ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА И КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

СКРЫТЫЕ ПАТТЕРНЫ В ПРОЦЕССЕ ОДНОМЕРНОЙ НАПРАВЛЕННОЙ ПЕРКОЛЯЦИИ

П. А. Овчинников ^{а, б, в, 1}, К. С. Солдатов ^{б, в}, В. Ю. Капитан^е, Г. Ю. Шитов ^{в, д}

^{*а*} Институт наукоемких технологий и передовых материалов Дальневосточного федерального университета, Владивосток, Россия

⁶ Институт прикладной математики ДВО РАН, Владивосток, Россия

^в Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

^e National University of Singapore, Singapore

^{*d*} Université de Sherbrooke, Sherbrooke, Québec, Canada

Исследована модель одномерного направленного перколяционного процесса с помощью методов Монте-Карло и размерного скейлинга. Полученные результаты подтверждают более раннюю гипотезу, что в общем случае активные (перколирующие) фазы обладают иерархической структурой, где более сложные паттерны проявляются поверх сосуществующих простых. Обнаружены пять фаз с различными перколяционными паттернами в активной фазе модели. Представлен подробный скейлинговый анализ дипольной фазы, проявляющейся внутри активной фазы направленной перколяции.

A model of one-dimensional directed percolation process has been investigated using Monte Carlo simulations and finite-size scaling methods. The obtained results confirm an earlier hypothesis that active (percolating) phases possess a hierarchical structure, where complex patterns appear on the top of coexisting simple ones. Five phases with different percolation patterns were found in the active phase of the model. This paper presents a detailed scaling analysis of the dipole phase existing within the active phase of directional percolation.

PACS: 44.25.+f; 44.90.+c

введение

Перколяция представляет собой пример фазового перехода, связанного с нелокальным порядком связности исследуемой системы [1]. Временная эволюция многих кинетических моделей (таких как кинетический контактный процесс с параллельным обновлением и вероятностные клеточные автоматы) в (1 + 1) пространственновременной размерности приводит к формированию двумерных направленных перколяционных ландшафтов.

¹E-mail: ovchinnikov.pa@dvfu.ru

В данной работе определены шесть различных скрытых перколяционных фаз, представленных на фазовой диаграмме. Полученные результаты подтверждают ключевую роль двух параметров формирования перколяционного кластера: 1) локального параметра порядка основных узлов в рамках ренормализованного узла; 2) диапазона перколяции, допускаемого между локально упорядоченными (т.е. активными) узлами.

МОДЕЛЬ И СКЕЙЛИНГОВЫЙ АНАЛИЗ

Нами исследован одномерный кинетический процесс контактного распространения (вариант вероятностного клеточного автомата). Состояние системы в дискретные моменты времени $t = 0, 1, \ldots, T$ задается числами $n_{i,t} = 0, 1$ (заполненный/пустой), $i = 1, \ldots, N$, с периодическими граничными условиями в пространственном направлении. При t = 0 задается случайная стартовая конфигурация. Для численного моделирования используется метод Монте-Карло с параллельным обновлением (т. е. конфигурации на всех узлах обновляются одновременно за один временной шаг).

Распространение активных узлов подчиняется вероятностным правилам, которые определяются величинами p и q, представленными в табл. 1. Кинетический процесс можно рассматривать как направленную перколяцию на двумерной пространственновременной решетке (1 + 1). Эта модель была предложена и исследована в [2]. Она может рассматриваться как модификация известной модели направленной связи перколяции [3].

$n_{i-1,t}$	1	1	0	0	0	1	1	0
$n_{i,t}$	1	1	1	1	0	0	0	0
$n_{i+1,t}$	1	0	1	0	1	0	1	0
Вероятность $n_{i,t+1} = 1$	p			q		q(2-q)	0	

Таблица 1. Правила распространения модели

Перколяционный паттерн определяется как протекающий кластер узлов, проходящий через всю систему. Этот кластер состоит из ренормализованных узлов, образованных подмножеством узлов исходной решетки. Следует отметить, что присвоение состояния активности ренормализованным узлам (заполненный/пустой) может выполняться разными способами. Например, в случае плакетов 2×2 можно выбрать конфигурацию квадруполя в качестве активного ренормализованного узла и отбросить все остальные конфигурации как пустые состояния. Либо можно выбрать конфигурацию, где плакет полностью заполнен или заполнен тремя активными узлами, как показано на рис. 1.

