Modelowanie perkolacji metodą Monte Carlo – Obliczanie progu perkolacji

Oleh Kiprik, Yahor Kachanouski

22 stycznia 2025

Spis treści

1 Perkolacja

Perkolacja to podstawowa koncepcja w fizyce statystycznej i matematyce, która bada powstawanie i zachowanie połączonych klastrów w systemach losowych. Pozwala zrozumieć, w jaki sposób rozmieszczenie poszczególnych komponentów w sieci może prowadzić do pojawienia się łączących klastrów na dużą skalę. Głównym pytaniem w teorii perkolacji jest to, czy klaster łączący taki, który łączy przeciwległe strony systemu, może powstać, gdy losowość systemu jest zdefiniowana.

Perkolacja obejmuje dwa kluczowe procesy: perkolację wierzchołków i perkolację krawędzi. W przypadku perkolacji wierzchołków, wierzchołki sieci są losowo zajmowane lub niezajmowane w oparciu o prawdopodobieństwo p. W przypadku perkolacji krawędziowej, między sąsiednimi wierzchołkami krawędzie są tworzone niezależnie z prawdopodobieństwem p.

Ponieważ p rośnie, prawdopodobieństwo utworzenia większych klastrów rośnie, a po przekroczeniu krytycznego progu p_c prawie na pewno pojawi się klaster łączący odległe części systemu. Przejście to następuje szybko z tego powodu jest często porównywane do przejść fazowych w układach fizycznych, takich jak przejście między stanem ciekłym i stałym.

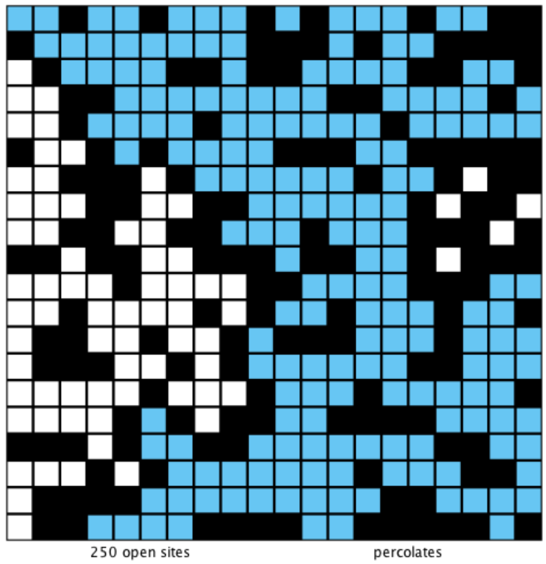
Teoria perkolacji nie jest jedynie abstrakcyjną konstrukcją matematyczną, ona znajduje zastosowanie w wielu rzeczywistych zjawiskach. Przykłady obejmują zrozumienie przepływu płynów przez materiały porowate, przewidywanie rozprzestrzeniania chorób w populacjach, modelowanie przewodnictwa elektrycznego w materiałach kompozytowych, a nawet analizowanie odporności sieci komunikacyjnych.

2 Przykłady

2.1 Perkolacja wierzchołkowa

Zobaczymy jak wygląda najprostrza perkolacja wierzchołkowa w praktyce:

Zdefiniujemy siatkę NxN, w której zaznaczymy klatkę na czarno o ile jest ona zablokowana, i na biało o ile jest wolna, liczymy że przepływ może przychodzić tylko do wolnych sąsiadujących (lewo, prawo, góra, dół) klatek, będziemy szukać przepływu z góry do dołu, czyli definiujemy klaster w którym znajduje się każdy górny wierzchołek i wierzchowłki do których da się dojść, mówimy, że istnieje perkolacja, kiedy taki klaster zawiera chociażby jeden wierzchołek dolnej linii.



Rysunek 1: Prosta perkolacja wierzchołkowa

Rysunek 2: Prosta perkolacja wierzchołkowa

Na rysunkach 1 i 2 widzimy udaną perkolację.

3 Nieskończony klaster

Często sprawdzenie, czy istnieje perkolacja, przetwarza się w pytanie: czy istnieje nieskończony otwarty klaster, czyli czy istnieje ścieżka połączonych punktów w sieci, długość której jest nieskończona.

