# Wykład 3: Modele sieciowe, ciąg dalszy

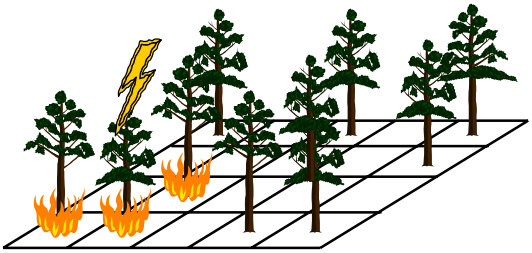
Fizyka komputerowa 2005
Katarzyna Weron,
kweron@ift.uni.wroc.pl

## Plan

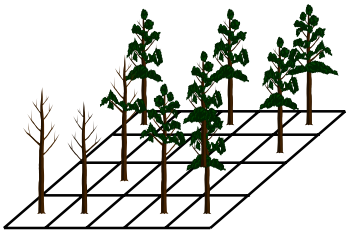
- Model Perkolacji
- Błądzenie losowe a ruch Browna
- Błądzenie losowe w dwóch wymiarach
- Modelowanie rzeczywistości
  - Układy drapieżca-ofiara
  - Rozprzestrzenianie się chorób
  - Diffusion limited aggregation (DLA)
- Mrówka Langtona i chaos deterministyczny

## Przykład 1: Pożary lasów

## Model pożaru lasu: ogień rozprzestrzenia się do NN

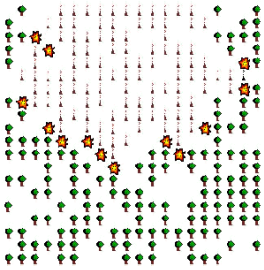


## Czy to był „dobry" las?

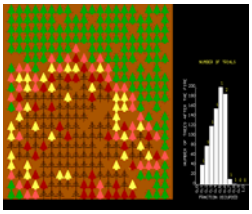


20 pól
10 drzew
3 drzewa spalone

## Można zrobić symulacje MC



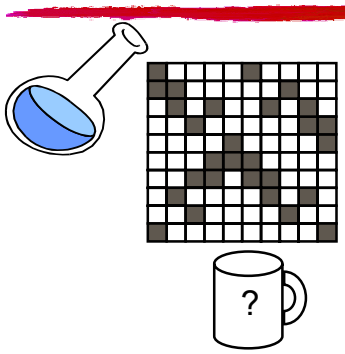
## Próg perkolacji



Próg perkolacji = koncentracja drzew, przy której pożar rozprzestrzeni

W progu perkolacji pożar trwa najdłużej

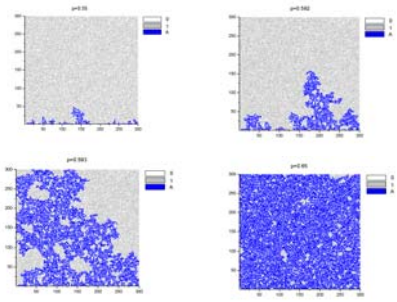
## Przykład 2: Przepływy



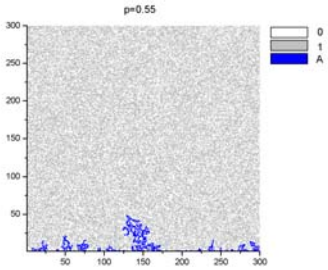

## Model przepływu

- Zbuduj filtr: losowo zapełnij niektóre miejsca siatki
- 1 (zapełnione) – prawdopodobieństwo p
- 0 (puste) – prawdopodobieństwo 1-p
- „woda” może przepływać tylko przez zapełnione miejsca i tylko do najbliższego sąsiada
- Dla jakiego p nastąpi przepływ?

