

Ettekanne aines  
“Kaasaegse matemaatika  
meetodite eriseminar I”

Indrek Mandre <indrek@mare.ee>

26. veebruar, 2009

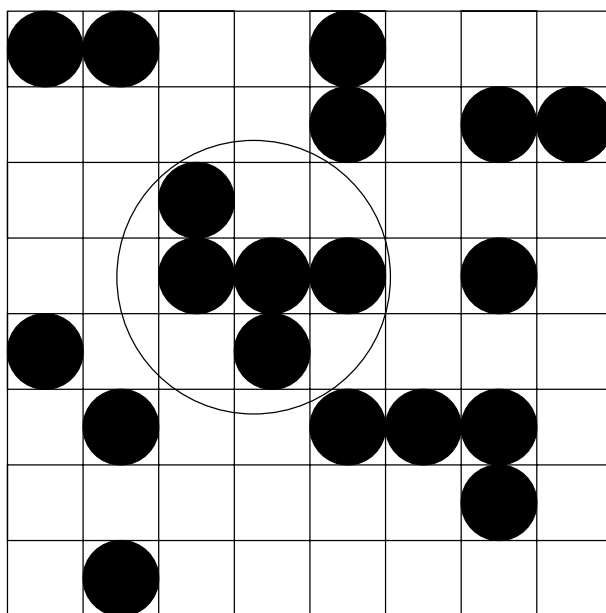
**Kokkuvõte**

Siin on toodud kerge sissejuhatusega autori lõputöö/uurimisala teemasse. Elementaarne sissejuhatus perkolatsiooniprobleemi ja juhendaja Jaan Kalda poolt väljatöötatud algoritmi eksponentide arvutamiseks kasutades modifitseeritud vähimruutude meetodit.

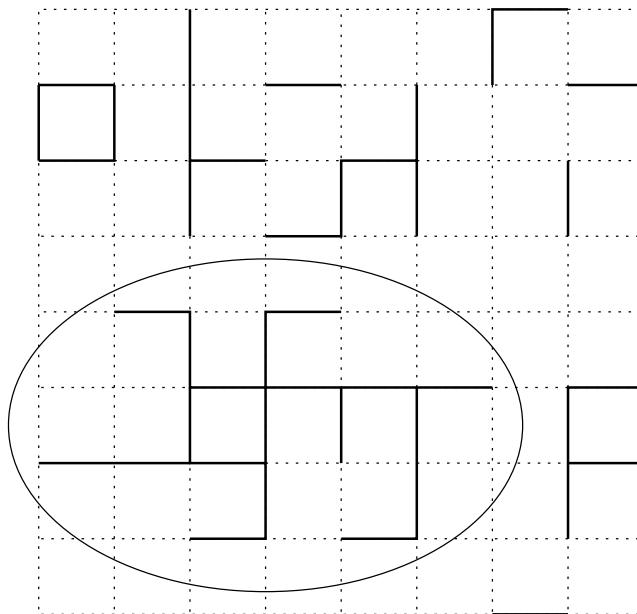
## 1 Perkolatsioon

Perkolatsiooni probleem uurib lihtsate objektide (juhusliku perkolatsiooni korral suvalist) paigutamist mingisse võrse või ruumi. Objektid on ühendatud kui nendevaheline kaugus on väiksem kui mingi  $\lambda_0$ .

Meile pakub eriti huvi, milliseid klastreid moodustavad omavahel ühendatud objektid, nende omadused ja eriti huvitab meid, millal tekib lõpmatu suur klaster.



Vaatame lihtsat näidet kahedimensionaalse võre peal. Olgu võre iga sõlm täidetud tõenäosusega  $p$ . Siin on kujutatud sõlme perkolatsioon. Kaks sõlme on seotud üheks klastriks, kui nad on teineteise küljel (igal sõlmel on 4 võimalikku naabrit). Antud joonisel on ring ümber tõmmatud 5-lisele klastrile.

