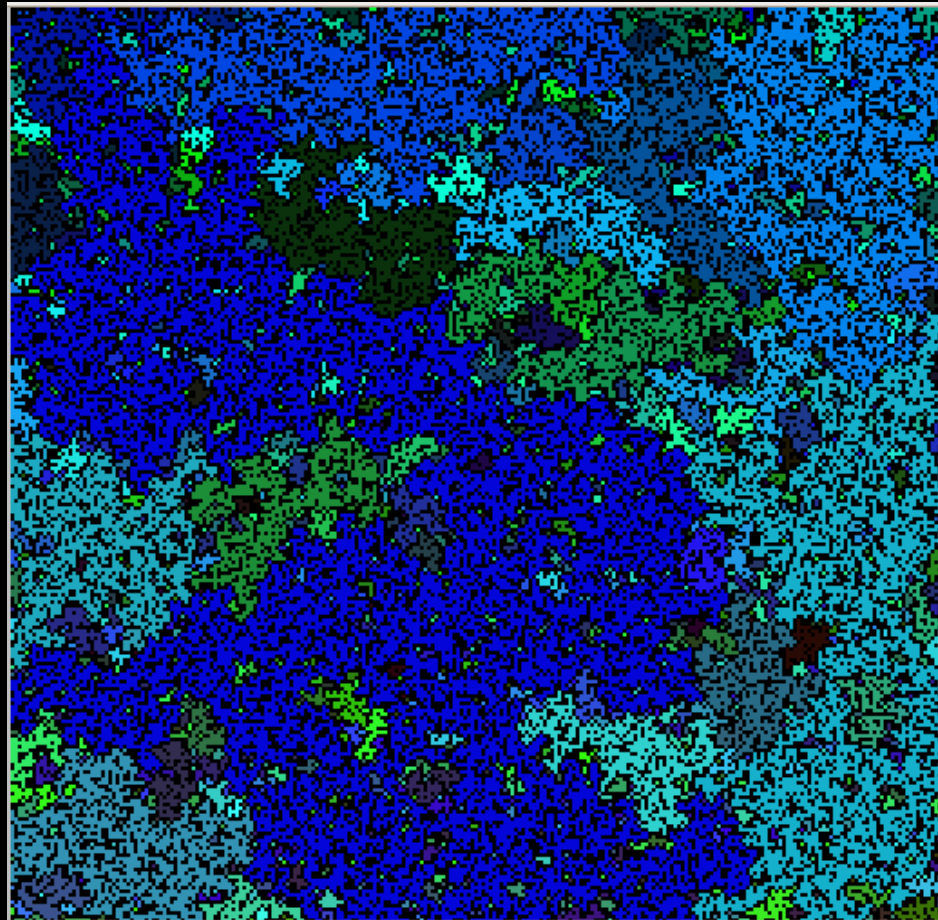


Symulacje komputerowe w fizyce

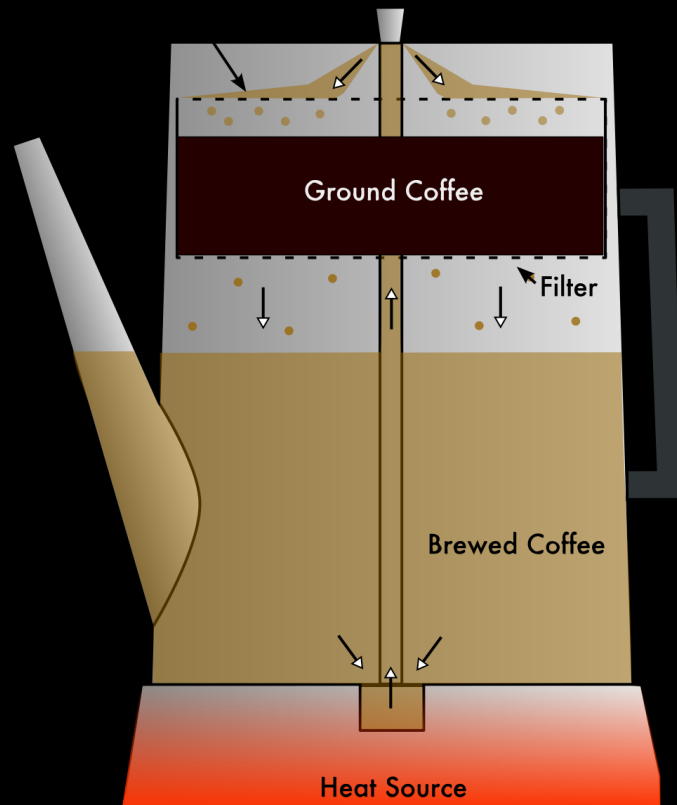


22-23.11.2022

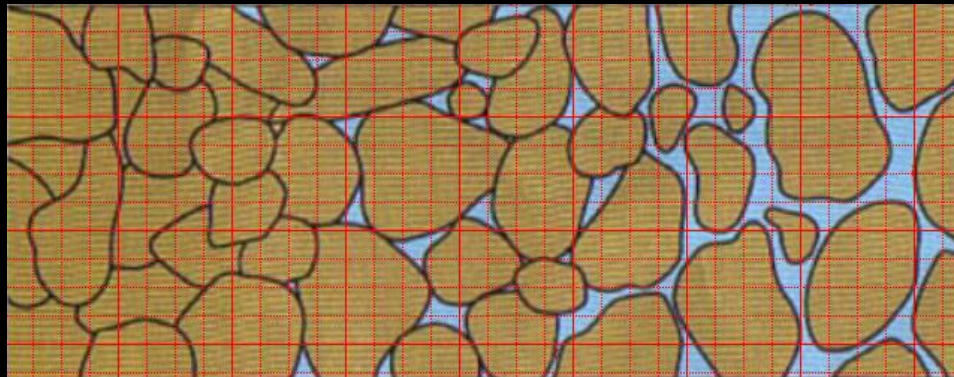
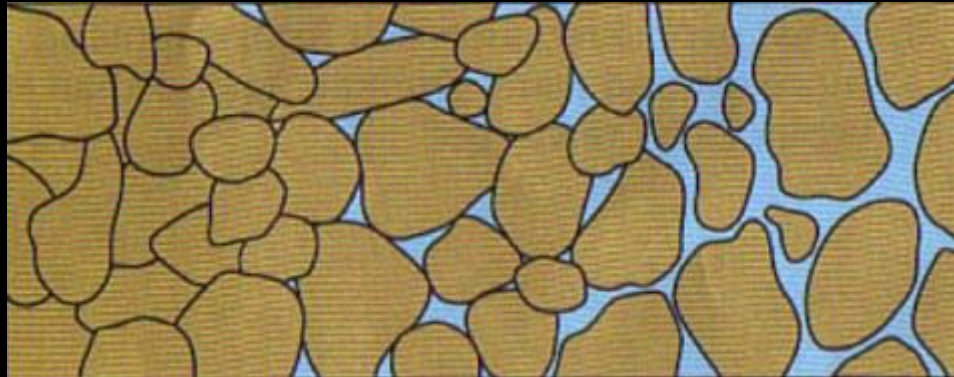
Wykład 7: Perkolacja

