

Однокластерные модели пористых материалов и топологические фазовые переходы

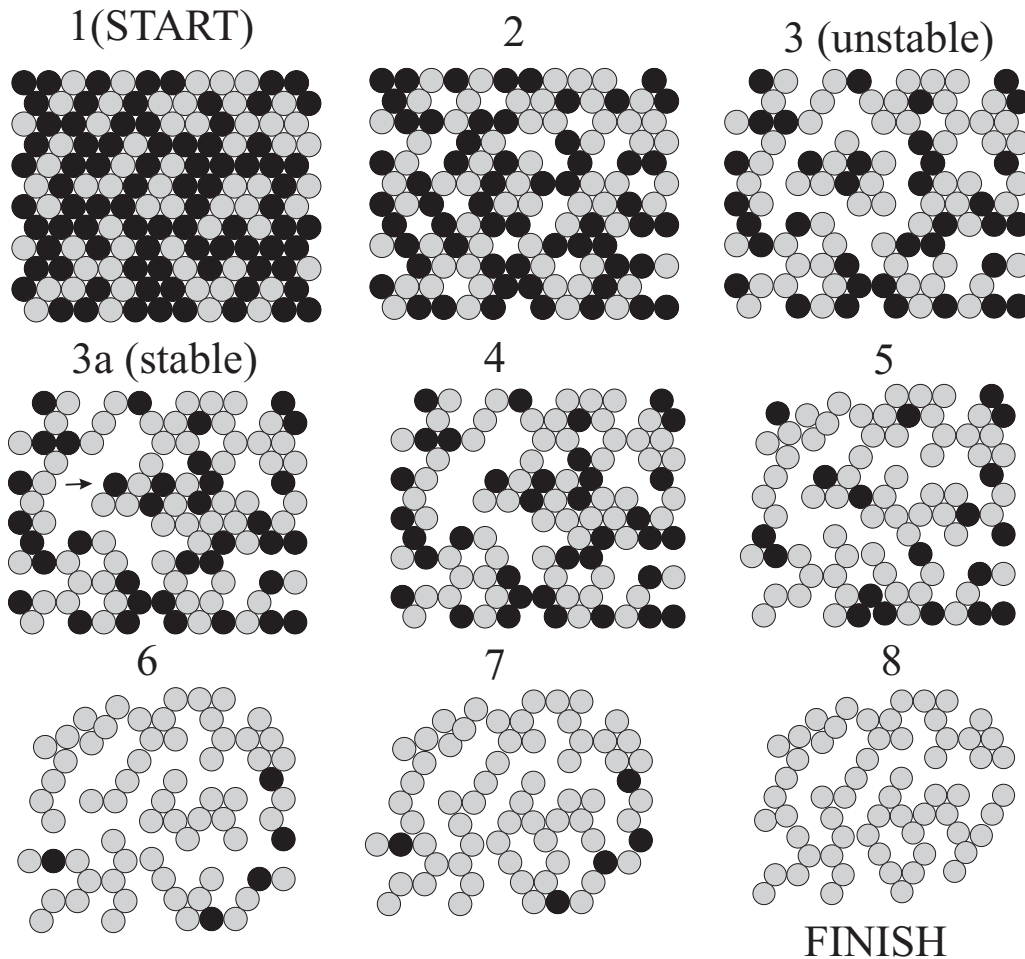
А.С. Иоселевич, Д.С. Любшин

“Burning-and-sticking model of a porous material: suppression of the topological phase transition due to the backbone reinforcement effect”, Письма в ЖЭТФ 89(10), 612-617 (2009)

“Universality and non-universality in behavior of self-repairing random networks”, Письма в ЖЭТФ, 89, вып. 8 (2009).

“Phase transition in a self-repairing random network“, Письма в ЖЭТФ, 79, вып. 5, стр. 286-290 (2004).

Пример: модель “burning-and-sticking”

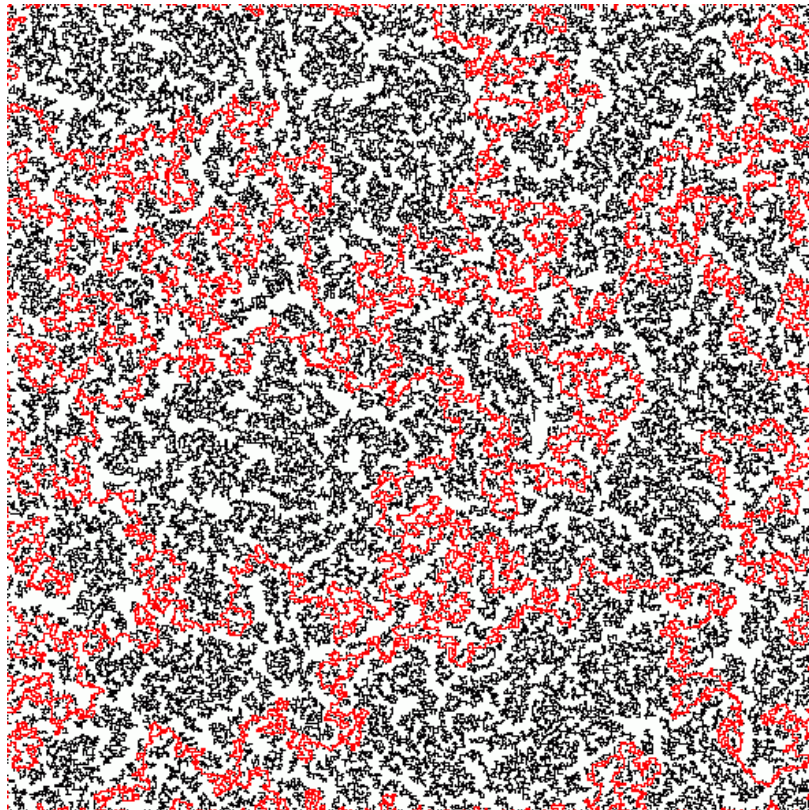


3-3a: перенос «вправо»

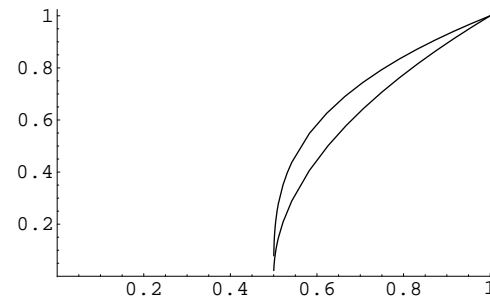
6-7: перенос «вправо-вниз»

Общая однокластерная модель:
зависящее от плотности
распределение на связных
решеточных конфигурациях.