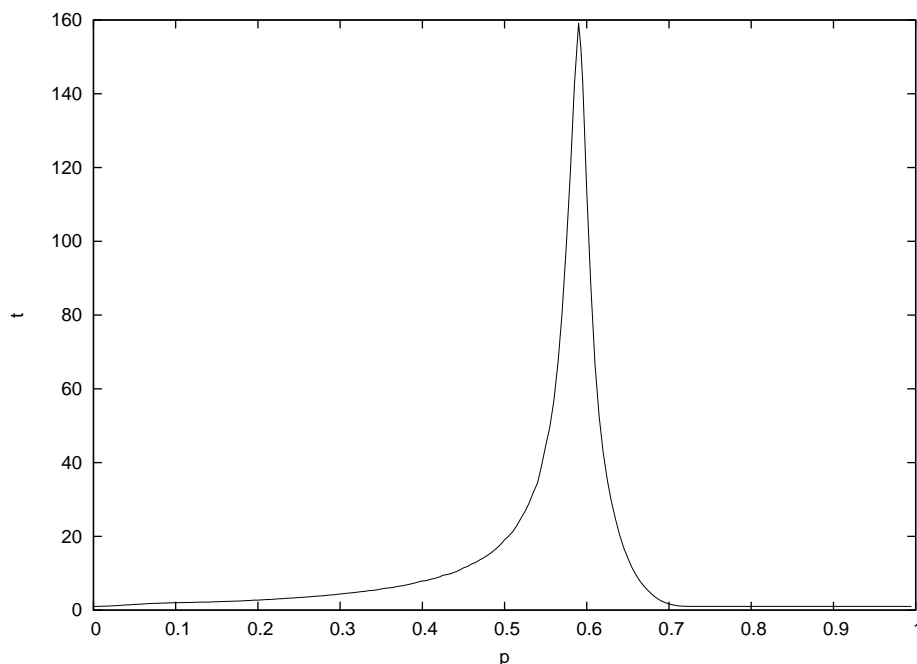


Siin on jällegi kujutatud kahedimensionaalne sideme perkolatsioon. Ring on jällegi ümber tõmmatud suurimale klastrile (19 sidet).

Nagu öeldud huvitab meid nn. perkolatsiooni lävi  $p_c$  - mille korral moodustub lõpmatu suurusega klaster, mis ulatub võre ühest otsast teise. Füüsilise mudelina võib siin ette kujutada vedeliku liikumist läbi poorse aine - vedelik kas pääseb läbi või mitte. Kui me täidame sõlmi või sidemeid mingi tõenäosusega  $p$ , siis alates mingist  $p > p_c$  tekib lõpmatu suurusega klaster. Perkolatsiooniteooria tegeleb klastrite uurimisega peaaesjalikult selle lävi  $p_c$  ligiduses.

## 2 Paar huvitavat omadust, näidet

Miks on see käitumine  $p = p_c$  juures niivõrd huvitav? Selleks toome järgmise näite: vaatame metsa, kus kasvavad puud. Jagame metsa võreks ja kasvagu igas võre sõlmes puu tõenäosusega  $p$ . Ehk meil on tegu sõlme perkolatsiooniga. Paneme nüüd metsa ühest võre otsast põlema ja jälgime tulekahju liikumist. Seda on lihtne modelleerida arvutil kasutades Monte-Carlo simulatsiooni. St. me simuleerime põlemist suurel arvul eri sõlmede konfiguratsiooniga võresid ja arvutame keskmised parameetrid. Olgu nii, et iga Monte-Carlo sammuga vaatame järjest läbi kogu võre ja kui kohtame põlevat puud, süütame kõik tema naaberpuud (liikudes vasakult paremale, ülevalt alla). Me teeme seda kuni kõik võimalikud puud põlevad või oleme võre ühest servast teise jõudnud. Meid huvitab Monte-Carlo sammude arv kui funktsioon  $p$ -st. Selleks joonistame graafiku puu võre sõlmes kasvamise tõenäosusest tule levimise sammude arvuga. Tekib järgnev pilt:



Pildi järgi kriitilise perkolatsiooni läve juures  $p_c = 0.5927$  toimub midagi ootamatud - tuli põleb praktiliselt lõpmatu kaua. Üleminekut kriitilise  $p_c$  juures nimetatakse ka faasinihkeks.

Kommentaariks veel, et loomulikult on päris metsade põlemise modelleerimine keerukam kui antud lihtsustatud mudel.

