計算科学クラスター演習 事前準備

- ThinkPadを起動し，Linux(CentOS)を起動
  - 学籍番号，MyWasedaのパスワードでログイン
- Firefoxを起動し，https://github.com/ssh0/SCS_yamlab2016 にアクセス
  - 

をクリック後，”Download ZIP”を選択
  - 「ダウンロード」ディレクトリに保存されたmaster.zipをホームディレクトリに移動
- 「端末」アプリケーションを起動して以下を実行
  - 圧縮ファイルの展開
    - unzip master.zip
  - “SCS_yamlab2016-master”というディレクトリが生成されているか確かめる
    - doc/以下にこのスライドがあります。適宜参照してください。

計算科学クラスター演習 2016/06/21

パーコレーションの基礎とフラクタル

山崎研究室 55号館N棟302
藤本將太郎 (fuji101ijuf@fuji.waseda.jp)

本日の流れ

- (コードの共有)
- 研究室紹介
- シミュレーションの実施と内容の解説
  - パーコレーション
  - パーコレーション確率
  - フラクタル次元
  - 粗視化による繰り込み
- 課題説明

研究室紹介

- 身のまわりの現象の普遍的理解をめざして
- “身のまわりで観られるパターン形成現象・行動様式に対し、特に、統計物理学・物理的動力学の観点から、単純なモデル化、数理構造の抽出を目指して研究を行っています。”1)

1) http://www.y2003.phys.waseda.ac.jp/cgi-bin/fswiki/wiki.cgi?page=FrontPage

研究室紹介

- 研究分野
  - 統計物理学
  - 非線形動力学
- 研究対象
  - それぞれの興味にしたがって
  - 着目している系に依らない普遍的な性質やその数理的構造
- 具体的なテーマ
  - http://www.y2003.phys.waseda.ac.jp/cgi-bin/fswiki/wiki.cgi?page=研究テーマ

パーコレーションについて

- “着目している系に依らない普遍的な性質”
  - 具体 (着目している系):
    - 物質中の隙間を液体が浸透するか
    - 果樹園で胴枯れ病が伝染するかどうか
    - 絶縁体と導体の混合物が導電性を持つか
  - 抽象 (普遍的性質): 「つながり」
- 数理的構造
  - 必要な要素
    - ネットワーク
    - ランダムな「つながり」
    - 一続きのサイズ

パーコレーションについて

- ボンドパーコレーション
  - 格子(正方格子，三角格子など)の格子点どうしを結ぶボンドをランダムに占有
- サイトパーコレーション
  - 格子点をランダムに占有
  - 隣接する他の格子点も占有されていればその間にはつながりがある

サイトパーコレーション

- 占有確率 p:
  - 格子点を占有させるかどうかを決める確率
- pが大
  - 端から端までつながったクラスターが存在
    - ＝パーコレーションクラスター
    - 最大クラスターサイズ≒システムサイズL
- pが小
  - パーコレーションクラスターが存在しない

サイトパーコレーション

- シミュレーション
  - bin/ディレクトリ内のsim_percolation.pyを実行
    - cd bin; python sim_percolation.py
  - パラメータ設定ダイアログが開くので，各自適当な値を代入して”Run”ボタンを押す
  - L×Lの各格子点が確率pで占有され，それぞれのクラスターがラベル付されたものが描画される
    - マウスオーバーするとラベル名(整数)が左下に表示される
    - 上部のタスクバーから操作して，画像として保存することができる
  - パーコレーションクラスターは別の色で表示される