Perkolator

perkolacja – z łac. *percolare* (przeciekać przez coś, filtrować)

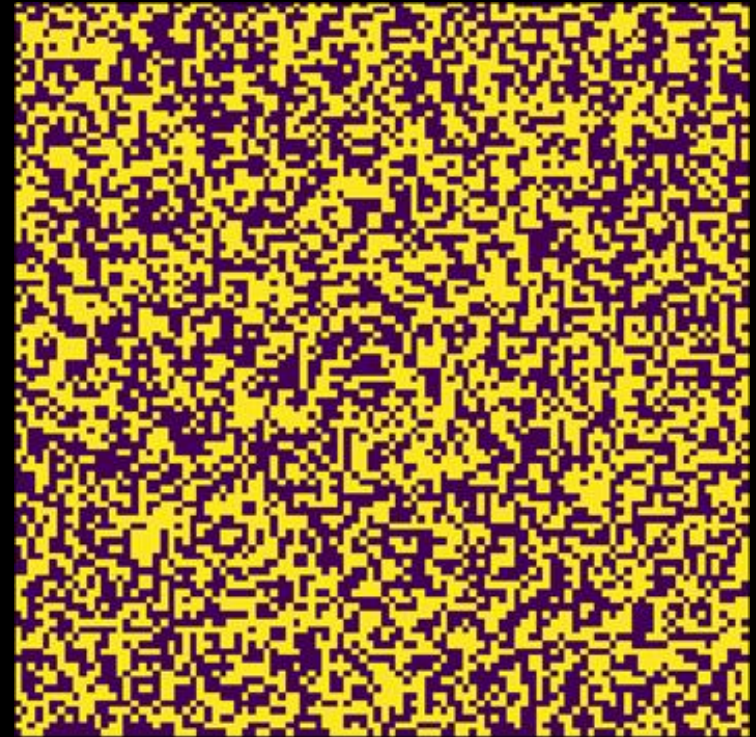


Perkolacja



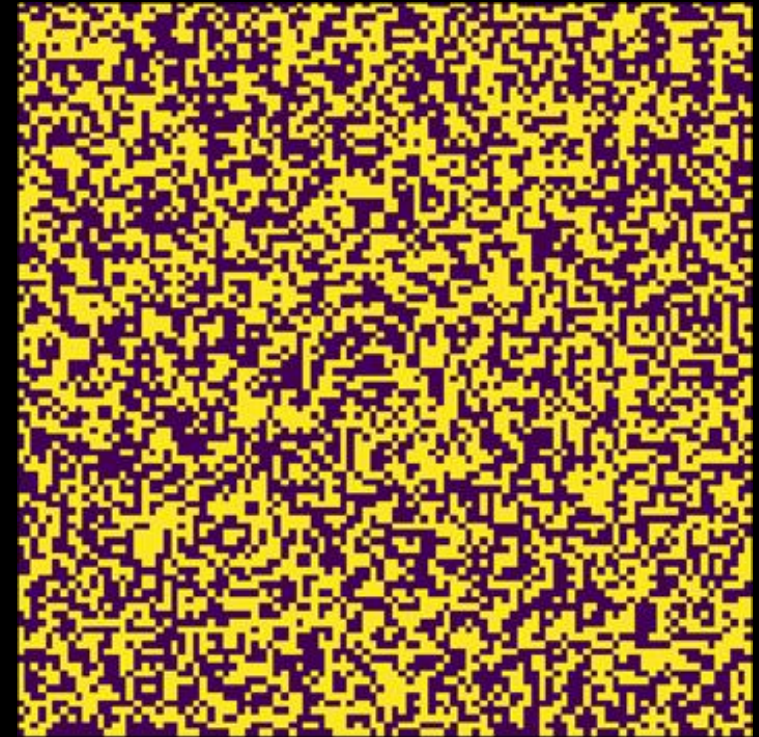
Stochastyczna konstrukcja

- Węzły na sieci kwadratowej.
- Każdy węzeł zostaje zaznaczony z prawdopodobieństwem p .



Stochastyczna konstrukcja

- Węzły na sieci kwadratowej.
- Każdy węzeł zostaje zaznaczony z prawdopodobieństwem p .
- Sąsiadujące zaznaczone węzły tworzą klastry.

