
УДК 519.2

Ю. П. Вирченко, Ю. А. Толмачева (Ин-т монокристаллов НАН Украины, Харьков)

МАЖОРАНТНЫЕ ОЦЕНКИ ПОРОГА ПЕРКОЛЯЦИИ БЕРНУЛЛИЕВСКОГО ПОЛЯ НА КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ

We suggest a method for obtaining a monotonically decreasing sequence of upper bounds of percolation threshold of the Bernoulli random field on \mathbb{Z}^2 . On the basis of this sequence, we obtain a method of constructing approximations with the guaranteed exactness estimate for a percolation probability. We compute the first term $c_2 = 0,74683$ of the considered sequence.

Запропоновано метод одержання монотонно спадної послідовності верхніх оцінок порогу перколяції бернуллієвського випадкового поля на \mathbb{Z}^2 та на її основі — метод побудови апроксимацій із гарантованою оцінкою точності для ймовірності перколяції. Обчислено перший член $c_2 = 0,74683$ цієї послідовності.

1. Введение. В дискретной теории перколяции изучаются случайные подмножества в группах \mathbb{Z}^d , $d = 1, 2, 3, \dots$, стохастически трансляционно инвариантные по mod Λ ($\Lambda = \{\langle n_i; i = 1, \dots, d \rangle; n_j = 0, 1, \dots, L_j, L_j \in \mathbb{N}, j = 1, \dots, d\}$)

[1]. При этом каждое счетное множество \mathbb{Z}^d предполагается оснащенный бинарным отношением смежности, трансляционно инвариантным по mod Λ и таким, что каждый элемент x из \mathbb{Z}^d имеет только лишь конечный набор смежных с ним элементов y . Такие топологические структуры называются *периодическими графами*. Они являются топологическими моделями кристаллических решеток, при изучении случайных физических нарушений которых возникли, в свое время [2], основные понятия теории перколяции.

На основе отношения смежности естественным образом вводится понятие связности на периодических графах. Одной из центральных задач теории перколяции, вообще, и дискретной теории перколяции, в частности, является определение условий существования с ненулевой вероятностью бесконечной связной компоненты случайного множества, наличие которой, собственно, и называется явлением перколяции [1, 2]. Именно эта задача оказывается наиболее востребованной в физических приложениях. Несмотря на математическую разработанность основ дискретной теории перколяции, просуммированную в монографии [3], и огромное количество публикаций, посвященных различного рода нестрогим эвристическим подходам к решению указанной задачи, а также связанным с ней компьютерным экспериментам, к настоящему времени не произошло серьезного, математически последовательного продвижения в ее исследовании даже в том простейшем нетривиальном частном случае, который рассматривается в настоящей работе, когда случайные множества порождаются бернулліевским случайным полем на \mathbb{Z}^2 . При этом под решением задачи мы понимаем определение так называемого *порога перколяции* — критического значения параметра бернулліевского поля — вероятности „успеха”, который, следуя физической терминологии, будем называть *концентрацией*. Порог является граничной точкой области существования перколяции. С определением порога тесно связана задача вычисления вероятности перколяции.

Поскольку для периодических графов сколь-нибудь общего типа маловероятно, чтобы порог перколяции мог быть определен точно в терминах каких-либо известных трансцендентных функций, задача его вычисления должна пониматься как нахождение процедуры последовательных приближений, уточняющих его численное значение. Таким образом, решение основной задачи дискретной теории перколяции мы понимаем как разработку метода последовательных приближений для определения вероятности перколяции и, в частности, порога перколяции.

В настоящей работе мы предлагаем, в случае периодического графа на \mathbb{Z}^2 , называемого квадратной решеткой, схему построения убывающей последовательности верхних оценок порога перколяции и вычисления на их основе аппроксимаций с гарантированной оценкой точности для вероятности перколяции. Схема основывается на кластерном разложении вероятности перколяции и верхних оценках числа конечных кластеров, содержащих фиксированную точку. Эти оценки получаются на основе перечисления путей произвольной наперед заданной длины на так называемой сопряженной решетке [3]. Любой отрезок фиксированной длины m путей может служить отрезком так называемой внешней границы конечного кластера на квадратной решетке. Натуральное число m определяет порядок аппроксимации. В работе дана явная реализация этой схемы для $m = 2$.

2. Задача теории перколяции на \mathbb{Z}^2 . Рассмотрим бесконечный периодический граф с множеством вершин \mathbb{Z}^2 , который, для простоты дальнейших формулировок, будем считать погруженным в \mathbb{R}^2 . Отношение смежности φ на графе определяется множеством пар $\{\langle x, y \rangle \in \mathbb{Z}^2 : x\varphi y\}$, где $x\varphi y$ в тех и только тех случаях, когда $y = x \pm e_1$, либо $y = x \pm e_2$, $e_1 = \langle 1, 0 \rangle$, $e_2 = \langle 0, 1 \rangle$. Такой граф будем называть квадратной решеткой и обозначать тем же символом \mathbb{Z}^2 .

Пусть $\{\tilde{c}(x); x \in \mathbb{Z}^2\}$ — бернуллиевское случайное поле с концентрацией

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

Знак „тильда” здесь и далее указывает на случайность объектов. Поле $\{\tilde{c}(x); x \in \mathbb{Z}^2\}$ индуцирует случайное множество с реализациями $\{\tilde{M}; \tilde{M} \subset \mathbb{Z}^2\}$, где $\tilde{M} = \{x : \tilde{c}(x) = 1\}$. Ясно, что распределение вероятностей для возможных реализаций \tilde{M} полностью определяется набором вероятностей

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

Здесь и далее $|\cdot| = \text{Card}\{\cdot\}$.