サイトパーコレーション

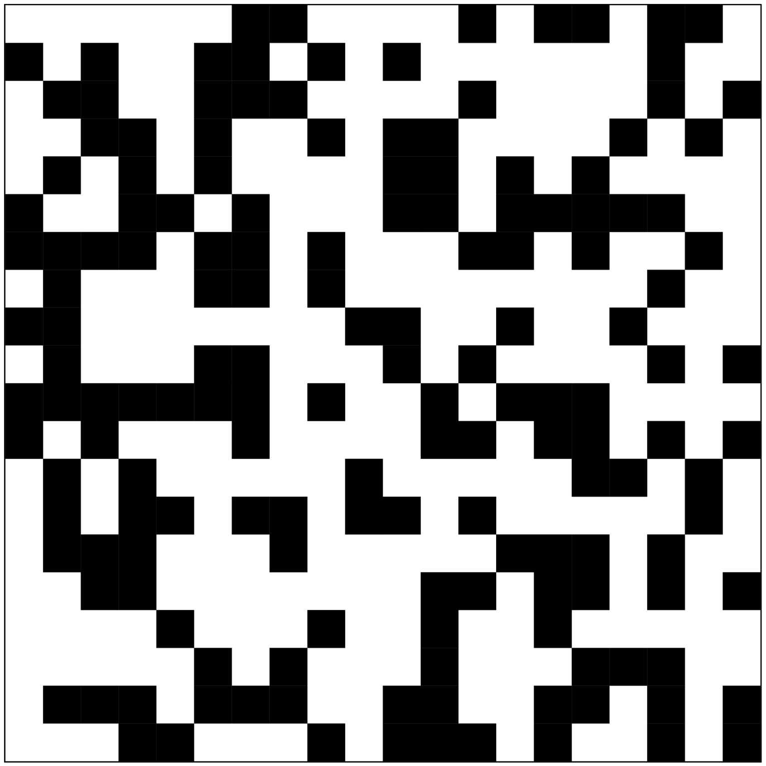

図1 占有された格子点 (p=0.4, L=20)

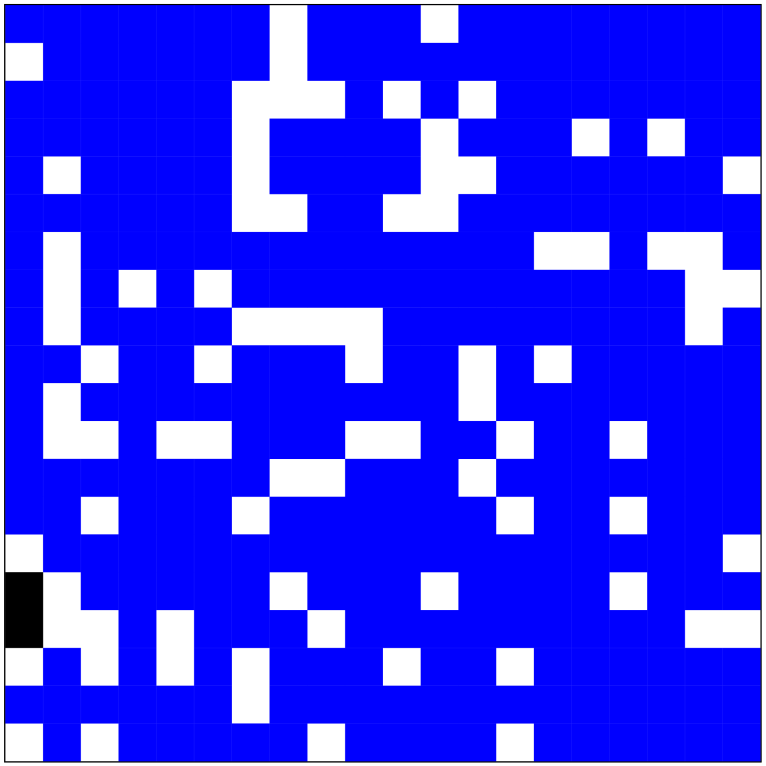

図2 占有された格子点 (p=0.8, L=20)

ちょうどパーコレーションクラスターが存在するようになる
<u>中間の値</u>が存在 (=パーコレーション閾値)

サイトパーコレーション

- パーコレーション頻度P(p):

  ＝ (パーコレートした回数)/(試行回数)

- シミュレーション
  - `sim_percolation_frequency.py`を実行
  - 異なるシステムサイズL
  - `trial`: 試行回数
  - `p_num`: 占有確率pの刻みの個数

パーコレーション確率

- 最大クラスターサイズ$M(L)$:
  - L×L格子内で最大のクラスターに含まれる占有格子点の数
- 最大クラスターサイズ密度:
  - $P_N(p) = M(L)/L^2$
- パーコレーション確率$P_\infty(p)$:
  - $P_\infty(p) = \lim_{N\to\infty} P_N(p)$
  - Lの増大につれて曲線の立ち上がりがよりシャープに

パーコレーション閾値

- パーコレーション閾値 p_c:
  - P_∞=0となる最大の確率p
  - $p_c = \sup\{p|P_\infty(p) = 0\}$
- 連続的に変化するパラメータのある1点で定性的変化