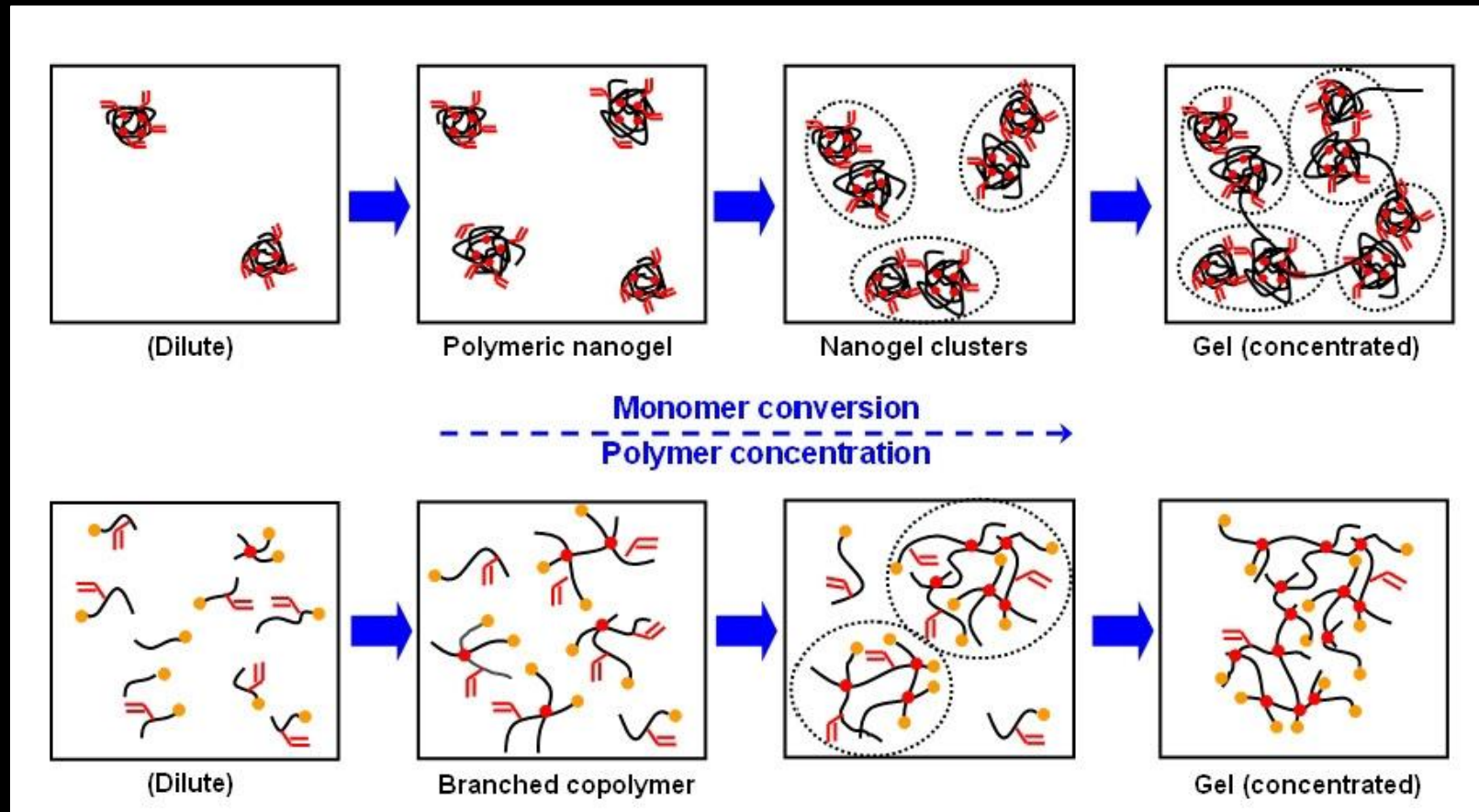


Jaki jest oczekiwany rozmiar klastra?

Jakie jest prawdopodobieństwo otrzymania perkolującego klastra?

Historia

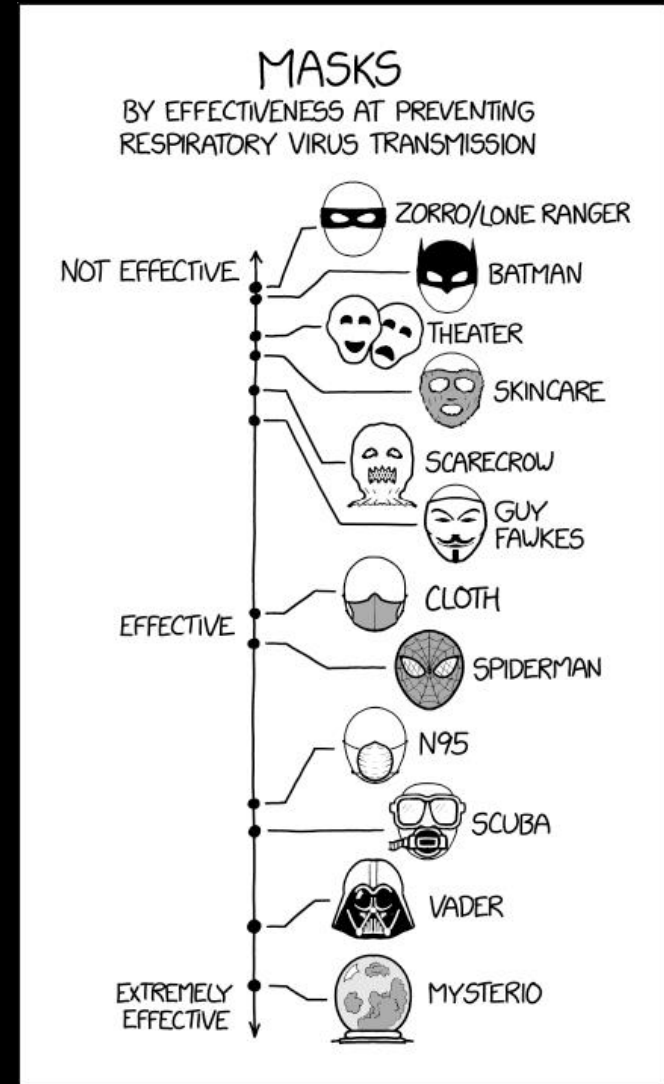
Pierwsze prace – Flory & Stockmayer (1941-1943) badali żelowanie



Historia

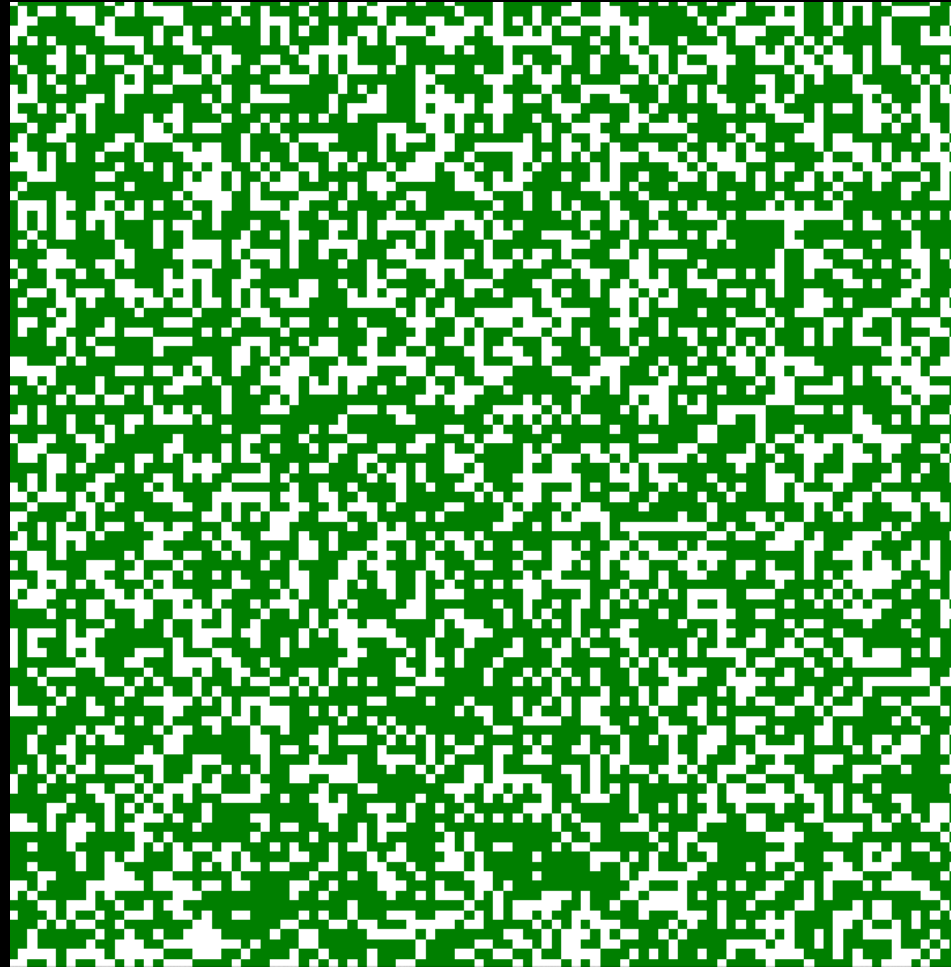
Model – Broadbent & Hammersley

Jak zbudować skuteczną maskę
przeciwgazową?



