

計算機実習 問題 14.6 イーデン・モデル

早稲田大学先進理工学部物理学科 B4 藤本将太郎

2015 年 5 月 29 日

1 シミュレーションの目的

成長モデルのさらに簡単な例が 1958 年にイーデンによって、細胞のコロニーの成長のシミュレーションを行うために提案された。結果の質量分布はフラクタルではないことがわかるが、イーデン成長のアルゴリズムの記述は、フラクタルな成長モデルの一般的な性質を示している。問題 14.6 ではイーデンクラスターのいくつかの性質について調べることにする。

2 作成したプログラム

本シミュレーションで作成したプログラムを以下に示す。

2.1 イーデンモデルにより正方格子上でクラスターを生成するプログラム

イーデンモデルのアルゴリズムは、以下のようにまとめられる。

1. 種を原点に置き、占有されていないすべての隣接格子点 (成長点と呼ぶ) を探す。
2. 1 つの成長点がランダムに選ばれ、占有される。このとき選ばれた成長点は必ず占有されることに注意する。すなわちこれまでのモデルにおいて $p = 1$ としたことに対応する。
3. 新しく占有された格子点を成長点のリストから除外し、新しい成長点を加えられる。
4. 2,3 の過程を、クラスターが考えている格子サイズの端から端まで連結するまで繰り返すとする。

このモデルと前のモデルとの基本的な相違は、調べられたすべての格子点が占有されることであり、問題 14.5 の伝染病のモデルとの対応で言えばどの格子点も永久に”免疫”を持つことがない。

以下に、実際に作成したプログラムの内容を示すが、ダイアログの表示、ウィンドウへの格子の描画など、ほとんどの部分は問題 14.5 で使用したものをそのまま利用できる。したがって、変更した点のみを述べることにすると、関数 `perc_cluster` の内部での挙動は、上で説明したアルゴリズムを実現するように変更されている。1 回に 1 つずつ成長させていくので、リストとして扱っていた `nextseed` を廃止し、`for` 文を使うことを避けた。成長点のリスト `nnsite` からランダムに要素を取り出すために `random` モジュールの `choice` メソッドを用いた。これは与えられたリストの要素数と、生成された乱数の値によって、返す値を決定するものである。

次に、関数 `b4_pushed` について説明すると、これは種を中心とした半径 r の円の中に含まれる、占有された格子点の数を計算し、それを両対数グラフにして表示するものである。 `rlattice` が実際の格子における種か

