实验一 渗透问题 (Percolation)

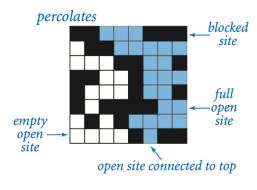
一、实验目的

使用合并-查找(union-find)数据结构,编写程序通过蒙特卡罗模拟(Monte Carlo simulation)来估计渗透阈值的值。

二、内容描述

给定由随机分布的绝缘材料和金属材料构成的组合系统:金属材料占多大比例才能使组合系统成为电导体?给定一个表面有水的多孔渗水地形(或下面有油),水将在什么条件下能够通过底部排出(或油渗透到表面)?科学家们已经定义了一个称为渗透(percolation)的抽象过程来模拟这种情况。

如图 1.2.1 所示,我们使用 N×N 网格点来模型一个渗透系统。 每个格点或是 open 格点或是 blocked 格点。一个 full site 是一个 open 格点,它可以通过一连串的邻近(左,右,上,下)open 格点连通到顶行的一个 open 格点。如果在底行中有一个 full site 格点,则称系统是渗透的。(对于绝缘/金属材料的例子,open 格点对应于金属材料,渗透系统有一条从顶行到底行的金属路径,且 full sites 格点导电。对于多孔物质示例,open 格点对应于空格,水可能流过,从而渗透系统使水充满 open 格点,自顶向下流动。



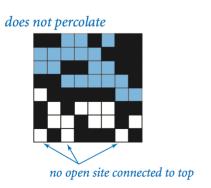
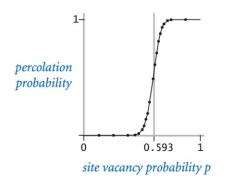


图 1.2.1

在上述模型中,我们将格点以空置概率 p 独立地设置为 open 格点(因此以概率 1-p 被设置为 blocked 格点)。当 p=0 时,系统不会渗出;当 p=1 时,系统渗透。图 1.2.2 显示了 20×20 随机网格(左)和 100×100 随机网格(右)的格点空置概率 p 与渗滤概率。



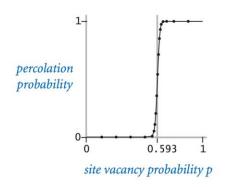


图 1.2.2

当 N 足够大时,存在阈值 p^* ,使得当 $p < p^*$,随机 $N \times N$ 网格几乎不会

渗透,并且当 p> p*时,随机 N×N 网格几乎总是渗透。尚未得出用于确定渗滤阈值 p*的数学解。本次实验要求编写一个计算机程序来估计 p*。

三、模拟方法

本次实验,我们使用蒙特卡洛模拟来估计渗透阈值。蒙特卡洛模拟的步骤如下:

- 初始化所有格点为 blocked;
- 重复以下操作直到系统渗出:
 - 在所有 blocked 的格点之间随机均匀选择一个格点(row i, column j);
 - 设置这个格点(row i, column j)为 open 格点;

我们利用 open 格点的比例来估计系统渗透时的渗透阈值。例如,如果在 20×20 的网格中,如果我们测得当第 204 个格点被 open 时系统渗透,那么对渗滤阈值的估计是 204/400 = 0.51。

通过重复该计算实验 T 次并对结果求平均值,可以获得了更准确的渗滤阈值估计。

同时, 我们利用公式

$$\mu = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_T}{T}, \quad \sigma^2 = \frac{(x_1 - \mu)^2 + (x_2 - \mu)^2 + \dots + (x_T - \mu)^2}{T - 1}$$

以及公式

$$\left[\mu - \frac{1.96\sigma}{\sqrt{T}}, \mu + \frac{1.96\sigma}{\sqrt{T}}\right]$$

可以求得渗滤阈值提供95%置信区间。

四、具体实现

1. Percolation 系统模型化

模型化一个 Percolation 系统, 创建含有以下 API 的数据类型 Percolation。

```
public class Percolation {
      // 建立一个 N×N 的网格, 初始化为 block 状态
       public Percolation(int n)
3.
      // open 函数将网格从 block 变为 open 状态
       public void open(int row, int col)
5.
       // 判断网格 (row, col) 是否为 open 状态
       public boolean isOpen(int row, int col)
      // 判断网格 (row, col) 是否为 full 状态
9.
       public boolean isFull(int row, int col)
10.
      // 返回 open sites 数量
11.
       public int numberOfOpenSites()
       // 判断系统是否渗透
12.
13.
       public boolean percolates()
14.
       // 主函数
       public static void main(String[] args)
15.
16. }
```