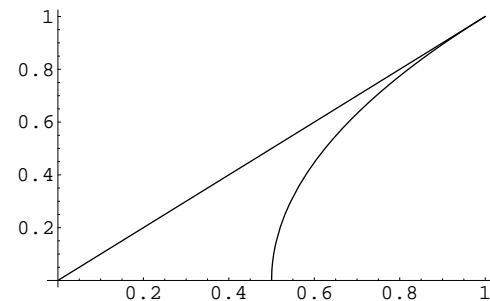
Остов (backbone) и его возможное поведение в однокластерной модели



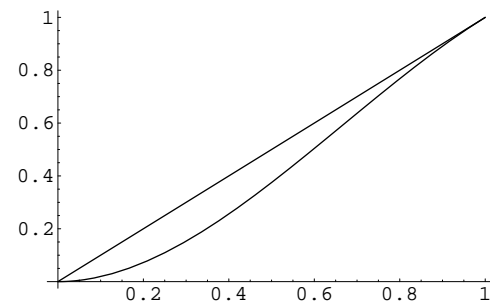
$x=0.4$; $P_B(x)=0.022$



Ordinary
percolation

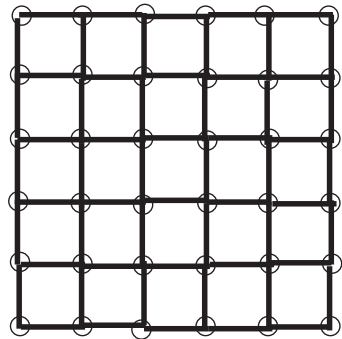


Single-cluster
phase transition

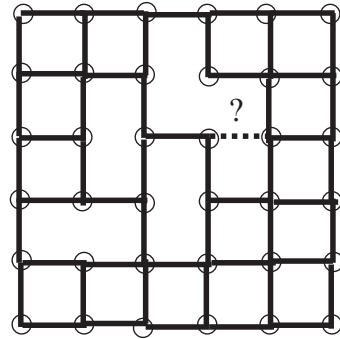


No phase
transition

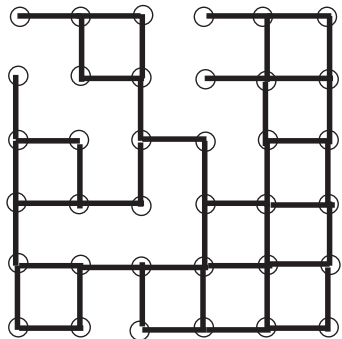
SRBP: self-repairing bond percolation



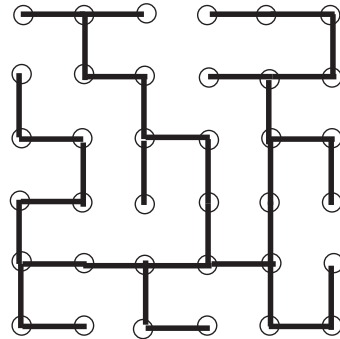
1 (Start=Lattice)



2



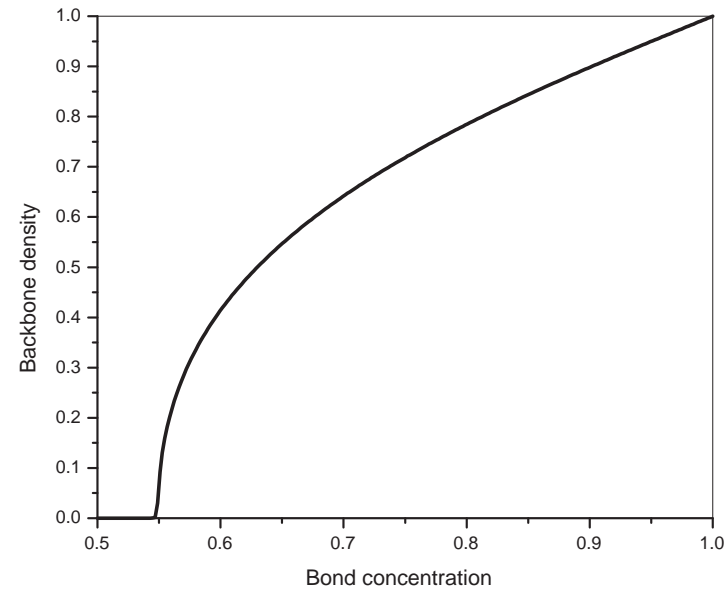
3



4 (Finish=Tree)

Цикл удаления:

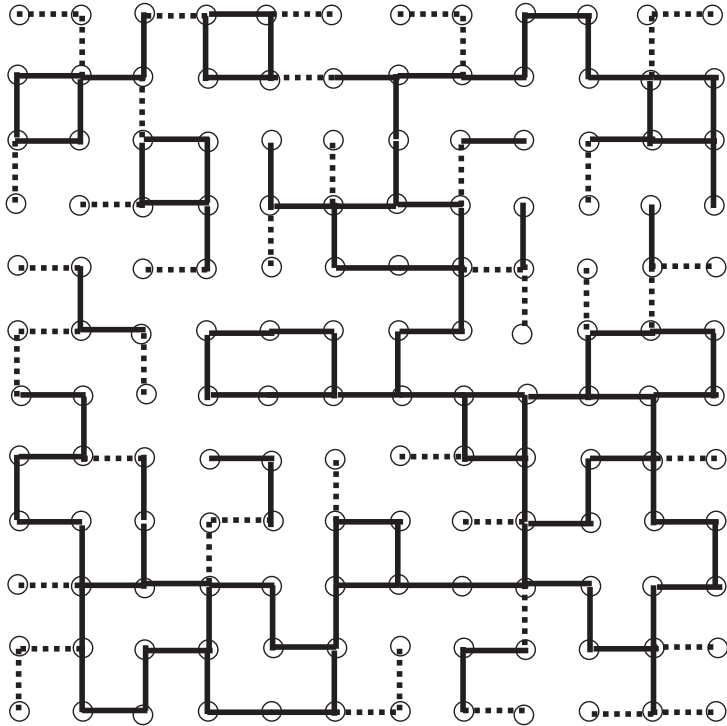
- 1) выбираем случайную связь;
- 2) если она – не мост, то удаляем.



