УДК 531.1

ВЕРОЯТНОСТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФРАКТАЛЬНО СТРУКТУРИРОВАННЫХ СРЕД

Ю.П. Вирченко, О.Л. Шпилинская
г. Харьков, Институт монокристаллов НАН Украины

Введение. В последние десятилетия в физике конденсированного состояния и в материаловедении уделялось большое внимание изучению неупорядоченных твердотельных сред, структура которых, с геометрической точки зрения, на масштабах много больших среднего расстояния между частицами не может быть описана на основе понятий и теоретических представлений модели сплошной среды. Феноменологически это означает, что не существует масштаба, большего указанной характерной длины и меньшего макроскопических размеров такого, чтобы усреднение неупорядоченных расположений частиц по областям с размером порядка этого масштаба приводило бы к "сплошному" распределению вещества в виде каких-то случайных пространственных образований, которые, с математической точки зрения, состоят из внутренних точек и окружающих их границ. Физические примеры таких сред столь многочисленны, что мы не будем на них останавливать внимания.

В связи с изучением структур указанного типа в теоретической физике возникла парадигма – понятие фрактала и вся связанная с ним терминология. Поэтому мы будем в дальнейшем называть неупорядоченные среды, имеющие такую структуру, фрактально неупорядоченными, или *фрактальными средами*.

Несмотря на отмеченное бурное развитие физики фрактальных сред в последние десятилетия, их теоретическое исследование в сильнейшей степени сдерживается отсутствием адекватных математических инструментов, посредством которых могли бы быть синтезированы идеализированные математические модели, которые были бы пригодны для описания именно такого рода пространственно распределённых структур. Причиной существующего положения является необходимость совмещения у них наряду со стохастичностью свойств пространственной однородности в среднем и фрактальности (локального самоподобия). Такого рода стохастические фракталы, в отличие о регулярных фракталов [1], должны описываться распределениями вероятностей для пространственных конфигураций точек их составляющих, т.е. представлять собой, с математической точки зрения, случайные точечные поля. С другой стороны, в математической физике и вообще в теории случайных полей изучались и находили применение до недавнего времени только два типа качественно противоположных точечных случайных полей. Это, во-первых, *ординарные* точечные поля, расположение точек в случайных реализациях которых характеризуется тем, что с вероятностью до единицы в каждом конечном объёме находится только лишь конечный набор точек реализации. Примером таких полей являются т.н. гиббсовские точечные случайные поля, на основе которых строится статистическая механика точечных частиц [2]. Во-вторых, в приложениях используются *сепарабельные* точечные поля, реализации которых с вероятностью до единицы составлены из "сплошным образом" заполненных пространственных областей случайной формы, ограниченных случайными непрерывными границами, что вписывается в представления теории сплошной среды. В физике такого рода модели применяются для описания гетерогенно неупорядоченных сред [3].

Случайные точечные поля, соответствующие фрактальным средам, очевидным образом должны занимать промежуточное положение между указанными двумя противоположными типами моделей, и с этим связана невозможность использования традиционных средств их вероятностного описания. В связи с этим авторами в последние годы разрабатывается математический аппарат для конструирования вероятностных моделей фрактальных сред и исследование их свойств [4]-[6]. В настоящем сообщении мы кратко опишем класс моделей, изученных в этих работах, а также укажем его естественное расширение, в пределах которого справедливы результаты цитированных работ.

Стохастические фракталы с марковскими измельчениями. Для простоты, мы будем рассматривать фрактальные среды погруженными в куб $\Lambda = [0, L]^d \subset R^d$, $d = 2,3$, так как не будем интересоваться термодинамическим предельным переходом. Универсальный способ описания стохастических фракталов реализуется на основе последовательности, занумерованной индексами $m = 0, 1, 2, \ldots$ "клеточных" разбиений куба Λ на непересекающиеся $A^{(m)}_x$ с размерами соответственно L/N^m, где $N > 1$ – фиксированное натуральное число – степень дробления и $\mathbf{x}$ – вектор вершины, характеризующей куб $A^{(m)}_x$; эта вершина выбирается для всех кубов единообразно. Обозначим $\Re_m$ множество всех возможных векторов $\mathbf{x}$ при фиксированном m. Введём далее оператор огрубления $K_m(\cdot)$ множеств $Z \subset \Lambda$ клеточным разбиением порядка m,

$$K_m(Z) = \bigcup_{\{x: A_x^m \cap Z \neq \varnothing\}} A_x^m$$

Пусть $H \subset \Re_m$. Тогда для каждого $l < m$ это множество представимо в виде дизъюнктивного объединения множеств $S_l(\mathbf{x},H)$, $\mathbf{x} \in K_l(H)$, где $S_l(\mathbf{x},H) = \{\mathbf{y} \in H: K_l(\mathbf{y}) = \mathbf{x}\}$, т.е. прообразов точек $\mathbf{x}$ при операции огрубления.