Отношение смежности φ индуцирует естественное отношение связности для вершин, входящих в реализацию \tilde{M} . Две вершины x и y из \tilde{M} будем называть связанными, если существует путь $\langle x_i; i = 0, 1, 2, \dots, n \rangle$, $x_i \in \tilde{M}$, $x_0 = x$, $x_n = y$ и $x_i\varphi x_{i+1}$, $i = 0, 1, 2, \dots, n-1$. Связность является отношением эквивалентности на множестве \tilde{M} . Поэтому каждая реализация \tilde{M} однозначно разлагается $\tilde{M} = \bigcup_{j \in \mathbb{N}} \tilde{W}_j$ на семейство $\mathcal{W}(\tilde{M}) = \{\tilde{W}_j; j \in \mathbb{N}\}$ непересекающихся классов эквивалентности, порождаемых этим отношением. Эти классы будем называть кластерами. Если $x \in \tilde{W}_j$ с некоторым $j \in \mathbb{N}$ в реализации \tilde{M} , то этот кластер \tilde{W}_j будем обозначать $\tilde{W}(x)$ [3].

Введем вероятность

$$Q(c) = \Pr\{\tilde{M}: \tilde{W}(x) \in \mathcal{W}(\tilde{M}), |\tilde{W}(x)| = \infty\}. \quad (1)$$

Если $Q(c) > 0$, то говорят, что такое поле $\{\tilde{c}(x); x \in \mathbb{Z}^2\}$ имеет перколяцию.

Для функции $Q(c)$ определена характеристика

$$c^* = \sup\{c: Q(c) = 0\},$$

которая называется порогом перколяции. Ввиду однородности бернуллиевского поля $\{\tilde{c}(x); x \in \mathbb{Z}^2\}$ — инвариантности вероятностной меры относительно трансляций на векторы $(n_1 e_1 + n_2 e_2)$, $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$, вероятность $Q(c)$ не зависит от $x \in \mathbb{Z}^2$.

3. Кластерное разложение на \mathbb{Z}^2 . Очевидно, что вероятность $1 - Q(c)$ можно выразить в виде ряда по вероятностям попарно несовместимых событий — попаданий выделенной вершины 0 в тот или иной конечный кластер. Этот ряд называется кластерным разложением [4].

Введем понятие *внешней границы* кластера. Следуя [3], определим новое понятие смежности $\bar{\varphi}$, т. е. наряду с графом \mathbb{Z}^2 будем рассматривать граф $\bar{\mathbb{Z}}^2$ с тем же множеством вершин \mathbb{Z}^2 , но с отношением смежности $\bar{\varphi}$. Вершины x и y назовем $\bar{\varphi}$ -смежными, если $x\bar{\varphi}y$, либо $y = x + e_1 \pm e_2$, или $y = x - e_1 \pm e_2$.

Отношение $\bar{\varphi}$ порождает новое отношение связности вершин на каждой конфигурации \tilde{M} , которое также является отношением эквивалентности и приводит к разложению \tilde{M} на связные по отношению к $\bar{\varphi}$ множества вершин.

Определение 1. Обозначим через ∂W множество, состоящее из вершин y , $\bar{\varphi}$ -смежных с вершинами x кластера W , но не принадлежащих ему. *Внешней границей кластера W называется подмножество $\bar{\partial}W \subset \partial W$, для каждой вершины v которого существует бесконечный $\bar{\varphi}$ -путь $\alpha(v)$ по вершинам решетки \mathbb{Z}^2 , начинающийся в v , причем v — единственная вершина в $\alpha(v)$, принадлежащая объединению $W \cup \bar{\partial}W$.*

Для любого плоского периодического графа справедливо следующее утверждение [3], которое мы формулируем применительно к $\bar{\mathbb{Z}}^2$.

Теорема 1. Пусть $W(x)$ — конечный кластер, содержащий некоторую фиксированную вершину x , $|W(x)| < \infty$. Тогда $W(x)$ имеет непустую конечную внешнюю границу $\bar{\partial}W(x)$ со следующими свойствами:

- 1) $\bar{\partial}W(x)$ — $\bar{\varphi}$ -связное множество вершин в $\bar{\mathbb{Z}}^2$, которое представляет собой цикл, т. е. $\bar{\partial}W(x) = \langle x_0, x_1, \dots, x_n, x_0 \rangle$, где $x_i \neq x_j$, $i \neq j$, $n = |\bar{\partial}W(x)|$, $x_i \bar{\varphi} x_{i+1}$, $i = 0, 1, \dots, n$, $x_{n+1} = x_0$ и каждая вершина x_i , $i = 0, 1, \dots, n$, имеет только две $\bar{\varphi}$ -смежные вершины в $\bar{\partial}W(x)$;
- 2) вершина x содержится в конечном внутреннем множестве

$$\text{Int}(\bar{\partial}W(x)) \equiv \{u \notin \bar{\partial}W(x): \forall(\alpha(u): |\alpha(u)| = \infty) (\alpha(u) \cap \bar{\partial}W(x) \neq \emptyset)\}.$$

Обратно, каждый цикл γ на $\bar{\mathbb{Z}}^2$ может служить внешней границей некоторого кластера $W \subset \text{Int}(\gamma)$.

Пусть $\mathcal{A} = \{W: 0 \in W, |W| < \infty, W \text{ — } \bar{\varphi}\text{-связно}\}$ — семейство конечных кластеров W , содержащих вершину 0. Определим для любого кластера $W \in \mathcal{A}$ событие

$$A(W) = \{ \tilde{M}: 0 \in \tilde{M}, \tilde{W}(0) \in \mathcal{W}(\tilde{M}), \tilde{W}(0) = W \}.$$

Такое событие имеет определенную вероятность

$$\Pr \{A(W)\} = c^{|W|} (1-c)^{|\partial W|}. \quad (2)$$

Рассмотрим вероятность $1 - Q(c)$. Очевидно, что

$$1 - Q(c) = \{ \tilde{M}: x \in \tilde{M}, \tilde{W}(x) \in \mathcal{W}(\tilde{M}), |\tilde{W}(x)| < \infty \} = \sum_{W \in \mathcal{A}} \Pr \{A(W)\}.$$

Согласно теореме 1, каждому кластеру из семейства \mathcal{A} соответствует $\bar{\varphi}$ -цикл γ такой, что $0 \in \text{Int}(\gamma)$. В связи с этим введем в рассмотрение семейство \mathcal{B} всех таких $\bar{\varphi}$ -циклов.