Связи между ренормализованными узлами не обязаны совпадать с их аналогами в исходной решетке. Это очевидно в контексте сетей: например, на карте города можно рассмотреть кластер из знакомых друг с другом пар людей. Или в модели, рассматриваемой в этой работе, правила распространения допускают перколяционные связи между ближайшими и следующими соседями узлов.



Рис. 1 (цветной в электронной версии). Схема перколяционных структур, рассматриваемых в работе. Активные (заполненные) узлы показаны желтым цветом; пустые узлы — фиолетовым. а) Перколяция по узлам исходной решетки. б) Перколяция между диполями. Перколяционная структура в фазе D включает диполи ближайших соседей (сплошные красные линии). В фазе D^+ структура включает диполи ближайших и вторых соседей (штриховые светло-голубые линии). в) Перколяция между квадруполями Q и Q^+ . г) Перколяция между плакетами PL, которые либо полностью заполнены, либо имеют один пустой узел



Рис. 2 (цветной в электронной версии). Фазовая диаграмма модели. P — перколирующая фаза без скрытых паттернов; D (D^+) и Q (Q^+) — фазы с дипольными и квадрупольными перколирующими паттернами с nn (nn + nnn) связями соответственно; PL — плакетная фаза; A — поглощающее состояние; красная звездочка — точка на линии q = 0,9, на которой показаны примеры D-паттернов рис. 3

Скрытые паттерны в процессе одномерной направленной перколяции 427



Рис. 3 (цветной в электронной версии). *D*-паттерны: *a*, *s*) данные Монте-Карло (N = 500, T = 500) для двух конфигураций перколирующей фазы при q = 0.9; p = 0.14 (*a*), p = 0.12 (*s*); критическая точка перехода в фазу $D p_c(q) \approx 0.121$; *б*, *c*) связанные дипольные (nn) паттерны, построенные на основе данных, показанных в (*a*, *b*); желтые/бирюзовые точки соответствуют связанным ± 1 диполям, находящимся на дипольной решетке; темно-пурпурный фон соответствует сайтам без диполей или диполям без nn-предков

Были исследованы шесть различных перколяционных фаз, для которых построена фазовая диаграмма (рис. 2). Перколяционные паттерны для каждой фазы представлены на рис. 1.

Критические индексы модели направленной перколяции можно вычислить с помощью метода скейлингового анализа. Для фазового перехода, относящегося к классу направленной перколяции (DP), необходимо рассчитать независимые критические индексы [3]:

$$\rho(\infty) \propto (p - p_c)^{\beta}, \quad \xi_{\perp} \propto |p - p_c|^{-\nu_{\perp}}, \quad \xi_{\parallel} \propto |p - p_c|^{-\nu_{\parallel}}, \tag{1}$$

где ρ — параметр порядка (плотность активных узлов); $(p - p_c)$ — расстояние до критической точки; β — критический индекс параметра порядка; ξ_{\parallel} и ξ_{\perp} — корреляционные длины; ν_{\parallel} и ν_{\perp} — критические индексы, описывающие поведение корреляционных длин ξ вблизи критической точки. $\xi_{\parallel} \sim \xi_{\perp}^z$ связаны через динамический показатель

$$z = \frac{\nu_{\parallel}}{\nu_{\perp}}.$$
 (2)

Для систем конечного размера также есть скейлинговый закон [2]:

$$\rho(t) \sim t^{-\alpha} f\left(\Delta t^{1/\nu_{\parallel}}, \frac{t^{1/z}}{N}\right), \quad \alpha = \frac{\beta}{\nu_{\parallel}},\tag{3}$$

где Δ — расстояние от критической точки, а показатель определяет критический распад $\rho(t)$ при $\Delta = 0$ в пределе $N \to \infty$.

Построив зависимость (3) для набора численных экспериментов в окрестности критической точки, можно определить показатели α , ν_{\parallel} и z. Найдя α и ν_{\parallel} , мы можем вычислить значение β с помощью уравнения (3).

