На правах рукописи

Буреева Мария Александровна

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕПРЕРЫВНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В РАМКАХ ЗАДАЧИ СВЯЗЕЙ ОДНОМЕРНОЙ ТЕОРИИ ПРОТЕКАНИЯ

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Барнаул – 2011

Работа выполнена на кафедре теоретической физики
и информационных технологий в образовании
ГОУ ВПО «Хакасский государственный университет
им. Н. Ф. Катанова»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Удодов Владимир Николаевич

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Плотников Владимир Александрович

кандидат физико-математических наук, доцент
Хаимзон Борис Бернардович

Ведущая организация: Институт физики прочности
и материаловедения СО РАН, г. Томск

Защита диссертации состоится 20 мая 2011 года в 14-00 на заседании диссертационного совета Д 212.005.04 при ГОУ ВПО «Алтайский государственный университет» по адресу: 656049, Барнаул, пр. Ленина, 61.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ГОУ ВПО «Алтайский государственный университет» по адресу: 656049, г. Барнаул, пр. Ленина, 61.

Автореферат разослан «18» апреля 2011 года.

Учёный секретарь
диссертационного совета
доктор физико-математических наук,
профессор С. А. Безносюк

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Проблема моделирования фазовых переходов – это одна из центральных и современных проблем как математического и компьютерного моделирования, так и других областей науки, в которых свойства описываемой системы меняются скачкообразно. Существенный вклад в решение этой задачи вносит применение методов теории протекания. В первую очередь это обусловлено тем, что теория адекватно описывает многие системы, в которых имеет место геометрический фазовый переход: переход проводник-изолятор в смесях проводящих и изолирующих частиц, раскалывание горных пород при образовании достаточного количества трещин и т.д. Кроме того, она используется при описании упругости полимерных гелей, прыжковой проводимости в легированных полупроводниках, аномальной диффузии в одномерных (квазиодномерных) дефектных структурах, квазиодномерных изинговских магнетиков с немагнитными атомами и целом ряде других задач в экономике, социологии, биологии, демографии и т.д.

В настоящее время, в связи с активным развитием такой области науки, как наноэлектроника, особенно актуальным становится исследование дефектных систем малых размеров и пониженной размерности (нульмерные, одномерные и двумерные структуры). Экспериментальное и теоретическое изучение таких явлений крайне сложно, поэтому важное значение приобретает создание и исследование математических и компьютерных моделей малых систем.

Помимо этого, достоинством моделей ограниченного размера является то, что они могут быть исследованы математически строго комбинаторными методами.

Степень изученности проблемы. В своих исследованиях автор полагался на труды отечественных и зарубежных исследователей, внесших значительный вклад в развитие теории моделирования фазовых переходов в рамках перколяционного подхода: Дж. Хаммерсли, С. Бродбент, А. Л. Эфрос, Б. И. Шкловский, Дж. Займан, М. Сайкс, Дж. Эссам, Ю. Ю. Тарасевич, Е. Н. Манжосова, О. С. Вайтанец, М. В. Меньшиков, Б. А. Аронзон, В. Е. Архинчеев, В. Н. Удодов и др.

Наибольших результатов удалось достичь в вычислении порога протекания, как в задаче узлов, так и в задаче связей. Найдены значения порога протекания в термодинамическом пределе (для системы бесконечного размера) для некоторых плоских решеток (треугольная, квадратная, шестиугольная, решетка «галстук-бабочка», решетка Кагоме). Приближенными методами (в частности, методами компьютерного моделирования) получены значения порога протекания как в задаче узлов, так и в задаче связей, для многих решеток размерности $d > 2$ кубической, объемноцентрированной, гранецентрированной, решетки типа алмаза и др. В одномерной задаче узлов с различным радиусом перколяции найдены значения порога протекания для систем конечного размера и для бесконечной решетки.

Однако значения критических индексов, отражающих характер зависимости исследуемых величин от управляющих параметров, найдены только для размерности пространства $d \geq 2$. Для модели одномерной перколяции найдены значения критических индексов лишь в задаче узлов.

Цель диссертационного исследования – разработка и реализация математических и компьютерных моделей, алгоритмов и прикладных программ для комплексного исследования задачи связей одномерной теории протекания в системах конечных размеров с произвольным радиусом перколяции.

Для достижения этой цели в работе решались следующие **задачи**:

1. Разработать метод математического моделирования и алгоритмы расчета порога протекания и основных критических индексов для задачи связей одномерной теории перколяции при произвольном радиусе протекания.

2. В рамках разрабатываемой модели рассчитать порог протекания, аналог свободной энергии и критические индексы корреляционной длины и теплоемкости с учетом внешнего поля с целью сопоставления одномерных задач узлов и связей.

3. С целью проверки устойчивости и адекватности модели провести анализ справедливости термодинамических условий устойчивости системы и гипотезы подобия для одномерной теории перколяции в системах малого размера для задачи связей.

Объект исследования – моделирование фазового перехода на одномерной цепочке узлов в рамках теории протекания в зависимости от управляющего и внешних параметров.

Предметом исследования настоящей работы является компьютерное моделирование геометрического (без учета взаимодействия) фазового перехода в рамках математической задачи связей одномерной теории протекания.