Для каждого $\bar{\varphi}$ -цикла $\gamma \in \mathcal{B}$ определим событие

$$B(\gamma) = \{ \tilde{M}: 0 \in \tilde{M}, \tilde{W}(0) \in \mathcal{W}(\tilde{M}), \bar{\partial} \tilde{W}(0) = \gamma \},$$

которое представимо в виде конечного объединения попарно непересекающихся событий

$$B(\gamma) = \bigcup_{W \in \mathcal{A}: \bar{\partial} W = \gamma} A(W). \quad (3)$$

Следовательно, это событие имеет определенную вероятность

$$P(\gamma) = \Pr \{B(\gamma)\}, \quad (4)$$

которая согласно (2), (3) равна

$$P(\gamma) = \sum_{W \in \mathcal{A}: \bar{\partial} W = \gamma} \Pr \{A(W)\} = \sum_{W \in \mathcal{A}: \bar{\partial} W = \gamma} c^{|W|} (1-c)^{|\partial W|}.$$

Разложим семейство \mathcal{A} на непересекающиеся классы. К одному классу отнесем кластеры $W \in \mathcal{A}$, которые имеют одну и ту же внешнюю границу, т. е. множество вершин, входящих в состав $\bar{\varphi}$ -цикла γ , для которого выполняется $\bar{\partial} W = \gamma$. Поэтому справедливо преобразование

$$\bigcup_{W \in \mathcal{A}} \dots = \bigcup_{\gamma \in \mathcal{B}} \bigcup_{W \in \mathcal{A}: \bar{\partial} W = \gamma} \dots \quad (5)$$

Далее, на основании (3) получаем

$$\{ \tilde{M}: 0 \in \tilde{M}, \tilde{W}(0) \in \mathcal{W}(\tilde{M}), |\tilde{W}(0)| < \infty \} = \bigcup_{\gamma \in \mathcal{B}} B(\gamma)$$

и поэтому, учитывая (4) и (5), приходим к следующему утверждению.

Теорема 2. Вероятность $1 - Q(c)$ представляется разложением

$$1 - Q(c) = \sum_{\gamma \in \mathcal{B}} P(\gamma). \quad (6)$$

Разложение (6) будем называть кластерным.

4. Достаточный признак перколяции. Разложение (6), по построению, всегда сходится и сумма не превышает 1. Однако имеется область значений концентрации c , где эта сумма точно равна 1, и в этом случае перколяция в случайном поле $\{ \tilde{c}(x); x \in \mathbb{Z}^2 \}$ отсутствует. Если же имеет место точное неравенство, то перколяция существует. Установить непосредственно наличие точного неравенства крайне сложно. Тем не менее с разложением (6) тесно связан другой ряд, который не обязательно сходится и как раз его сходимость является достаточным условием наличия перколяции.

Для каждого цикла γ из \mathcal{B} определим событие

$$\hat{B}(\gamma) = \{ \tilde{M} : \exists (\tilde{W} \in \mathcal{W}(\tilde{M})) (0 \in \text{Int}(\gamma), \gamma = \bar{\partial} \tilde{W}) \}$$

и его вероятность

$$\hat{P}(\gamma) = \text{Pr}\{\hat{B}(\gamma)\}.$$

Справедлив следующий достаточный признак наличия перколяции.

Теорема 3. *Если имеет место*

$$\sum_{\gamma \in \mathcal{B}} \hat{P}(\gamma) < \infty, \tag{7}$$

то $Q(c) > 0$.

Доказательство. Применим к бесконечной совокупности событий семейства $\{\hat{B}(\gamma); \gamma \in \mathcal{B}\}$ лемму Бореля–Кантелли (см., например, [5]). Из суммируемости ряда в (7), согласно указанной лемме, следует, что вероятность события, состоящего в одновременной реализации бесконечной совокупности событий из семейства $\{\hat{B}(\gamma); \gamma \in \mathcal{B}\}$, равна нулю. Тогда с вероятностью 1 существует некоторый максимальный цикл $\gamma^* \in \mathcal{B}$ такой, что за его пределами найдутся вершина z и вместе с ней бесконечный путь $\alpha(z)$ без самопересечений, начинающийся в этой вершине и такой, что $\alpha(z) \cap \tilde{M} = \emptyset$. Это означает, что для бернуллиевского поля $\{\tilde{c}(x); x \in \mathbb{Z}^2\}$ событие $\{\tilde{M} : \exists (\tilde{W} \in \mathcal{W}(\tilde{M})) (|\tilde{W}| = \infty)\}$ имеет вероятность 1.

С другой стороны, имеет место счетное разложение

$$\{\tilde{M} : \exists (\tilde{W} \in \mathcal{W}(\tilde{M})) (|\tilde{W}| = \infty)\} = \bigcup_{v \in \mathbb{Z}^2} \{\tilde{M} : \tilde{W}(v) \in \mathcal{W}(\tilde{M}), |\tilde{W}(v)| = \infty\}. \tag{8}$$

Ввиду независимости вероятности $Q(c)$, определяемой (1), от вершины v она не может быть равна нулю из-за неравенства

$$1 \leq \sum_{v \in \mathbb{Z}^2} \text{Pr}\{\tilde{M} : \tilde{W}(v) \in \mathcal{W}(\tilde{M}), |\tilde{W}(v)| = \infty\},$$

которое на основании (8) должно иметь место.

5. Перечисление конечных кластеров на \mathbb{Z}^2 . Основой построения мажорантных оценок порога перколяции в данной работе является получение убывающей последовательности верхних оценок числа $r_k = \text{Card}\{\gamma \in \mathcal{B} : |\gamma| = k\}$ всех возможных $\bar{\Phi}$ -циклов из \mathcal{B} длины k , $k \geq 4$.

Заметим, что описание любого пути и, в частности, цикла на $\bar{\mathbb{Z}}^2$ можно эквивалентно, наряду с указанием последовательности $\langle x_0, x_1, \dots, x_n \rangle$ вершин, задавать указанием начальной вершины x_0 и последовательности ребер $\langle u_1, \dots, u_n \rangle$, $u_i = x_i - x_{i-1}$, $i = 1, 2, \dots, n$. При этом $u_i \in \mathcal{E}_1 \cup \mathcal{E}_{-1}$, $i = 1, \dots, n$, где введены обозначения

$$\mathcal{E}_1 = \{\varepsilon e_i; \varepsilon = \pm 1, i = 1, 2\}, \quad \mathcal{E}_{-1} = \{\varepsilon e'_i; \varepsilon = \pm 1, i = 1, 2\},$$

и $e'_1 = e_1 + e_2$, $e'_2 = e_1 - e_2$.