らの距離を表現するものとなっており, `rlattice` のなかで距離 r (プログラム上では `r`) より小さい値をもつところの座標が `s` に記録される. この座標 `s` は格子点より右下の $1/4$ の部分のものであり, 格子の中心を $(0,0)$ としているので, そのまま使うには都合の悪い形をしている. したがって, 次の `set_in_r` で実際の格子上での座標に置き換えられた (x,y) の組にし, 座標の重複は除かれる. その2行後で $(x$ の列, y の列) の形に整形されて, `M_r` でその座標において値が1であるものの総数を計算している. 半径 r は 2^i ($i = 1, 2, \dots$) ととり, r は格子の中心から端までの距離を超えないようにしている.

```
1  #! /usr/bin/env python
2  # -*- coding:utf-8 -*-
3  #
4  # written by Shotaro Fujimoto, July 2014.
5
6  from Tkinter import *
7  import numpy as np
8  import matplotlib.pyplot as plt
9  import scipy.optimize as optimize
10 import sys
11 import random
12
13 class Percolation:
14
15     def __init__(self, L=61):
16         if L % 2 == 0:
17             raise ValueError("lattice size L must be odd number.")
18         self.sub = None
19         self.lattice = None
20         self.L = L # lattice size
21
22     def perc_cluster(self):
23         self.lattice = np.zeros([self.L+2, self.L+2], dtype=int)
24         self.lattice[:,1:] = self.lattice[:, :1] = -1
25         self.lattice[self.L+1:,:] = self.lattice[:, self.L+1:] = -1
26         center = (self.L//2) + 1
27         self.lattice[center, center] = 1
28         nextseed = [(center, center)]
29         if self.sub is None or not self.sub.winfo_exists():
30             lattice = self.lattice
31             L = self.L
32             rn = np.random.random
33             choice = random.choice
```

```

34         ne = [(0, -1), (0, 1), (-1, 0), (1, 0)]
35         nnsite = set([(center+nx, center+ny) for nx, ny in ne])
36         t = [0] # time
37         S = [4] # a number of growing sites
38         N = [1] # a number of occupied sites
39         percolate = False
40         l = set([])
41         while percolate == False:
42             nn = choice(list(nnsite))
43             nnsite.remove(nn)
44             lattice[nn] = 1
45             i, j = nn
46             nnsite = nnsite | set([(i+nx, j+ny) for nx, ny in ne
47                                     if lattice[i+nx, j+ny] == 0])
48             if i == 1:
49                 l.add('top')
50             if i == L:
51                 l.add('bottom')
52             if j == 1:
53                 l.add('left')
54             if j == L:
55                 l.add('right')
56
57             glsite = (np.array([a[0] for a in list(nnsite)]),
58                       np.array([a[1] for a in list(nnsite)]))
59             lattice[glsite] = -1
60             if ('top' in l and 'bottom' in l) or \
61                 ('right' in l and 'left' in l):
62                 percolate = True
63
64             t.append(t[-1]+1)
65             S.append(len(nnsite))
66             N.append(np.sum(lattice == 1))
67         self.lattice = lattice[1:-1, 1:-1]
68
69     return t, S, N
70
71     def draw_canvas(self, rect, L, show=1):
72         default_size = 640 # default size of canvas
73         r = int(default_size/(2*L))

```

```

74         if r == 0:
75             r = 1
76         fig_size = 2*r*L
77         margin = 10
78         sub = Toplevel()
79
80         self.canvas = Canvas(sub, width=fig_size+2*margin,
81                               height=fig_size+2*margin)
82         self.canvas.create_rectangle(margin, margin,
83                                     fig_size+margin, fig_size+margin,
84                                     outline='black', fill='white')
85         self.canvas.pack()
86
87         c = self.canvas.create_rectangle
88
89         site = np.where(rect == show) # 1: occupied site, -1: growing site
90         for m, n in zip(site[0], site[1]):
91             c(2*m*r+margin, 2*n*r+margin,
92               2*(m+1)*r+margin, 2*(n+1)*r+margin,
93               outline='', fill='black')
94
95     class TopWindow:
96
97     def quit(self):
98         self.root.destroy()
99         sys.exit()
100
101     def show_window(self, pr, pushed, b4_pushed, b5_pushed):
102         self.root = Tk()
103         self.root.title('Percolation')
104         f1 = Frame(self.root, padx=5, pady=5)
105         b1 = Button(f1, text='run (and show figure)', command=pushed)
106         b1.pack(side='top', expand=YES, fill='x')
107         f1.pack(fill='x')
108
109         f2 = Frame(self.root, padx=5, pady=5)
110         b5 = Button(f2, text='show growing site', command=b5_pushed)
111         b5.pack(side='top', expand=YES, fill='x')
112
113         b4 = Button(f2, text='plot graph', command=b4_pushed)

```

```

114         b4.pack(expand=YES, fill='x')
115
116         b2 = Button(f2, text='save canvas to sample.eps', command=pr)
117         b2.pack(expand=YES, fill='x')
118         f2.pack(fill='x')
119
120         f3 = Frame(self.root, padx=5, pady=5)
121         b3 = Button(f3, text='quit', command=self.quit)
122         b3.pack(expand=YES, fill='x')
123         f3.pack(fill='x')
124
125         self.root.mainloop()
126
127
128     if __name__ == '__main__':
129         L = 201
130         top = TopWindow()
131         per = Percolation(L=L)
132         count = 1
133
134         def pr():
135             global count
136             d = per.canvas.postscript(file="figure_%d.eps" % count)
137             print "saved the figure to a eps file"
138             count += 1
139
140         def pushed():
141             global t, S, N
142             t, S, N = per.perc_cluster()
143             per.draw_canvas(per.lattice, L)
144
145         def b5_pushed():
146             if per.lattice == None:
147                 per.perc_cluster()
148             per.draw_canvas(per.lattice, L, show=-1)
149
150         def b4_pushed():
151             if per.lattice == None:
152                 per.perc_cluster()
153             sqrt = np.sqrt