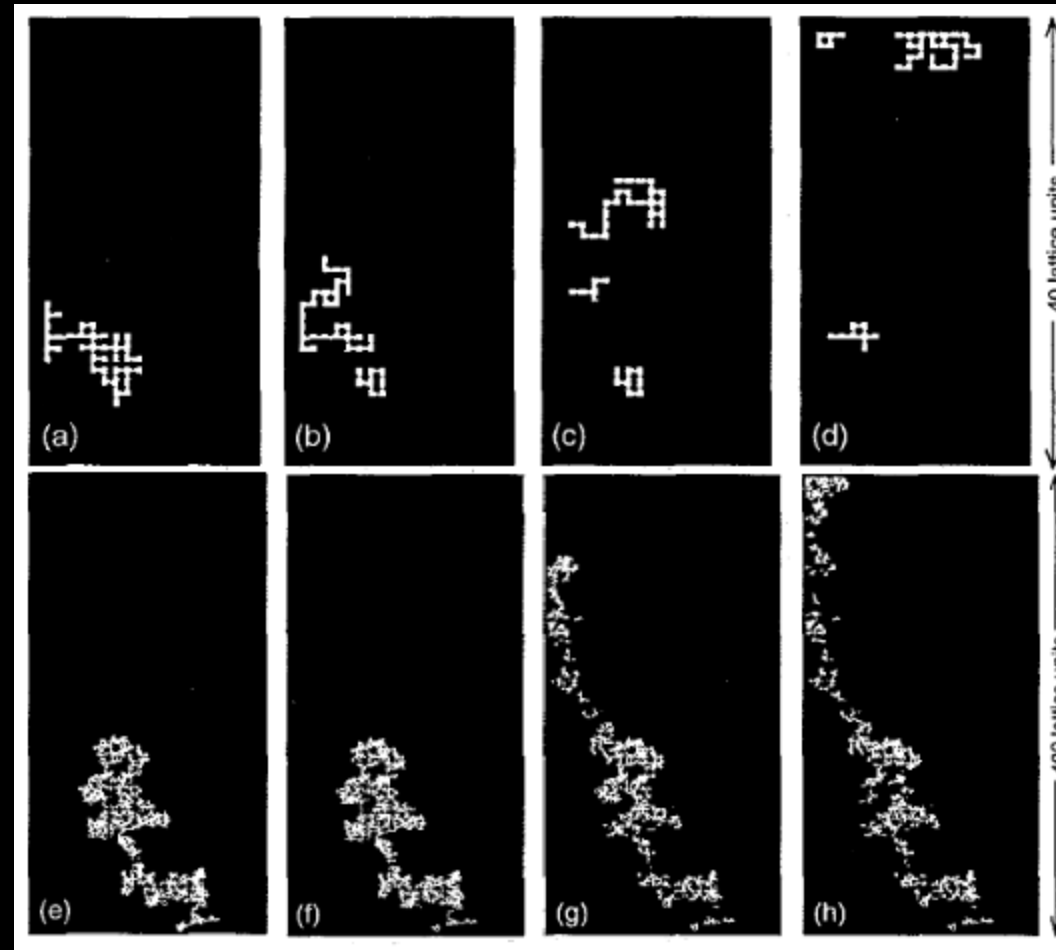
Zastosowania

pożary lasów



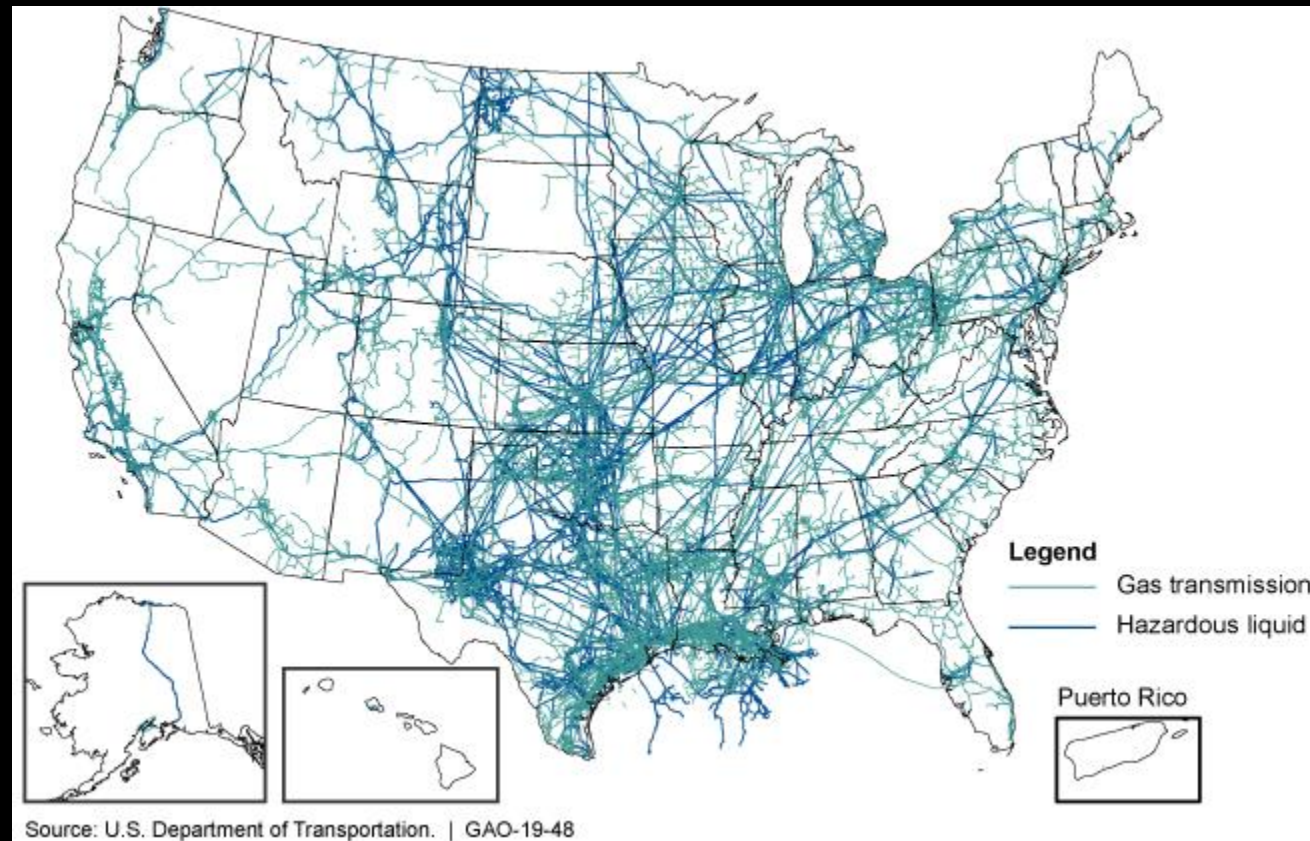
Zastosowania

wydobycie ropy

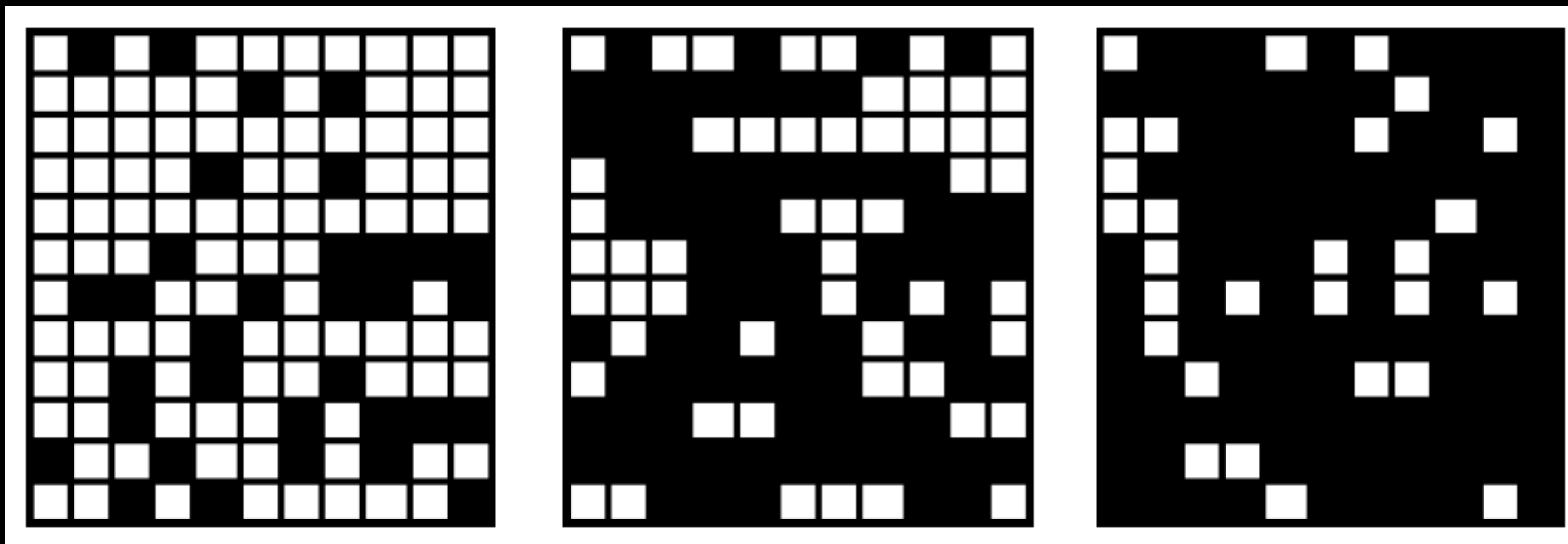


Zastosowania

analiza infrastruktury krytycznej



Próg perkolacji



$p = 0.2$

$p = p_c = 0.5927$

$p = 0.8$

Próg perkolacji

odpowiada granicznemu prawdopodobieństwu p_c , takiemu że dla każdego $p > p_c$ (w nieskończonym układzie) pojawia się perkolujący klaster, natomiast dla $p < p_c$ taki klaster nie istnieje.