Методы исследований. В качестве основного математического метода компьютерного эксперимента был выбран статистический метод Монте-Карло. Кроме того, использовались методы теории одномерной перколяции, теории графов и математической статистики, а также методы линейной и не-линейной экстраполяции при расчете индексов в термодинамическом пределе (для системы бесконечного размера).

Научная новизна работы состоит в том, что впервые разработаны метод математического моделирования и алгоритмы решения одномерной задачи связей теории протекания для систем конечного размера при произвольном радиусе протекания с использованием теории графов без построения покрывающей решетки, позволяющие вычислять характеристики геометрических фазовых переходов в одномерном случае. Впервые рассчитан критический индекс аналога теплоемкости выше порога протекания. Показано, что значения индекса теплоемкости выше и ниже порога существенно различаются в одномерной задаче связей, что говорит о сильном нарушении математической гипотезы подобия для одномерных систем конечного размера.

Разработаны алгоритмы, компьютерные программы и методики нахождения аналогов свободной энергии и критического индекса теплоемкости с учетом внешнего поля выше и ниже порога протекания для задачи связей на модели конечного размера с произвольным радиусом перколяции.

Положения, выносимые на защиту:

1. Метод математического моделирования одномерной задачи связей теории протекания для систем конечного размера при произвольном радиусе перколяции, основанный на теории графов.
2. Оригинальный алгоритм маркировки кластеров для одномерной задачи связей при произвольном радиусе протекания.
3. Эффективные алгоритмы расчета критических индексов корреляционной длины и теплоемкости для одномерной задачи связей при произвольном радиусе протекания на основе численного метода Монте-Карло.
4. Комплекс компьютерных программ для расчета порога протекания, аналога свободной энергии и критических индексов корреляционной длины и теплоемкости для одномерной задачи связей теории перколяции.

Значение для теории. Разработан новый метод математического моделирования, на основе которого создан комплекс эффективных алгоритмов и компьютерных программ для вычисления основных показателей задачи связей одномерной теории протекания для систем конечного размера с произвольным радиусом протекания. Рассчитанные при помощи комплекса программ критические индексы, характеризующие сингулярности термодинамических функций, могут служить основой для новых теорий моделирования фазовых превращений и диффузии.

Значение для практики. Разработанный комплекс проблемно-ориентированных программ позволяет вычислять основные характеристики задачи связей одномерной теории перколяции для систем из сотен узлов и отслеживать их изменение в зависимости от размеров системы, величины внешнего поля и радиуса протекания. Рассчитанные критические индексы могут использоваться при модельном описании фазовых превращений. Предложенные алгоритмы значительно повышают быстродействие компьютерных программ. Полученные результаты могут найти применение при моделировании прыжковой проводимости полупроводников при низких температурах, политипных превращений в плотноупакованных кристаллах, аномальной диффузии и в ряде других случаев, в особенности для объектов или зерен нанометровых размеров.

Достоверность полученных результатов достигается за счет использования в качестве основополагающей системы модели решеточного газа, нашедшей широкое применение в теории моделирования. Использовался хорошо зарекомендовавший себя численный метод статистических испытаний – метод Монте-Карло, позволяющий определять погрешность расчета в рамках самого метода. Также применялись апробированные и надежные алгоритмы, в том числе алгоритмы теории перколяции. Подтверждение достоверности осуществлялось сопоставлением с данными экспериментальных исследований, а также с результатами, полученными другими авторами с использованием других методов, в том числе и теоретических. Проводилось тестирование предложенного метода на основе сравнения с аналитическим решением задачи связей на четырех узлах, которое показало согласие численных и аналитических результатов в пределах погрешности расчета.

Использование результатов диссертации. Результаты диссертационного исследования используются в Хакасском государственном университете им. Н. Ф. Катанова и могут быть использованы в учебном процессе для студентов, магистров и аспирантов и при создании нового программного обеспечения в Томском государственном университете, Сибирском физико-техническом институте им. акад. В. Д. Кузнецова (г. Томск), Алтайском государственном университете (г. Барнаул), Сибирском федеральном университете (г. Красноярск), Институте физики прочности и материаловедения СО РАН (г. Томск), а также в других организациях, где ведется моделирование прыжковой проводимости полупроводников при низких температурах, квазиодномерных магнетиков с примесями, аномальной диффузии при низких температурах и моделирование других явлений в низкоразмерных неупорядоченных системах нанометрового размера.

Личный вклад автора состоит в участии в постановке задач, разработке алгоритмов и компьютерных программ, проведении численных расчетов и анализе результатов, а потому является определяющим. Все основные положения и выводы диссертации получены лично автором. Оригинальный математический метод решения одномерной задачи связей при произвольном радиусе протекания с использованием теории графов без построения покрывающей решетки предложен автором. Из работ, выполненных в соавторстве, в диссертацию включены результаты, полученные лично соискателем.