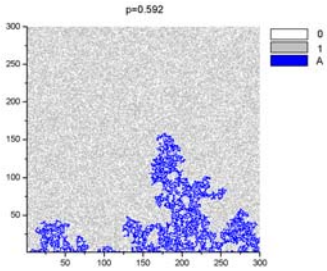
## Symulacje komputerowe



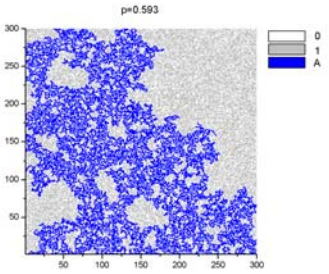
## Przepływ dla p=0.55



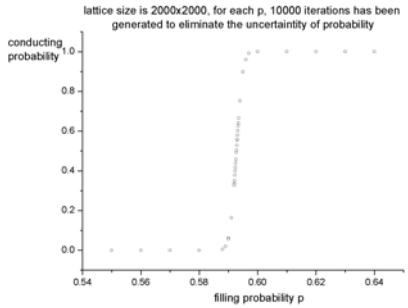

## Przepływ dla p=0.592



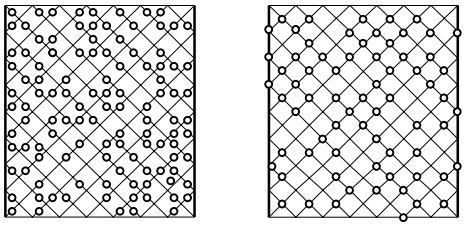
## Przepływ dla p=0.593



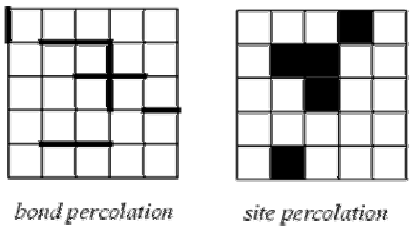

## Prawdopodobieństwo przepływu




## Problem wiązań i więzów (bond and site percolation)



## Problem wiązań i więzów (bond and site percolation)



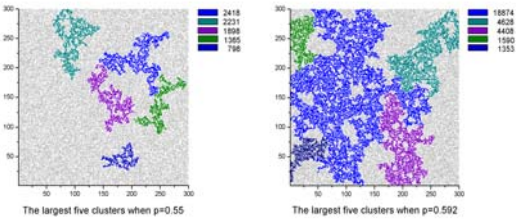

## Definicje teoretyczne = sieć nieskończona

- Próg perkolacji dla problemu site to najmniejsza koncentracja zapełnionych węzłów na sieci, przy której powstaje nieskończony klaster.
- Próg perkolacji dla problemu bond to najmniejsza koncentracja zapełnionych połączeń między węzłami sieci, przy której powstaje nieskończony klaster.

## Definicje praktyczne

- Próg perkolacji (site) to granica dla nieskończonej sieci koncentracji zapełnionych węzłów, przy której powstaje klaster łączący dwa przeciwległe brzegi sieci.
- Próg perkolacji (bond) to granica dla nieskończonej sieci koncentracji zapełnionych połęczeń, przy której powstaje klaster łączący dwa przeciwległe brzegi sieci.

## Nieskończony klaster i inne klastry




## Próg perkolacji (sieć nieskończona)

| sieć | site | bond |
|---|---|---|
| Plastry miodu | 0.696 2 | 0.652 71* |
| kwadratowa | 0.592 75 | 0.500 00* |
| trójkątna | 0.500 00* | 0.347 29* |
| diamond | 0.428 | 0.388 |
| Prosta kubiczna | 0.311 7 | 0.249 2 |
| BCC | 0.245 | 0.178 5 |
| FCC | 0.198 | 0.119 |

## Próg perkolacji - wyniki analityczne

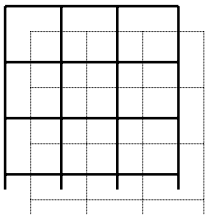
$$p_c \text{ (square bond)} = \frac{1}{2}$$

$$p_c \text{ (triangular site)} = \frac{1}{2}$$

$$p_c \text{ (triangular bond)} = 2\sin\left(\frac{\pi}{18}\right)$$

$$p_c \text{ (honeycomb bond)} = 1 - 2\sin\left(\frac{\pi}{18}\right).$$

## Perkolacja na sieci kwadratowej (bond): dualność sieci

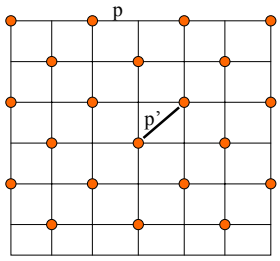


$$p > p^* \Rightarrow q < q^*$$
$$p < p^* \Rightarrow q > q^*$$
$$q^* = p^*, q^* = 1 - p^*$$
$$p^* = 0.5$$