Teine näide oleks difusioon ebakorrapärases aines. Olgu meil mingi poorne aine ja liikugu seal näiteks vesiniku aatom. Me saame seda jälle modelleerida kui perkolatsioonivõret. Olgu vesiniku aatom mingil sõlmel ja igal sammul prooviks ta juhuslikult liikuda mingi naaberruudu suunas. Kui antud suunas olev võre sõlm on täidetud, liikugu ta sinna, muidu aga jäägu paigale. Aatom on seega piiratud sellesse klastrisse, millesse ta algul oli paigutatud. 1976 nimetas Gennes antud probleemi “sipelgas labürindis”.

Simuleerime sellist sipelga liikumist palju kordi ( $n$  korda) ja leiame sellise suuruse sõltuvuse ajast:

$$R(t) = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^n r_k^2(t)}{n}}.$$

See on ruut-keskmine kaugus. Juhul kui  $p = 1$ , siis  $R^2 = t$ .

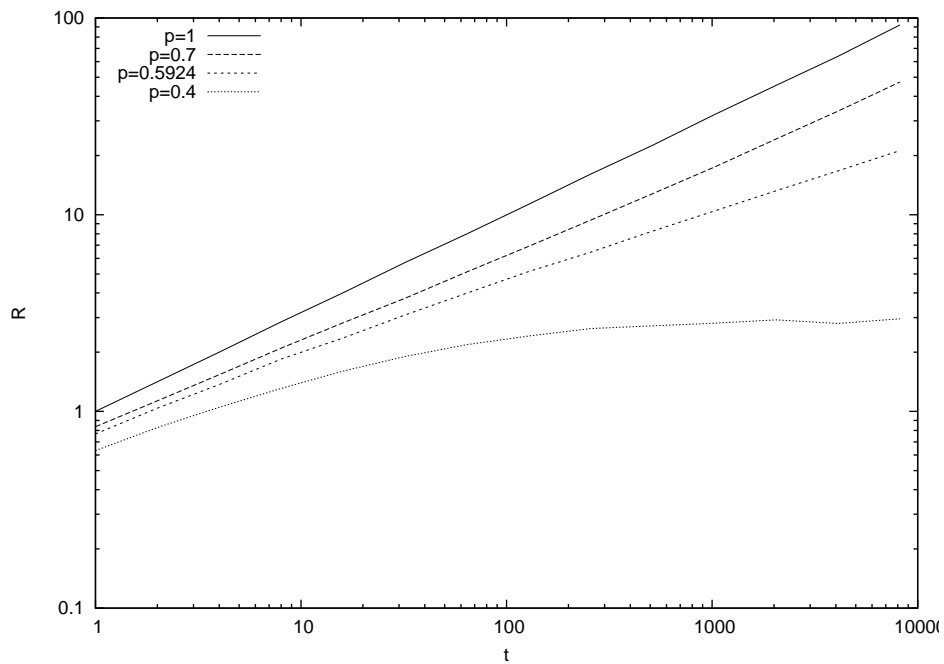
Sipelga liikumise kaugus  $R$  jälgib siin astmeseadust:

$$R \propto t^k$$

või

$$t \propto R^{\frac{1}{k}}.$$

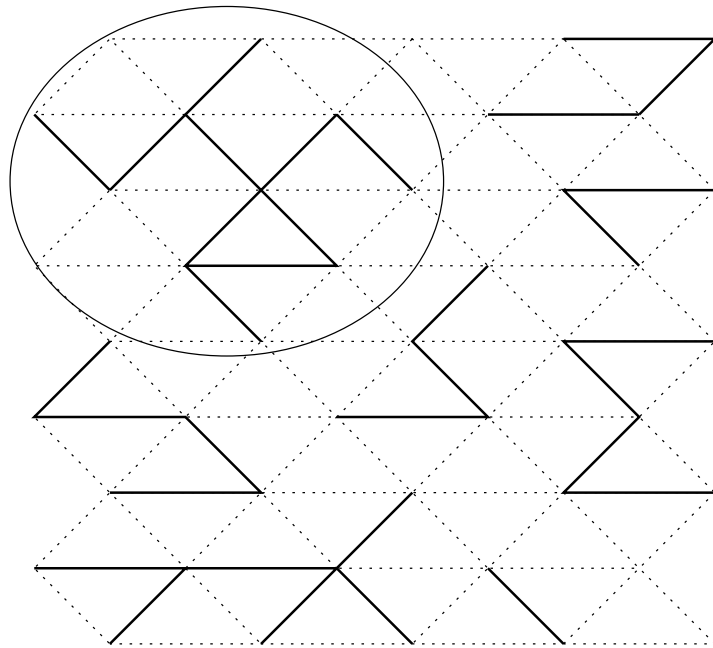
Juhul kui  $p = 0.4$ , on sipelgas piiratud ühe lõpliku suurusega klastriga ja ei suuda sõlmest lõpmata kaugemale liikuda. Kriitilise perkolatsiooni läve juures peab sipelgas läbima fraktaalse struktuuri ja konstanti  $1/k$  võib käsitleda kui liikumise