Определение 2. *Путь γ на $\bar{\mathbb{Z}}^2$ будем называть правильным, если каждые два последовательных ребра u, v (в порядке прохождения) имеют следующие свойства:*

- а) *если $u \in \mathcal{E}_1$, то либо $v = u$, либо $v \in \mathcal{E}_{-1}$, и $(u, v) > 0$;*
- б) *если $u \in \mathcal{E}_{-1}$, то либо $v \in \mathcal{E}_{-1}$, $v \neq -u$, либо $v \in \mathcal{E}_1$, $(u, v) > 0$.*

Определение 3. *Для фиксированного $t \in \mathbb{N}$ конечный незамкнутый правильный путь $\gamma = \langle x_0, x_1, \dots, x_n \rangle$, $n \geq t$, у которого для любых $i = 0, 1, \dots, n-1$*

и $j = 1, \dots, t$, $i + j \leq n$, каждый правильный путь $\langle x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+j}, y \rangle$, $y \in \mathbb{Z}^2$, не является замкнутым, назовем t -простым.

При $n < t$ путь γ является t -простым по определению.

Очевидно, что при $t = 1, 2$ множество t -простых путей совпадает со множеством всех правильных путей.

Сформулируем в виде отдельной теоремы утверждение, справедливость которого непосредственно следует из теоремы 1. Оно представляет собой критерий того, что замкнутый путь на $\overline{\mathbb{Z}^2}$ принадлежит \mathcal{B} .

Теорема 4. Для того чтобы замкнутый путь $\gamma = \langle x_0, x_1, \dots, x_n, x_0 \rangle$ на $\overline{\mathbb{Z}^2}$ мог быть внешней границей некоторого кластера из \mathcal{A} , необходимо и достаточно, чтобы он был правильным и при этом каждый путь $\langle x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+n-1} \rangle$, $i = 0, 1, \dots, n$, должен быть $(n-1)$ -простым. (Нумерация вершин понимается по $\text{mod}(n+1)$.)

Доказательство. Докажем необходимость правильности пути. Необходимость второго свойства, утверждаемого в теореме, непосредственно следует из того, что γ — цикл. Допустим противное. Пусть x, y, z — последовательные вершины цикла γ , являющегося внешней границей кластера W , для которых свойства а), б) не выполняются. Положим, для определенности, что $x\bar{\varphi}y$, $y = x + e_1$ и $z = y - e_1 + e_2$. Тогда вершины $y \pm e_2$, $y + e_1$ не могут все одновременно находиться вне W , так как в этом случае y не принадлежит ∂W и, следовательно, не является вершиной из внешней границы W . Более того, простой анализ показывает, что указанные вершины обязаны принадлежать $\text{Int}(\gamma)$. Но тогда для вершины y не существует бесконечного пути, начинающегося в ней и имеющего пустое пересечение с $W \cup \partial W$, т. е. $y \notin \overline{\partial W}$.

Для доказательства обратного утверждения достаточно убедиться, что γ представляет собой цикл. Допустим противное, т. е. существует номер i такой, что $x_{i-1}\bar{\varphi}x_i$, $x_i\bar{\varphi}x_{i+1}$ и существует l (для определенности $l > i + 1$) такое, что $x_i\bar{\varphi}x_l$. Тогда при $j = l - i - 1$ путь $\langle x_i, \dots, x_{i+j}, x_{i+j+1} \rangle$ — замкнутый.

Теорема 4 доказана.

Для построения оценок величины r_k проведем следующее распределение циклов из семейства \mathcal{B} по классам. Рассмотрим путь $\alpha(0) = \langle je_1; j = 0, 1, 2, \dots \rangle$. Согласно теореме 1 каждый цикл $\gamma \in \mathcal{B}$ имеет непустое пересечение с $\alpha(0)$. Выберем в множестве $\gamma \cap \alpha(0)$ вершину, ближайшую к вершине 0, и обозначим ее z_γ . Имеет место дизъюнктивное разложение

$$\mathcal{B} = \bigcup_{l=1}^{\infty} C_l,$$

где в один класс C_l входят циклы из \mathcal{B} с совпадающей вершиной $z_\gamma \equiv le_1$. Это разложение индуцирует разложение множества $\{\gamma \in \mathcal{B} : |\gamma| = k\}$ на непересекающиеся классы

$$C_l^{(k)} = \{\gamma \in \mathcal{B} : |\gamma| = k\} \cap C_l.$$

Поскольку при этом обязательно $l < k$, то

$$\{\gamma \in \mathcal{B} : |\gamma| = k\} = \bigcup_{l=1}^{k-1} C_l^{(k)}, \quad r_k = \sum_{l=1}^{k-1} |C_l^{(k)}|. \quad (9)$$

Для каждого $n \in \mathbb{N}$ и $m = 1, 2, \dots, n$ обозначим через $Q(m, n)$ множество m -простых путей длины n , которые начинаются в вершине 0. Имеет место очевидное включение $Q(m, n) \supset Q(m+1, n)$.

Пусть теперь $Q_l(m, n) = Q(m, n) + le_1$, $m = 1, \dots, n - 1$, $l = 0, 1, 2, \dots$. Тогда $|Q_l(m, n)| = |Q(m, n)|$. Рассмотрим множество $Q_l(n - 1, n)$. Согласно теореме 4, вырезанием у каждого цикла $\gamma \in C_l^{(n+1)}$ ребра $x_n \bar{\varphi} x_0$ или $x_0 \bar{\varphi} x_1$ мы получим из него два различных пути из $Q_l(n - 1, n)$, причем различным γ из $C_l^{(n+1)}$ будут соответствовать непересекающиеся пары путей из $Q_l(n - 1, n)$ (ввиду договоренности выбора вершины $x_0 = z_\gamma$, ближайшей к 0). По этой причине $|C_l^{(k)}| < |Q(k - 2, k - 1)|/2$. Тогда на основании (9) находим оценку

$$\begin{aligned} r_k &< \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{k-1} |Q_l(k - 2, k - 1)| = \\ &= \frac{1}{2} (k - 1) |Q(k - 2, k - 1)| \leq \frac{1}{2} (k - 1) |Q(m, k - 1)| \end{aligned} \tag{10}$$

при любом $m \leq k - 2$.