Апробация результатов диссертации. Результаты диссертационного исследования были изложены на ежегодных «Республиканских Катановских чтениях» (2004-2008 гг., г. Абакан), на X Российской научной студенческой конференции «Физика твердого тела» (2006 г, г. Томск), на 8, 9, 12, 13 Всероссийских семинарах «Моделирование неравновесных систем» (2005-2006 гг, 2009-2010 г., г. Красноярск); на IV, V и VI Всесибирских конгрессах женщин-математиков (2006 г., 2008 г., 2010 г., г. Красноярск), на 4 Всероссийской конференции молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем» (2008 г., г. Томск); на Международных конференциях: «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (2003 г., г. Барнаул); «Фундаментальные проблемы современного материаловедения» (2006 г., г. Барнаул); на Международной научно-технической школе-конференции «Молодые ученые – науке, технологиям и профессиональному образованию в электронике» (2005 г., 2006 г., 2008 г., г. Москва), на конференции Американского физического общества (2011 г., Даллас, США).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 20 научных работ, из которых 13 статей (4 статьи в журналах), в том числе: 1 статья в периодическом издании в соответствии со списком ВАК, 1 статья депонирована в ВИНИТИ, 5 статей в трудах Международных научно-технических конференций, 6 работ в материалах Всероссийских научно-технических конференций, 1 статья в сборнике научных трудов, 1 статья в электронном архиве в США.

Общая характеристика диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, содержит основной текст на 124 с., 25 иллюстраций, список литературы из 201 наименования, 6 приложений.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение содержит обоснование актуальности темы исследования, сформулированы научная новизна и практическая значимость диссертационной работы, приведены защищаемые положения, дана краткая характеристика глав диссертации.

В первой главе «Моделирование фазовых переходов в системах конечного размера в рамках перколяционного подхода» представлен обзор современных данных о математических моделях фазовых переходов первого и второго рода. Сформулирован ряд актуальных вопросов о моделировании фазовых превращений в системах конечного размера. Рассмотрены основные положения теории протекания и ее приложение к моделированию фазовых переходов.

Проблема моделирования фазовых переходов является одной из важнейших проблем теории математического моделирования. Это обусловлено в первую очередь огромным интересом к характерным особенностям фазовых превращений, которые проявляются в резком изменении свойств системы. Кроме того, в окрестностях фазового перехода свойства системы не только меняются резким образом, но и поведение системы в этом интервале оказывается чувствительным даже к небольшим внешним воздействиям, что существенно с точки зрения технических приложений и вызывает интерес у представителей других областей науки, например у биологов, медиков, экономистов, социологов, экологов.

Существует множество теоретических моделей, применяемых для описания систем, совершающих фазовый переход. Одной из самых распространенных среди них является модель решеточного газа. Эта модель первоначально служила для модельного описания критической точки жидкость – пар. Модель решеточного газа описывается числами заполнения 0 или 1: единица (нуль) соответствует состоянию узла, в котором есть (нет) атом. Далее решетка заполняется нулями и единицами многократно с помощью генератора случайных чисел.

Компьютерное моделирование фазовых переходов тесно связано с методами теории перколяции, так как перколяционный переход является моделью простейшего фазового перехода.

В основе математических решеточных задач теории протекания лежит решетка неограниченных размеров, каждый узел которой либо занят случайным образом (т.е. является целым), либо свободен (т.е. блокирован). Концентрация (доля) целых узлов равна x.

Два целых узла связаны, если они соединены цепочкой целых узлов, причем любые два соседних узла цепочки являются ближайшими соседями (радиус протекания R равен 1). Совокупность связанных узлов называется кластером. Существует такая критическая концентрация целых узлов x_c, что для $x < x_c$ на решетке существуют только кластеры конечного размера, в то время как при $x > x_c$ образуется бесконечный кластер, «связывающий» противоположные стороны решетки. Это значение x_c и называется порогом протекания задачи узлов и находится по формуле

$$x_c = \frac{N_1}{N}, \tag{1}$$

где N– общее число узлов решетки, N_1 – среднее число целых узлов решетки на пороге протекания.

В задаче связей, наоборот, все узлы целые, а связи разрываются случайным образом, то есть связи бывают целые и блокированные.

В связи с тем, что перколяционный переход является фазовым переходом без взаимодействия, некоторые величины теории протекания аналогичны величинам из математической теории фазовых переходов второго рода. Многие важные характеристики кластера (корреляционная длина, среднее число узлов) вблизи перехода описываются степенной функцией с различными критическими показателями:

$$F(x) \propto \left| x - \tilde{o}_c \right|^{2-\alpha}, \tag{2}$$

$$\xi(x) \propto \left(\tilde{o}_c - x \right)^{-\nu}, \tag{3}$$

где $F(x)$ – аналог свободной энергии системы, $\xi(x)$ – корреляционная длина (определяет поведение пространственной корреляционной функции), x – доля целых узлов в цепочке, x_c – порог протекания, α – критический индекс теплоемкости ниже порога протекания, ν – критический индекс корреляционной длины.

Введенную в задаче связей теории одномерной перколяции цепочку узлов вполне естественно рассматривать в виде неориентированного графа: узлы цепочки соответствуют вершинам графа, а связи – ребрам графа. Достаточно эффективным средством представления и исследования свойств неориентированного графа является матрица смежности.

В настоящее время модели фазовых переходов и критических явлений интенсивно исследуются методами Монте-Карло. Это обусловлено в первую очередь тем, что современный этап моделирования фазовых переходов характеризуется изучением более сложных и реалистических моделей, аналитическое описание которых невозможно.