Zgodnie z zero-jedynkowym prawem Kołmogorowa, dla dowolnego p, prawdopodobieństwo istnienia nieskończonego klastra wynosi zero lub jeden. Ponieważ prawdopodobieństwo to jest rosnącą funkcją p, musi istnieć krytyczne p (oznaczone przez p_c), poniżej którego prawdopodobieństwo zawsze wynosi 0, a powyżej którego prawdopodobieństwo zawsze wynosi 1. W praktyce tę krytyczność bardzo łatwo zaobserwować.

4 Obliczenie parametru krytycznego

Dla większości nieskończonych sieci, p_c nie może być dokładnie obliczone, chociaż w niektórych przypadkach p_c ma dokładną wartość. Na przykład:

- dla sieci kwadratowej Z^2 w dwóch wymiarach: $p_c = 1/2$ w przypadku perkolacji krawędziowej, natomiast w przypadku perkolacji wierzchołkowej dla takiej sieci, wartość p_c nie jest wiadoma dokładnie, i przybliża się: $p_c = 0.59274621 \pm 0.00000013$.
- Przypadkiem granicznym dla sieci o dużych wymiarach jest sieć Bethego, której parametr krytyczny znajduje się przy $p_c = 1/(z-1)$, dla liczby koordynacyjnej z (liczba koordynacyjna, to samo co stopień wierzchołka).

5 Algorytmy

Perkolacje można zmodelować jako łączenie klastrów między sobą. Stosuje się algorytm Union-Find. Przy zwiększeniu poziomu odblokowują się krawędzie lub wierzchołki, co powoduje łączenie między sobą wierzchołków za pomocą operacji Union. Kolor każdego wierzchołka jest aktualizowany po każdym kroku za pomocą operacji Find.

6 Wizualizacje

6.1 Wizualizacja kolorowa

W tej części opiszemy badania dotyczące progu perkolacji, przy którym pojawia się nieskończony klaster.

Jest to struktura, która w warunkach teoretycznych obejmuje nieskończoną liczbę wierzchołków (w przypadku nieskończonych sieci), natomiast w praktycznych zastosowaniach charakteryzuje się połączeniem znaczącej części sieci lub jej granicznych obszarów. Proces poszukiwania nieskończonego klastra wymaga szczegółowego monitorowania relacji między wierzchołkami sieci i zmian ich przynależności do różnych klastrów. Dla generowania nowych krawędzi będziemy używać metodę Monte Carlo. Algorytm identyfikacji nieskończonego klastra:

- Inicjalizacja: Na początku każdy wierzchołek sieci jest traktowany jako odrębny klaster, co oznacza, że każdy z nich jest oznaczany unikalnym kolorem. Kolory te pełnią rolę identyfikatorów klastrów i pozwalają na śledzenie ich łączenia w kolejnych etapach symulacji.
- Łączenie wierzchołków: W miarę dodawania nowych krawędzi sprawdzamy, czy dwa wierzchołki, które mają być połączone, należą do różnych klastrów. Jeśli tak, dokonujemy operacji Union, która łączy te dwa klastry w jeden, przy czym wszystkie wierzchołki należące do obu klastrów otrzymują wspólny kolor. Jeśli oba wierzchołki należą już do tego samego klastra, ich kolor pozostaje niezmieniony.

Znaczenie kolorowania wierzchołków: Kolorowanie wierzchołków na różnych etapach pozwala nie tylko śledzić zmiany w strukturze sieci, ale również ułatwia identyfikację punktu przejścia z fazy bez perkolacji do fazy, w której istnieje nieskończony klaster. Proces ten jest istotny zwłaszcza w symulacjach metodą Monte Carlo, gdzie kluczowym elementem jest monitorowanie ewolucji klastrów przy różnych wartościach prawdopodobieństwa otwarcia wierzchołków lub krawędzi.

Uwagi:

Pojawienie się nieskończonego klastra w sieci jest zjawiskiem dynamicznym i zachodzi stosunkowo szybko w porównaniu z całym procesem wzrostu klastrów. To gwałtowne przejście charakteryzuje się momentem, w którym wiele małych, izolowanych klastrów nagle łączy się, tworząc jeden dominujący klaster o zasięgu globalnym. Zjawisko to można porównać do przejść fazowych w fizyce, takich jak przejście substancji z fazy ciekłej w gazową.

Zobaczymy jak to wygląda w praktycę: rysunek 3, 4, 5, 6.

