УДК 517.987

НОВЫЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ВЕРХНЕЙ ОЦЕНКИ ПОРОГА ПЕРКОЛЯЦИИ В ЗАДАЧЕ УЗЛОВ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ [2)]

Е.С. Антонова, Ю.П. Вирченко [3)]

Белгородский государственный университет,
ул. Победы 85, Белгород, 308015, Россия, e-mail: virch@bsu.edu.ru

Аннотация. Предложен новый подход при нахождении верхних оценок порога перколяции в задаче узлов. На основе этого похода доказана более точная оценка порога перколяции случайного множества, порождаемого однородным бернуллиевским случайным полем на квадратной решётке $\mathbb{Z}^2$.

Ключевые слова: квадратная решетка, случайное бернуллиевское поле, перколяция, кластер, внешняя граница.

1. Введение. В настоящем сообщении предлагается новый метод получения верхних оценок порога перколяции c_* случайных множеств порождаемых однородным бернуллиевским случайным полем на бесконечном периодическом графе [1]. Этот метод демонстрируется вычислением верхней оценки для квадратной решетки. Она несколько точнее, чем известные к настоящему времени [1-5]. Как и в указанных работах, метод основан на оценке того отрезка в $[0,1]$ изменения вероятности заполнения c каждого из узлов решетки, в котором сходится сумма последовательности вероятностей случайных событий W_n, $n \in \mathbb{N}$. Каждое из этих событий W_n состоит в появлении в случайной реализации *неспрямляемого* (определение неспрямляемости см. в [6]), оптимально выбранного контура γ_n, $n \in \mathbb{N}$ на так называемой сопряженной решетке из незаполненных узлов, причем длина контуров $|\gamma_n|$ стремится к бесконечности при неограниченном возрастании n и каждый из них окружает фиксированную, наперед выбранную вершину решетки. Сходимость указанного ряда влечет, на основании леммы Бореля-Кантелли, равенство нулю вероятности события $W = \bigcup_{n\in\mathbb{N}} W_n$ появления в реализации хотя бы одного из контуров последовательности $\langle \gamma_n; n \in \mathbb{N}\rangle$, что означает наличие на случайной реализации такой вершины z на решетке, в которой начинается бесконечный путь, состоящий из заполненных вершин. Принципиальное отличие от используемых ранее приемов оценивания последовательности вероятностей событий W_n, $n \in \mathbb{N}$ состоит в учете структуры случайной реализации в вершинах, непосредственно примыкающих, в смысле связности на квадратной решетке, к вершинам каждого из контуров γ_n во внутренней по отношению к этому контуру области $\mathrm{Int}[\gamma]$ на решетке. Сопутствующим

---

[2]Работа выполнена в рамках ФЦП ГК № 02.740.11.0545

[3]Антонова Е.С., аспирант Белгородского государственного университета

Вирченко Ю.П., док. физ.-мат. наук, зав. кафедры теоретической и математической физики Белгородского государственного университета методическим новшеством при получении оценки порога перколяции является использование более точной оценки числа $n(s)$ всех спрямляемых контуров на квадратной решетке, охватывающих фиксированную вершину и имеющих заданную длину s.

2. Задача теории перколяции на квадратной решетке. Квадратной решеткой называется пара $\langle \mathbb{Z}^2, \Phi \rangle$, где некоторое семейство Φ двухэлементных подмножество из $\mathbb{Z}^2$ определяет отношение смежности на ней. Для квадратной решетки $\Phi = \{\{x,y\} \in \mathbb{Z}^2 : x\varphi y\}$, где $x\varphi y$ в тех и только тех случаях когда $y = x \pm e_1$, либо $y = x \pm e_2, e_1 = \langle 1,0 \rangle, e_2 = \langle 0,1 \rangle$. Далее, если это не оговаривается дополнительно, под символом $\mathbb{Z}^2$ всегда понимается квадратная решетка. Пусть $\{\tilde{c}(x); x \in \mathbb{Z}^2\}$ – однородное бернуллиевское случайное поле (далее, «тильда» указывает на случайность используемых объектов). Такое поле полностью определяется значением вероятности заполнения узла