Одним из эффективных алгоритмов метода Монте-Карло, применяемым для моделирования перколяции, является метод простой выборки. В данной задаче он означает генерацию конфигураций и их последующий анализ с учетом равных статистических весов этих конфигураций.

Для перколяционной модели заполненная решетка рассматривается как конфигурация в методе простой выборки. Для генерации конфигурации необходимо просмотреть по одному разу все узлы решетки, заполняя (числами 1) или оставляя их при этом свободными (число 0) с помощью генератора случайных чисел. Анализ сгенерированной конфигурации обычно состоит в подсчете числа и размеров кластеров в данной конфигурации.

Кроме того, важную роль играют непосредственно перколяционные алгоритмы – алгоритм определения порога протекания и алгоритм многократной маркировки кластеров Хошена-Копельмана.

Вторая глава «Расчет порога протекания и критического индекса корреляционной длины для одномерной модели решеточного газа» посвящена моделированию одномерного решеточного газа в рамках теории перколяции. Изложены методы нахождения порога протекания и критического индекса корреляционной длины в задаче узлов и задаче связей.

Разработана модель решения одномерной задачи связей, основанная на методах теории графов. Цепочка узлов представляется в виде неориентированного графа G: каждый узел цепочки соответствует вершине графа G, а каждая связь – ребру графа G. Так как мы рассматривали модель с оборванными концами (рис. 1а), то концу каждой оборванной связи также поставим в соответствие вершину графа G. В результате полученный граф будет иметь на 2 (R–1) вершин больше, чем количество узлов в цепочке (рис. 1б), R – радиус протекания.

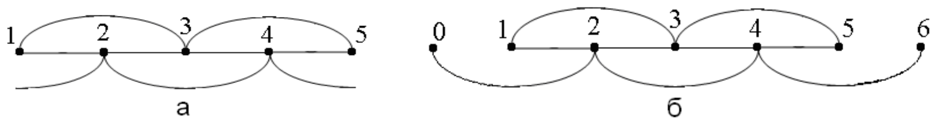

Рис. 1 Цепочка из пяти узлов при радиусе протекания R = 2 (а) и соответствующий ей граф G

Полученный граф исследуется с помощью матрицы смежности (рис. 2). Элемент матрицы q [i; j] = 0, если i-я и j-я вершины графа G не связаны между собой ребром (то есть связь между i-м и j-м узлами исходной цепочки блокированная или отсутствует вовсе). В противном случае элемент матрицы $q\,[i; j] = 1$.

$$
\begin{array}{c c}
 & \begin{array}{ccccccc} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{array} \\
\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{array} &
\begin{pmatrix}
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0
\end{pmatrix}
\end{array}
$$

Рис. 2. Матрица смежности графа, соответствующего цепочке из пяти узлов при радиусе протекания $R = 2$; все связи целые.

В программировании матрица смежности графа, соответствующего заданной цепочке, представляется с помощью двумерного массива, заполненного числами 0 и 1. Матрица смежности является симметричной относительно главной диагонали. Поэтому целесообразно рассматривать только часть двумерного массива, расположенную выше главной диагонали.

Разобьем полученный неориентированный граф G на подграфы следующим образом: если в исходной цепочке i-й узел принадлежит s-му кластеру, то в графе G i-я вершина принадлежит подграфу G_s. Для разбиения графа G на подграфы (маркировки кластеров в математической задаче связей при произвольном радиусе протекания) нами был разработан оригинальный алгоритм, обобщающий алгоритм Хошена-Копельмана. Данный алгоритм предназначен для определения наличия протекания в цепочке, а также размера кластеров по матрице смежности неориентированного графа, соответствующего исходной цепочке, и состоит в следующем:

1. Вводим метку k и присваиваем ей начальное значение $k = 2$.
2. Находим элемент матрицы смежности (массива) $q\,[i; j] = 1$ и присваиваем ему текущее значение k.
3. В i-ой и j-ой строках, а также в i-ом и j-ом столбцах всем единичным элементам матрицы (массива) q присваиваем текущее значение k.
4. Просматриваем все элементы матрицы (массива) и для каждого элемента $q\,[i; j] = k$ выполняем шаг 3; шаг 4 выполняем до тех пор, пока не достигнем конца матрицы (массива).
5. Увеличиваем значение метки k на единицу и возвращаемся к шагу 2.

Описанные шаги проделываем до тех пор, пока в матрице (массиве) не останется единичных элементов. По завершении алгоритма в матрице смежности каждый подграф (кластер в исходной цепочке) пронумерован собственной меткой, что позволяет определить наличие протекания по связям в цепочке и размер любого отдельно взятого кластера. Протекания в исходной цепочке не будет, если не будет ни одного подграфа, содержащего одновременно первые R и последние R вершин графа G.

Критический индекс корреляционной длины находим по формуле (3).

Разработан комплекс алгоритмов и программ, реализованных в среде объектно-ориентированного программирования Turbo Pascal 7.0, который позволяет рассчитывать порог протекания и критический индекс ν как в задаче узлов, так и в задаче связей с произвольным радиусом протекания. Обработка данных (нахождение среднего значения и среднего квадратичного уклонения), полученных в результате компьютерного эксперимента, осуществлялась методами математической статистики в среде табличного редактора Microsoft Office Excel. В рамках разработанного комплекса алгоритмов и программ исследуется влияние размеров системы на значение критического индекса корреляционной длины.