$$p_{\text{final}} = p_{\text{tree}} = 1/2$$

Переход при $p=0.549\dots$

SRBP: точное решение



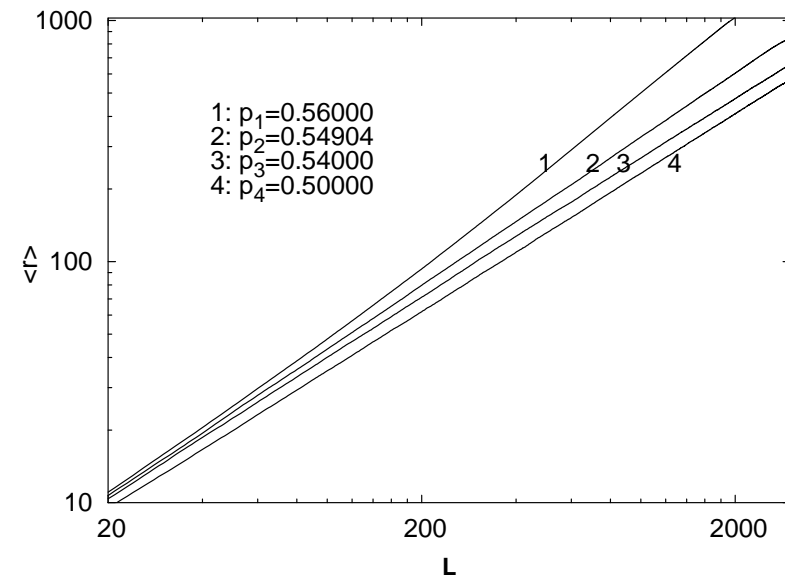
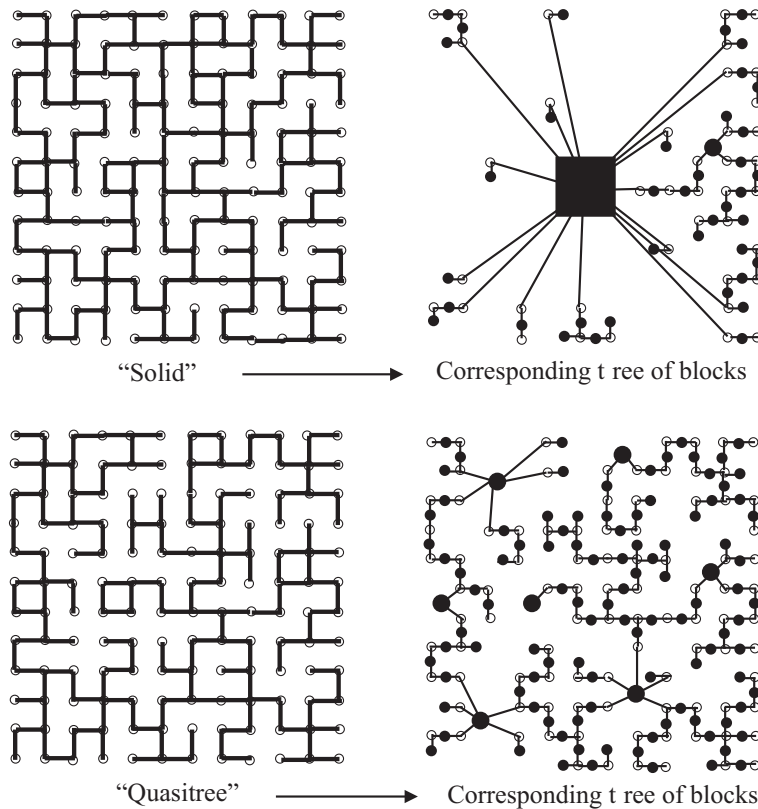
- 1) Можно считать, что каждая связь рассматривается однажды;
- 2) Удаленная и восстановленная (серая) связь не принадлежит остову
- 3) Конфигурация черных связей (а потому и остова) – чисто перколяционная.
- 4) Число серых связей в критической точке равно числу кластеров в критической точке обычной перколяции.

$$p_c = p_c(\text{perc}) + n_c(\text{perc}) = \frac{1}{2} + \frac{3\sqrt{3} - 5}{4} = \frac{3\sqrt{3} - 3}{4},$$

$$P_B \propto (p - p_c)^{\beta_B}, \quad \beta_B = 0.48,$$

$$\nu = \nu(\text{perc}) = \frac{4}{3}.$$

SRBP ниже точки перехода: MST-like phase



$p > p_c: d_{\min} = 1;$
 $p = p_c: d_{\min} = 1.13(1);$
 $p < p_c: d_{\min} = 1.22(1).$

Ансамбль при $p=1/2$: *Minimum Spanning Tree (MST)*
 При $1/2 < p < p_c$ дерево блоков на больших расстояниях
 имеет все свойства MST.