```

```

154     c = (L//2)
155     rlattice = np.array([sqrt(x**2 + y**2) for x in range(c)
156                          for y in range(c)]).reshape(c, c)
157     i = 1
158     _r = 2
159     r, M = [], []
160     while _r <= c:
161         s = np.where(rlattice <= _r)
162         set_in_r = set(zip(np.append(s[0], [s[0], -s[0], -s[0]])+c,
163                             np.append(s[1], [-s[1], s[1], -s[1]])+c))
164         l = list(set_in_r)
165         site = (np.array([p[0] for p in l]), np.array([p[1] for p in l]))
166         M_r = np.sum(per.lattice[site] == 1)
167         r.append(_r)
168         M.append(M_r)
169         i += 1
170         _r = 2**i
171
172     log = np.log
173     def fit_func(parameter0, r, M_r):
174         c1 = parameter0[0]
175         c2 = parameter0[1]
176         residual = log(M_r) - c1 - c2*log(r)
177         return residual
178
179     r = np.array(r)
180     M = np.array(M)
181     x = np.logspace(np.log10(np.min(r))-0.1, np.log10(np.max(r))+0.1, 10)
182     parameter0 = [0.1, 2.0]
183     result = optimize.leastsq(fit_func, parameter0, args=(r, M))
184     c1 = result[0][0]
185     D = result[0][1]
186
187     def fitted(r, c1, D):
188         return np.exp(c1)*(r**D)
189
190     fx = fitted(x, c1, D)
191
192     fig = plt.figure()
193     ax = fig.add_subplot(111)

```

```

194         plt.subplots_adjust(bottom=0.14)
195         plt.subplots_adjust(right=0.68)
196         ax.set_xscale('log')
197         ax.set_yscale('log')
198         ax.set_xlabel(r'$\ln r$', fontsize=16)
199         ax.set_ylabel(r'$\ln M$', fontsize=16)
200         ax.set_ymargin(0.05)
201         ax.plot(r, M, 'o')
202         ax.plot(x, fx, '--', color='black',
203               label=r'\n$\mathrm{fitted\ curve}$\n$(D= %1.2f)$' % D)
204         ax.legend(bbox_to_anchor=(1.05, 1.0), loc='upper left', borderaxespad=0)
205         plt.show()
206
207     top.show_window(pr, pushed, b4_pushed, b5_pushed)
208

```

3 実習課題

- a. イーデンモデルにしたがって正方格子上でクラスターを形成せよ。周辺の点を無制限に占有し続けるならば、何が起こるだろうか。問題 14.3 の手順に従い、種の格子点から距離 r の範囲内の占有された格子点の数 $M(r)$ を求めよ。十分に大きな r に対して $M(r) \sim r^D$ を仮定し、 r に対する M の両対数プロットの傾きから D を求めよ。得られたデータからイーデンクラスターはコンパクトであると結論できるか。

作成したプログラムを用いて、イーデンモデルにより正方格子上でクラスターを形成した。 $L = 201$ としたときのクラスターの様子を図 1 に示す。この図から、イーデンモデルによるクラスターは、これまで生成したクラスターとは異なり、クラスターの内部の点はほとんどが占有されていて、穴の多いフラクタル的な構造とはなっていないことが分かる。

次に、種の格子点から距離 r の範囲内の占有された格子点の数 $M(r)$ を求め、 r に対する M の両対数プロットを図 2 に示した。このグラフより、 $M(r) \sim r^D$ と表すことができ、その傾き D は $D \approx 2.00$ となることが分かる。すなわち、フラクタル次元 D が 2 でユークリッド次元と等しく、したがってイーデンクラスターはコンパクトであると言える。