Так как каждая случайная реализация X ансамбля {X}, составляющего фрактальное точечное случайное поле, определяется указанием последовательности $K_m(X)$, $m = 1, 2, \ldots$, то полное вероятностное описание этого ансамбля может быть осуществлено на основе последовательности $\{P_m(\cdot)\,;\, m = 1, 2, \ldots\}$ распределений вероятностей, каждое из которых определено на наборах из $\Re_m$, где

$$P_{m+1}(H) = Q_m(H|\, K_m(H))P_m(K_m(H)), \quad m=1, 2, \ldots \qquad (1)$$

$$Q_m(H|G) = \mathbf{P}\{X: K_{m+1}(X) = H|\, K_m(X)\} = G\}.$$

Для каждого $m = 1, 2, \ldots$ и каждого $\mathbf{x} \in \Re_m$ при фиксированном значении m единообразно определено отображение "подобия" T : $S_m(\mathbf{x},\Re_{m+1}) \to \Re_1$, которое состоит в совмещении клетки $A^{(m)}_x$ с $A^{(m)}_0$ и растягивании её в N^m раз до совпадения с Λ.

Введём теперь случайные точечные поля с марковскими измельчениями, отличительное свойство которых состоит в явной конструкции условной вероятности $Q_m(\cdot|\cdot)$ в виде

$$Q_m(\cdot,\cdot) = \prod_{x \in G} q(TS_m(x, H)), \qquad (2)$$

где функция $q(\cdot) > 0$ определена по совокупности всех подмножеств из $\Re_1$, не содержащей $\varnothing$. Она является распределением вероятностей на этом пространстве элементарных событий, т.е.

$$\sum_{\varnothing \neq \sigma \subset \Re_1} q(\sigma) = 1.$$

Легко проверяется, что в этом случае $Q_m(\cdot|\cdot)$ действительно является условной вероятностью

$$\sum_{H \subset \Re_{m+1}: K_m(H) = G} Q_m(H\,|\,G) = 1,$$

а функции, определяемые (1), распределениями вероятностей на $2^{\Re_m}$, которые подчинены т.н. условию согласованности,

$$P_m(G) = \sum_{H: K_m(H) = G} P_{m+1}(H). \qquad (3)$$

В общем случае, совокупность всех функций $P_m(\cdot)$:m = 1, 2, ... , удовлетворяющих (3), определяет на множестве всех геометрических структур вероятностную меру. Тогда посредством таких наборов распределений можно описывать любые точечные случайные поля, в том числе и традиционно используемые в математической физике. Однако, использование такой математической конструкции наиболее удобно для задания стохастически самоподобных геометрических структур, в частности, в виде модели, определяемой формулой (2).

Укажем простейший класс моделей точечных случайных полей, задаваемых формулами (1), (2). Пусть $q(\sigma) = p(|\sigma|)$, где $|\sigma|$ – число элементов в σ и

$$p(l) = C\left(\frac{p}{1-p}\right)^l \cdot l^\alpha, \quad l = 1, 2, ..., N^d, \quad (4)$$

где $\alpha \geq 0$, $1 > p > 0$ и C определяется из условия нормировки

$$\sum_{l=1}^{N^d} p(l)\binom{N^d}{l} = 1.$$

Для случайных точечных полей с марковским измельчением удается доказать очень важную, с физической точки зрения, теорему [5], [6] о том, что фрактальная размерность

$$D = \sup\{\delta : \lim_{m\to\infty} \frac{|K_m(X)|}{N^{m\delta}} = 0\} \quad (5)$$

неслучайна и может быть вычислена по формуле

$$D = \frac{\ln \sum_{\varnothing\neq\sigma\subset\Re_1} |\sigma| q(\sigma)}{\ln N}. \quad (6)$$

При этом эффективно используется хорошо разработанный аппарат марковских ветвящихся случайных процессов [7]. В частности, для примера стохастического фрактала, задаваемого функцией (4) при α=1, находим

$$D = \frac{\ln(1 + p(N^d - 1))}{\ln N}.$$

Кроме того, поля с марковским измельчением обладают тем свойством, что на них может быть введена D-мера Хаусдорфа и тем самым определено понятие интеграла. В связи с этим, появляется возможность рассмотрения полей физических величин на таких стохастических пространственных структурах.