SRSP: определение и свойства

Цикл удаления в SRSP:

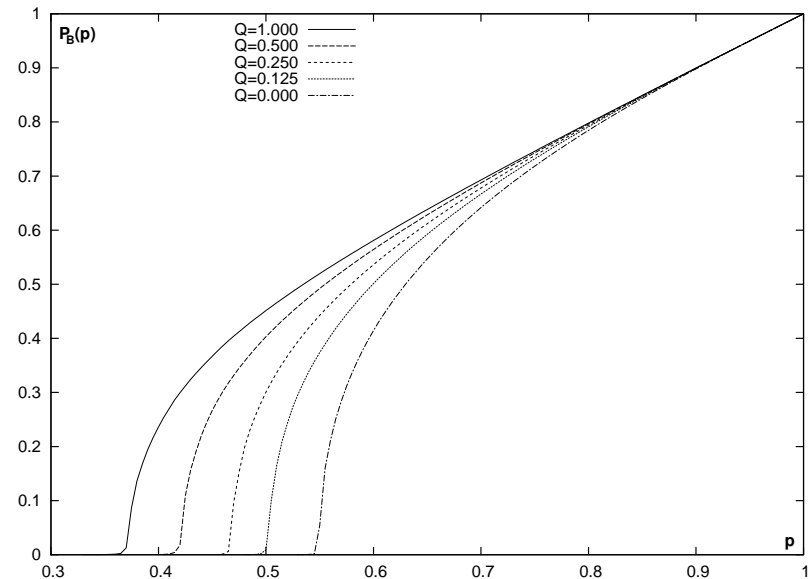
- 1) Выбираем случайный узел;
- 2) Если его удаление вместе со всеми инцидентными связями не нарушает связности остальных узлов – удаляем.



Blue site is favoured (vs. **green**)
Red site is protected.

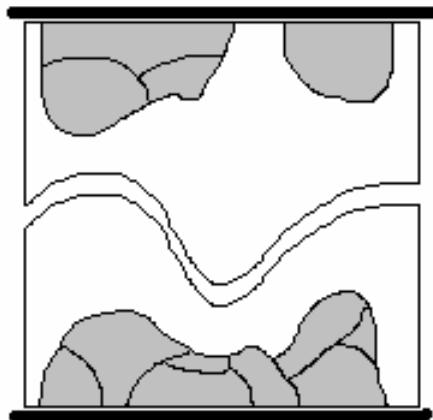
Цикл удаления в гибриде:

- С вероятностью Q делаем шаг SRBP:
С вероятностью $1-Q$ -- шаг SRSP.



В системе имеется переход
с $\beta < 1$ при всех $0 \leq Q \leq 1$.

Вопрос универсальности перехода SRBP-типа: numerical set-up

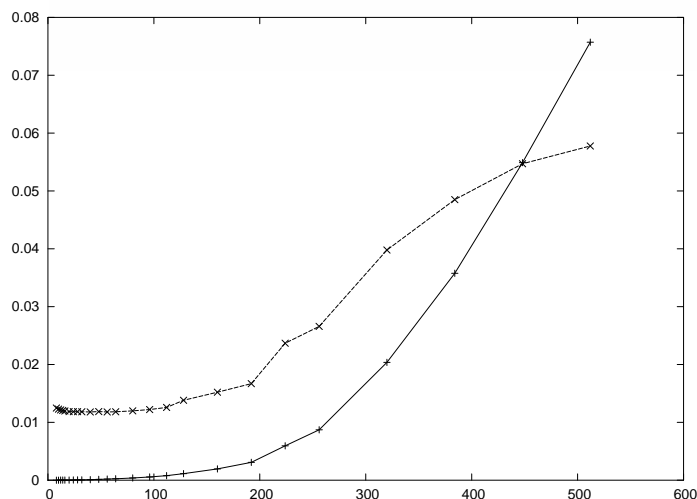


Микроканоничность задачи+неизвестное p_c :
счет плотности остова в плавающей крит. точке.

$$\langle M_B(p_c(X)) \rangle \sim L^{d(B)}, \quad d(B) = d - \beta/\nu:$$

$$\langle \delta p_c(X)^2 \rangle^{1/2} \sim L^{-1/\nu}$$

(ср. Mouzkarel)



Алгоритмическая часть:

Union-find Тарьяна (в т.ч. для SRSP);

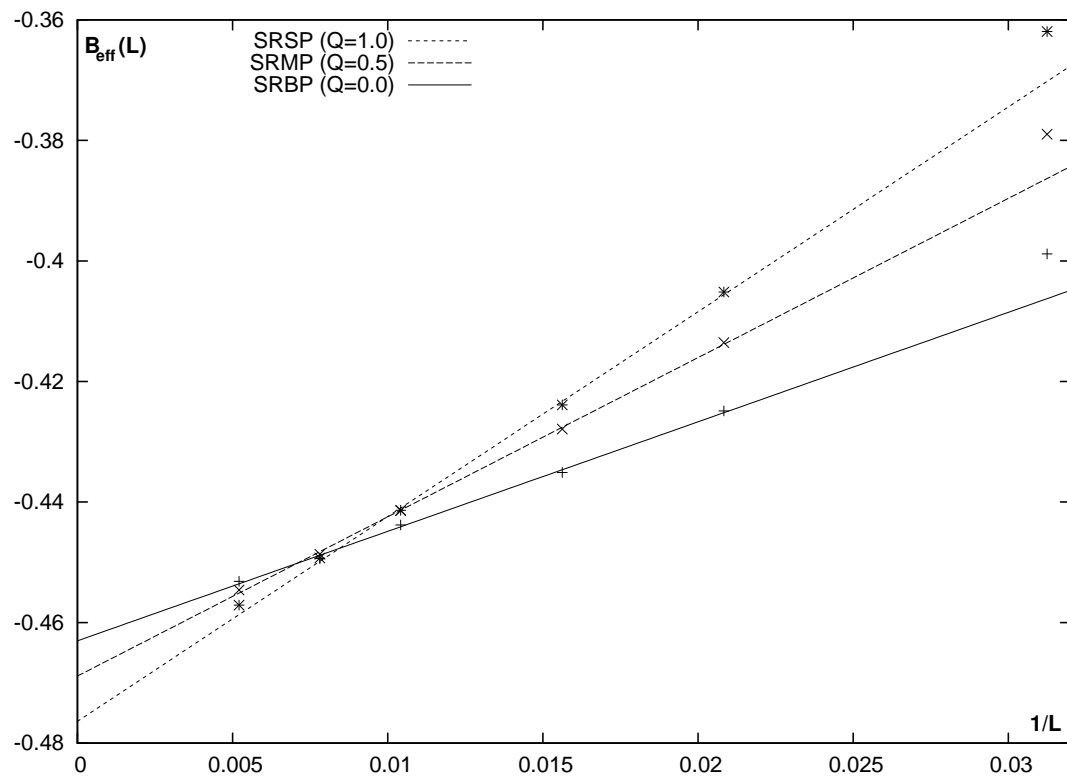
Идентификация остова за $O(M_B)$.