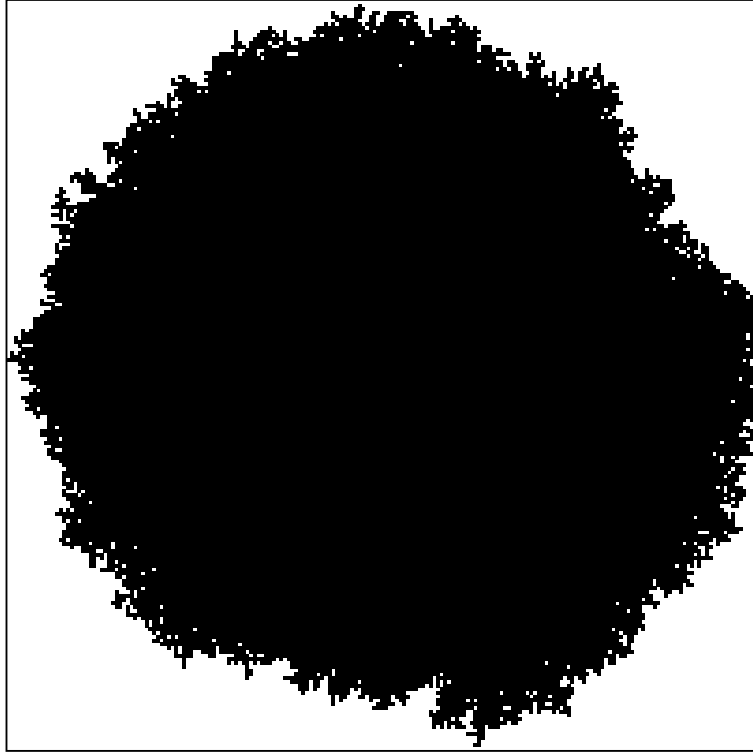


図1 格子サイズ $L = 201$ のとき，生成されたイーデンクラスター

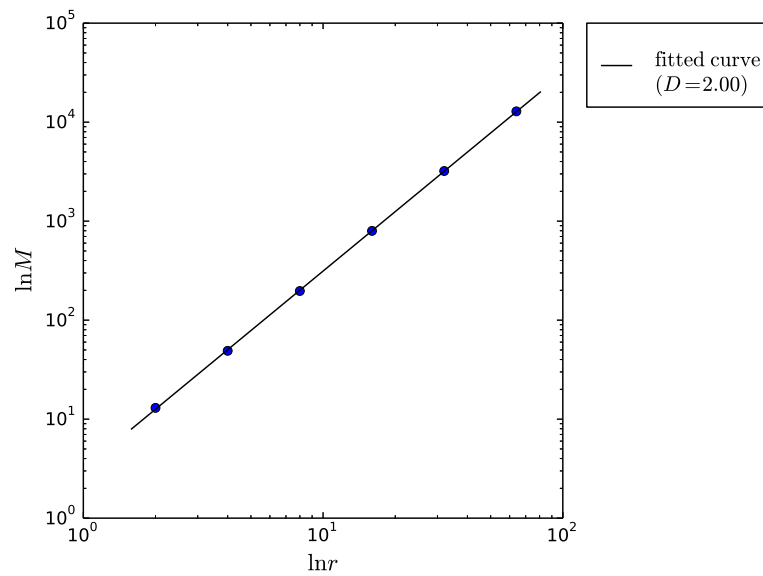


図2 種の格子点からの距離 r とその内部の占有された格子点数 $M(r)$ の関係 ($L = 201$)

- b. 周辺の点つまり成長点だけが示されるようにプログラムを修正せよ．大部分の周辺の点はクラスターの中心から見てどこにあるか．計算時間と忍耐の許す限り大きなクラスターを成長させよ．