Przykłady

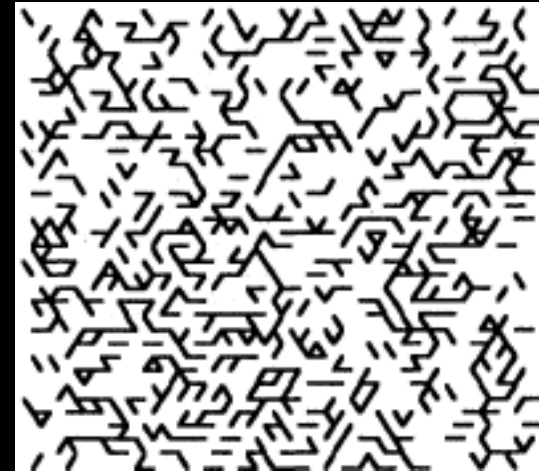
perkolacja na węzłach,
sieć kwadratowa

$$p < p_c$$



perkolacja na krawędziach,
sieć trójkątna

$$p < p_c$$



Przykłady

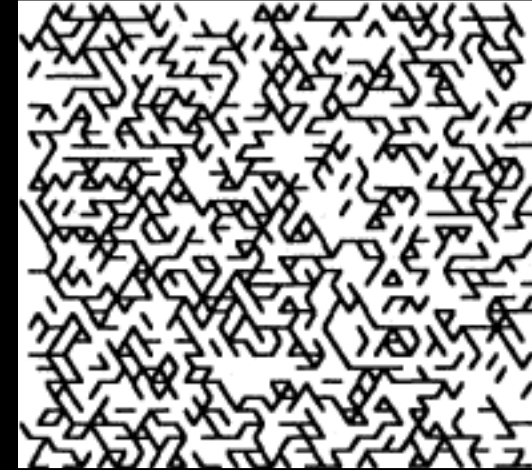
perkolacja na węzłach,
sieć kwadratowa

$$p = p_c = 0.5927$$



perkolacja na krawędziach,
sieć trójkątna

$$p = p_c = 0.3473$$



Przykłady

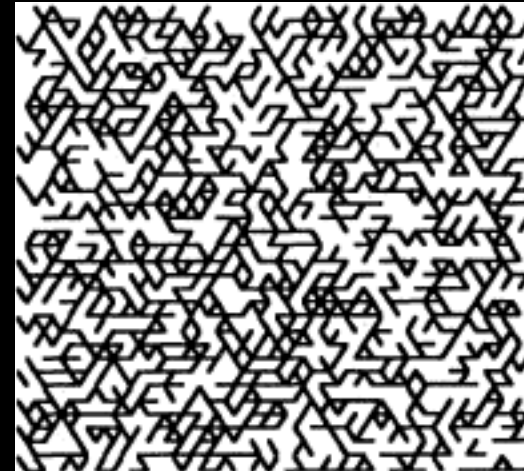
perkolacja na węzłach,
sieć kwadratowa

$$p > p_c$$



perkolacja na krawędziach,
sieć trójkątna

$$p > p_c$$



Parametr krytyczny p_c

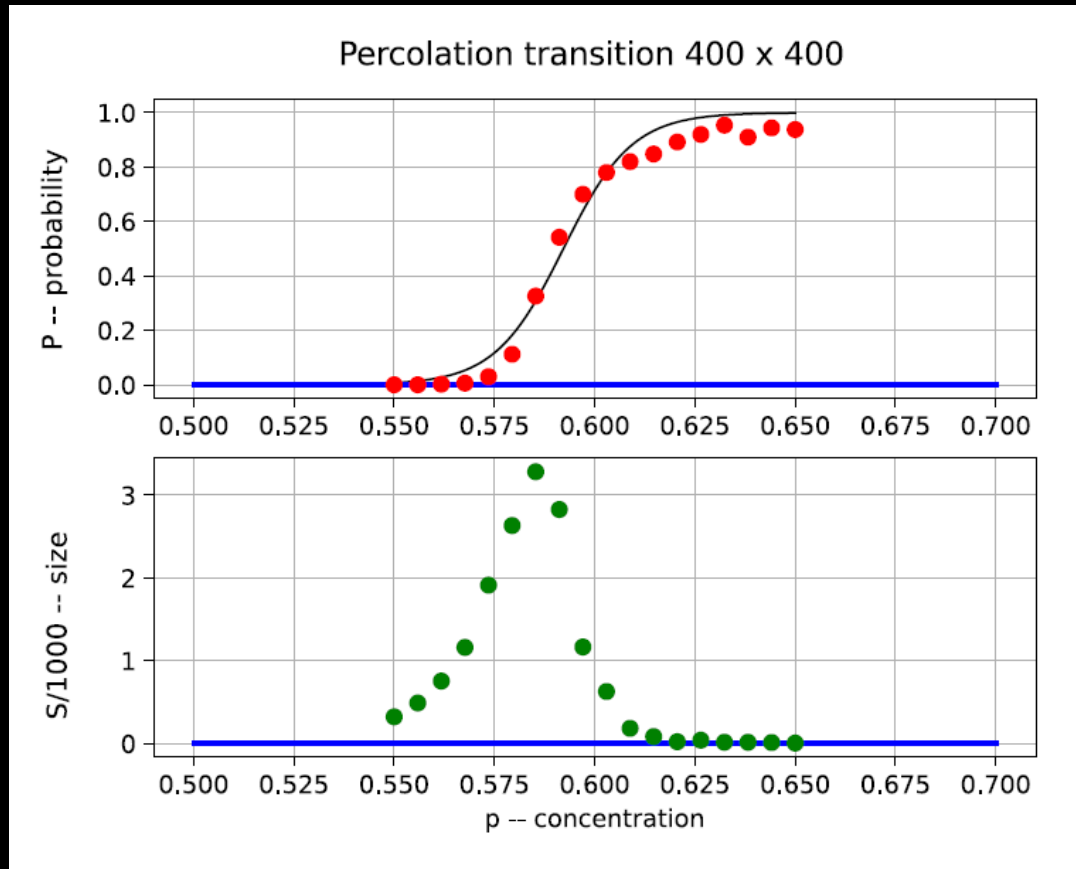
Wartość krytyczna p_c zależy od:

- wymiaru sieci,
- typu: na węzłach czy na krawędziach,
- geometrii sieci.

Obliczone wartości p_c – głównie z symulacji numerycznych:

D	sieć	krawędź	węzeł
2	kwadratowa	1/2	0.593
	trójkątna	$2 \sin (\pi / 18)$	1/2
3	prosta kubiczna	0.249	0.312
	bcc	0.180	0.246

Wielkości charakterystyczne



$P(p)$

prawdopodobieństwo, że
dany węzeł należy do
perkolującego klastra

$S(p)$

średni rozmiar klastra
(bez perkolującego)

Nagła zmiana charakterystyk w p_c ...

...podobieństwo do przejścia fazowego!

Długość korelacji

- Funkcja korelacji par $g(r) = \langle \rho(r_0) \rho(r_0 + r) \rangle$ prawdopodobieństwo, że w odległości r znajduje się węzeł należący do tego samego klastra.

- Zanik wykładniczy $g(r) = \exp(-\frac{r}{\xi})$ definiuje tzw. **długość korelacji** ξ .

- W praktyce obliczamy $\xi = R\sqrt{2}$,