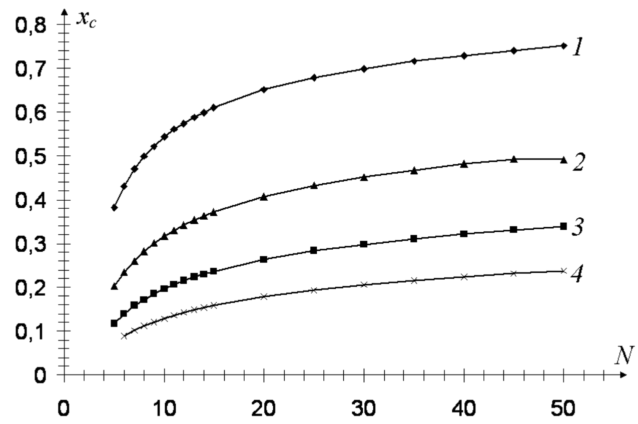

Рис. 3. Зависимость порога протекания от длины цепочки и радиуса протекания (задача связей): 1) $R = 2$; 2) $R = 3$; 3) $R = 4$; 4) $R = 5$; погрешность вычислений 5-20%.

Порог протекания возрастает с увеличением длины цепочки и уменьшается с увеличением радиуса протекания как в задаче узлов, так и в задаче связей (рис. 3). Кроме того, можно сделать вывод о справедливости теоремы Хаммерсли, так как для цепочек одинаковой длины порог протекания в задаче связей не больше, чем в задаче узлов.

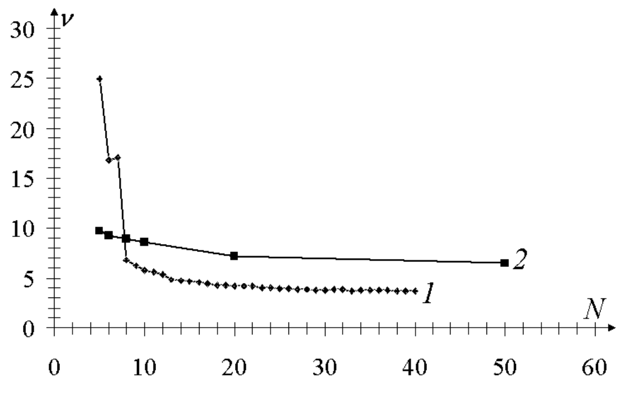

Рис. 4. Зависимость критического индекса корреляционной длины от длины цепочки и радиуса протекания (задача связей): 1) $R = 2$, 2) $R = 3$; погрешность вычислений 10-25%.

Индекс корреляционной длины, напротив, увеличивается с увеличением радиуса протекания и уменьшается с увеличением длины цепочки (рис. 4). Но в то же время в задаче связей индекс v больше, чем в задаче узлов для цепочек одинаковой длины.

С целью проверки математической корректности модели нами была рассмотрена описанными методами тестовая задача, которая состояла в нахождении порога протекания в задаче связей для цепочки из четырех узлов при радиусе протекания $R = 2$. Путем комбинаторного полного перебора всех конфигураций получено аналитическое решение данной задачи (точное решение).

В третьей главе «Расчет аналога свободной энергии и критического индекса теплоемкости для одномерной модели решеточного газа» представлен комплекс алгоритмов и программ для вычисления свободной энергии и критического индекса теплоемкости в различных задачах теории протекания.

В теории протекания роль свободной энергии F играет среднее число кластеров в расчете на один узел

$$F(x)=\sum_{s} n_s e^{-sh}, \tag{4}$$

где x – доля целых узлов (связей) в цепочке; n_s– среднее число кластеров размера s; h – параметр, играющий роль безразмерной напряженности поля.

В теории протекания величина h имеет следующий смысл. Введем дополнительный узел («демон» Кастелайна и Фортуина), не принадлежащий рассматриваемой решетке, но по определению связанный с каждым из ее узлов с вероятностью $1-e^{-h}$. Множитель e^{-sh} в перколяционной модели имеет смысл доли кластеров из s узлов, у которых ни один из узлов не связан с демоном. Таким образом, величина h не имеет прямого физического смысла и является дополнительным управляющим параметром.

Критический индекс аналога теплоемкости (далее для краткости – теплоемкости) находим из соотношения (2).

Как в задаче узлов, так и в задаче связей аналог свободной энергии и критический индекс теплоемкости (рис. 5) ниже порога протекания уменьшаются с увеличением длины цепочки и внешнего поля; график свободной энергии представляет собой кривую выпуклую вверх, что согласуется с термодинамическими условиями устойчивости системы (в устойчивом состоянии свободная энергия минимальна). Экстраполяция по обратному размеру показала, что индекс α уменьшается с увеличением радиуса протекания.