6.2 Wizualizacja przepływów

W tym przypadku badamy sieci w których szukamy klastra, który będzie łączył dwie przeciwległe strony struktury.

6.2.1 Wyniki pomiaru progu perkolacji

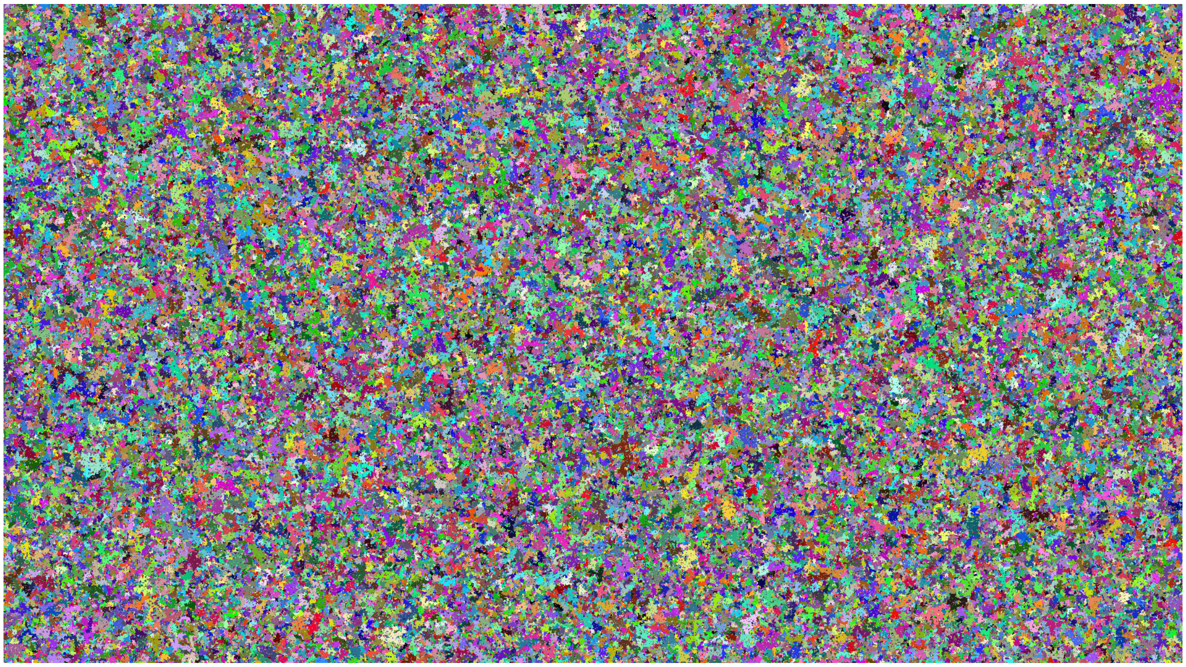
W celu określenia progu perkolacji wykorzystujemy metodę Monte Carlo. W zależności od rodzaju badanej perkolacji stosujemy różne podejścia:

- Perkolacja wierzchołkowa: Otwieramy kolejno losowo wybrany wierzchołek sieci.
- Perkolacja krawędziowa: Dodajemy losowo wybraną krawędź łączącą dwa wierzchołki.