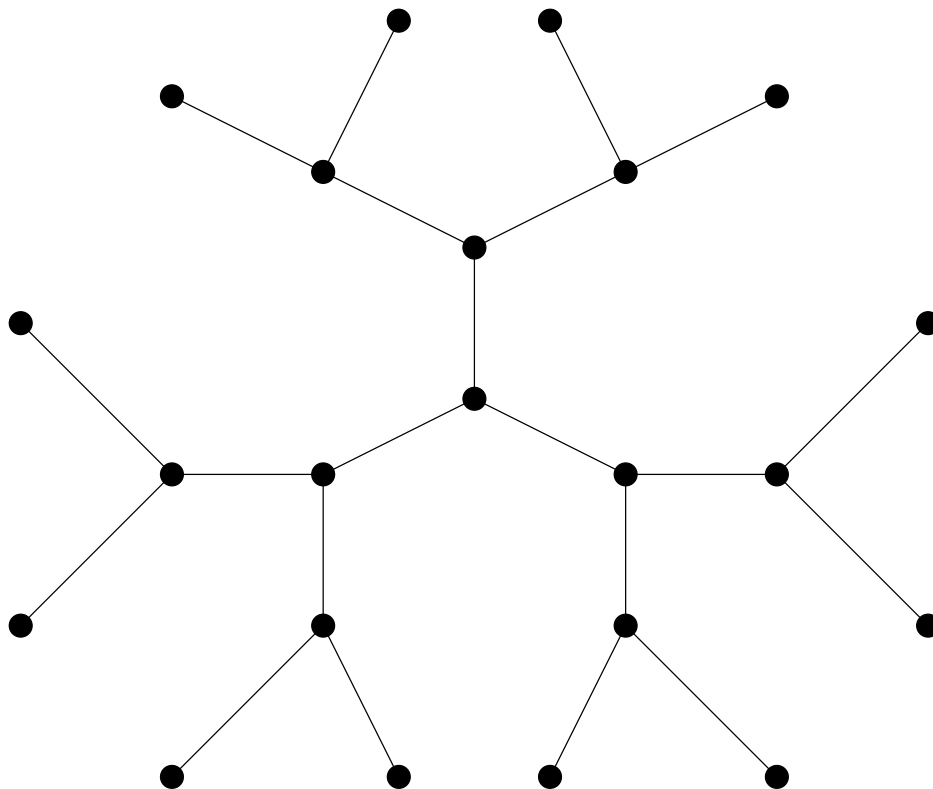
fraktaalset dimensiooni. Juhul kui  $p = 1$ , siis  $R^2 = t$  ehk  $k = 1/2$ .  $p = 0.7$  juures on struktuuri fraktaalne dimensioon tuntav ainult teatud distantstil, aga alates  $R \gg \xi$  on  $k = 1/2$ . Arvu  $\xi$  nimetatakse siin korrelatsiooni raadius, mis on aukude klastrite maksimaalseks pikkuseks.

### 3 Erinevad perkolatsioonivõred

Perkolatsioonivõred ei ole piiratud kahe dimensiooniga, ega ka ruutvõredega. Võime võtta näiteks kolmnurkse sidemete võre. Lisaks on olemas ka sõlmesideme hübriidvõred.