其中,若网格(row, col)与顶部连通,则称该网格处于 full 状态。

a) Percolation 函数

```
public Percolation(int n) {
           if (n <= 0) {
2.
3.
               throw new IllegalArgumentException("n 必须大于 0! ");
4.
5.
           this.n = n;
6.
           virtualtop = 0;//顶部虚节点存在数组头部
7.
           virtualbtm = n * n + 1; //底部虚节点存在数组尾部
           virtualQU = new WeightedQuickUnionUF(n * n + 2);
8.
           realQU = new WeightedQuickUnionUF(n * n + 1);
10.
           isOpen = new boolean[n * n + 2];
11.
           isOpen[virtualtop] = true;
12.
           isOpen[virtualbtm] = true;//2 个虚节点均置为 open
13. }
```

在 Percolation 函数中通过传入参数 n 建立一个 n×n 的数组,分别建立大小为 n×n+2 和 n×n+1 的 QuickUnion 对象。其中建立大小为 n×n+1 的 QuickUnion 对象是为了解决回溯(backwash)问题,这会在后面探讨。

b) Open()函数

```
public void open(int row, int col) {
2.
         int curIndex = linearIndex(row, col);
3.
         isOpen[curIndex] = true;
4.
         openCount++;
5.
         if (row == 1) {//第1行
6.
7.
             virtualQU.union(curIndex, virtualtop);
8.
            realQU.union(curIndex, virtualtop);
9.
10.
         if (row == n) {//最后一行
11.
            virtualQU.union(curIndex, virtualbtm);
12.
13.
        neighborConnect(row, col, row - 1, col); // 上
14.
         neighborConnect(row, col, row + 1, col); // 下
15.
         neighborConnect(row, col, row, col - 1); // 左
         neighborConnect(row, col, row, col + 1); // 右
16.
17. }
```

c) isopen()函数

```
1. public boolean isOpen(int row, int col) {
2.     return isOpen[linearIndex(row, col)];
3. }
```

d) isfull()函数

```
    public boolean isFull(int row, int col) {
    return realQU.connected(virtualtop,linearIndex(row, col)
    //必须用 realQU 判断而不能用 virtualQU, 否则出现 backwash 现象
    }
```

这里用了大小为 n×n+1 的 QuickUnion 对象来判断 isfull,是因为如果将虚拟底部节点(virtualbottom)算进来,那么实际未和顶部连通的方块可以通过虚拟底部节点(virtualbottom)与顶部连通。

e) Numberofopensites()函数

```
1. public int numberOfOpenSites() {
2.     return openCount;
3. }
```

f) Percolates()函数

```
    public boolean percolates() {
    return virtualQU.connected(virtualtop, virtualbtm);
    //判断渗透用 virtualQU 判断
    }
```

2. PercolationStats 测试模型

我们创建数据类型 PercolationStats 来执行一系列计算实验,包含以下 API:

```
public class PercolationStats {
       // perform independent trials on an n-by-n grid
3.
        public PercolationStats(int n, int trials)
       // sample mean of percolation threshold
4.
       public double mean()
       // sample standard deviation of percolation threshold
6.
       public double stddev()
        // low endpoint of 95% confidence interval
8.
9.
       public double confidenceLo()
10.
        // high endpoint of 95% confidence interval
       public double confidenceHi()
11.
12.
       // test client (see below)
13.
      public static void main(String[] args)
14. }
```

此外,还包括一个 main()方法,它取两个命令行参数 N 和 T,在 N×N 网格上进行 T 次独立的计算实验(上面讨论),并打印出均值、标准差和 95%渗透阈值的置信区间。

a) PercolationStats()函数

```
public PercolationStats(int n, int trials) {
2.
           if (n <= 0) {
3.
               throw new IllegalArgumentException("必须大于 0");
4.
5.
           if (trials <= 0) {
               throw new IllegalArgumentException("必须大于 0");
6.
8.
           fractions = new double[trials];
9.
           for (int i = 0; i < trials; i++) {</pre>
10.
           //进行 trials 次随机实验
11.
               Percolation percolation = new Percolation(n);
               int openedSites = 0;
12.
13.
               while (!percolation.percolates()) {
14.
               //每次开1个方块直到 percolates 为止
                   int row = StdRandom.uniform(n) + 1;
15.
                   int col = StdRandom.uniform(n) + 1; //随机 open
16.
17.
                   if (!percolation.isOpen(row, col)) {
                       percolation.open(row, col);
18.
19.
                       openedSites++;//每开1个格子 opensites 加1
20.
21.
               fractions[i] = openedSites * 1.0 / (n * n);
22.
              //恰好渗透时 open 的格子数比例
23.
           }
24.
25. }
```