p — Mogę przejść

q=1-p — Nie mogę przejść

## Grupa renormalizacyjna: Perkolacja na sieci kwadratowej



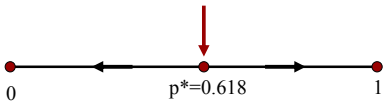

$$p' = p^4 + 2p^2(1-p)^2 + 4p^3(1-p) = 2p^2 - p^4$$

## Szukamy punktów stałych transformacji:

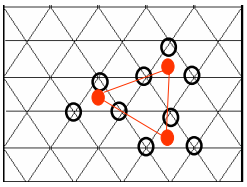
$$p' = 2p^2 - p^4$$

Metoda grupy renormalizacyjnej!

Punkty stałe, tzn. p'=p: p*=0, p*=1, p*=0.618

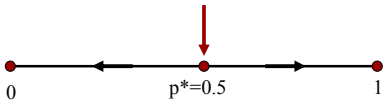


## Problem węzłów na sieci trójkątnej

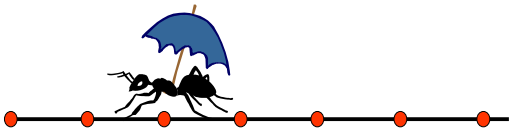


$$p' = p^3 + 3p^2(1-p)$$

$$p' = p \rightarrow p = 0{,}0.5{,}1$$



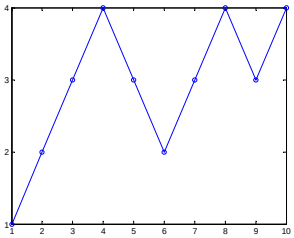

## Pijana mrówka na linie



orzeł: w prawo
reszka: w lewo

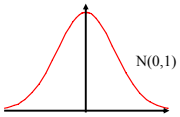
## Trajektoria błądzenia losowego

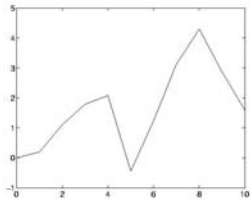
| | |
|---|---|
| 1 | 1 |
| 1 | 2 |
| 1 | 3 |
| 1 | 4 |
| -1 | 3 |
| -1 | 2 |
| 1 | 3 |
| 1 | 4 |
| -1 | 3 |
| 1 | 4 |



## Błądzenie losowe - formalizm matematyczny

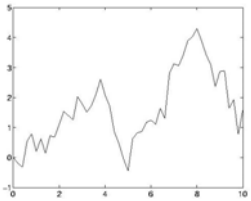
- Błądzenie losowe:
  $B(t+1) = B(t) + z(t+1), \quad B(0) = B_0$
  - gdzie zmienna losowa $z(t) \sim N(0,1)$, tzn. $z(t)$ ma rozkład normalny o średniej 0 i wariancji 1



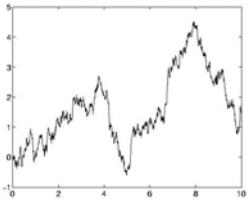
## Błądzenie losowe - formalizm matematyczny cd.

- Błądzenie losowe gdy przyrosty czasu $\neq 1$:
  $B(t+\Delta) = B(t) + z(t+\Delta), \quad B(0) = B_0$
  - gdzie zmienna losowa $z(t) \sim N(0,\Delta)$, tzn. $z(t)$ ma rozkład normalny o średniej 0 i wariancji $\Delta$

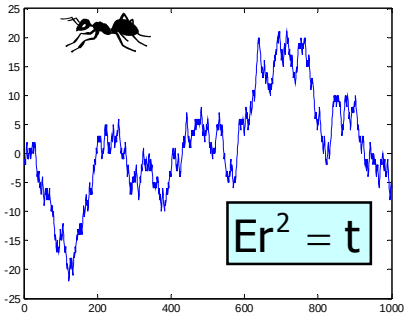


## Błądzenie losowe - formalizm matematyczny cd.

- Błądzenie losowe gdy przyrosty czasu są nieskończenie małe:
  $B(t+dt) = B(t) + z(t+dt), \quad B(0) = B_0$
  - gdzie zmienna losowa $z(t) \sim N(0,dt)$, tzn. $z(t)$ ma rozkład normalny o średniej 0 i wariancji $dt$
  - $z(t)$ to tzw. biały szum