Нашей дальнейшей задачей является получение формулы для величины $|Q(m, n)| = s_n^{(m)}$, на основе которой будут вычисляться верхние оценки для порога перколяции.

В соответствии с изложенным выше, каждый путь из $Q(m, n)$ описывается последовательностью $\langle u_1, \dots, u_n \rangle$, $u_i \in \mathcal{E}_1 \cup \mathcal{E}_{-1}$, $i = 1, \dots, n$. Рассмотрим конечномерное пространство \mathfrak{S}_m функций $s : Q(m, m) \mapsto \mathbb{R}$, т. е. определенных на путях $\beta = \langle u_1, \dots, u_m \rangle \in Q(m, m)$. Введем в этом пространстве линейный оператор \mathbf{T}_m , определяемый ядром $\mathbf{T}_m(\alpha, \beta)$, $\alpha = \langle u_1, \dots, u_n \rangle \in Q(m, m)$, $\beta = \langle v_1, \dots, v_n \rangle \in Q(m, m)$, следующего вида:

$$\mathbf{T}_m(\alpha, \beta) = \begin{cases} 1, & u_i = v_{i+1}, \quad i = 1, \dots, m - 1, \\ & \langle v_1, \dots, v_m, u_m \rangle \in Q(m + 1, m + 1); \\ 0 & \text{— в противном случае.} \end{cases}$$

По определению

$$(\mathbf{T}_m \mathbf{s})(\alpha) = \sum_{\beta \in Q(m, m)} \mathbf{T}_m(\alpha, \beta) s(\beta).$$

Пусть для каждого $n \in \mathbb{N}$, $n \geq m$, функция $s_n : Q(m, m) \mapsto \mathbb{R}$ определена для каждого $\beta = \langle v_1, \dots, v_m \rangle \in Q(m, m)$ формулой

$$s_n(\beta) = |\{ \langle u_1, \dots, u_n \rangle \in Q(m + 1, n) : \langle u_{n-m+1}, \dots, u_n \rangle = \beta \}|, \tag{11}$$

т. е. $s_n(\beta)$ — число путей из $Q(m + 1, n)$, имеющих в качестве конечного отрезка длины m путь, который переносом начальной вершины в 0 превращается в путь β .

Очевидно, что

$$s_n^{(m)} = \sum_{\alpha \in Q(m, m)} s_n(\alpha) \equiv (s_n, \mathbf{e})_m, \tag{12}$$

где $\mathbf{e}(\alpha) \equiv 1$, $\alpha \in Q(m, m)$ и $(\cdot, \cdot)_m$ — скалярное произведение в пространстве \mathfrak{S}_m .

Заметим далее, что

$$s_n(\alpha) = (\mathbf{T}_m s_{n-1})(\alpha),$$

и так как из (11) следует $s_m(\alpha) = \mathbf{e}(\alpha)$, в сочетании с (12) получаем

$$s_n^{(m)} = (\mathbf{T}_m^{n-m} \mathbf{e}, \mathbf{e})_m. \quad (13)$$

Суммируем полученный результат в виде следующего утверждения.

Теорема 5. Для числа r_k справедлива оценка

$$r_k < \frac{1}{2}(k-1)(\mathbf{T}_m^{k-1-m} \mathbf{e}, \mathbf{e})_m \quad (14)$$

при любом $m \leq k-2$, причем правая часть неравенства убывает при увеличении m .

Оценка (14) следует из (10) и (13) при $n = k-1$.

б. Оценка порога перколяции. Покажем, каким образом оценки, задаваемые (14), дают монотонно убывающую последовательность оценок порога перколяции.

Теорема 6. При каждом $m = 1, 2, \dots$ для бернуллиевского случайного поля на квадратной решетке имеют место неравенства

$$c^* < c_m \equiv 1 - \rho_m^{-1},$$

где ρ_m — максимальное (по модулю) собственное число оператора \mathbf{T}_m , причем последовательность $\{c_m; m = 1, 2, \dots\}$ — монотонно убывающая.

Доказательство. Согласно теореме 3, необходимо доказать сходимость ряда (7) при $c > c_m$. Поскольку $\hat{B}(\gamma) \subset \{\hat{M}: \hat{M} \cap \gamma = \emptyset\}$, то

$$\hat{P}(\gamma) \leq (1-c)^{|\gamma|}. \quad (15)$$

На основании этого неравенства справедлива следующая оценка сверху для суммы:

$$\sum_{\gamma \in \mathcal{B}} \hat{P}(\gamma) \leq \sum_{\gamma \in \mathcal{B}} (1-c)^{|\gamma|} = \sum_{k=4}^{\infty} (1-c)^k r_k. \quad (16)$$

Зафиксировав число m , достаточно доказать, что сходится остаток этого ряда, начинающийся с $k = m+1$. В этом случае, воспользовавшись неравенством (14), получим

$$\sum_{k=m+1}^{\infty} (1-c)^k r_k < \frac{1}{2} \sum_{k=m+1}^{\infty} (k-1)(1-c)^k (\mathbf{T}_m^{k-m-1} \mathbf{e}, \mathbf{e})_m. \quad (17)$$

Ввиду того, что матрица $\mathbf{T}_m(\alpha, \beta)$ имеет неотрицательные элементы, она имеет собственное число $\rho_m \geq 0$, соответствующий собственный вектор \mathbf{e}_m которого имеет неотрицательные компоненты, такое, что все остальные собственные числа этой матрицы по модулю не превышают ρ_m (см. [6], гл. XIII, § 3, теорема 3).