Аппаратные оптимизции:

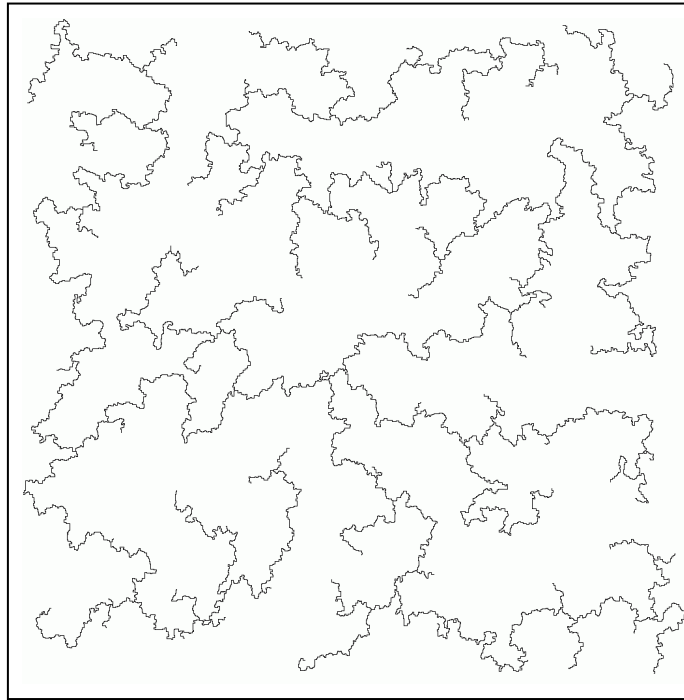
Reuse массивов для невыхода из кэша 1 уровня;
ассемблерные вставки для длинного умножения.

Время обработки узла $O(1)$; дрейф
константы – эффект выхода из кэша)

Неуниверсальность SRBP-SRSP гибридов

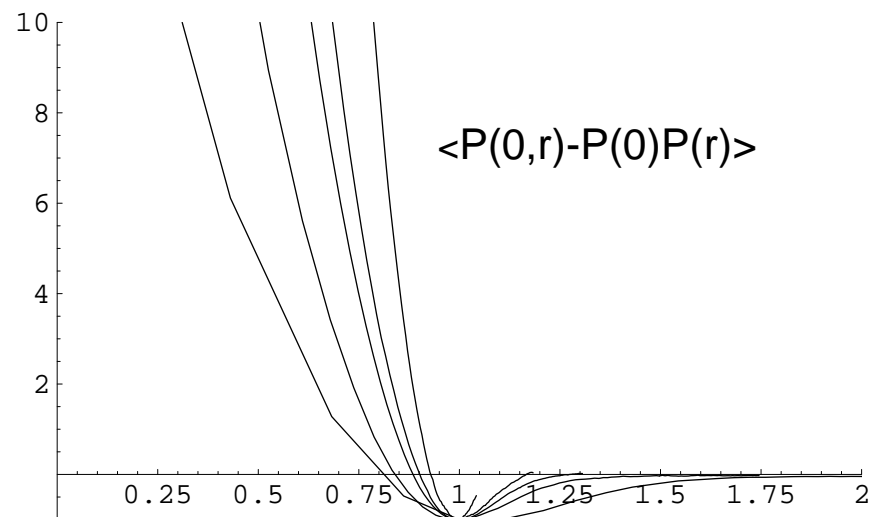
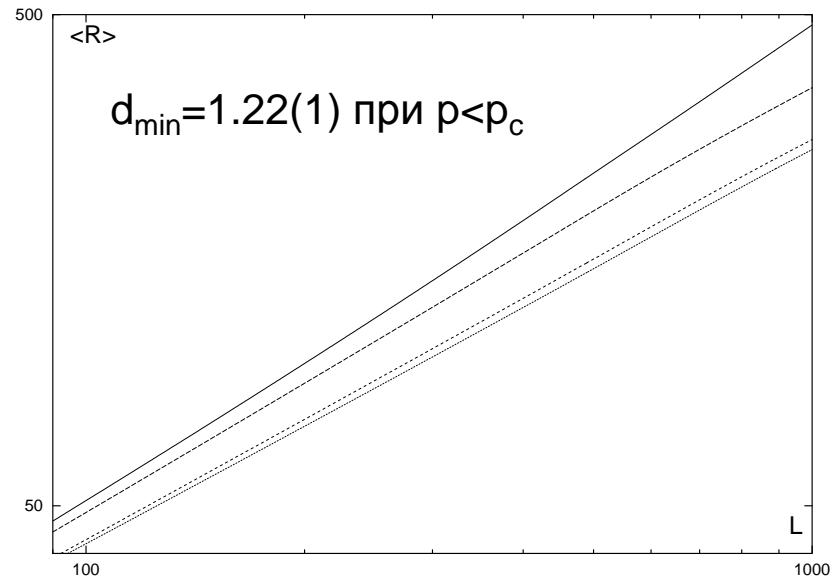