$$\text{gdzie } R^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\vec{r}_i - \vec{r}_0)^2, \quad \vec{r}_0 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{r}_i,$$

N – rozmiar klastra, \vec{r}_i – położenia zajętych węzłów.

Wykładnik krytyczny

Prawo potęgowe

rozbieżność charakterystycznej skali długości

$$\xi \sim (p_c - p)^{-\nu}$$

Koncepcja uniwersalności

w punkcie krytycznym p_c nie istnieje skończona skala długości



ν nie zależy od „mikroskopowych” szczegółów!

D	2	3	4	5	≥ 6
ν	4/3	0.875	0.69	0.57	1/2

Koncepcje

proste zasady



złożone zachowanie

długozasięgowe korelacje

Mimo prostego modelu, wiele ważnych idei:

- gwałtowna zmiana globalnych wartości (przejście fazowe),
- prawa potęgowe, uniwersalność,
- efekty skończonego rozmiaru symulacji,
- metody grupy renormalizacji.

Metody symulacji

- jednoklastrowy algorytm Leatha

Phys. Rev. B 14, 5046 (1976)

- algorytm Hoshena-Kopelmana do identyfikacji klastrów

Phys. Rev. B 14, 3438 (1976)

- metoda Newmana-Ziffa dla wielu p jednocześnie

Phys. Rev. B 85, 4104 (2000)

Algorytm Leatha

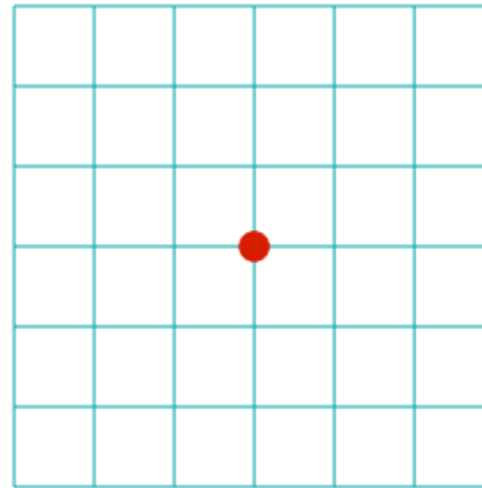
Pomysł: konstruujemy tylko jeden klaster (fikcyjna dynamika).

Sieć węzłów o wartościach:

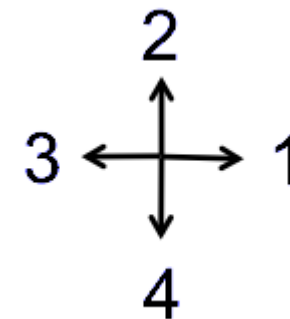
1 – zajęty,

0 – pusty,

-1 – pierwotny (niesprawdzony).



Zaczynamy od zajętego węzła na środku i zaznaczamy jego sąsiadów z prawdopodobieństwem p .