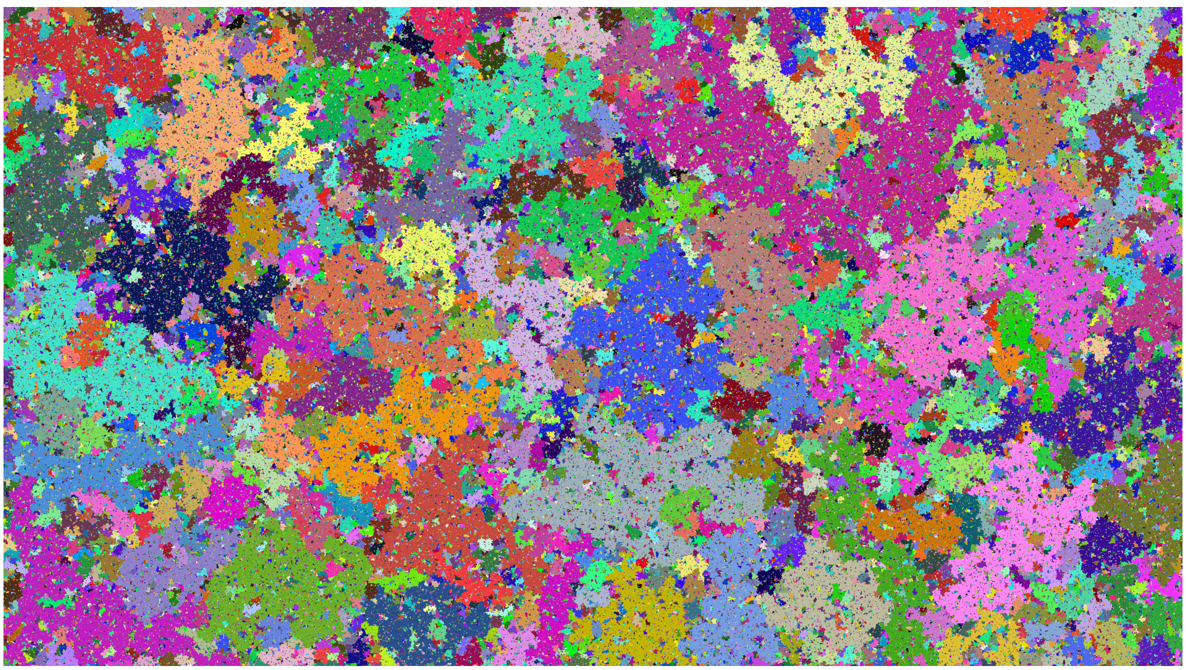
Po każdej iteracji przeprowadzamy analizę struktury sieci, aby sprawdzić, czy dodanie nowego elementu (wierzchołka lub krawędzi) wpłynęło na strukturę klastrów. Analiza ta polega na:

- Weryfikacji, czy nowo dodany wierzchołek został podłączony do istniejącego klastra. Jeśli tak, wykonywana jest operacja Union, która łączy nowy wierzchołek z odpowiednim klastrem, uwzględniając zmiany w jego strukturze.

Proces ten powtarza się iteracyjnie, aż do momentu osiągnięcia krytycznego stanu, w którym powstaje klaster łączący dwa przeciwległe końca badanej struktury. Ostatnią wartość i definiujemy jako próg perkolacji. Wyniki pomiarów można następnie uśredniać z wielu niezależnych realizacji Monte Carlo, co pozwala uzyskać wiarygodne dane statystyczne dotyczące badanego systemu.



Rysunek 3: Perkolacja kolorowa przy poziomie 0,33



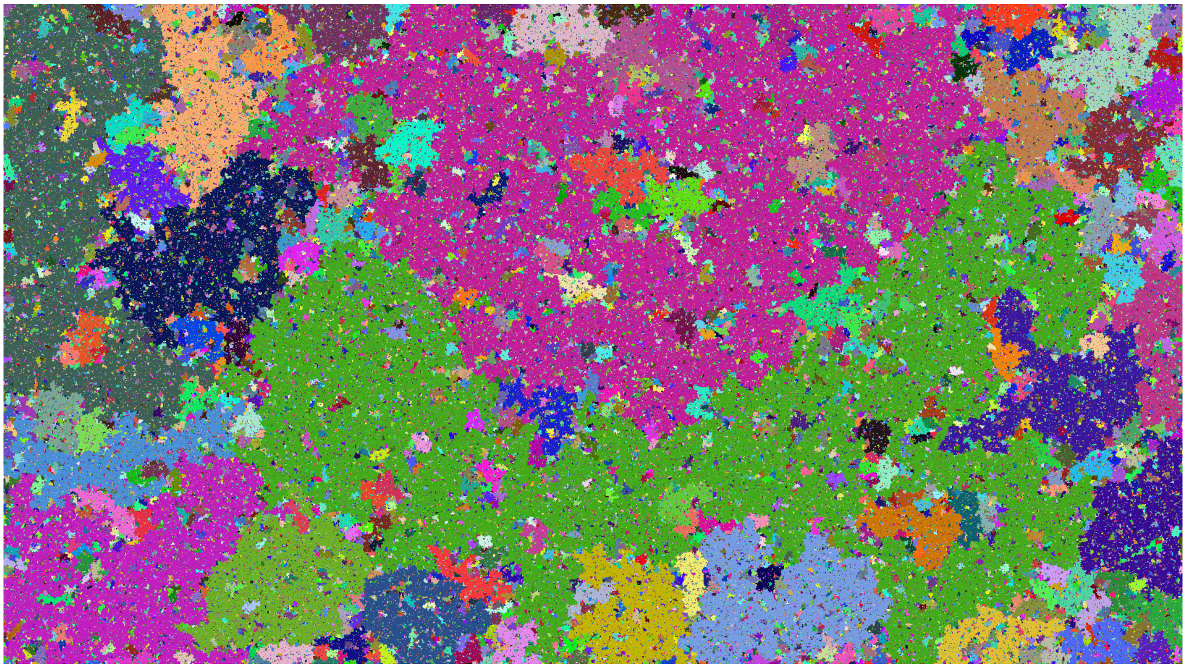
Rysunek 4: Perkolacja kolorowa przy poziomie 0,49