$$c \;=\; \Pr\{\tilde{c}(x) = 1\}\,.$$

Поле $\{\tilde{c}(x); x \in \mathbb{Z}^2\}$ индуцирует случайное множество с реализациями $\{\tilde{M} : \tilde{M} \subset \mathbb{Z}^2\}$, где $\tilde{M} = \{x : \tilde{c}(x) = 1\}$, которые мы будем называть далее *конфигурациями заполненных вершин* или, просто, *конфигурациями*. Ясно, что распределение вероятностей для возможных реализаций $\tilde{M}$ полностью определяется набором вероятностей

$$\Pr\{\tilde{M} : A \subset \tilde{M}\} \;=\; c^{|A|}\,, \qquad A \subset \mathbb{Z}^2\,,$$

где здесь и далее $|\cdot| = \mathrm{Card}\{\cdot\}$.

Отношение смежности φ индуцирует, естественным образом, отношение связности для вершин, входящих в конфигурацию $\tilde{M}$, а именно, две вершины x и y из $\tilde{M}$ связаны, если существует путь – последовательность $\langle x_i; i = 0,1,2,...,n \rangle$, $x_i \in \tilde{M}$, $x_0 = x, x_n = y$ и $x_i\varphi x_{i+1}$, $i = 0,1,2,...,n-1$. Каждая конфигурация $\tilde{M}$ однозначно разлагается на непересекающиеся классы эквивалентности $\tilde{W}_j$, $\tilde{M} = \bigcup\limits_{j\in\mathbb{N}} \tilde{W}_j$, порождаемых отношением связности вершин. Эти классы называются в теории перколяции *кластерами*. Семейство кластеров, связанное с фиксированной конфигурацией $\tilde{M}$, будем обозначать $\mathcal{W}[\tilde{M}] = \{\tilde{W}_j; j \in \mathbb{N}\}$. Если $x \in \tilde{W}_j$ для некоторого $j \in \mathbb{N}$ в конфигурации $\tilde{M}$, то этот кластер $\tilde{W}_j$ будем обозначать $\tilde{W}(x)$.

Пусть

$$Q(c) \;=\; \Pr\{\exists (z \in \mathbb{Z}^2 : |W(z)| = \infty)\}\,.$$

Если $Q(c) > 0$, то говорят что такое поле $\{\tilde{c}(x); x \in \mathbb{Z}^2\}$ обладает перколяцией. В связи с этим вводится характеристика

$$c_* \;=\; \inf\{c : Q(c) \;=\; 0\}\,,$$

которая называется *порогом перколяции*. В рассматриваемом нами случае однородного бернуллиевского поля вероятность $Q(c)$ равна либо 0, либо 1.

3. Неспрямляемые контуры на сопряженной решетке. Введем на $\mathbb{Z}^2$, следуя [1], новое понятие смежности $\bar{\varphi}$, т.е. наряду с графом $\mathbb{Z}^2$ будем рассматривать граф $\overline{\mathbb{Z}}^2$

с тем же множеством вершин $\mathbb{Z}^2$, но с отношением смежности $\bar{\varphi}$. При этом Вершины x и y на $\mathbb{Z}^2$ назовём $\bar{\varphi}$-смежными, если $x\varphi y$, либо $y = x + e_1 \pm e_2$, или $y = x - e_1 \pm e_2$.