Стохастические фракталы на измельчениях с фиксированным базисом. Рассмотрим теперь расширение класса стохастических фракталов с марковским измельчением такое, при котором случайные реализации по-прежнему строятся на основе фиксированного измельчения пространства погружения Λ. Фиксация измельчения осуществляется заданием *базиса* – набора направляющих ортов для кубов $A^{(m)}_x$ и степенью дробления N. При этом функции распределения по-прежнему задаются формулами (1) и (2). Однако, в отличие от фракталов с марковским измельчением, функции $q(\cdot)$ в (2) заменяются на зависящие от масштаба функции $q_m(\cdot)$, причём таким образом, что сохраняется «память о прошлом», если логарифмическую шкалу масштабов рассматривать как временную. При этом для любого m ограничения реализации X на каждую из клеток $A^{(m-1)}_x$, $A^{(m)}_y$, где $x \in \Re_{m-1}$, $y \in \Re_m$ и $x = K_{m-1}(y)$ при переходе от масштаба L/N^m к масштабу $L/N^{(m+1)}$ не являются статистически независимыми, а связаны в марковскую цепь с некоторой матрицей условных вероятностей перехода

$$P(\sigma', \sigma) =$$
$$= \mathbf{P}\{ TS_m(\mathbf{y}, K_{m+1}(X)) = \sigma, | \; \mathbf{x} \in K_{m-1}(X), TS_{m-1}(\mathbf{x}, K_m(X)) = \sigma'\},$$

т.е.

$$q_{m+1}(\sigma) = \sum_{\varnothing\neq\sigma'\subset K_1} q_m(\sigma') P(\sigma', \sigma).$$

При этом построении мы предполагаем, что конструируемые стохастические фракталы должны быть пространственно однородны в среднем, т.е. они строятся «дроблением сплошной среды» каждый раз по некоторому стохастическому механизму, который не меняется при переходе от одной пространственной области к другой.

На стохастические фракталы описанного класса переносится техника их исследования, развитая в [5],[6]. Она позволяет, в частности, доказать формулу для математического ожидания числа клеток разбиения m-го порядка, покрывающих фрактал,

$$\langle| K_m(X) |\rangle = \prod_{l=1}^{m} \left(\sum_{\varnothing\neq\sigma\subset\Re_l} q_l(\sigma) | \sigma |\right). \quad (7)$$

Если стохастическая матрица $P(\cdot;\cdot)$ неразложима [8], [9], то для вероятностей состояния $q_m(\cdot)$; m = 0, 1, 2, ... марковской цепи, определяющей стохастический фрактал рассматриваемого класса, справедлива теорема Маркова [10], утверждающая, что для цепи существует однозначно определённое предельное распределение вероятностей

$$q(\sigma) = \lim_{m\to\infty} q_m(\sigma), \qquad \sigma \in \Re_1.$$

Это позволяет при исследовании свойств стохастического фрактала воспользоваться эффективным случайным полем с марковским измельчением, которое задаётся предельной функцией распределения $q(\cdot)$. В частности, при вычислении фрактальной размерности по формуле (5) получим

$$D = \lim_{m\to\infty} \frac{1}{m} \frac{\ln\langle |K_m(X)|\rangle}{\ln N} = \frac{1}{\ln N} \cdot \sum_{\varnothing \neq \sigma \subset \Re_1} |\sigma| q(\sigma).$$

Отсюда следует также, что на стохастических фракталах с фиксированным базисом можно ввести интеграл по D-мере Хаусдорфа.

Заключение. Отметим, что описанное выше расширение класса фракталов, допускающее их исследование на основе техники случайных ветвящихся процессов, достаточно для моделирования физических фрактальных структур в смысле учёта масштабных корреляций, т.к. реально при переходе от макроскопических размеров до микроскопических масштаб длины изменяется самое большее на восемь порядков, т.е. показатель m в выражении L/N^m может изменяться самое большее на восемь (при N ~ 10). Поэтому при моделировании не возникает необходимости строить такие точечные случайные поля, у которых сохраняется «память» между сколь угодно удалёнными друг от друга масштабами.

Вместе с тем, модели построенного класса обладают «нехорошими», с физической точки зрения, свойствами: они строятся посредством физически ничем не выделенной неслучайной сетки, задающей измельчение пространства погружения Λ на кубы $A_x^{(m)}$. В частности, по этой причине они не обладают стохастической изотропностью.

Библиографический список

1. The Beauty of Fractals. Images of Complex Dynamical Systems. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-NewYork, 1986, 173 p.

2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика, часть I, М.: Наука, 1976.

3. Займан Дж. Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем.- М.: Мир, 1982.

4. Virchenko Yu.P., Dulfan A.Ya., Model of Uniform Stochastic Fractal. Functional Materials **5**, № 4, 471 - 474 (1998).

5. Virchenko Yu.P., Shpilinskaya O.L., Random Point Fields with Markivian Refinements and the Gerometry of Fractally Disordered Media. Theor. and Mathem. Phys., **124**, № 3, 1273-1285 (2000).

6. Virchenko Yu.P., Shpilinskaya O.L., Stochastic Fractals with Markovian Refinements. Theor. and Mathem. Phys., **128**, № 2, 983-995 (2001).

7. Севастьянов Б.А. Ветвящиеся процессы.- М.: Наука, 1971.- 434с.

8. Gantmakher F.R. Applications of the Theory of Matrices. Wiley, New York, (1959).

9. Nummelin E. General irreducible Markov chains and nonnegative operators. Cambridge University Press, Cambridge, 1984.

10. Гнеденко Б.В. Курс теории вероятностей -М.: Наука.- 1969.