b) Mean()函数

```
1. public double mean() {
2.     return StdStats.mean(fractions);
3. }
```

c) Stddev()函数

```
1. public double stddev() {
2.     return StdStats.stddev(fractions);
3. }
```

d) confidenceLo()函数

```
1. public double confidenceLo() {
2.     return mean() - CONFIDENCE_95 * stddev()
3. }
```

e) confidenceHi()函数

```
1. public double confidenceHi() {
2.    return mean() + CONFIDENCE_95 * stddev()
3. }
```

五、源代码

Percolation.java:

```
    import edu.princeton.cs.algs4.StdOut;

import edu.princeton.cs.algs4.WeightedQuickUnionUF;
3.
4. public class Percolation {
       private final WeightedQuickUnionUF realQU;//不包含 virtual bottom
6.
7.
       private final WeightedQuickUnionUF virtualQU;//包含 2 个虚节点
       private final boolean[] isOpen;//方块的状态参数
8.
       private final int virtualtop;//顶部虚节点
10.
       private final int virtualbtm;//底部虚节点
11.
       private final int n;
12.
       private int openCount;
13.
       public Percolation(int n) {
14.
           if (n <= 0) {
15.
               throw new IllegalArgumentException("n 必须大于 0! ");
16.
17.
           this.n = n;
           virtualtop = 0;//顶部虚节点存在数组头部
18.
           virtualbtm = n * n + 1;//底部虚节点存在数组尾部
19.
           virtualQU = new WeightedQuickUnionUF(n * n + 2);
20.
21.
           realQU = new WeightedQuickUnionUF(n * n + 1);
22.
           isOpen = new boolean[n * n + 2];
23.
           isOpen[virtualtop] = true;
           isOpen[virtualbtm] = true;//2 个虚节点均置为 open
24.
25.
26.
       //将二维下标转化为一维下标
27.
28.
       private int linearIndex(int row, int col) {
29.
           if (row < 1 || row > n) {
30.
               throw new IndexOutOfBoundsException("行越界!");
31.
32.
           if (col < 1 || col > n) {
               throw new IndexOutOfBoundsException("列越界!");
33.
```

```
34.
35.
           return (row - 1) * n + col;
36.
37.
38.
       public void open(int row, int col) {
39.
           int curIndex = linearIndex(row, col);
40.
            isOpen[curIndex] = true;
41.
           openCount++:
42.
43.
           if (row == 1) {//第1行
44.
                virtualQU.union(curIndex, virtualtop);
45.
                realQU.union(curIndex, virtualtop);
46.
47.
           if (row == n) {//最后一行
48.
                virtualQU.union(curIndex, virtualbtm);
49.
50.
           neighborConnect(row, col, row - 1, col); // ⊥
51.
           neighborConnect(row, col, row + 1, col); // 下
52.
           neighborConnect(row, col, row, col - 1); // 左
53.
           neighborConnect(row, col, row, col + 1); // 右
54.
55.
       //将 a 与 open 的邻居相连接
56.
57.
        private void neighborConnect(int rowA, int colA, int rowB, int colB) {
           if (0 < rowB && rowB <= n && 0 < colB && colB <= n
58.
59.
                    && isOpen(rowB, colB)) {
60.
                virtualQU.union(linearIndex(rowA, colA), linearIndex(rowB, colB));
61.
                realQU.union(linearIndex(rowA, colA), linearIndex(rowB, colB));
62.
           }
63.
        //计数
64.
       public int numberOfOpenSites() {
65.
66.
           return openCount;
67.
68.
69.
70.
       public boolean isOpen(int row, int col) {
71.
           return isOpen[linearIndex(row, col)];
72.
73.
74.
       public boolean isFull(int row, int col) {
75.
           return realQU.connected(virtualtop, linearIndex(row, col));
76. //必须用 realQU 判断而不能用 virtualQU,否则出现 backwash 现象
77.
78.
79.
       public boolean percolates() {
           return virtualQU.connected(virtualtop, virtualbtm);//判断渗透用 virtualQU
80.
   判断
81.
82.
83.
       public static void main(String[] args) {
           StdOut.println("请运行 PercolationStats 程序!");
84.
85.
86. }
87.
```