Путь $\gamma = \langle x = x_0, x_1, x_2, ...\rangle$ на $\bar{\mathbb{Z}}^2$ конечный или бесконечный называется неспрямляемым, если $x_i \neq x_j$, $i \neq j$ и $x_i\bar{\varphi}x_{i+1}$, $i, j = 0, 1, 2, ...$ и каждая его вершина имеет в γ только две $\bar{\varphi}$-смежные вершины. Неспрямляемым циклом γ на $\bar{\mathbb{Z}}^2$ называется неспрямляемый путь $\langle x_0, x_1, ..., x_n\rangle$, у которого $x_0 = x_n$, $n = |\gamma|$. На каждом неспрямляемом цикле введем определенную ориентацию, например, против часовой стрелки, которая будет использоваться в дальнейшем. Неспрямляемые циклы мы называем далее просто *циклами*. Справедлива (см. [6])

Теорема 1. *Пусть x – фиксированная вершина на $\mathbb{Z}^2$. Любой цикл на $\bar{\mathbb{Z}}^2$, окружающий вершину x, разбивает $\mathbb{Z}^2 \setminus \gamma$ на две части:*

$$\mathrm{Int}[\gamma] \equiv \{u \notin \gamma) : \forall (\alpha(u); |\alpha(u)| = \infty : \alpha(u) \cap \gamma \neq \varnothing)\}$$

и $\mathbb{Z}^2 \setminus (\mathrm{Int}[\gamma] \cup \gamma)$ так, что $x \in \mathrm{Int}[\gamma]$. При этом из любой вершины x цикла γ существует бесконечный неспрямляемый путь, который не пересекается с $\mathrm{Int}[\gamma]$ и не содержит других отличных от x вершин из γ.

Следствием неспрямляемости цикла γ является следующее свойство ее вершин.

Теорема 2. *Пусть u, v, w – тройка $\bar{\varphi}$-смежных вершин, следующих друг за другом на цикле γ согласно введенной ориентации. Тогда, при $u\bar{\varphi}v$, вершина w обязательно принадлежит одному из следующих наборов:*

a) *трёхэлементному множеству $\{2v - u,\ v \pm e\}$, где e – единичный вектор, ортогональный вектору $(v - u)$, если $u\varphi v$;*

b) *пятиэлементным множествам*

$$\{2v - u,\ v + \varepsilon e_1,\ v + \varepsilon e_2,\ v \pm e'/2\}\,,$$

если $v = u + \varepsilon(e_1 + e_2)$ и

$$\{2v - u,\ v + \varepsilon e_1,\ v - \varepsilon e_2,\ v \pm e'/2\}\,,$$

если $v = u + \varepsilon(e_1 - e_2)$, где e' – вектор, ортогональный $(v - u)$, $|e'| = \sqrt{2}$ и $\varepsilon = \pm 1$.

4. Достаточное условие перколяции на $\mathbb{Z}^2$. Введём в рассмотрение семейство $\mathcal{B}$ всех $\bar{\varphi}$-циклов γ, окружающих вершину 0 и таких, что из каждой вершины x любого цикла γ существует бесконечный неспрямляемый путь, который не пересекается с $\mathrm{Int}[\gamma]$ и не содержит других отличных от x вершин из γ. Проведем из вершины 0 путь $\alpha(0) = \langle je_1;\ j \in \mathbb{N}_+\rangle$ бесконечной длины. Тогда, согласно Теореме 2, каждый цикл $\gamma \in \mathcal{B}$ обязательно пересечет этот путь в некоторой вершине. Среди множества всех таких вершин пересечения выберем ближайшую к вершине 0. Пусть таковой является вершина le_1, $l \in \mathbb{N}$. Все циклы из $\mathcal{B}$ распадаются на непересекающиеся классы $\mathcal{C}_l$, где к одному классу отнесем циклы с одной и той же вершиной le_1.

Цикл $\gamma \in \mathcal{C}_l$, $l \in \mathbb{N}$ назовем оптимально выбранным на конфигурации $\tilde{M}$, если на этой конфигурации не существует никакого другого цикла γ_- такого, что $\mathrm{Int}[\gamma_-] \subset \mathrm{Int}[\gamma]$, $\complement\tilde{M} \supset \mathrm{Int}[\gamma] \setminus \mathrm{Int}[\gamma_-] \neq \varnothing$.