Для матрицы \mathbf{T}_m справедливо следующее разложение Данфорда, имеющее место для любой квадратной матрицы (см., например, [8]): $\mathbf{T}_m = \mathbf{S} + \mathbf{N}$, где \mathbf{S} — некоторая матрица простой структуры [6], т. е. имеющая в пространстве $Q(m, n)$ полный набор собственных векторов, а матрица \mathbf{N} — нильпотентная, т. е. для нее существует число $l \in \mathbb{N}$, $l \leq \dim Q(m, n)$, такое, что $\mathbf{N}^l = 0$. При этом спектр матрицы \mathbf{S} совпадает со спектром матрицы \mathbf{T}_m . Допустим теперь, что $\rho_m = 0$. Тогда, так как ρ_m — максимальное по модулю собственное число, в этом случае все собственные числа матрицы \mathbf{T}_m равны нулю. Следовательно, $\mathbf{S} = 0$ и поэтому $\mathbf{T}_m = \mathbf{N}$. Тогда из формулы (14) следует при $k-1-m \geq \dim Q(m, n)$ невозможное неравенство $r_k < 0$. Таким образом, предположение $\rho_m = 0$ приводит к противоречию и, следовательно, $\rho_m > 0$.

В силу определения вектора \mathbf{e} (\mathbf{e}, \mathbf{e}_m) $_m \neq 0$. По этой причине для сходимости ряда в правой части (17) необходимо, чтобы $(1-c)\rho_m < 1$, т. е. $c > 1 - \rho_m^{-1}$.

Отсюда следует, что $c^* < c_m$. При этом сумма ряда равна

$$(1 - c)^{m+1} \left([m - (m-1)(1 - c)\mathbf{T}_m] [1 - (1 - c)\mathbf{T}_m]^{-2} \mathbf{e}, \mathbf{e} \right)_m.$$

С другой стороны, условие $(1 - c)\rho_m < 1$ является достаточным для сходимости ряда в (17), так как ρ_m равно максимуму модуля собственных чисел матрицы \mathbf{T}_m [7]. Таким образом, неравенство $c < c_m$ эквивалентно сходимости указанного ряда.

Поскольку, по построению, $(\mathbf{T}_m^{k-m-1} \mathbf{e}, \mathbf{e})_m > (\mathbf{T}_{m+1}^{k-m} \mathbf{e}, \mathbf{e})_{m+1}$, сходимость ряда $\sum_{k=m+2}^{\infty} (k-1)(1-c)^k (\mathbf{T}_m^{k-m} \mathbf{e}, \mathbf{e})_m$ влечет сходимость ряда

$$\sum_{k=m+2}^{\infty} (k-1)(1-c)^k (\mathbf{T}_{m+1}^{k-m-1} \mathbf{e}, \mathbf{e})_{m+1},$$

а в силу доказанной эквивалентности этой сходимости соответственно выполнению неравенств $\rho_m(1-c) < 1$ и $\rho_{m+1}(1-c) < 1$ получаем, что первое из них влечет за собой второе. Это возможно только лишь в случае, если $\rho_{m+1} < \rho_m$, т. е. $c_{m+1} < c_m$.

7. Вероятность перколяции. Покажем, каким образом получаются приближения с гарантированной оценкой точности для вероятности перколяции.

Теорема 7. При каждом $t = 1, 2, \dots$ для $c < c_m$ вероятность перколяции $Q(c)$ бернуллиевого случайного поля на квадратной решетке определяется формулой

$$Q(c) = 1 - \sum_{\gamma \in \mathcal{B}: |\gamma| \leq l} P(\gamma) + S_l,$$

где

$$S_l < \frac{1}{2}(1-c)^{l+1} \left[\max_{\alpha \in Q(m,m)} (\mathbf{T}_m^{l-m} \mathbf{e})(\alpha) \right] \times \left([1 - (1-c)\mathbf{T}_m]^{-1} (l-1) + [1 - (1-c)\mathbf{T}_m]^{-1} \mathbf{e}, \mathbf{e} \right)_m \quad (18)$$

при $l \geq t$.

Доказательство. На основании (6) необходимо доказать указанную в утверждении верхнюю оценку для суммы $S_l = \sum_{\gamma \in \mathcal{B}: |\gamma| > l} P(\gamma)$. Из определения 1 и включения $B(\gamma) \subset \{ \tilde{M} : \tilde{M} \cap \gamma = \emptyset \}$ следует неравенство

$$P(\gamma) \leq (1-c)^{|\gamma|}.$$

Поэтому, используя кластерное разложение (6), получаем следующую верхнюю оценку:

$$S_l < \sum_{\gamma \in \mathcal{B}: |\gamma| > l} (1-c)^{|\gamma|} = \sum_{k=l+1}^{\infty} (1-c)^k r_k.$$

При $l \geq t$, оценивая величину r_k , согласно (14) имеем

$$S_l < \frac{1}{2} \sum_{k=l+1}^{\infty} (k-1)(1-c)^k (\mathbf{T}_m^{k-m-1} \mathbf{e}, \mathbf{e})_m. \quad (19)$$

Поскольку

$$(\mathbf{T}_m^{n+j} \mathbf{e}, \mathbf{e})_m \leq (\mathbf{T}_m^n \mathbf{e}, \mathbf{e})_m \max_{\alpha \in Q(m,m)} (\mathbf{T}_m^j \mathbf{e})(\alpha),$$

из (19) находим

$$S_l < \frac{1}{2}(1-c)^{l+1} \left[\max_{\alpha \in Q(m,m)} (\mathbf{T}_m^{l-m} \mathbf{e})(\alpha) \right] \sum_{k=0}^{\infty} (k+l)(1-c)^k (\mathbf{T}_m^k \mathbf{e}, \mathbf{e})_m.$$

Суммируя последний ряд при $c > c_m$, получаем (18).

8. Случай $m = 2$. В этом пункте, используя идею получения мажорантных оценок, изложенную в пп. 5–7, реализуем ее в случае $m = 2$. В этом случае можно, используя симметрию квадратной решетки, редуцировать оператор \mathbf{T}_2 к некоторому оператору \mathbf{T} , действующему в \mathbb{R}^5 , что существенно облегчает анализ.