## Gdy liczba kroków jest duża




## Ruch Browna - definicja

- Proces stochastyczny $\{B(t): t \geq 0\}$ nazywamy ruchem Browna (procesem Wienera) jeśli:
  - $B(0)=0$ p.w.;
  - $\{B(t): t \geq 0\}$ ma niezależne przyrosty;
  - $B(t)-B(s) \sim N(0,t-s)$ dla $0 \leq s < t < \infty$, gdzie $N(\mu,\sigma^2)$ oznacza zmienną gaussowską o średniej $\mu$ i wariancji $\sigma^2$

## Własności ruchu Browna

- B(t) ma prawie wszystkie realizacje (trajektorie) ciągłe
- Realizacje B(t) są nieróżniczkowalne p.w.
- B(t) jest procesem o przyrostach stacjonarnych i niezależnych
- Przyrosty procesu B(t) mają rozkład normalny o średniej 0 i wariancji dt, tzn. $dB(t) \sim N(0,dt)$

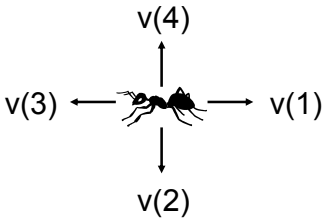
## Własności ruchu Browna cd.

- Rozkład warunkowy B(u) przy danym B(t) jest normalny o średniej B(t) i wariancji u – t, tzn. N(B(t),u – t), dla u > t
- Wariancja $Var[B(t)] \to \infty$ gdy $t \to \infty$
- B(t) jest procesem o nieograniczonym wahaniu, natomiast ma skończone kwadratowe wahanie

## Ruch Browna - symulacja

- Schemat Eulera:
  - Ustalamy siatkę n równoodległych punktów na przedziale [0,T]; oznaczamy $\tau=T/n$
  - Przyjmujemy $B(0)= B(t_0)= 0$;
  - Dla i=1,...,n bierzemy $B(t_i)=B(t_{i-1}) + \tau^{1/2}\cdot N$, gdzie $N \sim N(0,1)$

## Błądzenie losowe na sieci dwuwymiarowej




v(1)=(1,0)
v(2)=(0,1)
v(3)=(-1,0)
v(4)=(0,-1)

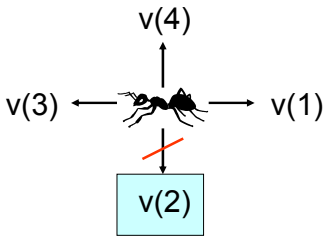
## Błądzenie losowe na sieci dwuwymiarowej - algorytm

1. r(0)=0, k=0
2. wylosuj kierunek d(k) z [1,2,3,4]
3. k=k+1, r(k)=r(k-1)+v(d(k))
4. wróć do 2

v(1)=(1,0)
v(2)=(0,1)
v(3)=(-1,0)
v(4)=(0,-1)

## Błądzenie losowe bez powrotów

Modelowanie polimerów
*Nonreversal random walk* (NRRW)




## Błądzenie losowe bez powrotów - algorytm

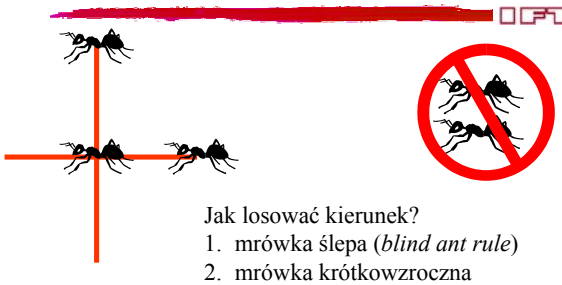
1. r(0)=0, k=0
2. wylosuj kierunek d(k)
   z [d(k-1)-1,d(k-1),d(k-1)+1]
3. k=k+1, r(k)=r(k-1)+v(d(k))
4. wróć do 2

$$\vec{v}(d \pm 4) = \vec{v}(d)$$

## Więcej cząstek

- Brak oddziaływań = jedna cząstka
- Oddziaływanie sztywnych sfer = jedna cząstka na węzeł
- Inne oddziaływania: odpychanie, przyciąganie, reakcje chemiczne

## Sztywne sfery



Jak losować kierunek?
1. mrówka ślepa (*blind ant rule*)
2. mrówka krótkowzroczna (*myopic ant rule*)

