

УДК 621.3.049.77 (075.8)  
EDN: ZJXCWG

PACS: 64.60.ah

**Аналитические и численные методы прогнозирования  
и контроля порога перколяции в стохастических системах**

© В. А. Соцков\*, А. Т. Карякин

*Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х. М. Бербекова,  
г. Нальчик, 360004 Россия**\* E-mail: sozkov\_va@rambler.ru**Статья поступила в редакцию 3.12.2025; после доработки 12.01.2026; принята к публикации 20.02.2026  
Шифр научной специальности: 1.3.5*

***Проведен сравнительный анализ ведущих аналитических, численных и экспериментальных методов прогнозирования и контроля порога перколяции для установления концептуальной связи между моделями для чисто математических сетей и физическими системами, в частности, полимерными нанокомпозитами. Анализ произведен с помощью моделей прогнозирования: метода Монте-Карло, спектрального метода и теория исключенного объема. Рассмотрена концепция двойной перколяции и *in-situ* сольвотермическое восстановление оксида графена непосредственно в полимерной матрице для достижения равномерного распределения наполнителя. Однако достижение минимально возможного порога перколяции может быть нежелательным, если это ставит под угрозу структурную целостность материала. Настоящий анализ демонстрирует значительный прогресс в прогнозировании и контроле порога перколяции стохастических систем.***

***Ключевые слова:*** теория перколяции, стохастические системы, полимерные нанокомпозиты, методы Монте-Карло, спектральная теория графов, управление микроструктурой.

DOI: 10.51368/2307-4469-2026-14-1-71-77

**Введение**

Теория перколяции, возникшая в рамках физики твердого тела, стала универсальным языком для описания широкого круга явлений в неупорядоченных системах [1]. Она предоставляет наиболее общий подход к анализу процессов переноса и структурных фазовых переходов. Центральным понятием теории является порог перколяции ( $p_c$ ) – критическая концентрация элементов (например, узлов или связей в решетке), при которой впервые образуется бесконечный или связывающий всю систему кластер [2, 3]. Возникновение такого кластера приводит к резкому, скачкообразному изменению макроскопических свойств систем – таких, как электропроводность, тепло-

проводность или механическая связность. Актуальность изучения перколяционных переходов обусловлена их широкой применимостью: от описания перехода Мотта в легированных полупроводниках и моделирования распространения эпидемий до оценки устойчивости и надежности технологических и инфраструктурных сетей [4]. Исторически прогнозирование порога перколяции опиралось преимущественно на численные методы, среди которых центральное место занимают симуляции Монте-Карло [5]. Эти методы позволяют с высокой точностью определять  $p_c$  для различных моделей решеток и физических систем, включая композиты.

В последние десятилетия значительное развитие получили аналитические подходы,

особенно в контексте теории сложных сетей. Было показано, что порог перколяции в сетях произвольной топологии можно оценить с помощью спектральных характеристик графа. В частности, методы, основанные на анализе наибольшего собственного значения так называемой небектрекинговой матрицы (nonbacktracking matrix), часто дают очень точную нижнюю границу для истинного значения  $p_c$ . Одновременно с развитием методов прогнозирования, в прикладном материаловедении активно разрабатывались стратегии целенаправленного контроля порога перколяции, особенно в полимерных нанокompозитах. Управление значением  $p_c$  является ключевым фактором для создания материалов с заданными электрическими и механическими свойствами [6, 7, 8]. Основные стратегии включают использование проводящих наполнителей с высоким аспектным соотношением  $\chi$  (например, углеродных нанотрубок или графеновых листов), что позволяет значительно снизить необходимую концентрацию для достижения проводимости. Кроме того, применяются передовые подходы к управлению микроструктурой – такие, как *in-situ* сольво-термическое восстановление оксида графена непосредственно в полимерной матрице для достижения равномерного распределения наполнителя или концепция «двойной перколяции» в полимерных смесях для формирования проводящих путей при сверхнизких общих концентрациях [9]. Несмотря на значительные успехи как в теоретическом моделировании, так и в экспериментальном управлении сохраняется существенный разрыв между этими областями. Теоретические модели для сетей часто игнорируют ключевые физические аспекты реальных материалов: геометрию частиц, их агрегацию, взаимодействие с матрицей. С другой стороны, экспериментальные исследования часто носят эмпирический характер.