Рассмотрим пару последовательных ребер $\langle u, v \rangle$ цикла γ ; $u, v \in \mathcal{C}_{-1} \cup \mathcal{C}_1$. Такие пары можно распределить по следующим пяти классам. Во-первых, класс \mathcal{K}_0 , к которому отнесем пары, для которых выполняется $u, v \in \mathcal{C}_{-1}$, $u \perp v$, и, во-вторых, 4 класса \mathcal{K}_a , $a = \langle i, j \rangle$, $i, j \in \{\pm 1\}$, для которых соответственно выполняется $u \in \mathcal{C}_i$, $v \in \mathcal{C}_j$, $(u, v) > 0$. Обозначим $I = \{0\} \cup \{\langle i, j \rangle; i, j \in \{\pm 1\}\}$.

Пусть, согласно (11), при каждом \mathbb{N}

$$s_n(\langle u, v \rangle) = \left| \{ \langle u_1, \dots, u_n \rangle \in Q(3, n) : u_{n-1} = n, u_n = v \} \right|.$$

В соответствии с указанным выше разбиением пар последовательных ребер на классы введем пятимерные векторы

$$s_n(a) = \sum_{\langle u, v \rangle \in \mathcal{K}_a} s_n(\langle u, v \rangle), \quad a \in I,$$

где

$$s_n(a) = \left| \{ \langle u_1, \dots, u_n \rangle \in Q(3, n) : \langle u_{n-1}, u_n \rangle \in \mathcal{K}_a \} \right|. \quad (20)$$

Пусть $\gamma \in Q(3, n)$, $n > 4$ и $\langle u, v, w \rangle$ — последовательные ребра γ . Из геометрических соображений в 3-простых путях γ с длиной, большей 4, возможны только следующие последовательности, у которых пары $\langle u, v \rangle$, $\langle v, w \rangle \in Q(2, 2)$, а последовательность $\langle u, v, w \rangle$ удовлетворяет теореме 4.

I. Если $u, v \in \mathcal{C}_1$, $u = v$, то реализуется одна из возможностей:

- 1) $w \in \mathcal{C}_1$, $w = v$;
- 2) $w \in \mathcal{C}_{-1}$, $w = \text{sgn}(v, e_i) e_i$, $i = 1, 2$.

II. Если $u \in \mathcal{C}_{-1}$, $v \in \mathcal{C}_1$, $(u, v) > 0$, то реализуется одна из возможностей:

- 1) $w \in \mathcal{C}_1$, $w = v$;
- 2) $w \in \mathcal{C}_{-1}$, $w = \text{sgn}(v, e_i) e_i$, $i = 1, 2$.

III. Если $u \in \mathcal{C}_1$, $v \in \mathcal{C}_{-1}$, $(u, v) > 0$, то реализуется одна из возможностей:

- 1) $w \in \mathcal{C}_{-1}$, $w = v$;
- 2) $w \in \mathcal{C}_1$, $w = \text{sgn}(v, e'_i) e'_i$, $i = 1, 2$;
- 3) $w \in \mathcal{C}_{-1}$, $w \perp v$ (два варианта).

IV. Если $u, v \in \mathcal{C}_{-1}$, $u = v$, то реализуется одна из возможностей:

- 1) $w \in \mathcal{C}_{-1}$, $w = v$;
- 2) $w \in \mathcal{C}_1$, $w = \text{sgn}(v, e'_i) e'_i$, $i = 1, 2$;
- 3) $w \in \mathcal{C}_{-1}$, $w \perp v$ (два варианта).

V. Если $u, v \in \mathcal{C}_{-1}$, $u \perp v$, то реализуется одна из возможностей:

- 1) $w \in \mathcal{C}_{-1}$, $w = v$;
- 2) $w \in \mathcal{C}_1$, $w = \text{sgn}(v, e_i) e_i$, $i = 1, 2$;
- 3) $w \in \mathcal{C}_1$, $w \perp v$, $w = u$ (один вариант).

В последнем случае реализуется только один вариант продолжения цикла $w = u$, так как при продолжении $w = -u$ путь перестает быть 3-простым. Дополнением одного ребра он превращается в цикл $\langle u, v, -u, -v \rangle$.

Заметим, что условия в пп. I–V описывают оператор \mathbf{T}_2 в \mathfrak{S}_2 . На их основании можно построить редуцированный оператор \mathbf{T} на пространстве \mathbb{R}^5 , состоящем из векторов $\mathbf{s} = \langle s(a); a \in I \rangle$. Этот оператор строится из тех соображений, чтобы для каждого $n \in \mathbb{N}$ выполнялось

$$s_{n+1}(a) = (\mathbf{T}\mathbf{s}_n)(a), \quad a \in I. \tag{21}$$

Из пп. I₁ и II₁, соответственно порядку слагаемых в правой части, следует равенство

$$s_{n+1}(\langle 1, 1 \rangle) = s_n(\langle 1, 1 \rangle) + s_n(\langle -1, 1 \rangle). \tag{22}$$

Аналогичным образом получаются следующие равенства, которые вытекают соответственно из пп. I₂ и II₂, III₁, IV₁ и V₁, III₂, IV₂ и V₂, III₃, IV₃ и V₃:

$$\begin{aligned} s_{n+1}(\langle 1, -1 \rangle) &= 2s_n(\langle 1, 1 \rangle) + 2s_n(\langle -1, 1 \rangle), \\ s_{n+1}(\langle -1, -1 \rangle) &= s_n(\langle 1, -1 \rangle) + s_n(\langle -1, -1 \rangle) + s_n(0), \\ s_{n+1}(\langle -1, 1 \rangle) &= 2s_n(\langle 1, -1 \rangle) + 2s_n(\langle -1, -1 \rangle) + 2s_n(0), \\ s_{n+1}(0) &= 2s_n(\langle 1, -1 \rangle) + 2s_n(\langle -1, -1 \rangle) + s_n(0). \end{aligned} \tag{23}$$

Введем матрицу $\mathbf{T}_{a,b}$ оператора \mathbf{T} , где a, b — компоненты упорядоченного множества $\langle 0, \langle 1, 1 \rangle, \langle 1, -1 \rangle, \langle -1, 1 \rangle, \langle -1, -1 \rangle \rangle$,

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 2 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{24}$$

Эта матрица определяет искомый оператор \mathbf{T} , так как приведенные выше равенства представляются в виде (21). Тогда, используя оператор \mathbf{T} , имеем

$$\mathbf{s}_n = \mathbf{T}^{n-2} \mathbf{s}_2. \tag{25}$$

При этом на основании (20) вектор $\mathbf{s}_2 = 4 \langle 2, 1, 2, 2, 1 \rangle$.