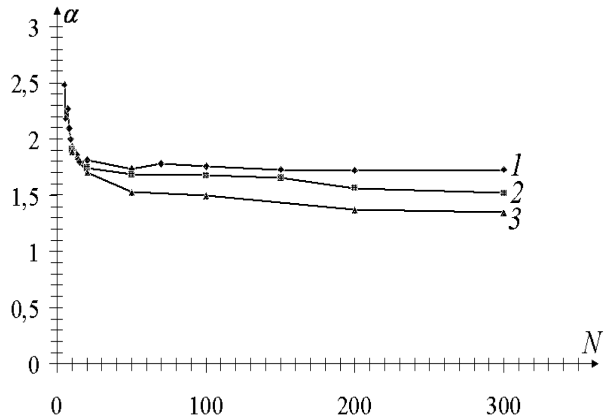

Рис. 5. Зависимость критического индекса теплоемкости от внешнего поля и длины цепочки ниже порога протекания (задача связей); 1) $h = 0$; 2) $h = 0{,}01$; 3) $h = 0{,}05$; радиус протекания $R = 2$; погрешность вычислений 8,7-21,7%.

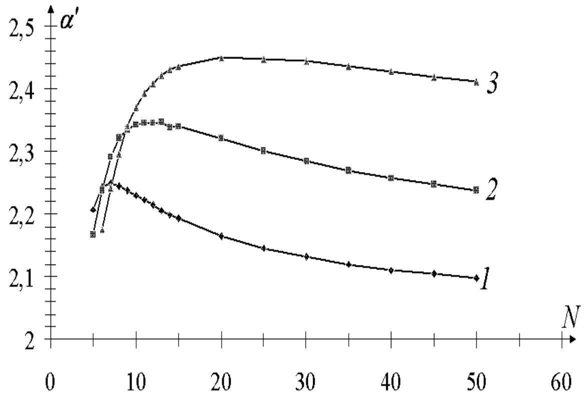

Рис. 6. Зависимость критического индекса теплоемкости выше порога протекания от длины цепочки и радиуса протекания в отсутствие внешнего поля (задача связей); 1) $R = 3$; 2) $R = 4$; 3) $R = 5$; погрешность вычислений 4-24%.

Также нами были вычислены значения критического индекса теплоемкости в задаче связей выше порога протекания (рис. 6). Особенностью индекса α' выше порога является наличие области возрастания и точки максимума для малых цепочек ($N \leq 15$). С увеличением внешнего поля меняется характер зависимости индекса α' от длины цепочки, и функция становится монотонно возрастающей. При радиусе протекания $R \geq 4$ этот факт проявляется уже при поле $h = 0{,}001$. Вследствие этого можно сделать предположение, что при радиусе $R \geq 4$ поле $h = 0{,}001$ уже является достаточно сильным, и имеет смысл рассматривать критический индекс теплоемкости при поле $h < 0{,}001$. Значения критического индекса теплоемкости в одномерной задаче связей выше и ниже порога протекания в отсутствие внешнего поля существенно различаются, что говорит о нарушении гипотезы скейлинга.

Кроме того, проверено выполнение условия устойчивости системы $\alpha + \nu\, d \geq 2$, где d – размерность пространства (в нашем случае $d = 1$). Результаты представлены в таблице.

Значения критических индексов α и ν в одномерной задаче узлов и задаче связей в зависимости от длины цепочки ($R = 2$)

Задача узлов				Задача связей			
N	α	ν	$\alpha + \nu\, d$	N	α	ν	$\alpha + \nu\, d$
5	2,48	3,36	5,84	5	2,58	7,65	10,23
10	1,93	3,22	5,15	10	1,90	4,74	6,63
50	1,73	2,36	4,09	50	1,56	3,47	5,02

Данные таблицы показывают, что условие устойчивости выполняется всегда как неравенство. Кроме того, из таблицы видно, что с увеличением длины цепочки величина $\alpha + \nu d$ уменьшается, но всегда превышает двойку. Экстраполяция по обратному размеру показывает, что для бесконечной системы в одномерной задаче связей $\alpha + \nu d \approx 4{,}8$. Таким образом, на основании данных компьютерного эксперимента можно сделать вывод, что гипотеза подобия для системы конечного размера (и даже согласно оценке для бесконечной системы) в одномерной теории протекания нарушается как в задаче узлов, так и в задаче связей (для задачи связей это доказано впервые). Это нарушение оказывается столь существенным, что необходимо сделать вывод, о неприменимости гипотезы подобия к одномерным случайным наноструктурам размером в сотни и тысячи структурных единиц. Следствия из этого утверждения нуждаются в дальнейших исследованиях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Разработаны метод математического моделирования и компьютерная модель, позволяющая рассматривать одномерную задачу связей теории перколяции с произвольным радиусом протекания на неориентированном графе. В рамках данной модели становится возможным решение одномерной задачи связей без построения покрывающей решетки, что значительно сокращает время работы компьютерных программ.
2. В рамках разработанной модели сформулирован новый алгоритм маркировки кластеров для одномерной задачи связей при произвольном радиусе протекания.
3. С помощью разработанных алгоритмов и компьютерных программ рассчитаны порог протекания и критический индекс корреляционной длины для системы конечного размера с радиусом перколяции $2 \leq R \leq 3$ в задаче узлов и $2 \leq R \leq 5$ в задаче связей. Проверена справедливость основных положений теории перколяции (в частности, теорема Хаммерсли). Показано, что критический индекс корреляционной длины, уменьшается с увеличением длины цепочки и растет с увеличением радиуса протекания независимо от типа задачи.
4. В рамках разработанной компьютерной модели произведен расчет аналога свободной энергии и критического индекса α с учетом внешнего поля выше и ниже порога протекания для задачи связей на модели конечного размера с радиусом перколяции $2 \leq R \leq 5$ и сопоставление с известными. Как в задаче узлов, так и в задаче связей аналог свободной энергии представляет собой кривую выпуклую вверх, что согласуется с термодинамическими ус-

ловиями устойчивости системы. Ниже порога протекания в задаче связей критический индекс аналога теплоемкости уменьшается (монотонная функция), а выше порога протекания индекс теплоемкости имеет максимум как функция длины цепочки.