Algorytm Leatha

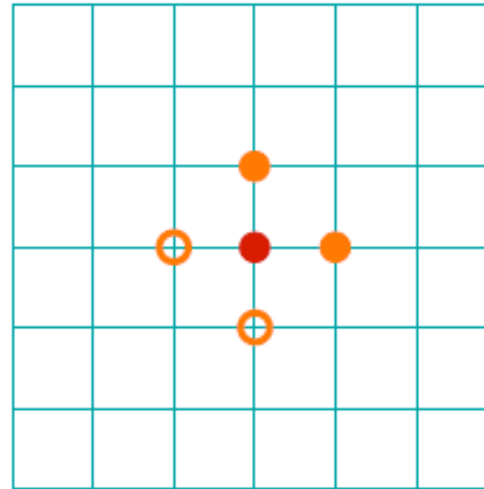
Pomysł: konstruujemy tylko jeden klaster (fikcyjna dynamika).

Sieć węzłów o wartościach:

1 – zajęty,

0 – pusty,

-1 – pierwotny (niesprawdzony).



Dostaliśmy 2 zajęte, 2 puste.
W kolejce do sprawdzenia:



Algorytm Leatha

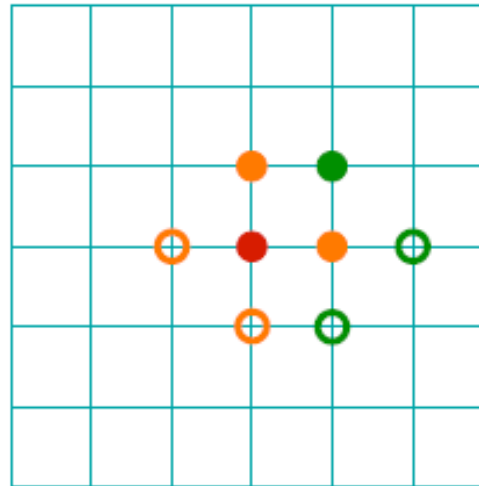
Pomysł: konstruujemy tylko jeden klaster (fikcyjna dynamika).

Sieć węzłów o wartościach:

1 – zajęty,

0 – pusty,

-1 – pierwotny (niesprawdzony).



1 zajęty, 2 puste.

Dołączamy zielony węzeł na koniec kolejki.



Algorytm Leatha

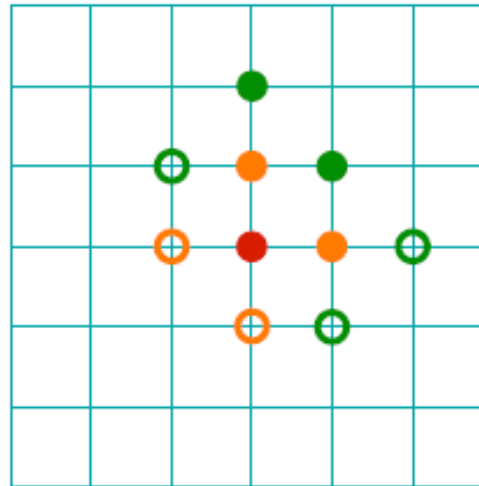
Pomysł: konstruujemy tylko jeden klaster (fikcyjna dynamika).

Sieć węzłów o wartościach:

1 – zajęty,

0 – pusty,

-1 – pierwotny (niesprawdzony).



1 zajęty, 1 pusty.

Nowy zielony węzeł do kolejki.



Algorytm Leatha

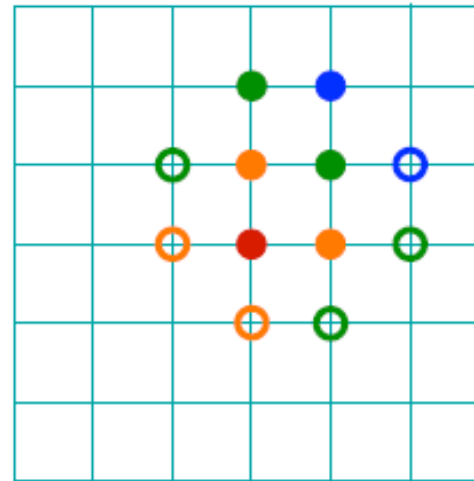
Pomysł: konstruujemy tylko jeden klaster (fikcyjna dynamika).

Sieć węzłów o wartościach:

1 – zajęty,

0 – pusty,

-1 – pierwotny (niesprawdzony).



1 zajęty, 1 pusty.
Niebieski do kolejki.



Algorytm Leatha

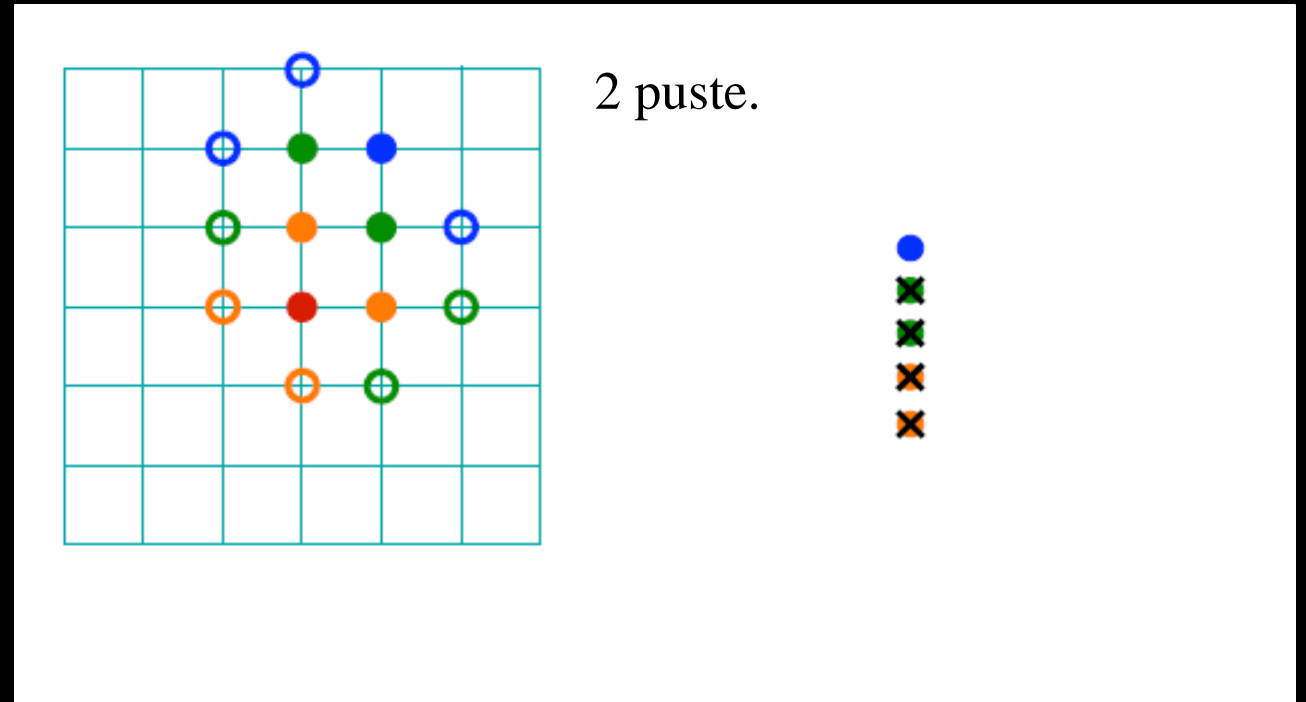
Pomysł: konstruujemy tylko jeden klaster (fikcyjna dynamika).