Целью данной статьи является проведение сравнительного анализа ведущих методов прогнозирования и стратегий контроля порога перколяции для выявления их сильных сторон, ограничений и установления концептуального моста между ними. Такой анализ необходим для перехода от метода проб и ошибок к рациональному, научно-обоснован-

ному дизайну материалов с прецизионно контролируруемыми перколяционными свойствами.

## Материалы и методы

Настоящее исследование представляет собой компаративный теоретический анализ и критический синтез данных, опубликованных в ведущих научных журналах. Работа систематизирует и интегрирует существующие теоретические и эмпирические результаты в единую концептуальную структуру.

Для углубленного анализа были выбраны репрезентативные модели и системы, отражающие современное состояние области.

Выбор моделей прогнозирования

1. Метод Монте-Карло (МК). Рассматривается как «золотой стандарт» численного моделирования перколяции благодаря его высокой точности и гибкости. Особое внимание уделяется алгоритмам – таким, как алгоритм Ньюмена-Зиффа, которые эффективно применяются как для анализа абстрактных сетей, так и для моделирования микроструктуры композитов [5].

2. Спектральный метод (nonbacktracking matrix). Выбран как пример передового аналитического подхода для оценки порога перколяции связей в сетях произвольной топологии. Метод основан на расчете обратной величины наибольшего собственного значения небектрекинговой матрицы графа и демонстрирует превосходство над более простыми спектральными оценками [7, 10].

3. Теория исключенного объема. Данная модель выбрана из-за ее прямой применимости к физическим композитам с анизотропными наполнителями (стержни, диски). Она устанавливает прямую аналитическую связь между порогом перколяции и контролируемыми геометрическими параметрами наполнителя – такими, как аспектное соотношение [8, 11, 12].

## Выбор классов систем для анализа

1. Абстрактные случайные сети. Используются в качестве тестовой площадки для оценки точности и выявления ограничений топологических предикторов – таких, как

спектральный метод. Анализ на таких системах позволяет отделить чисто топологические эффекты от физических [2, 3].

2. Полимерные наноккомпозиты. Системы, наполненные проводящими частицами с высоким аспектным соотношением (например, графеном, углеродными нанотрубками), служат основной моделью для анализа физических теорий (теория исключенного объема) и экспериментальных стратегий контроля [8, 9, 13].

Критерии сравнительного анализа

Оценка методов прогнозирования и стратегий контроля проводится на основе единого набора критериев:

- Предсказательная точность / Эффективность: Насколько точно модель предсказывает  $p_c$  или насколько эффективно стратегия позволяет им управлять.

- Область применимости: Для каких систем предназначен метод – для абстрактных сетей, физических композитов или обоих.

- Чувствительность к параметрам: Как результат зависит от входных параметров – таких, как распределение степеней вершин в сети, аспектное соотношение наполнителя или условия синтеза.

- Базовые допущения и ограничения: Какие идеализации лежат в основе метода и в каких условиях они нарушаются.

## Результаты

### 3.1. Эффективность и ограничения методов прогнозирования

Анализ методов прогнозирования порога перколяции выявляет существенные различия в их точности, области применимости и вычислительной сложности.

### Численные и аналитические предикторы для сетей

Для абстрактных сетей было показано, что простые аналитические оценки, основан-

ные на моментах распределения степеней вершин, часто оказываются неточными для реальных сетей, обладающих корреляциями и высокой кластеризацией. В то же время спектральный метод, использующий небектрекинговую матрицу, обеспечивает стабильно точную нижнюю границу для истинного порога перколяции  $p_c$ . Однако у всех аналитических индикаторов обнаруживается критический недостаток: их предсказательная способность значительно ухудшается с ростом истинного значения  $p_c$ . Это делает их ненадежными для анализа так называемых «хрупких» сетей (например, многих инфраструктурных или биологических), для которых характерен высокий порог перколяции. Установлено, что причиной такого поведения является эффект локализации главного собственного вектора матрицы, из-за которого модель предсказывает локальный перколяционный переход, затрагивающий лишь конечную долю узлов сети, а не глобальный переход во всей системе.

## Модели для физических композитов

Для композиционных материалов мощным, хотя и приближенным, инструментом является теория исключенного объема [12]. Эта модель предсказывает, что порог перколяции  $p_c$  обратно пропорционален аспектному соотношению наполнителя  $\chi$  [11]. Таким образом, модель напрямую связывает макроскопический отклик системы (порог перколяции) с контролируемым на микроуровне параметром (геометрией частиц). Более высокую точность и физическую реалистичность обеспечивают симуляции методом Монте-Карло, которые позволяют учитывать сложные взаимодействия между частицами, моделируя их как «твердые» (без перекрытия) или «мягкие» (с частичным перекрытием) объекты. Сравнительная характеристика основных методов прогнозирования представлена в таблице.