6.3 Próg perkolacji wierzchołkowej

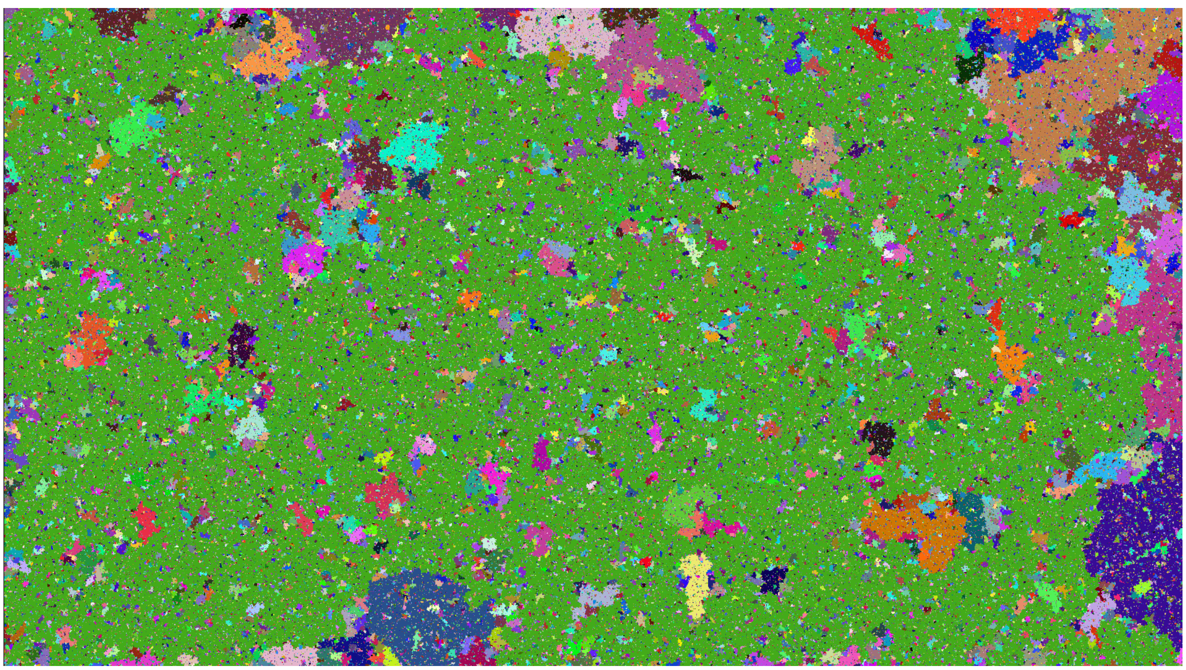
Na rysunku 7 osiągnięty wynik wynosi około 0,6.

6.4 Próg perkolacji krawędziowej

W związku z dualnością krawędzio-wierzchołkową uzyskujemy wartość 0,5. Ciekawą obserwacją jest to, że w okolicach wartości krytycznej, czyli $0,5$, rozkład klastrów oraz ich połączenia wykazują właściwości fraktalne — są samopodobne. Struktury te, jak przedstawiono na rysunku 5 i 8, charakteryzują