Как независимую проверку положения критических точек, определенных из (3), мы также рассчитываем вероятность $P_{N,T}(p,q)$ того, что связанная кластерная структура возникает в системе размером $N \times T$ [4]. Вероятность $P_{N,T}(p,q)$ представляет собой долю связанных узлов и аналогична кумулянту Биндера для перколяции [3]. Для заданного значения p графики $P_{N,T}(q)$ для различных размеров $N \times T$ пересекаются в критической точке $q = q_c$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Переход от поглощения к активности и переход внутри активной (перколирующей) фазы в фазу D^+ с паттерном дипольной (nn + nnn) перколяции были описаны в работе [2]. Наши расчеты подтверждают эти результаты. Найдены новые фазы с паттерном дипольной (D, nn), квадрупольной (Q, Q^+) с nn (nn + nnn) связями соответственно, а также плакетной (PL) перколяции. Границы фаз показаны на фазовой диаграмме на рис. 2 и установлен DP класс универсальности для всех переходов. Ниже мы приводим репрезентативные результаты численного моделирования и скейлингового анализа на примере перехода в D-фазу.

На рис. 4, *а* параметр порядка ρ показан в зависимости от *t* на двойной логарифмической шкале. На основе сходимости функций для системы различных размеров, представленных на рис. 4, *б*, *в*, были определены показатели ν_{\parallel} и *z*. Положение критической точки также подтверждено графиками доли связанных диполей $P_{N,T}(q)$ для различных размеров $N \times T$, показанными на рис. 4, *г*. Все они пересекаются при $q = q_c$. Граница фазы *D* показана на рис. 2; численные результаты для нескольких критических точек q_c и критических показателей для перехода в эту фазу собраны в табл. 2. Данные подтверждают, что данный переход принадлежит к универсальности направленной перколяции (DP).

Представленные в работе результаты были получены на суперкомпьютерном вычислительном кластере Института прикладной математики ДВО РАН.



Рис. 4. *D*-фаза. *a*) Плотность связанных (nn) диполей $\rho(t)$ для p = 0,1 и серии q около $q_c \approx 0,7662$. Размер системы N = 3000 и $T = 100\,000$. Средняя линия соответствует критическому замедлению $\rho(t) \propto t^{-\alpha}$ с $\alpha \approx 0,1595$. *b*) Сходимость кривых из *a* на одну масштабируемую функцию. Подгонка дает значения q_c и ν_{\parallel} . *b*) Сходимость релаксации параметра порядка $t^{\alpha}\rho(t)$ в критической точке для разных размеров (N = 100; 200; 400) дает критический индекс z. *c*) Доля связанных диполей $P_{N,T}(q)$ для разных размеров $N \times T$, все кривые пересекаются в $q_c \approx 0,768$. Критические значения q_c , полученные из *a*, *б* и *c*, согласуются в пределах $\sim 0,01\%$

 $Tаблица \ 2.$ Критические точки q_c и критические индексы для перехода в фазуDдля нескольких значений p

p	q_c	α	$ u_{ }$	z	$\beta = \alpha \nu_{ }$	$ u_{\perp}= u_{ }/z$
0,0000	0,6444	0,1595	1,72	1,58	0,27(4)	1,08(8)
0,0500	0,6896	0,1595	1,72	1,56	0,27(4)	1,10(2)
0,1000	0,7662	0,1595	1,72	1,56	0,27(4)	1,10(2)
0,2002	0,8500	0,1595	1,72	1,56	0,27(4)	1,10(2)
0,1000	0,9735	0,1595	1,72	1,56	0,27(4)	1,10(2)
0,0736	1,0000	0,1590	1,72	1,57	0,27(3)	1,09(5)

Финансирование. Данное исследование поддержано грантом № 24-22-00075 (https://rscf.ru/project/24-22-00075/) Российского научного фонда.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Stauffer D., Aharony A. Introduction to Percolation Theory. 2nd ed. London: Taylor & Francis, 1992. 181 p.
- 2. *Timonin P. N., Chitov G. Y.* Hidden Percolation Transition in Kinetic Replication Process // J. Phys. A: Math. Theor. 2015. V. 48, No. 13. P. 135003.
- Hinrichsen H. Non-Equilibrium Critical Phenomena and Phase Transitions into Absorbing States // Adv. Phys. 2000. V.49, No.7. P.815–958.
- 4. Binder K. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. 1992.

Получено 31 октября 2024 г.