5. Проведен сравнительный анализ результатов задачи узлов и задачи связей в рамках модели одномерной перколяции. Показано, что зависимости порога протекания, аналога свободной энергии и критических индексов корреляционной длины и теплоемкости от длины цепочки и радиуса протекания имеют одинаковый вид (кроме индекса теплоемкости), но значения перечисленных величин в одномерной задаче узлов и задаче связей существенно различаются.
6. Сделана проверка на математическую корректность построенной модели для задачи связей одномерной перколяции. Среднее квадратичное уклонение всех вычисленных параметров модели убывает пропорционально величине $1/\sqrt{m}$, где m – количество шагов Монте-Карло. Проведено сравнение результатов вычислений порога протекания в рамках построенной модели с точным значением порога протекания в тестовой задаче, найденным путем перебора всех конфигураций. Показано, что наблюдается согласие в пределах погрешности расчета.
7. Проверено выполнение условий устойчивости системы. Показано, что неравенство $\alpha + \nu d \geq 2$ выполняется всегда как неравенство независимо от типа задачи и радиуса протекания. Это согласуется с термодинамическими условиями устойчивости системы, то есть модель устойчива.
8. Анализ рассмотренной модели показал несправедливость гипотезы подобия в одномерной задаче связей для систем конечного размера при радиусе протекания $R \geq 3$, так как значения критического индекса аналога теплоемкости выше и ниже порога протекания существенно различаются. Таким образом, гипотеза подобия для модели одномерной перколяции как в задаче узлов, так и в задаче связей не применима для системы конечного размера (из сотен узлов). Следовательно, гипотеза подобия неприменима к одномерным случайным (неупорядоченным) наноструктурам размером в сотни структурных единиц. Возможно, именно это объясняет (хотя бы в некоторой степени) аномальные свойства нанометровых систем.

Таким образом, в работе впервые методами математического и компьютерного моделирования с помощью численного метода Монте-Карло решена задача связей для модели одномерной перколяции при произвольном радиусе протекания на цепочках конечного размера в десятки нанометров.

Список публикаций автора

В журналах, рекомендуемых ВАК по специальности

1. Буреева М. А., Волкова Т. В., Удодов В. Н., Потекаев А. И. Задача связей в одномерной теории перколяции для конечных систем // Известия вузов. Физика. – 2010. – № 2. – С. 33–39.

Другие публикации

2. Шпигальская Е. О., Кулакова М. А. (Буреева М. А.) Моделирование одномерно-разупорядоченных состояний в плотно упакованных кристаллах в рамках перколяционного подхода // Молодые ученые – 2005: материалы Международной технической школы-конференции «Молодые ученые – науке, технологиям и профессиональному образованию в электронике», 26–30 сентября 2005 г. – М.: МИРЭА, 2005. – Ч. 1. – 292 с. – С. 48–51.
3. Кулакова М. А. (Буреева М. А.), Удодов В. Н. Порог протекания и критические индексы α и ν для модели одномерной перколяции // Моделирование неравновесных систем: материалы VIII Всероссийского семинара, 14–16 октября 2005 г.; под ред. В. В. Слабко. – Красноярск: ИВМ СО РАН, 2005. – 245 с. – С. 109–110.
4. Кулакова М. А. (Буреева М. А.), Удодов В. Н. Порог протекания и критические индексы α, β, ν для модели одномерной перколяции // IV Всесибирский конгресс женщин-математиков (в день рождения Софьи Васильевны Ковалевской): материалы конференции, 15–19 января 2006 г.; под ред. Г. М. Рудаковой. – Красноярск: РИО СибГТУ, 2006. – 212 с. – С. 94–95.
5. Шпигальская Е. О., Кулакова М. А. (Буреева М. А.), Удодов В. Н., Мартыненко М. В. Теория одномерной перколяции и ее приложения // Высокие технологии, фундаментальные и прикладные исследования, образование: сборник трудов Второй международной научно-практической конференции «Исследование, разработка и применение высоких технологий в промышленности», 7–9 февраля 2006 г.; под ред. А. П. Кудинова, Г. Г. Матвиенко, В. Ф. Самохина. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2006. – Т. 5. – 388 с. – С. 312–313.
6. Кулакова М. А. (Буреева М. А.) Порог протекания и критический индекс ν в задаче связей и задаче узлов для модели одномерной перколяции // Физика твердого тела: сборник материалов X Российской научной сту-

денческой конференции, 4–6 мая 2006 г., Томск. – Томск: Томский государственный университет, 2006. – 274 с. – С. 73–76.