= <u>相転移</u>

端から端まで連結したクラスターのない状態

↓

端から端まで連結したクラスターを持つ状態

パーコレーション確率

- シミュレーション
  - `sim_percolation_probability.py`を実行
  - ポイント
    - サイズLに対する依存性
    - パーコレーション閾値はどのくらいか?
      - 参考) 2次元正方格子上のサイトパーコレーションでの閾値

$$p_c \fallingdotseq 0.5975$$

パーコレーションクラスターのフラクタル次元

- フラクタル (自己相似性)
  - 図形の全体と部分がスケール変換を通して相似
    - 数学: Cantor set, Koch curve, Sierpinski gasketなど
    - 自然界: 海岸線や雲の輪郭線，枝分かれした樹木の形，血管構造など
- フラクタル次元
  - その図形の構造を評価するための定量的な尺度
    - $M \propto R^D$ (質量次元)
    - 求め方にはいくつか方法がある

フラクタル次元の測定(視野拡大法)

- 最大クラスター内のある一点を中心とする一辺bの領域内に含まれる占有点数M(b)を数える
  - 中心とした位置の依存性をなくすため，さまざまな中心点をとってそれを平均
- 閾値p_c=0.5975における横軸b，縦軸M(b)の両対数グラフを描く

フラクタル次元の測定(視野拡大法)

- シミュレーション
  - sim_fractal_dimension.pyを実行
    - “Created cluster is not percolated. Try again.”と表示される場合はもう一度ボタンを押して実行
  - グラフが表示され，結果はresult_fractal_dim.csvに保存される
  - (課題1) 視野拡大法によって求められたデータを用いてフィッティングを行い，実際にフラクタル次元を求めてみよ。

粗視化による繰り込み

- 粗視化
  - 粗く視る: 視るスケールによって見え方が異なる
- (今回の)ルール
  - 粗視化因子bの長さで区切られたブロックを一つの(繰り込まれた)格子点とみなす
  - 繰り込まれた格子点が占有されるかどうかは，ブロックの中でパーコレートしているかどうか

粗視化による繰り込み

- シミュレーション
  - `sim_percolate_renormalize.py`を実行
  - “Run”でクラスターを生成した後，一旦そのウィンドウを閉じ，“Renormalize the cluster”ボタンを押して繰り込まれた後のクラスターの様子を観察
  - pやLを変えて観察

粗視化による繰り込み

- 繰り込み操作によって，
  - 元の占有確率が低いと，繰り込み後の占有確率はより低く
  - 〃 高 〃 高く
- (課題2) 元の占有確率と粗視化後の占有確率の間の関係式は繰り込み変換の式(または漸化式)と呼ばれる。粗視化因子b=2のときのこの式を求めよ。

  またこの式から，繰り込み操作によって占有確率が変化しないような占有確率(固定点)を求めることができる。固定点のうち，非自明なものを求めよ。

フラクタル次元の測定(繰り込み)

- もとの格子と，大きさ$L' = L/b$に繰り込まれた格子の両方で, $p = p_c$における端から端まで連結したクラスター内の占有された格子点の数Mの2乗を数えると，それぞれ

$$\langle M^2 \rangle \sim R^{2D} \qquad \langle M'^2 \rangle \sim \left(\frac{R}{b} \right)^{2D}$$

のような関係となる。よって

$$b^{2D} = \frac{\langle M^2 \rangle}{\langle M'^2 \rangle}$$

フラクタル次元の測定(繰り込み)

- シミュレーション
  - sim_fractal_dimension_renormalization.pyを実行
  - グラフが表示され，結果はresult_fractal_dim_renormalization.csvに保存される
  - (自主課題) データをフィッティングし，その傾きからフラクタル次元を求めてみよ。視野拡大法で求めたものと比べてどうか。

課題

- 課題1)
  - 視野拡大法によって求められたデータを用いてフィッティングを行い，実際にパーコレーションクラスターのフラクタル次元を求めてみよ。
- 課題2)
  - 元の占有確率と粗視化後の占有確率の間の関係式は繰り込み変換の式(または漸化式)と呼ばれる。粗視化因子b=2のときのこの式を求めよ。

    またこの式から，繰り込み操作によって占有確率が変化しないような占有確率(固定点)を求めることができる。固定点のうち，非自明なものを求めよ。
- 課題3)
  - パーコレーション，もしくはフラクタルについて自分なりに調べてまとめよ。

(発展課題)

- プログラムを変更し，格子のサイズLを変えた時の最大クラスターサイズM(L)の関係を，いくつかのpの値に対して求めてみよ。閾値の前後で振る舞いはどう変わるか。

参考文献

- ハーベイ・ゴールド, ジャン・トボチニク 著, 鈴木増雄監訳, 計算物理学入門, ピアソン・エデュケーション, 第3版, 413-454, 2000.
- Jens Feder, Fractals, Plenum Press, 104-117, 1988.