PercolationStats.java:

```
1. import edu.princeton.cs.algs4.StdOut;
2. import edu.princeton.cs.algs4.StdRandom;
3. import edu.princeton.cs.algs4.StdStats;
4.
5.
6. public class PercolationStats {
7.
8. private final double[] fractions;
9. private final double CONFIDENCE_95 = 1.96;
```

```
10.
       public PercolationStats(int n, int trials) {
11.
           if (n <= 0) {
12.
               throw new IllegalArgumentException("n 必须大于 0! ");
13.
14.
           if (trials <= 0) {
15.
               throw new IllegalArgumentException("trials 必须大于 0! ");
16.
           fractions = new double[trials];
17.
18.
           for (int i = 0; i < trials; i++) {//进行 trials 次随机实验
               Percolation percolation = new Percolation(n);
19.
20.
               int openedSites = 0;
               while (!percolation.percolates()) {//每次开1个方块直到 percolates
21.
                   int row = StdRandom.uniform(n) + 1;
22.
23.
                    int col = StdRandom.uniform(n) + 1; //随机 open 方块
24.
                    if (!percolation.isOpen(row, col)) {
25.
                        percolation.open(row, col);
                       openedSites++;//每开1个格子 opensites 加1
26.
27.
                   }
28.
29.
               fractions[i] = openedSites * 1.0 / (n * n);//恰好渗透 open 的格子比例
30.
           }
       }
31.
32.
       //*p 均值
33.
       public double mean() {
34.
           return StdStats.mean(fractions);
35.
36.
37.
38.
       //标准偏差
39.
       public double stddev() {
40.
           return StdStats.stddev(fractions);
41.
42.
43.
       //置信区间
44.
       public double confidenceLo() {
45.
           return mean() - CONFIDENCE_95 * stddev() / Math.sqrt(fractions.length);
46.
47.
48.
49.
       public double confidenceHi() {
           return mean() + CONFIDENCE 95 * stddev() / Math.sqrt(fractions.length);
50.
51.
52.
53.
54.
       public static void main(String[] args) {
55.
56.
           int n = Integer.parseInt(args[0]);
57.
           int trials = Integer.parseInt(args[1]);
58.
           PercolationStats stats = new PercolationStats(n, trials);
59.
60.
           StdOut.println("mean
                                                    = " + stats.mean());
           StdOut.println("stddev
                                                    = " + stats.stddev());
61.
           StdOut.println("95\% confidence interval = "
62.
63.
                                  + stats.confidenceLo() + ", "
64.
                                   + stats.confidenceHi());
65.
       }
66. }
```

六、实验结果

输入: 200 100

mean = 0.5947457499999999 stddev = 0.010452860185039303

95% confidence interval = 0.5926969894037322, 0.5967945105962675

Process finished with exit code 0

输入: 200 100

mean = 0.59324125

stddev = 0.010217876105560578

95% confidence interval = 0.5912385462833102, 0.5952439537166899

Process finished with exit code 0

输入: 210000

mean = 0.668525

stddev = 0.11718339289231955

95% confidence interval = 0.6662282054993106, 0.6708217945006895

Process finished with exit code 0

输入: 2100000

mean = 0.6664675

stddev = 0.11792194664108388

95% confidence interval = 0.6657366122024869, 0.6671983877975131

Process finished with exit code θ

七、实验总结

本次实验主要考察了 quickfind()、quickunion()方法在连通问题上的使用。实验过程中把握住以下两点即可较为容易的完成实验。

模型-算法抽象。在实验中将是否渗透问题转化为连通问题。巧妙地借助两个虚拟结点便将系统渗透等价为了两结点连通。

阈值估计模型。每个网格开放的概率 p 是抽象的,不好在实验中控制。 因此,利用蒙特卡洛模型将阈值 p*转化为恰好渗透时 open 的格子数与总格 子数之比,这样便可形象地估计出阈值 p*。

掌握了以上两点,问题便迎刃而解了,剩余的便是利用算法课程所学习的 quick union 算法编写程序了。