Для каждого $\bar{\varphi}$-цикла $\gamma \in \mathcal{C}_l$, $l \in \mathbb{N}$ введем событие

$$C_l = \{\tilde{M} : \gamma \subset \complement\tilde{M}, \gamma - \text{оптимально выбран}\}. \qquad (2)$$

Тогда вероятность события $B\{\exists(\gamma \in \mathcal{B} : \gamma \subset \mathcal{B}, \gamma - \text{оптимально выбран})\}$ равна

$$\Pr\{B\} = \sum_{l=0}^{\infty} \Pr\{C_l\}. \qquad (3)$$

Если сумма в правой части конечна, то, согласно лемме Бореля-Кантелли, вероятность одновременной реализации бесконечной совокупности событий из семейства $\{C_l; l \in \mathbb{N}\}$ равна нулю. Тогда с вероятностью 1 в каждой случайной реализации существует некоторый максимальный цикл $\gamma \in \mathcal{B}$ такой, что за его пределами найдётся вершина z и вместе с ней бесконечный путь $\alpha(z)$ без самопересечений, начинающийся в этой вершине. Это означает, что для бернуллиевского поля $\{\tilde{c}(x); x \in \mathbb{Z}^2\}$ событие $\{\tilde{M} : \exists\left(\tilde{W} \in \mathcal{W}[\tilde{M}] : |\tilde{W}| = \infty\right)\}$ имеет вероятность 1.

Таким образом, нашей задачей является нахождение достаточно удачных оценок для вероятностей $\Pr\{C_l\}$ таких, которые бы обеспечили сходимость ряда (3).

5. Оценка порога перколяции. Докажем основное утверждение работы.

Для фиксированного цикла γ введем связанное с ним однозначным образом множество

$$\gamma' = \{x \in \mathrm{Int}[\gamma] : \exists(y \in \gamma : x\varphi y)\} = \bigcup_{y\in\gamma}\{x \in \mathrm{Int}[\gamma] : y\varphi x\}.$$

Оно является связанным множеством относительно отношения смежности $\bar{\varphi}$. Его отличительным свойством является то, что любой путь с начальной вершиной в $\mathrm{Int}[\gamma]$ имеет с ним непустое пересечение. Кроме того, $\gamma' \cap \tilde{M} \neq \varnothing$ (можно показать, что $|\gamma'| > |\gamma|/3$).

Лемма 1. *Для фиксированного цикла $\gamma \in \mathcal{B}$ справедливо неравенство $|\gamma'| \geqslant |\gamma|/2-1$.*

□ Доказательство ведется индукцией по числу вершин в $\mathrm{Int}[\gamma]$. В том случае, когда $\mathrm{Int}[\gamma] = \{0\}$, то есть при $|\mathrm{Int}[\gamma]| = 1$, имеется 4 вершины смежные с вершиной 0, которые составляют цикл γ, а $\{0\} = \gamma'$. Тогда неравенство очевидным образом выполняется. Пусть неравенство имеет место для любого цикла $\gamma \in \mathcal{B}$, если $|\mathrm{Int}[\gamma]| = m$. Рассмотрим произвольный цикл $\gamma \in \mathcal{B}$, для которого $|\mathrm{Int}[\gamma]| = m + 1$. Построим для этого цикла множество $\gamma' \subset \mathrm{Int}[\gamma]$.

Положим, что в γ' имеется вершина x, которая имеет только одну смежную с ней вершину в $\mathrm{Int}[\gamma]$. Тогда остальные три смежные с ней вершины обязательно содержатся в γ. В противном случае, найдется вершина, смежная с x, которая находится в $\complement(\mathrm{Int}[\gamma] \cup \gamma)$, и из γ' существует бесконечный неспрямляемый путь с начальной вершиной x, который не пересекается с γ. При удалении вершины x из $\mathrm{Int}[\gamma]$ она становится вершиной нового оптимально выбранного цикла, который окружает $\mathrm{Int}[\gamma] \setminus \{x\}$. Тогда возможны два случая: либо число вершин в γ' уменьшается на 1 и число вершин в

γ уменьшается на две, либо число вершин в γ' не изменяется и не изменяется число вершин в γ. В обоих случаях, так как для вновь полученном внутреннем множестве $\mathrm{Int}[\gamma] \setminus \{x\}$ число вершин равно m, и для него, по предположению индукции, доказываемое неравенство выполняется, то это неравенство выполняется и для исходного множества $\mathrm{Int}[\gamma]$.