## Jaka mrówka ?

Mrówka ślepa: d z [wszystkich kierunków]

$$P_{ruch} = 1 - c$$

Mrówka krótkowzroczna: d z [wolnych kierunków]

$$P_{ruch} = 1 - c^4$$

## Błądzenie losowe wielu cząstek - algorytm MC

1. Dla danego rozmiaru sieci (np. NxN) i danej koncentracji C∈(0,1) ustaw losowo (np. z rozkładem jednostajnym) L=NxNxC mrówek
2. Jeden krok **Monte Carlo (MC)** polega na L-krotnym:
   1. Wylosowaniu mrówki
   2. Wylosowaniu kierunku ruchu mrówki
   3. Zastosowaniu reguł modelu (np. drapieżca „zjada" ofiarę)
3. Powtórz wielokrotnie (np. 1000x) pojedynczy krok MC

## Warunki brzegowe

- Sztywne (*hard boundary conditions*)
  - Wylosowanie kierunku ruchu poza sieć powoduje brak ruchu mrówki
  - Tak jakby mur okalał całą sieć ...

## Warunki brzegowe cd.

- Swobodne (*free boundary conditions*)
  - Wylosowanie kierunku ruchu poza sieć powoduje usunięcie mrówki z układu
  - Mrówka znika, więc dobrze jest mieć jakieś źródło nowych mrówek (→ rozmnażanie)

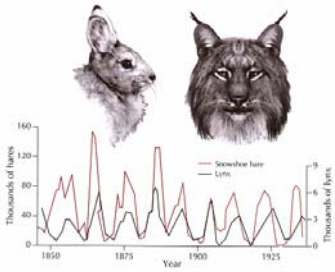
## Warunki brzegowe

- Cykliczne (*periodic boundary conditions*)
  - Wylosowanie kierunku ruchu poza sieć powoduje powoduje pojawienie się mrówki po drugiej stronie sieci, tzn.

    **∀i,j: (i,N+1)=(i,1) oraz (N+1,j)=(1,j)**
  - Jest to przybliżenie układu nieskończonego

## Modelowanie rzeczywistości 1/4 - układy drapieżca-ofiara

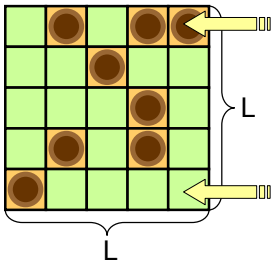
### Zające i Rysie




## Układy drapieżca-ofiara - dyfuzja z reakcją chemiczną

- Dynamika populacyjna w układach drapieżca ofiara:
  - drapieżca + ofiara → drapieżca
  - czyli A + B → A

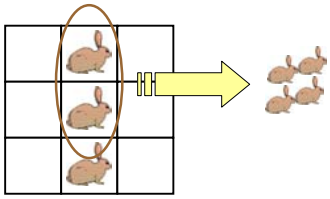
## Przykład: populacja wilków i zajęcy



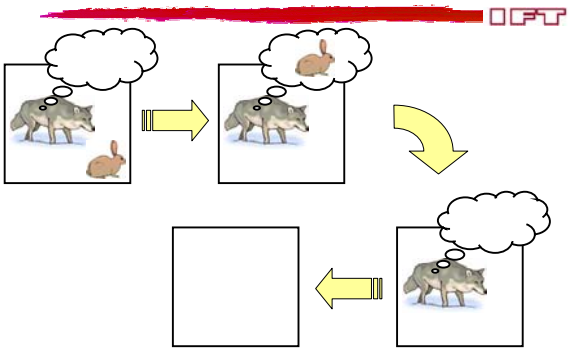

**Nory:** zające mają schronienie, ale nie mają pożywienia

**Trawa:** zające mają pożywienie, ale mogą zostać zjedzone przez wilki

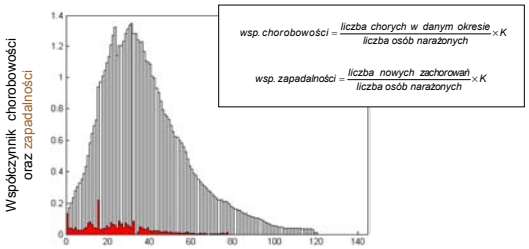
## Przykład cd.: ruch + partner = potomstwo