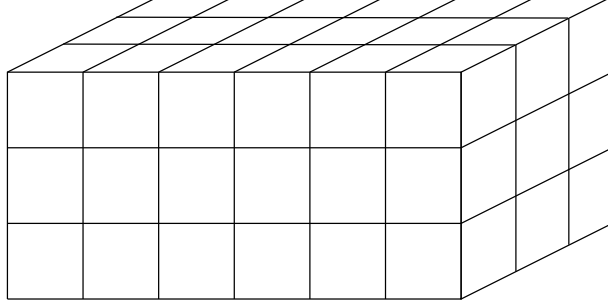


Siin on kolmnurkne võre.



See on Bethe võre või Cayley puu. Viimane on huvitav seetõttu, et tema abil

on lihtne modelleerida  $d$ -dimensionaalset struktuuri, kus  $d \rightarrow \infty$ . Antud võres ei ole ringid lubatud; samas saab näidata, et ringid ei ole perkolatsiooniprobleemis suure dimensionaalsuse korral olulised. Siin  $p_c = 1/(z - 1)$ .



3D võre. Võib olla nii sideme kui ka sõlme baasil konstrueeritud perkolatsioonimudel (servad või kastid). Üldiselt üle kahedimensionaalse võre korral võib vaadelda korruga kahte perkoleeruvat lõpmatut klastrit - seda, kus võre sõlmed on täidetud ja sellele vastavat täitmata sõlmedega klastrit (klastrid võivad käia rist-rästi a la mitmetasemelised sillad). 2D perkolatsiooni korral pole see tavaliselt võimalik.

## 4 Klastrite geometria

Klastrite kirjeldamiseks võib kasutada suurust  $n_s(p)$ , mis oleks  $s$ -suurusega klastrite hulk ruumiühiku kohta. Ruumiühikuks on mugav valida ühe võre ruudu suuruse. Näiteks kahedimensionaalse ruutvõre jaoks oleks ühese klastritihedus ja ka tõenäosus, et antud sõlm on klastrit nurgas  $n_1(p) = p(1-p)^4$  - üks okpueeritud ja selle kõrval neli tühja naabersõlme.  $n_2(p) = 2p^2(1-p)^6$ ,  $n_3(p) = 2p^3(1-p)^8 + 4p^3(1-p)^6$  jne.

Tõenäosus, et täidetud sõlm kuulub klastrisse suurusega  $s$  on  $sn_s(p)$ . Summa kõikide võimaluste üle, et antud sõlm kuulub lõplikku klastrisse või lõpmatusse klastrisse, peab andma kokku  $p$ :

$$\sum_{s=1}^{\infty} sn_s(p) + P_{\infty}(p) = p.$$

Siin  $P_{\infty}(p)$  on tõenäosus, et antud sõlm kuulub lõpmatusse klastrisse ( $p < p_c$  korral on ta 0).

Teine asi, mida vaadata, on keskmine klastrit suurus. Tõenäosus, et mingi sõlm kuulub klastrisse suurusega  $s$ , on  $sn_s(p)$ , mingisugusesse lõplikusse klastrisse kuulumiseks  $\sum_{s=1}^{\infty} sn_s(p)$ . Seega tõenäosus, et sõlm kuulub klastrisse suurusega  $s$  on  $w_s = sn_s(p) / \sum_s sn_s(p)$ . Keskmine klastrit suurus on seega

$$S = \sum w_s s = \frac{\sum s^2 n_s(p)}{\sum sn_s(p)}.$$

Samas  $p \leq p_c$  juures on see:

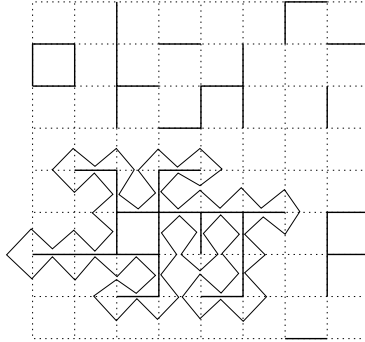
$$S = \sum \frac{s^2 n_s(p)}{p} = \frac{1}{p} \sum s^2 n_s(p).$$