Пусть в γ' нет вершины x только с одной смежной вершиной в $\mathrm{Int}[\gamma]$. Тогда в γ' обязательно имеется вершина x, которая имеет только две смежные с ней вершины из $\mathrm{Int}[\gamma]$. Причем, эти две смежные вершины переходят одна в другую поворотом на угол $\pi/2$ вокруг вершины x. Среди всех возможных вершин с такими свойствами выберем, например, ту, которая имеет наибольшую координату по оси вдоль вектора e_1. Тогда возможно два случая. В первом случае, обе смежные с x вершины содержатся в γ', а, во втором, одна из них та, которая имеет меньшую координату по оси вдоль e_1, содержится в $\mathrm{Int}[\gamma]$, но не содержится в γ', а вторая, которая имеет такую же как и у x координату вдоль этой оси, содержится в γ'. При удалении вершины x из $\mathrm{Int}[\gamma]$, в первом случае, $|\gamma|$ и $|\gamma'|$ уменьшаются на 1 и во втором, $|\gamma|$ и $|\gamma'|$ остаются неизменными. В обоих случаях, так как для цикла, полученного удалением вершины x, который является оптимально выбранным для $\mathrm{Int}[\gamma] \setminus \{x\}$, неравенство выполняется, то оно выполняется и для множеств γ и γ'. ■

Теорема 3. *Для однородного бернуллиевского случайного поля* $\{\tilde{c}(x); x \in \mathbb{Z}^2\}$ *на квадратной решётке* $\mathbb{Z}^2$ *справедливо неравенство* $c_* \le c_0$*, где* c_0 *– наибольший на* $[0,1]$ *корень уравнения* $3.951 * c^{1/2}(1-c) = 1$ *(*$c_0 \approx 0.6983$ *с избытком).*

□ Зафиксируем цикл $\gamma \in \mathcal{C}_l$, $l \in \mathbb{N}$. Так как все узлы цикла незаполнены при реализации случайного события C_l и статистически независимы друг от друга и от узлов, входящих в γ', то справедлива элементарная оценка

$$P(\gamma) \le (1 - c)^{|\gamma|} c^a (1-c)^b \,,$$

где a – число заполненных узлов, и, соответственно, b – число незаполненных узлов во множестве γ'. При этом $a+b = |\gamma'|$. Вследствие Леммы 1, $a+b \geqslant |\gamma|/2-1$. Так как $c < 1$ и $(1-c) < 1$, то функция $c^a(1-c)^b$ от переменных a и b может достигать максимума в области $\{\langle a,b\rangle : a \geqslant 0, b > 0, a+b \geqslant |\gamma|/2-1\}$ именно на ее границе – на отрезке, где $a+b = |\gamma|/2-1$. Тогда

$$(1-c)^{-|\gamma|} P(\gamma) \leqslant c^a (1-c)^{|\gamma|/2-1-a} = (1-c)^{|\gamma|/2-1} \left(\frac{c}{1-c}\right)^a .$$

Будем теперь считать, согласно утверждению теоремы, что $c > 1/2$. Тогда функция от a, стоящая в правой части, достигает максимума в наибольшем возможном значении $a = |\gamma|/2-1$ (заметим, что при этом выполняется упомянутое выше условие $a > |\gamma|/3$). Отсюда следует, что

$$P(\gamma) < c^{|\gamma|/2-1}(1-c)^{|\gamma|} .$$

Отсюда и из (3) следует, что

$$\Pr\{C_l\} = \sum_{\gamma \in \mathcal{C}_l} P(\gamma) \,,$$

$$\Pr\{B\} = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{\gamma\in\mathfrak{C}_l} P(\gamma) < \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{k=4}^{\infty} r_k(l)c^{k/2-1}(1-c)^k\,,$$