Найдем собственные значения матрицы $\mathbf{T}_{a,b}$. Матрица $\mathbf{T}_{a,b}$ имеет неотрицательные элементы. Поэтому она имеет собственное значение ρ такое, что модули всех других собственных чисел не превышают ρ (см. теорему 3, а также [6], гл. XIII, § 3). Характеристическое уравнение матрицы $\mathbf{T}_{a,b}$ имеет вид

$$T(\lambda) \equiv \det[\mathbf{T} - \lambda] = \lambda^2(\lambda^3 - 3\lambda^2 - 3\lambda - 3) = 0.$$

Положительный корень ρ характеристического уравнения, существование которого гарантируется указанным утверждением, является единственным вещественным корнем кубического уравнения, получаемого приравнением нулю выражения в скобках. Этот корень равен

$$\rho = \sqrt[3]{2} \left(\sqrt[3]{2 + \sqrt{2}} + \sqrt[3]{2 - \sqrt{2}} \right) + 1 \approx 3,951.$$

Остальные корни полинома $T(\lambda)$ не превышают по модулю ρ .

Поскольку разложение $\bigcup_{a \in I} \mathcal{K}_a = Q(3, n)$ дизъюнктивно, то

$$s_n^{(3)} = |Q(3, n)| \equiv s_n = \sum_{a \in I} s_n(a)$$

или при введении вектора $\mathbf{e} = \langle 1, 1, 1, 1, 1 \rangle$ $s_n = (\mathbf{e}, \mathbf{s}_n)$, где (\cdot, \cdot) — скалярное произведение в \mathbb{R}^5 . Если, кроме того, воспользоваться (25) и учесть явный вид вектора \mathbf{s}_2 , то покомпонентно имеет место неравенство $s_n(a) < 8(\mathbf{T}^{n-2}\mathbf{e})(a)$ и поэтому $s_n < 8(\mathbf{e}, \mathbf{T}^{n-2}\mathbf{e})$. На основании этого неравенства, используя (10), находим оценку для r_k :

$$r_k < \frac{1}{2}(k-1)s_{k-1} < 4(k-1)(\mathbf{e}, \mathbf{T}^{k-3}\mathbf{e}).$$

Полученная оценка и (16) дают возможность получить мажорантный ряд для суммы (7):

$$\sum_{\gamma \in \mathcal{B}} \hat{P}(\gamma) \leq \sum_{k=4}^{\infty} (1-c)^k r_k < 4 \sum_{k=4}^{\infty} (k-1)(1-c)^k (\mathbf{e}, \mathbf{T}^{k-3}\mathbf{e}).$$

Этот ряд суммируется при $c > 1 - \rho^{-1} > 0,74683$, и мы убеждаемся в справедливости следующего утверждения.

Теорема 8. Для бернуллиевского случайного поля на квадратной решетке \mathbb{Z}^2 выполняется $c^* \leq c_2 = 0,74683$.

Эта оценка лучше полученной в [7].

Заключение. Построенная в работе последовательность $\{c_m; m = 2, 3, \dots\}$ мажорантных оценок порога перколяции c^* является монотонно убывающей. Поэтому она имеет предел $c_\infty \geq c^*$. Ее построение основано на существенном использовании двух неравенств — (10), (15). Есть основания полагать, тем не менее, что эти неравенства асимптотически точны при $n \rightarrow \infty$, т. е., например, для величины r_n имеет место асимптотическое соотношение $\ln r_n \sim \sim \ln |Q(n-2, n-1)|$ при $n \rightarrow \infty$. Если эта гипотеза справедлива, то выполняется точное равенство $c_\infty = c^*$ и предложенный нами метод построения мажорантных оценок представляет собой приближенный метод вычисления порога перколяции. Однако для оценки точности получаемых таким образом приближений необходимо построить основанную на аналогичной идее процедуру получения нижних оценок для c^* .

1. *Вирченко Ю. П.* Перколяция // Математическая физика: Большая рос. энцикл. — 1998. — С. 346–347.
2. *Hammersley J. M.* Percolation processes. Lower bounds for the critical probability // Ann. Math. Statist. — 1957. — **28**. — P. 790–795.
3. *Kesten H.* Percolation theory for mathematicians. — Boston: Birkhäuser, 1982. — 420 p. (Рус. пер.: *Кестен Х.* Теория просачивания для математиков. — М.: Мир, 1986. — 390 с.)
4. *Меньшиков М. В., Молчанов С. А., Сидоренко А. Ф.* Теория перколяции и некоторые приложения // Итоги науки и техники. Сер. Теория вероятностей, мат. статистика и теор. кибернетика. — М.: ВИНТИ, 1986. — **24**. — С. 53–110.
5. *Lamperti J.* Probability. — New York; Amsterdam, 1966. — 190 p. (Рус. пер.: *Ламперти Дж.* Вероятность. — М.: Наука, 1973. — 184 с.)
6. *Гантмахер Ф. Р.* Теория матриц. — 3-е изд. — М.: Наука, 1967. — 576 с. (Англ. пер.: *Gantmakher F. R.* Applications of the theory of matrices. — New York: Wiley, 1959.)
7. *Virchenko Yu. P., Tolmacheva Yu. A.* Revision of the upper estimate of percolation threshold in square lattice // Mat. Fizika, Analiz, Geometrija. — 2003. — **10**, № 1. — С. 29–39.
8. *Хорн Р., Джонсон Ч.* Матричный анализ. — М.: Мир, 1989. — 426 с.

Получено 22.01.2003,
после доработки — 17.01.2005