SRSP при малых плотностях

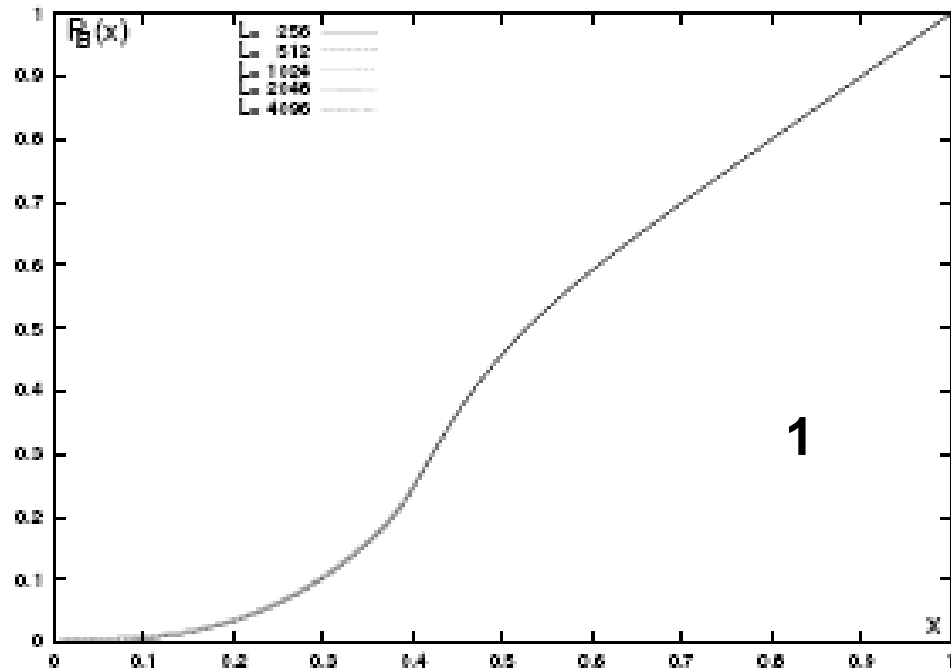


$p=0.025$

При $x \ll 1$ система, по-видимому, не является чистым фракталом (не допускает ренорм. группы): нет коллапса в корреляторе, $d_{\min} > d-1/\nu$.



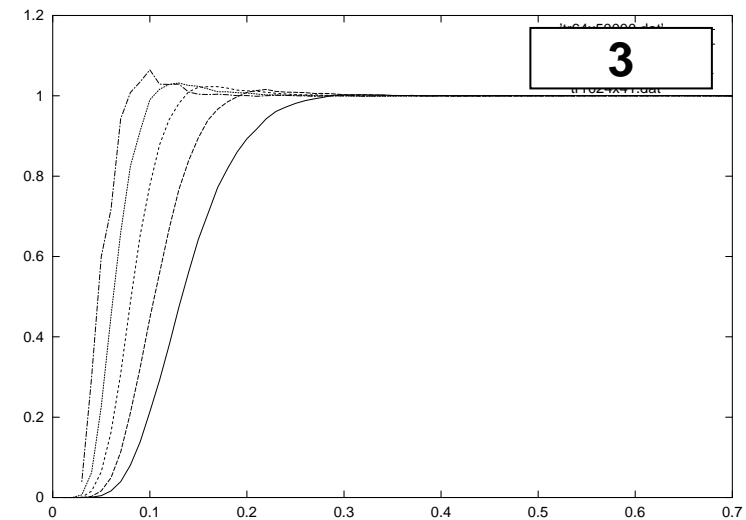
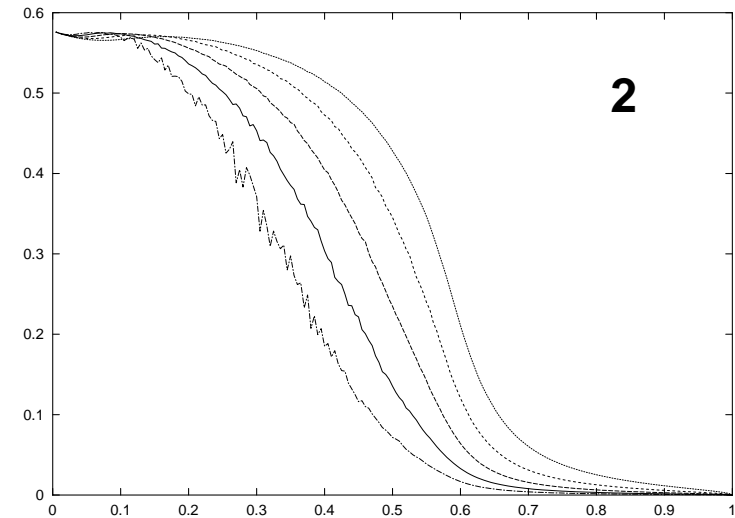
BS: плотность остова



1: $P_B(x) > 0$ при всех $x > 0$

2: Отношение корр. длины (как среднеквадратичного радиуса лакуны) к размеру системы

3: Роль граничных условий; отношение плотности в центральном подквадрате $L/2 \times L/2$ к полной