Sieć węzłów o wartościach:

1 – zajęty,

0 – pusty,

-1 – pierwotny (niesprawdzony).



Algorytm Leatha

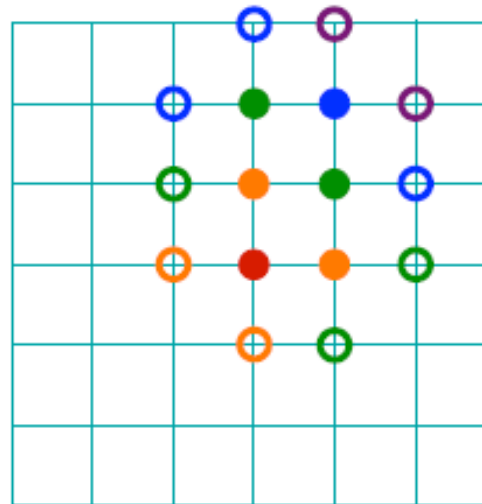
Pomysł: konstruujemy tylko jeden klaster (fikcyjna dynamika).

Sieć węzłów o wartościach:

1 – zajęty,

0 – pusty,

-1 – pierwotny (niesprawdzony).



2 puste.

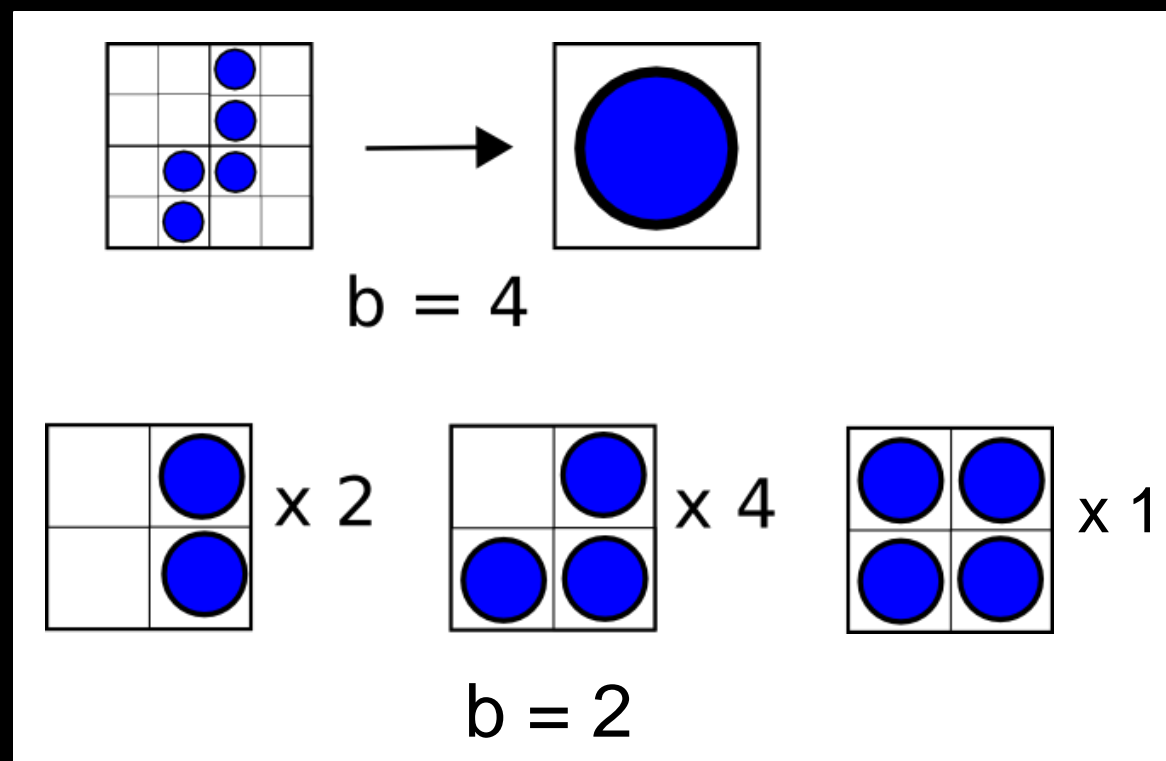
Koniec ewolucji.



Eliminujemy szczegóły mikroskopowe

Renormalizacja jest powiązana z samopodobieństwem.

Idea: układ $b \times b$ zastępujemy jednym efektywnym węzłem.

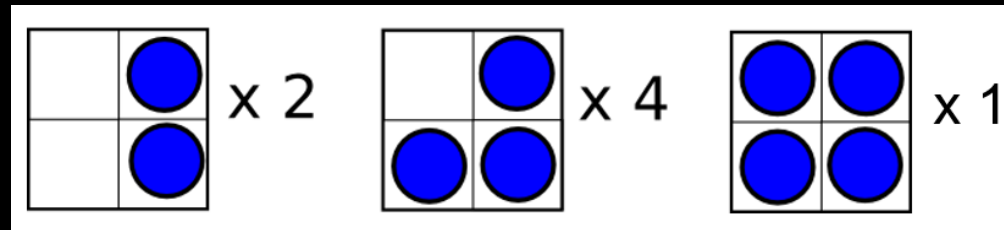


np. wszystkie konfiguracje „perkolujące” w danym miniukładzie
(łączące górną i dolną krawędź)

Transformacja renormalizacji

Prawdopodobieństwo uzyskania zapełnionego efektywnego oczka:

$$R(p) = 2 p^2 (1 - p)^2 + 4 p^3 (1 - p) + p^4$$



Transformacja w punkcie samopodobnym (krytycznym):

$$R(p^*) = p^*$$

Nietrywialny punkt stały $p^* = \sqrt{5} - 2 \simeq 0.61$
(bliski wynikowi dokładnemu $p_c = 0.5927$).

Wynik na prawo skalowania

Jeden krok naszej transformacji $p' = R(p)$ oraz $\xi' = \xi/b$.

Skalowanie długości korelacji $\xi \sim (p_c - p)^{-\nu}$ oraz $\xi' \sim (p_c - p')^{-\nu}$,
które łączymy: $(p_c - p)^{-\nu}/b = (p_c - p')^{-\nu}$

i możemy wyznaczyć ν :

$$\nu = \frac{\log b}{\log \frac{dR}{dp} |_{p_c}}$$

Oszacowanie dla $b = 2$ daje $\nu = 1.625\dots$

...dokładne wyniki z obliczeń/symulacji $R(p)$ dla dużych b .