где $r_k(l)$ – число циклов в классе $\mathfrak{C}_l$, имеющих длину k. При этом, очевидно, что $r_k(l) = 0$ при $k > l+1$. Для этих значений k воспользуемся известной оценкой $r_k(l) < 4(k-1)s_{k-1}$ (см. [2 - 4]), где s_k – число циклов длины k в классе $\mathfrak{C}_l$. Тогда достаточно установить, что в условиях теоремы сходится ряд

$$\sum_{k=4}^{\infty}(k-1)s_{k-1}c^{k/2-1}(1-c)^k\,.$$

Этот ряд сходится в том случае, если

$$c^{1/2}(1-c)\lambda < 1\,, \tag{4}$$

где $\lambda = \lim_{k\to\infty} s_k^{1/k}$. Это неравенство будет, наверняка, иметь место, если выполняется $c^{1/2}(1-c)\lambda_+ < 1$, где $\lambda_+ > \lambda$.

Так как $c > 1/2$, то, для выполнения неравенства с фиксированным λ_+, необходимо и достаточно, чтобы $c > c_0$, где c_0 – больший из двух имеющихся на интервале $[0,1]$ корней уравнения $c^{3/2} - c^{1/2} + \lambda_+^{-1} = 0$. Это связано с тем, что минимум полинома $t^3 - t + \lambda_+^{-1} = 0$ достигается в точке $t = \sqrt{3}/3$, и поэтому интересующий нас корень находится на $(1/3,1)$.

Воспользуемся следующей оценкой $\lambda_+ = 3.951$ для числа λ, полученной в [4,5]. Тогда, используя нужное решение уравнения $t^3 - t + \lambda_+^{-1} = 0$, получаем $c_0 = 0.6983$. ■

Литература

1. Кестен Х. Теория просачивания для математиков / Москва: Мир, 1986. – 390 с.
2. Virchenko Yu.P., Tolmacheva Yu.A. Revision of upper estimate of percolation threshold on square lattice // ArXiv math-phys/0204033, 2002.
3. Virchenko Yu.P., Tolmacheva Yu.A. Revision of the upper estimate of percolation threshold in square lattice // Matematicheskaya fizika, analiz, geometriya. – 2003. – 10;1. – P.29-39.
4. Virchenko Yu.P., Tolmacheva Yu.A. Method of Sequential Approximative Estimates in Discrete Percolation Theory // Studies in Mathematical Physics Research. ed. Charles V. Benton / New York: Nova Science Publishers, Inc., 2004. – P.155-175.
5. Вирченко Ю.П., Толмачёва Ю.А. Мажорантные оценки порога перколяции бернуллиевского поля на квадратной решётке // Украинский математический журнал. – 2005. – 57;10. – С.1315-1326.
6. Антонова Е.С., Вирченко Ю.П. Конечные кластеры на плоских мозаиках. Часть 3. // Belgorod State University Scientific Bulletin. – 2011. – 23(118);25. – С.112-126.
7. Zuev S.A. Bounds of the percolation threshold for a square lattice // Theory of Probability and its Applications. – 1987. – 32;3. – P.551-553.

8. Зуев С.А. Оценки порога перколяции для квадратной решетки // Теория вероятностей и ее применения. – 1987. – 32;3. – С.606-609.

NEW METHOD OF UPPER ESTIMATE CALCULATION OF PERCOLATION THRESHOLD ON SQUARE LATTICE IN SITE PROBLEM

E.S. Antonova, Yu.P. Virchenko

Abstract. New approach of upper estimate obtaining of percolation threshold in site problem is proposed. In frameworks of the approach it is proved more accurate estimate of percolation threshold when random set is generated by uniform Bernoulli random field on square lattice $\mathbb{Z}^2$.

Key words: square lattice, random Bernoulli field, percolation, cluster, external boundary.