$L = 257$ としたとき，もとのイーデンクラスターと，その成長点のみを表示したものとを，図 3, 4

に示す．この図から，成長点の大部分はクラスターの外縁にあることが分かる．

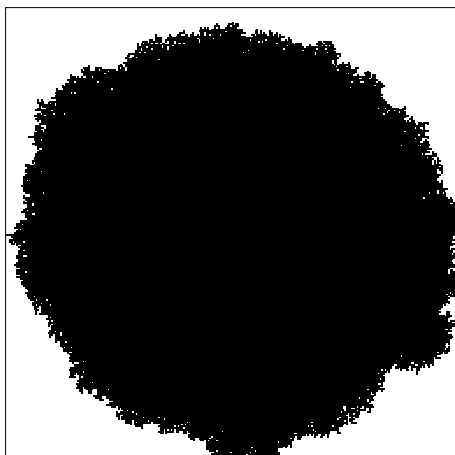


図3 格子サイズ $L = 257$ のとき，生成されたイーデンクラスター

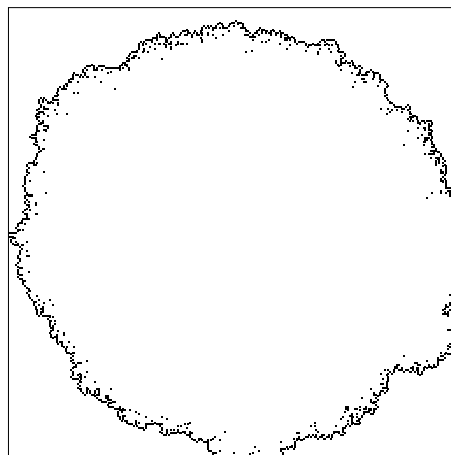


図4 格子サイズ $L = 257$ のとき，イーデンクラスターの成長点

また， $L = 513$ としたときのクラスターの成長点を描画したものを図5に示した．

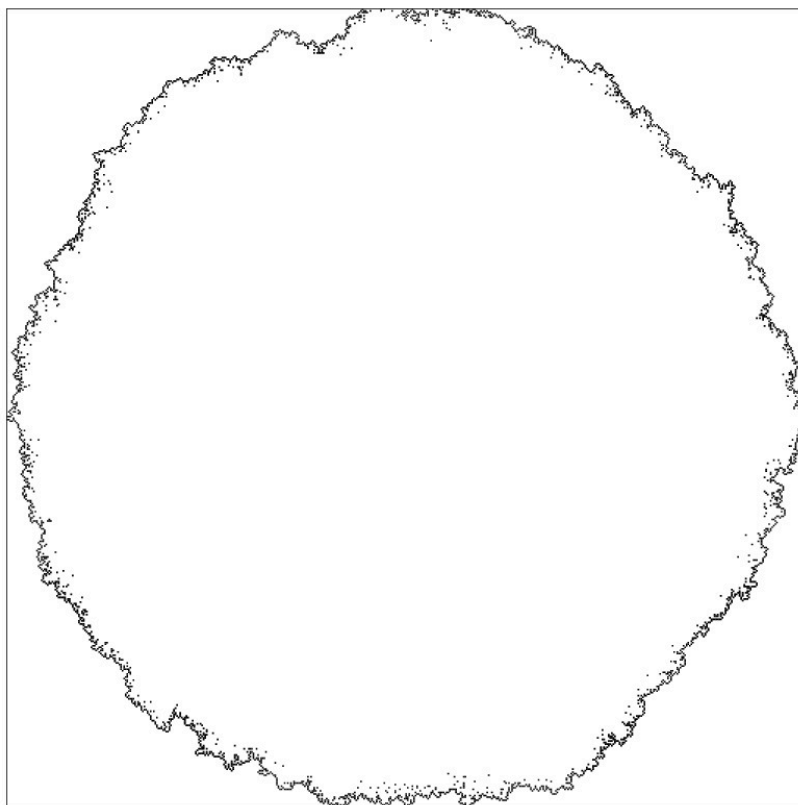


図5 格子サイズ $L = 513$ としたとき，イーデンクラスターの成長点

4 まとめ

クラスターの生成方法としてよく知られたイーデンモデルについて学び，またその生成されたクラスターはフラクタル図形ではなく，コンパクトであることを確認できた．

参考文献

- [1] ハーベイ・ゴールド，ジャン・トボチニク．石川正勝・宮島佐介訳．『計算機物理学入門』．ピアソン・エデュケーション，2000．