Perkolatsiooniprobleemi puhul on huvitav see, et samas dimensioonis kehtib klastrite käitumises universaalsus sõltumata võre struktuurist (kas ruut või kolmnurkvõre, sõlme või sideme perkolatsioon). Kriitilise punkti  $p_c$  ligikal kehtivad järgmised seosed:

$$\begin{aligned}\hat{S}_p \sum_{s=1}^{\infty} n_s(p) &\propto |p - p_c|^{2-\alpha}, \\ \hat{S}_p \sum_{s=1}^{\infty} s n_s(p) &\propto (p - p_c)^\beta, \\ \hat{S}_p \sum_{s=1}^{\infty} s^2 n_s(p) &\propto |p - p_c|^{-\gamma}, \\ \hat{S}_H \sum_{s=1}^{\infty} s n_s(p_c) e^{-Hs} &\propto H^{1/\sigma}, \\ \xi(p) &\propto |p - p_c|^{-\nu}\end{aligned}$$

kus kriitilised eksponendid  $\alpha, \beta, \dots$  on universaalsed antud dimensioonis sõltumata võre struktuurist. Lisaks  $|p - p_c| \ll 1$  ja  $1 < H \ll 1$ .  $\xi(p)$  nimetatakse siin korrelatsiooni või koherentsi raadiuseks ja karakteriseerib klastrite suurust. Ta on suurus, peale mida klastrite esinemise sagedus väheneb eksponentsiaalselt. Operaator  $\hat{S}$  võtab siin peamise singulaarse osa allolevast valemist ja on 0 analüütilise funktsiooni juures.

Järgmine klatri omadus on tema välimine koorik ehk perimeeter (*hull*).

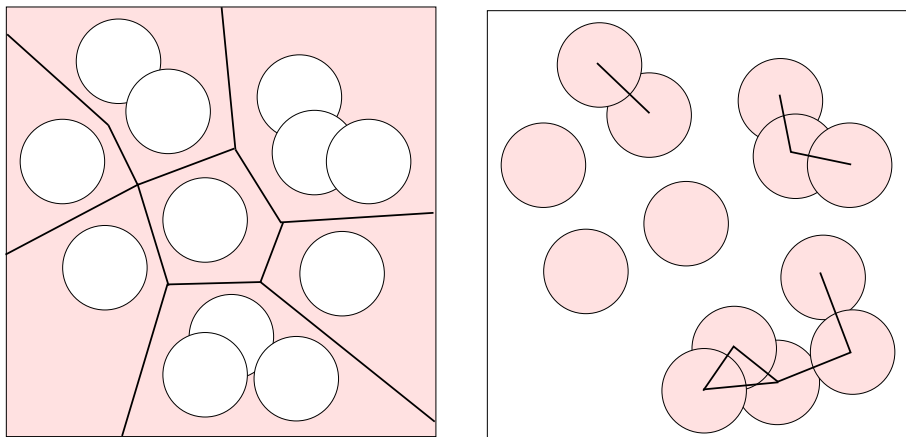


EkspONENT	d=2	d=3
$\alpha = 2 - \nu d$	$-2/3$	$-0.64 \pm 0.05$
$\beta$	$5/36$	$0.39 \pm 0.07$
$\gamma = \nu d - 2\beta$	$43/18$	$1.7 \pm 0.11$
$\delta = \nu d / \beta - 1$	$91/5$	$4.81 \pm 0.14$
$\nu$	$4/3$	$0.82 \pm 0.05$
$\mu$	$1.25 \pm 0.05$	$1.6 \pm 0.1$
$\tau = (2\nu d - \beta) / (\nu d - \beta)$	$187/91$	$2.19 \pm 0.01$

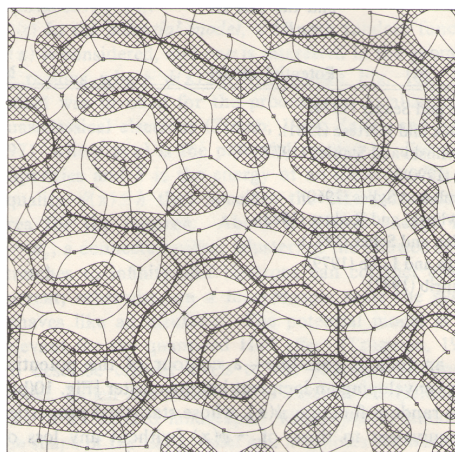
Erinevad eksponendid<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>M.B.Isichenko: Percolation, statistical topography, and transport in random media.

