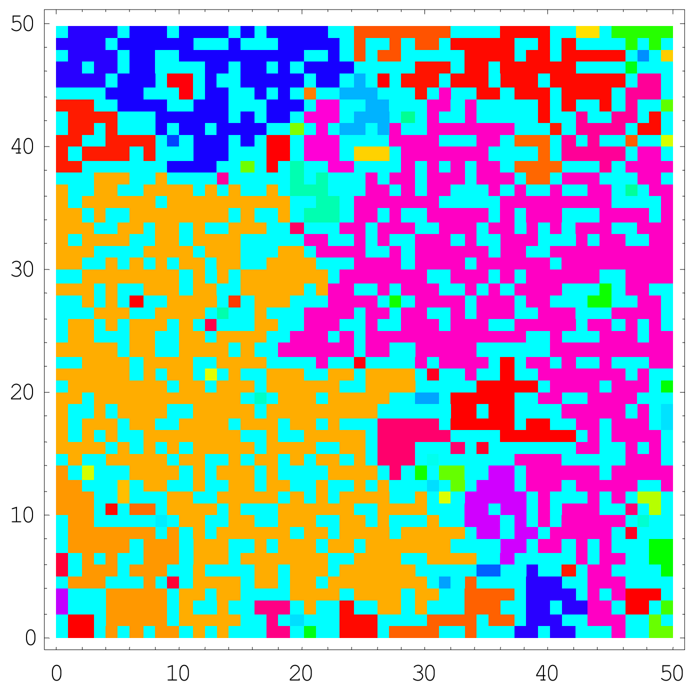

Рисунок 3 – Разбиение области на кластеры

Обратите внимание, что при построении изображения кластера в операторе **`ListDensityPlot`** массив **`m`**, хранящий информацию о кластере предварительно преобразован с помощью быстро осциллирующей функции **`Sin[100*m^2]`**. Это сделано, чтобы кластеры, имеющие близкие по значению метки отображались разными цветами. Для визуализации каждой конкретной полученной реализации кластеров осциллирующую функцию рекомендуется подбирать индивидуально исходя из собственных особенностей восприятия цветов и эстетических предпочтений.

Задание 2. *Доработайте рассмотренную программу таким образом, чтобы она автоматически выдавала ответ о наличии перколяционного кластера в системе.*

Созданную программу можно модифицировать для рассмотрения перколяции на треугольной решетке. За основу следует взять решетку с квадратными ячейками и учесть у узлов наличие соседей, расположенных по диагонали. Это можно сделать двумя способами, показанными на рисунке. Первый способ является более простым, второй – предпочтительным из-за экономии машинной памяти при рассмотрении задач диффузии и случайного блуждания (подумайте, почему).

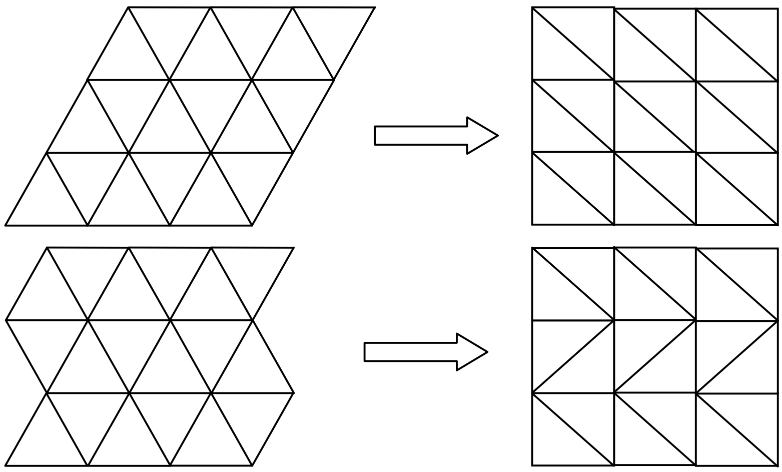

Рисунок 4 - Представление сетки с треугольными ячейками посредством двумерного массива

В первом случае для узла с координатами (i, j) список соседей будет таким:

$$(i+1, j),\ (i, j+1),\ (i-1, j+1),\ (i-1, j),\ (i, j-1),\ (i+1, j-1).$$

Во втором случае индексы диагональных узлов будут зависеть от четности индекса строки. Список соседей узла (i, j) для второго случая:

$$(i+1, j),\ (i, j+1),\ \left(i-1, j+(-1)^j\right),\ (i-1, j),\ (i, j-1),\ \left(i+1, j+(-1)^j\right).$$

Одним из возможных изображения сетки с треугольными ячейками второго типа на мониторе ЭВМ является создание изображающего двумерного массива на основе исходного по правилу, указанному ниже на рисунке.

1	2	3
4	5	6
7	8	9

1	1	2	2	3	3	0
1	1	2	2	3	3	0
0	4	4	5	5	6	6
0	4	4	5	5	6	6
7	7	8	8	9	9	0
7	7	8	8	9	9	0

Рисунок 5 - Построение изображающего массива для сетки с треугольной ячейкой

Задание 3. *Модифицируйте алгоритм таким образом, чтобы программа генерировала кластеры и оценивала наличие перколяции на сетке с треугольными ячейками. Получите изображение рассматриваемой области.*

Коэффициент диффузии броуновской частицы определяется предельным переходом $t \to \infty$ в выражении:

$$D(t) = \frac{1}{2dt}\left\langle \Delta R(t)^2 \right\rangle, \qquad \mathbf{(1)}$$

где $\left\langle \Delta R(t)^2 \right\rangle$ – полное среднеквадратичное смещение частицы за время t.

Задание 4. *Определите методом статистических испытаний зависимость коэффициента диффузии броуновской частицы в перколяционном кластере D(t) от времени. Оцените D(t) при* $t \to \infty$.

3 Литература, рекомендуемая для изучения темы

3.1 Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике [Текст] / Х. Гулд, Я. Тобочник: в 2-х частях. – М.: Мир, 1990. – 749 с.

3.2 Божокин С.В., Паршин Д.А. Фракталы и мультифракталы [Текст] / С.В. Божокин, Д.А. Паршин. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. – 128 с.

3.3 Капустина Т.В. Компьютерная система Mathematica 3.0 для пользователей [Текст]: справ. пособие / Т.В. Капустина. – М.: СОЛОН-Р, 1999. – 240 с.

3.4 Мандельброт Ж. Фрактальная геометрия природы [Текст] / Ж. Мандельброт. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. – 656 с.