## Przykład cd.: reakcja chemiczna oraz zużywanie zapasów



## Modelowanie rzeczywistości 2/4 - epidemia SARS

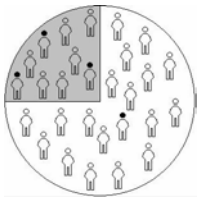



Kolejne dni trwania epidemii SARS w Hong Kongu

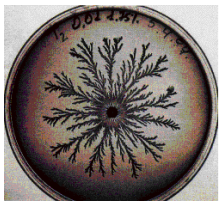
Źródło: Renata Wywrot (2004) *Modelowanie rozprzestrzeniania się epidemii SARS*, Praca inżynierska, PWr

## Rozprzestrzenianie się chorób - dyfuzja z reakcją chemiczną

- Rozprzestrzenianie się chorób
  - chory + zdrowy → chory + chory
  - czyli A + B → 2A



## Modelowanie rzeczywistości 4/4 - Diffusion Limited Aggregation (DLA)



Wzrost bakterii *Bacillus subtilis* 168 (*B* 168)

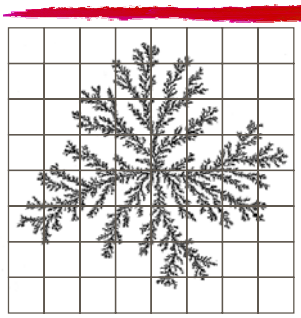
## Gdzie znajdziemy DLA ?

- Lepkie paluszki – wypieranie jednej cieczy przez drugą
- Przebicie dielektryczne
- Tworzenie się roztworów chemicznych
- Wzrost kryształów
- Wzrost kolonii bakterii
- Układ krwionośny siatkówki oka
- Rozrost sieci neuronów

## Jak powstaje DLA ?

- Algorytm konstrukcji DLA
  1. Ustaw ziarno („przylepiec”)
  2. Wypuść losowo spacerującą cząstkę
  3. Cząstka przylepi się do ziarna

## Jaki jest wymiar (fraktalny) DLA ?

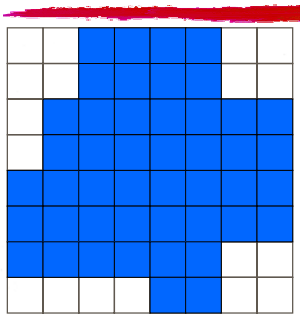


**Boxcounting:**

Bok:
**L=1/8**

Liczba pudełek o boku L potrzebnych do pokrycia DLA
**N(L)=?**

## Wymiar pudełkowy (metoda *boxcounting*)

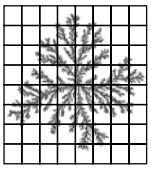


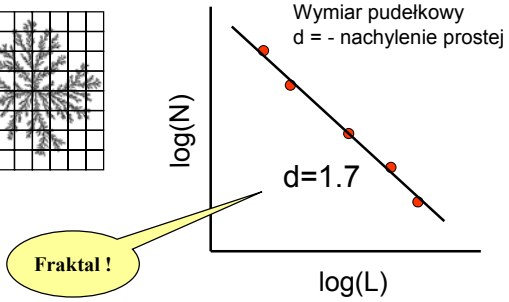
**Boxcounting:**

Bok:
**L=1/8**

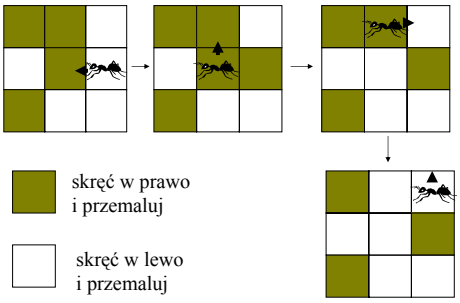
Liczba pudełek o boku L potrzebnych do pokrycia DLA
**N(L)=46**

## Narysuj to w log-log’u

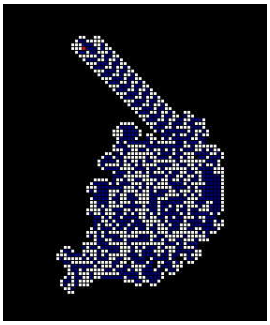





## Mrówka Langtona – losowość czy chaos deterministyczny?



## Co ta mrówka wyprawia ?!



- T~500: powrót i ruch chaotyczny
- T~10 000: „autostrada”