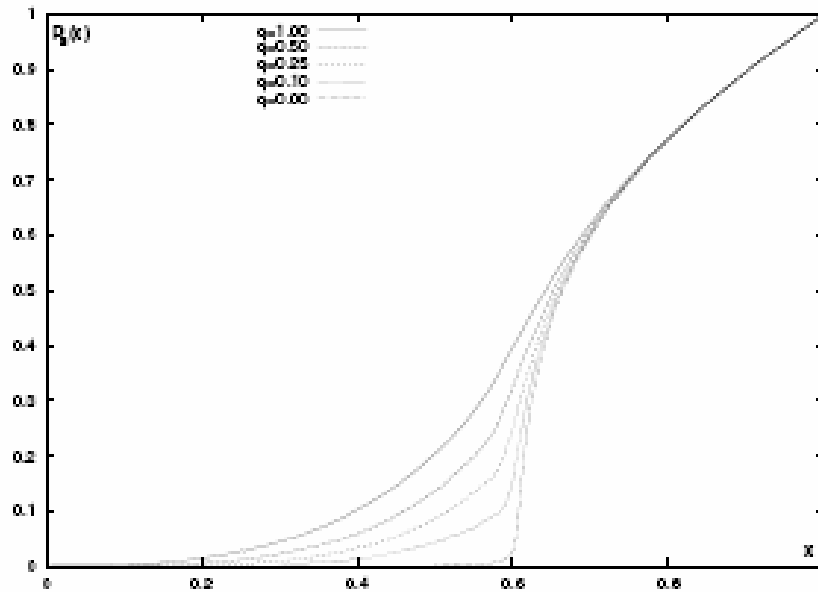


Гибриды SRSP-BS

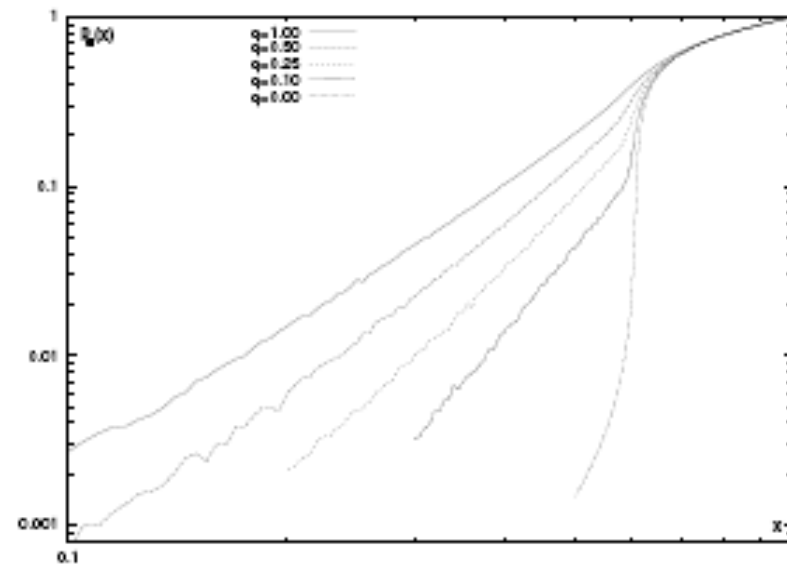
Цикл удаления:
1-q: SRSP-шаг до успеха;
q: BS-шаг.

q	1	0.5	0.25	0.1
β_B	2.85(15)	3.4(1)	4.2(1)	5.2(1)

TABLE I: The backbone-density index β_B (see (1)) for the BS-SRSP hybrid models with different mixing parameters q .



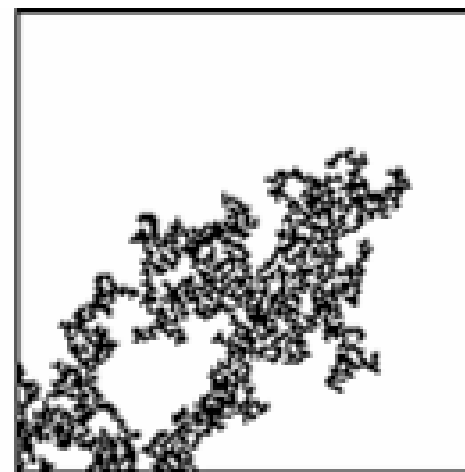
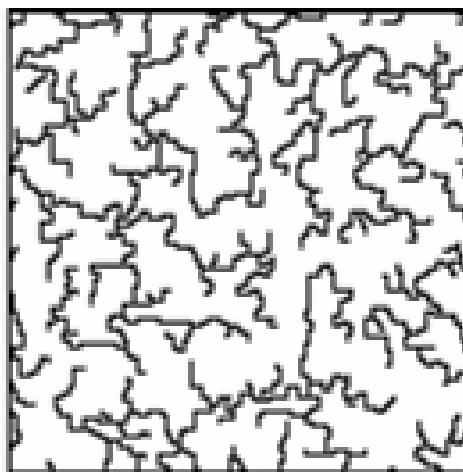
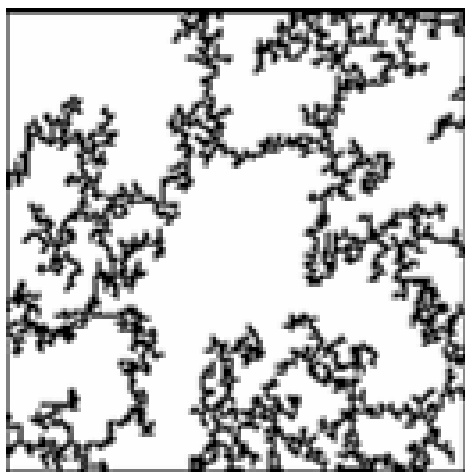
$P_B(x)$ (plain)



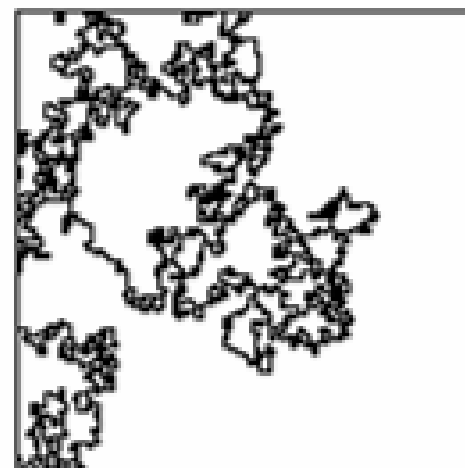
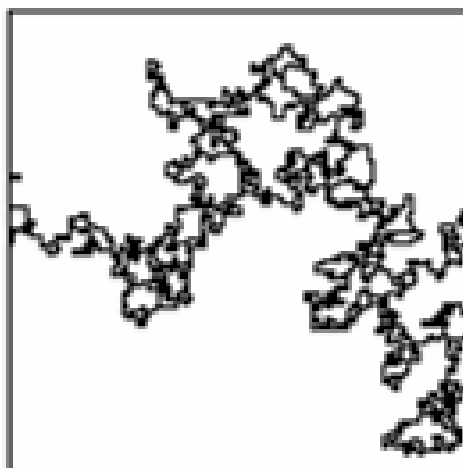
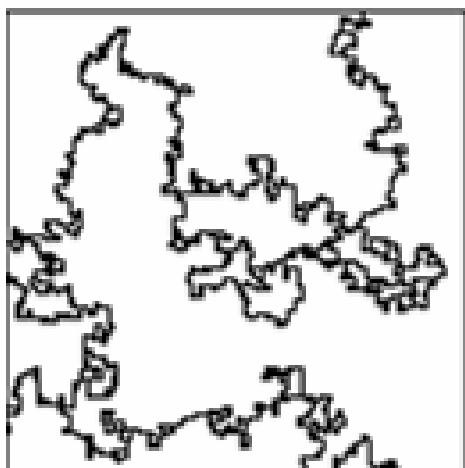
$P_B(x)$ (logarithmic)