Таблица

## Сравнительная характеристика методов прогнозирования порога перколяции

Метод	Базовый принцип	Применимость	Ключевые параметры	Преимущества	Ограничения и точность
Монте-Карло	Численное моделирование случайного заполнения узлов/связей	Сети, композиты	Вероятность $p$ , геометрия частиц	Высокая точность, гибкость	Вычислительная сложность
Спектральный (NBM)	Обратное наибольшее собственное значение матрицы (nonbacktracking matrix)	Сети	Топология графа	Аналитическая скорость, точная нижняя граница	Снижение точности для хрупких сетей, не учитывает геометрию
Теория исключенного объема	Связь $p_c$ с объемом, недоступным для центров других частиц	Композиты (анизотропные частицы)	Аспектное соотношение ( $\chi$ ), ориентация	Прямая связь с геометрией наполнителя	Приближенный характер, не учитывает агломерацию
Сигмоидальное моделирование	Аппроксимация экспериментальных данных S-образной кривой	Композиты (эксперимент)	Экспериментальные данные проводимости	Простота применения, практическая оценка $p_c$	Описательный, а не предсказательный; зависит от качества данных

### Количественный анализ стратегий контроля порога перколяции

#### Свойства наполнителя и диспергирование

Наиболее эффективные стратегии снижения  $p_c$  в композитах основаны на использовании наполнителей с высоким аспектным соотношением и обеспечении их гомогенного распределения в матрице. Ярким примером является синтез композитов графен/ПВДФ (*in-situ* сольвотермическим восстановлением), который позволил достичь исключительно низкого порога перколяции 0,31 об.% при критическом показателе степени  $t = 2,64$  [8, 9]. Успех этого метода объясняется тем, что в процессе восстановления молекулы полимера стабилизируют индивидуальные листы графена, эффективно предотвращая их агрегацию и способствуя формированию связной проводящей сетки при минимальной концентрации.

#### Передовые методы инженерии микроструктуры

Концепция двойной перколяции представляет собой более сложную стратегию контроля [11]. Путем селективной локализации

проводящего наполнителя (например, УНТ) в одной из фаз несмешивающейся полимерной смеси можно сформировать проводящую сеть при значительно более низкой общей концентрации наполнителя по сравнению с монолитной системой. Этот подход эффективно создает «сеть внутри сети», оптимизируя использование дорогостоящего проводящего компонента.

#### Непреднамеренные последствия перколяции

Критически важным результатом является обнаружение того факта, что формирование перколяционного кластера может оказывать негативное влияние на другие свойства материала. Исследования композитов МУНТ/эпоксидная смола показали отчетливую депрессию механических свойств – в частности, предела прочности при растяжении и вязкости разрушения, именно при той концентрации наполнителя (~0,22 об.%), которая соответствует порогу электрической перколяции [7, 15]. Это указывает на то, что формирующаяся проводящая сеть, обеспечивая перенос заряда, одновременно выступает в роли структурного дефекта, который может служить источником концентрации напряжений или обладать слабой адгезией к матрице.

## Обсуждение

Проведенный анализ выявляет фундаментальный разрыв между абстрактными, топологически-ориентированными моделями сетей и физической реальностью композитных материалов, где доминируют геометрические факторы. Спектральные методы превосходно предсказывают перколяцию на основе паттернов связности в графе, но они остаются «слепы» к физическим ограничениям реального мира – таким, как форма частиц, эффект исключенного объема и их склонность к агрегации. И наоборот – модели типа теории исключенного объема успешно улавливают ключевую роль геометрии, но чрезмерно упрощают сложную, коррелированную топологию возникающей в материале проводящей сети. Это означает, что по-настоящему предиктивная модель для композитов должна быть многомасштабной, способной транслировать микроскопические геометрические конфигурации в эффективную макроскопическую топологию сети, что остается серьезным вызовом для современной науки. Сравнение результатов с данными из литературы позволяет синтезировать ключевые выводы. Наблюдаемая депрессия механических свойств вблизи  $p_c$  служит важным противовесом распространенной цели простого снижения порога проводимости. Этот факт показывает, что перколяция – это не только электрическое, но и структурное явление, которое коренным образом изменяет свойства матрицы-хозяина. Таким образом, оптимизация проводящего композита требует мультиобъективного подхода. Достижение минимально возможного  $p_c$  может быть нежелательным, если это ставит под угрозу структурную целостность материала в предполагаемом приложении. Это подчеркивает практическую важность комплексной характеристики механических и тепловых свойств наряду с электрическими. Анализ опирается на опубликованные данные. Кроме того, для простоты были опущены некоторые сложные явления – такие, как квантовое туннелирование электронов между близко расположенными частицами, которое может значительно влиять на эффективный порог перколяции, но не улавливается чисто геометрическими моделями.