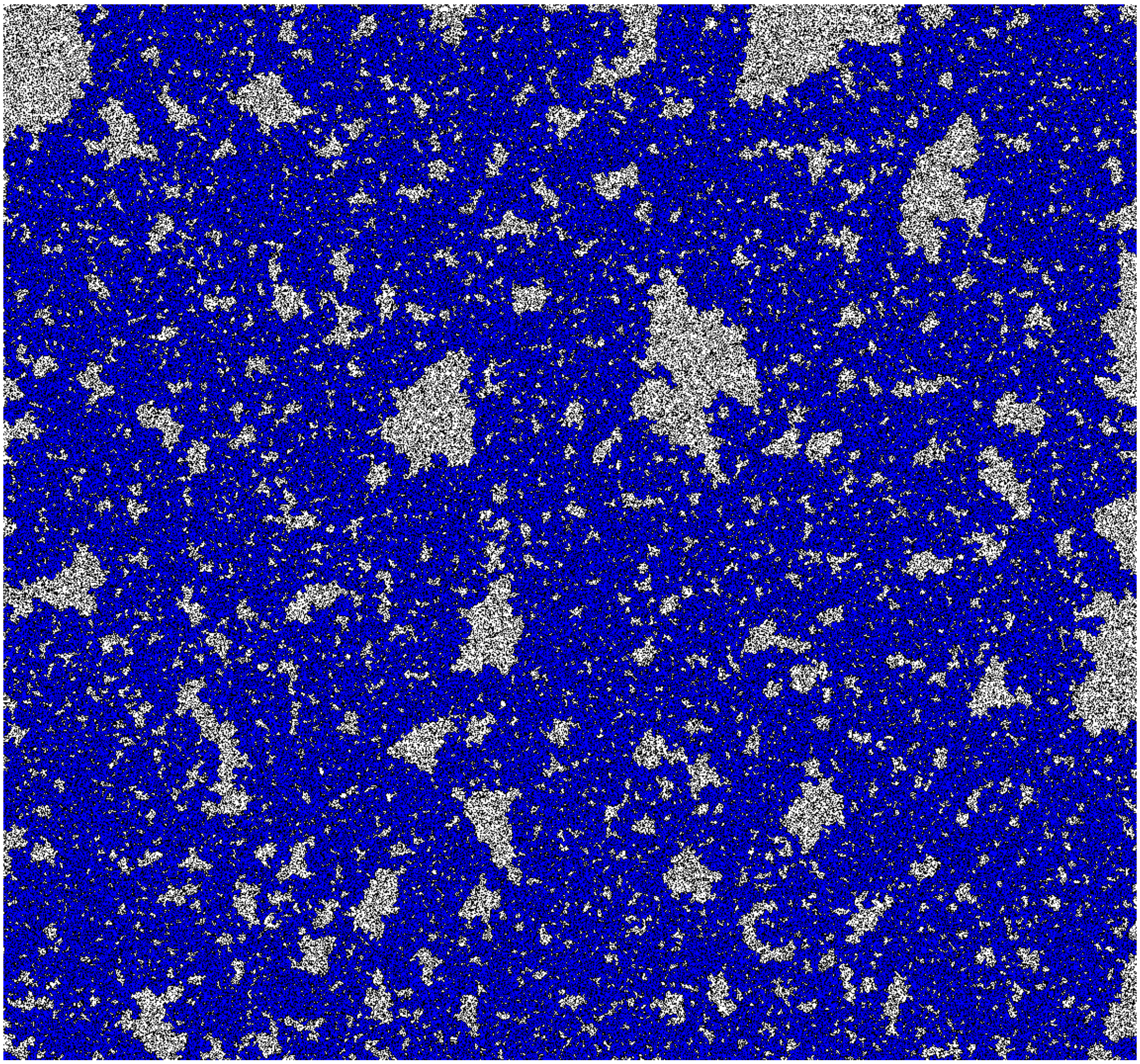


Rysunek 5: Perkolacja kolorowa przy poziomie 0,5

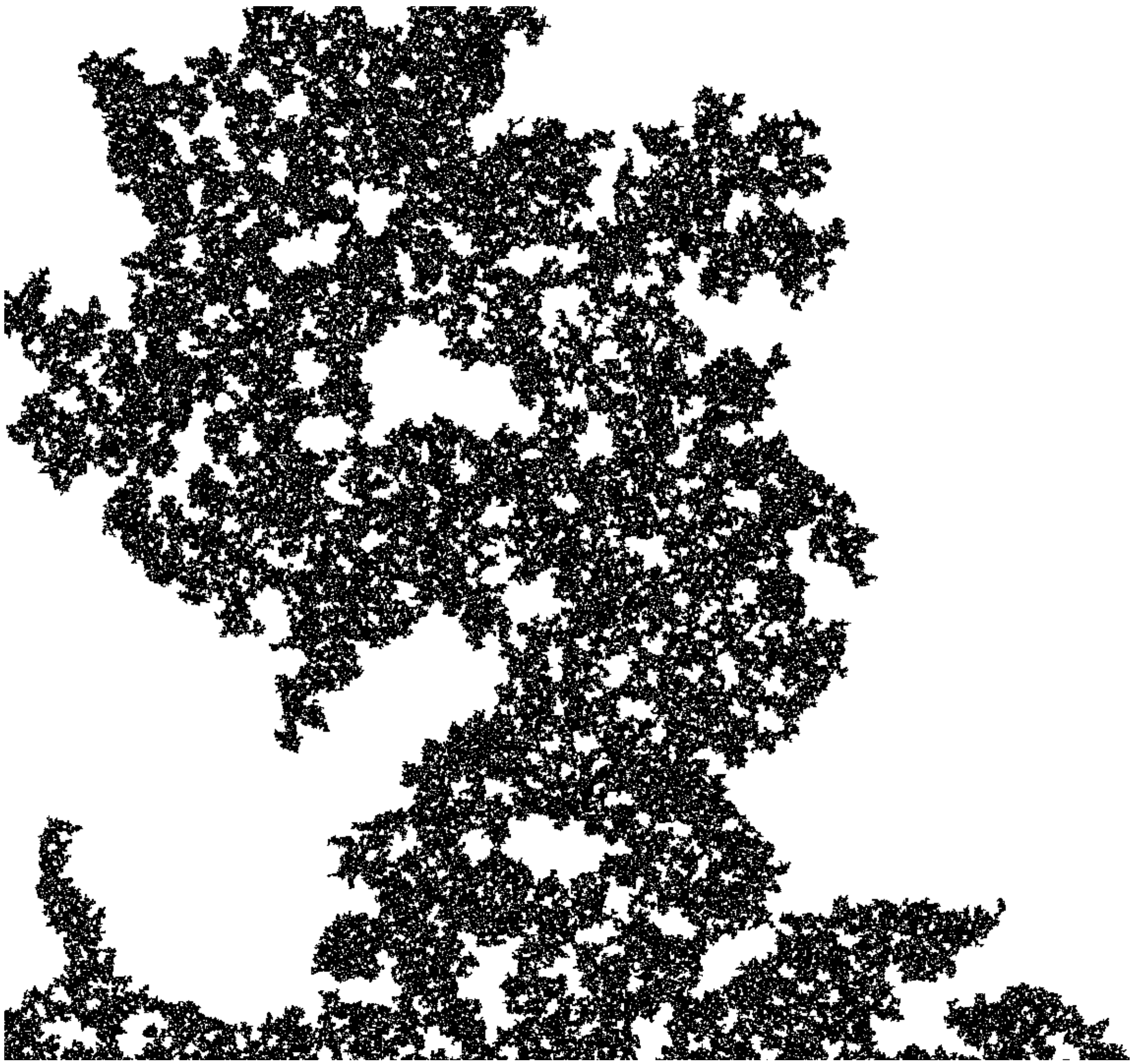


Rysunek 6: Perkolacja kolorowa przy poziomie nieco większym niż 0,5

się rozgałęzionymi, nieregularnymi formami, które jednocześnie są wystarczająco spójne, by połączyć znaczną część sieci.



Rysunek 7: Perkolacja wierzchołkowa



Rysunek 8: Perkolacja krawędziowa

7 Podsumowanie

Perkolacje mają sporo zagadnień, które nie są formalizowane. Mamy pojedyńcze teorie, które pomagają nam w badaniu perkolacji.

W tym projekcie zbadaliśmy perkolacje w siatkach kwadratowych, wymierzyliśmy ich progi w różnych typach siatki oraz zaobserwowaliśmy przypadek, kiedy przy krytycznej wartości poziomu przepustowości tworzą się fraktale.

8 Bibliografia

- www.cs.princeton.edu, data dostępu: 22 stycznia 2025
- en.wikipedia.org, data dostępu: 22 stycznia 2025