Типичные конфигурации и остовы

Full system



Backbone

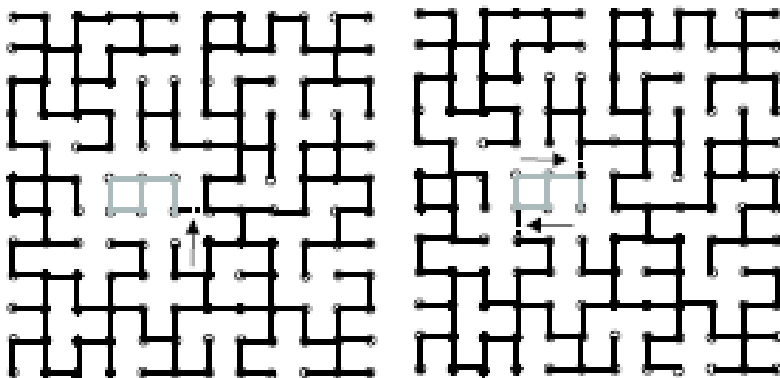


BS

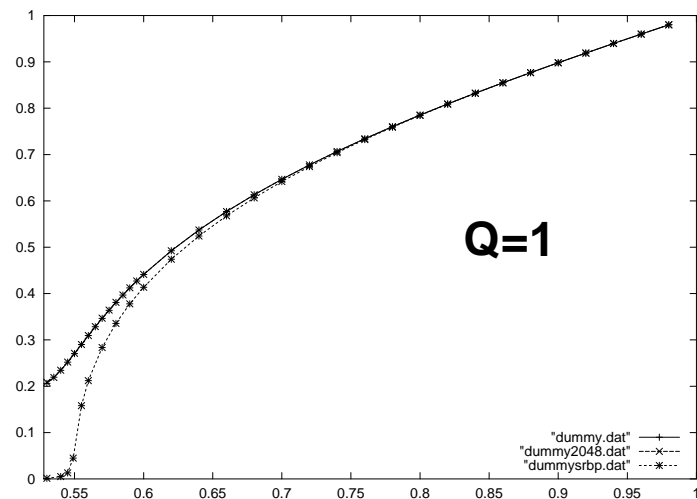
SRSP

Percolation

SR2BP-модель («Potts variant»)



С вероятностью Q изолированный кластер восстанавливает две связи



Равновесная концентрация
 $p > p_{\text{tree}}$

Модель близка к точно решаемой (*Sweeny dynamics*): если восстанавливать старую связь и случайную, то стат. сумма

$$Z = [p/(1-p)]^{Bq^C} \text{ в секторе } q=0, p=\text{const}$$

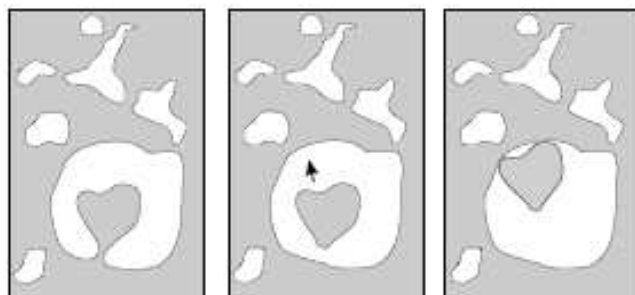
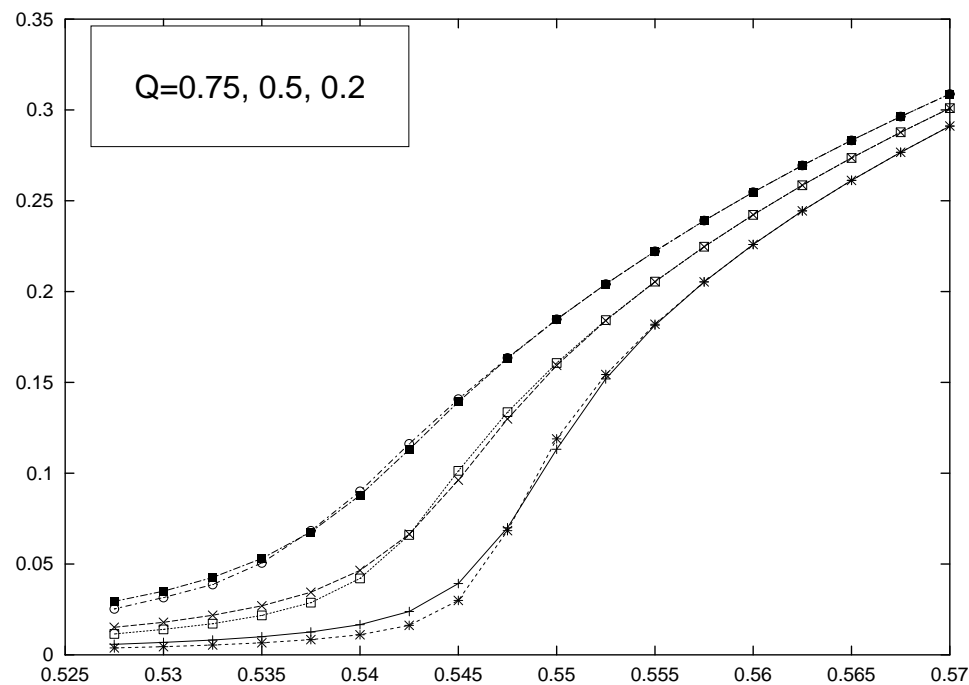
(*random-cluster model, надкритический случай*: $p=1-\exp[-J/T]$).

SRB2P («неравновесный вариант»)

Цикл удаления:

- 1) SRBP-шаг до успеха;
- 2) SRB2P(Q) шаг.

Переход отсутствует при всех $Q > 0$; вопрос об универсальности открыт



SR2BP и вопрос о числе контактных точек в BS: «решеточные резонансы» не важны.

Основной результат

- В монотонных моделях (где полностью отсутствует механизм восстановления разрушенного остова) фазовый переход имеет место и не универсален. Низкоплотная фаза представляет собой плотный фрактал (*SRBP, SRSP, гибриды*).
- В моделях с backbone reinforcement фазового перехода как правило нет, поведение не универсально, остов при малых плотностях качественно отличен от перколяционного (*BS, BS-SRSP гибриды, SR2BP*).
- Можно построить «патологические» немонотонные модели, в которых происходит фазовый переход; они крайне редки и имеют характер исключений. Возможно, к ним принадлежит SR2BP-модель с полностью локальным восстановлением связей.