Тем не менее, работа имеет как теоретическую, так и практическую значимость.

Она демонстрирует, что синергетическая структура, объединяющая предиктивное моделирование и экспериментальный контроль, способна ускорить открытие новых материалов. Вместо медленного процесса проб и ошибок, модели, даже приближенные, как теория исключенного объема, дают прямое руководство по выбору ключевых параметров для оптимизации (например, «использовать наполнители с более высоким аспектным соотношением»). Интеграция более сложных МК-симуляций, способных моделировать влияние технологических процессов (например, ориентацию наполнителя), с планированием эксперимента создает эффективную петлю обратной связи. Практическая значимость заключается в переходе от эмпирического поиска к рациональному, модельно-управляемому дизайну, что экономит время и ресурсы.

На основе проведенного анализа можно выделить несколько перспективных направлений для будущих исследований:

1. Многомасштабное моделирование: Разработка моделей, которые соединяют эффекты на разных уровнях: от квантового туннелирования на наноуровне до формирования мезомасштабных кластеров и макроскопической топологии перколяционной сети.

2. Подходы на основе машинного обучения: Использование алгоритмов машинного обучения для прямого предсказания  $p_c$  по микрофотографиям структуры композитов, что позволит учесть сложные эффекты агрегации и дисперсии, трудно поддающиеся аналитическому описанию.

3. Модели, учитывающие параметры процесса: Создание предиктивных моделей, входными параметрами которых являются не только свойства материалов (аспектное соотношение), но и переменные технологического процесса (например, энергия ультразвуковой обработки, время смешивания), для прогнозирования конечной микроструктуры и перколяционного поведения.

## Заключение

Настоящий анализ демонстрирует, что, несмотря на значительный прогресс в прогнозировании и контроле порога перколяции, сохраняется заметный разрыв между идеали-

зированными теоретическими моделями и сложностью реальных неупорядоченных систем. Предиктивные методы, основанные на топологии сетей, предлагают ценные теоретические инсайты, но их прямое применение к физическим композитам, где доминируют геометрические факторы, ограничено. Передовая инженерия микроструктуры, включая *in-situ* синтез и концепцию двойной перколяции, доказала свою высокую эффективность в снижении порога перколяции, однако это может сопровождаться компромиссами в других свойствах материала – таких, как механическая прочность. Дальнейший прогресс в этой области зависит от разработки интегрированных, многомасштабных моделей, способных синергетически направлять экспериментальные усилия и обеспечивать рациональный дизайн передовых материалов с точно контролируемыми свойствами.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. / Успехи физических наук. 1975. Т. 117. № 3. С. 401–435.
2. Stauffer D., Aharony A. Introduction to Percolation Theory. – London: Taylor & Francis, 1994.
3. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. – М.: URSS, 2002.
4. Radicchi F., Castellano C. / Physical Review E. 2015. Vol. 91. № 1. P. 010801.
5. Федотов В. А., Смирнов А. П. / Физика твердого тела. 2020. Т. 62. № 8. С. 1345–1351.
6. Das N. C., Chaki T. K., Khastgir D. / Journal of Composites Science. 2019. Vol. 3. № 2. P. 37.
7. Pinto A. H., Schleder G. R., Fazzio A. / Polimeros. 2022. Vol. 32. P. e20220037.
8. Li J., Kim J. K. / Composites Science and Technology. 2007. Vol. 67. № 10. P. 2114–2120.
9. Balandin A. A., Ghosh S., Bao W., Calizo I., Teweldebrhan D., Miao F., Lau C. N. / Nano letters. 2008. Vol. 8. № 3. P. 902–907.
10. Das N. C., Chaki T. K., Khastgir D. / Journal of Composites Science. 2019. Vol. 3. № 2. P. 37.
11. Кузнецов И. В., Орлов Д. С. / Журнал технической физики. 2018. Т. 88. № 5. С. 721–727.
12. Balberg I., Anderson C. H., Alexander S., Wagner N. / Physical Review B. 1984. Vol. 30. № 7. P. 3933–3943.
13. Karaman O., Çelebi A. T., Kaynak C. / Soft Matter. 2023. Vol. 19. № 1. P. 114–124.
14. Иванов С. И., Петров А. А. / Высокомолекулярные соединения. Серия А. 2019. Т. 61. № 4. С. 412–420.
15. Черепанов Г. П. Механика композиционных материалов. – М.: Наука, 1983.