7. Кулакова М. А. (Буреева М. А.), Удодов В. Н. Дефектные структуры в кобальтовых сплавах // IX Международная конференция в электронном формате «Градиентные структурно-фазовые состояния в сталях и сплавах», 24 мая 2006 г. – Новокузнецк, 2006. – С. 56–59.
8. Кулакова М. А. (Буреева М. А.), Удодов В. Н. Критические индексы α и ν в задаче связей для модели одномерной перколяции // Фундаментальные проблемы современного материаловедения: сборник трудов конференции, июнь 2006. – Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2006. – Т. 3. – № 2. – 124 с. – С. 72–74.
9. Кулакова М. А. (Буреева М. А.), Удодов В. Н. Сравнение свободной энергии и индекса α в задаче связей и задаче узлов для систем конечного размера // Моделирование неравновесных систем: материалы IX Всероссийского семинара, 13–15 октября 2006 г.; под ред. В. В. Слабко. – Красноярск: ИВМ СО РАН, 2006. – 205 с. – С. 109–110.
10. Буреева М. А., Удодов В. Н. Условия устойчивости для модели одномерной перколяции (доклад): материалы Международной научно-технической школы-конференции «Молодые ученые – науке, технол. и проф. образ. в электронике», 5–9 декабря 2006 г. – М.: МИРЭА. – Ч. 2. – С. 107–109.
11. Буреева М. А., Удодов В. Н. Задача связей и задача узлов для модели одномерной перколяции в системе конечного размера // Вестник Хакасского государственного университета им. Н. Ф. Катанова. Серия 9: Математика. Физика. Вып. 3 / отв. ред. В. Н. Удодов – Абакан: Издательство Хакасского государственного университета им. Н. Ф. Катанова, 2006. – 60 с. – С. 52–54.
12. Буреева М. А., Удодов В. Н. Влияние внешнего поля на свободную энергию и индекс альфа в задаче узлов теории одномерного протекания // V Всесибирский конгресс женщин-математиков (в день рождения Софьи Васильевны Ковалевской): материалы конференции, 15–18 января 2008 г.; под ред. О. Ф. Александровой. – Красноярск: РИО СФУ, 2008. – 462 с. – С. 61–66.
13. Буреева М. А., Удодов В. Н. Одномерная теория перколяции: задача связей и задача узлов // Хакасск. гос. ун-т им. Н. Ф. Катанова. – Абакан, 2008. – 11 с. – Библиогр. 8 назв. – Рус. – Деп. в ВИНИТИ 31.10.08, № 852-В2008.

14. Буреева М. А., Волкова Т. В. Зависимость порога протекания от длины цепочки и от радиуса протекания для модели одномерной перколяции // Физика и химия высокоэнергетических систем: сб. материалов IV Всероссийской конференции молодых ученых, 22–25 апреля 2008 г. – Томск: ТМЛ-Пресс, 2008. – 576 с. – С. 182–184.
15. Буреева М. А., Удодов В. Н. Задача связей для модели одномерной перколяции с переменным радиусом протекания // Актуальные вопросы современной науки: сборник научных трудов (Вып. 6) В 3-х кн. Кн. 1. / под общ. ред. С. С. Чернова. – Новосибирск: ЦРНС – Изд-во «Сибпринт», 2009. – 212 с. – С. 61–68.
16. Bureeva Mariya, Udodov Vladimir. Solution of the One-Dimensional Bond Problem in a Percolation Theory. arXiv: 1101.4449v1 [cond-mat.dis-nn], 2011.
17. Буреева М. А., Удодов В. Н. Условие устойчивости в задаче связей и задаче узлов для модели одномерной перколяции // Материалы Международной научно-технической школы-конференции «Молодые ученые – науке, технологиям и профессиональному образованию», 2008; под. ред. чл.-корр. РАН А. С. Сигова. – М.: Энергоатомиздат, 2008. – Ч. 1. – С. 79–82.
18. Буреева М. А., Удодов В. Н. Критические индексы α и ν для одномерной задачи связей с переменным радиусом протекания // VI Всесибирский конгресс женщин-математиков (в день рождения Софьи Васильевны Ковалевской): материалы Всероссийской конференции, 15–17 января 2010 г.; под ред. Н. Ф. Ноженковой. – Красноярск: РИЦ СибГТУ, 2010. – 455 с. – С. 35–39.
19. Буреева М. А., Удодов В. Н. Применение теории графов к решению задачи связей одномерной теории перколяции // Моделирование неравновесных систем: материалы XIII Всероссийского семинара, 15–18 октября 2010 г.; под ред. В. В. Слабко. – Красноярск: Сибирский федеральный университет, 2010. – 258 с. – С. 17–22.
20. Udodov Vladimir, Bureeva Mariya. The bond problem with an arbitrary percolation radius is solved! // Bulletin of the American Physical Society. APS March Meeting, 2011. – Volume 56. – Number 2.

Подписано в печать с готового оригинал-макета 5.04.2011. Формат 60х84 1/16.
Гарнитура Times New Roman.
Печать – ризограф. Бумага офсетная.
Физ. печ. л. 1,25. Усл. печ. л. 1,16. Уч.-изд. л. 0,92. Тираж 100 экз. Заказ № 60.

Отпечатано в типографии ГОУ ВПО «Хакасский государственный университет
им. Н. Ф. Катанова»
655017, г. Абакан, пр. Ленина, 90а, тел. 22-51-13; e-mail: izdat@khsu.ru