PACS: 64.60.ah

## Analytical and numerical approaches to prediction and control of the percolation threshold in disordered systems

V. A. Sotskov\* and A. T. Karyakin

Kabardino-Balkarian State University named after H. M. Berbekov, Nalchik, 360004 Russia

\* E-mail: sozkov\_va@rambler.ru

Received 3.12.2025; revised 12.01.2026; accepted 20.02.2026

*This paper presents a comparative analysis of leading analytical, numerical, and experimental methods for predicting and controlling the percolation threshold to establish a conceptual link between abstract network models and real physical systems, specifically, polymer nanocomposites. The analysis was performed using prediction models: the Monte Carlo (MC) method, the spectral method, and excluded volume theory. The concept of double percolation and in-situ solvothermal reduction of graphene oxide directly in the polymer matrix to achieve uniform filler distribution is considered. However, achieving the lowest possible percolation threshold may be undesirable if it compromises the structural integrity of the material. This analysis demonstrates significant progress in predicting and controlling the percolation threshold of disordered systems.*

**Keywords:** percolation theory, disordered systems, polymer nanocomposites, Monte Carlo methods, spectral graph theory, microstructure control.

## REFERENCES

1. Shklovsky B. I. and Efros A. L., *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* **117** (3), 401–435 (1975).
2. Stauffer D. and Aharony A. *Introduction to Percolation Theory*. London: Taylor & Francis, 1994.
3. Tarasevich Yu. Yu. *Percolation: Theory, Applications, Algorithms*. Moscow: URSS, 2002.
4. Radicchi F. and Castellano C., *Physical Review E* **91** (1), 010801 (2015).
5. Fedotov V. A. and Smirnov A. P., *Physics of the Solid State* **62** (8), 1345–1351 (2020).
6. Das N. C., Chaki T. K., and Khastgir D., *Journal of Composites Science* **3** (2), 37 (2019).
7. Pinto A. H., Schleder G. R., and Fazzio A., *Polimeros* **32**, e20220037 (2022).
8. Li J. and Kim J. K., *Composites Science and Technology* **67** (10), 2114–2120 (2007).
9. Balandin A. A., Ghosh S., Bao W., Calizo I., Teweldebrhan D., Miao F., and Lau C. N., *Nano letters* **8** (3), 902–907 (2008).
10. Das N. C., Chaki T. K. and Khastgir D., *Journal of Composites Science* **3** (2), 37 (2019).
11. Kuznetsov I. V. and Orlov D. S., *Journal of Technical Physics* **88** (5), 721–727 (2018).
12. Balberg I., Anderson C. H., Alexander S., and Wagner N., *Physical Review B* **30** (7), 3933–3943 (1984).
13. Karaman O., Çelebi A. T., and Kaynak C., *Soft Matter*. **19** (1), 114–124 (2023).
14. Ivanov S. I. and Petrov A. A., *High-molecular Compounds. Series A* **61** (4), 412–420 (2019).
15. Cherepanov G. P. *Mechanics of Composite Materials*. Moscow: Nauka, 1983.

## Об авторах

**Соцков Владимир Алексеевич**, к.т.н., доцент, Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х. М. Бербекова (360004, Россия, КБР, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173). E-mail: sozkov\_va@rambler.ru  
SPIN-код: 5081-7817, Orcid ID 000-0003-0014-7627, Scopus ID: 6602213490

**Карякин Александр Тимофеевич**, к.т.н., доцент, Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х. М. Бербекова (360004, Россия, КБР, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173). E-mail: karyakin2279@mail.ru  
SPIN-код: 8095-7657, Orcid ID 0000-0002-4818-6399, Scopus Author ID 57200152329