## 5 Perkolatsioon kontiinumis



Siinemaani käsitlesime diskreetses võres toimuvat perkolatsiooni. Siin on shveitsi juustu mudel ja kerade mudel. Esimene pole küll päris korrektne pilt, need peaksid olema Voronoi polügoonid.



Potensiaali mudeli<sup>2</sup> korral on antud funktsioon  $\psi(\mathbf{x})$ , mis annab igale ruumi asukohale väärtuse. Näiteks võib see funktsioon modelleerida geograafilist pinnareljeefi, kus siis kõrgus on  $\psi = \psi(x, y)$ . Võttes seal  $\psi(\mathbf{x}) \leq \text{const} = h$  võib funktsiooni määratud piirkonna jagada kaheks - maa ja meri. Teatud kriitilise  $h = h_c$  juures tekib lõpmatu suurusega meri. Antud rannajoont võib ka vaadata kui vektorvälja

$$\mathbf{v}(x, y) = \nabla\psi(x, y) \times \hat{\mathbf{z}}$$

jooni ja viimased on siis funktsiooni  $\psi(\mathbf{x})$  kontuurid.

Kontiinumi perkolatsiooni saab ümber teisendada võre perkolatsiooniks ehk tema kriitilised eksponendid on samas dimensioonis samad.

<sup>2</sup>Pilt on pärit "Percolation, statistical topography, and transpot in random media", M.B.Isichenko, 1992.



## 6 Fraktalid

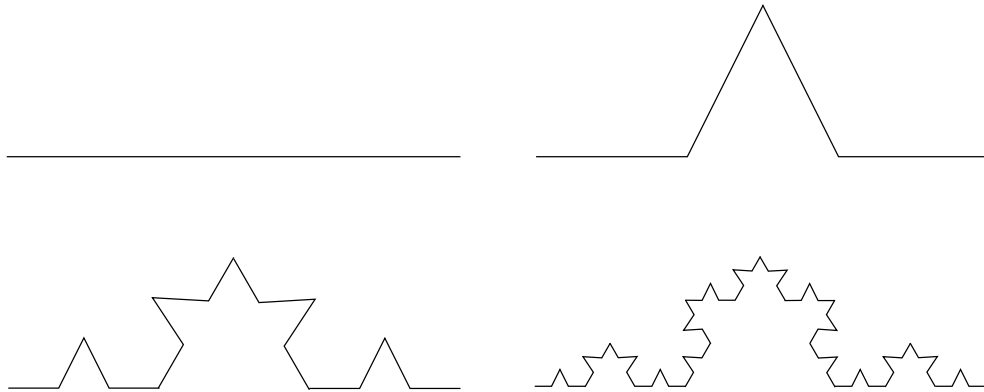
Hausdorff-Besikovitshi dimensioon - olgu meil hulk  $F$   $d$ -dimensionaalses ruumis. Katame mõõdetava hulga  $F$  kastidega  $U_k(F, \lambda_k)$ , kus kasti läbimõõt  $\lambda_k \leq \lambda$ .

$$M_s(F) = \lim_{\lambda \rightarrow +0} \inf_{U(F, \lambda)} \sum_i \lambda_i^s$$

$$D_H = \inf\{s : M_s(F) = 0\} = \sup s : M_s(F) = \infty.$$

Kastidimensioon või mahtuvusdimensioon (Kolmogorovi järgi):

$$D_K = \lim_{\lambda \rightarrow +0} \frac{\ln N_\lambda}{\ln 1/\lambda}.$$



Fraktaalise struktuuri omapära. Kui meile on antud ühe tavalise joone peal kaks punkti, saame mööda joont liikudes mööta nende punktide vahel oleva segmendi pikkuse. Aga valides kaks punkti antud Kochi kõvera sees - mis on nende vahelise joone pikkus? Lõpmatu.

Teine omadus on enesesarnasus. Suurendades joont näeme seal seda sama sikk-sakki. Juhuslikke elemente sisaldavate fraktalite puhul räägime statistilisest enesesarnasusest.

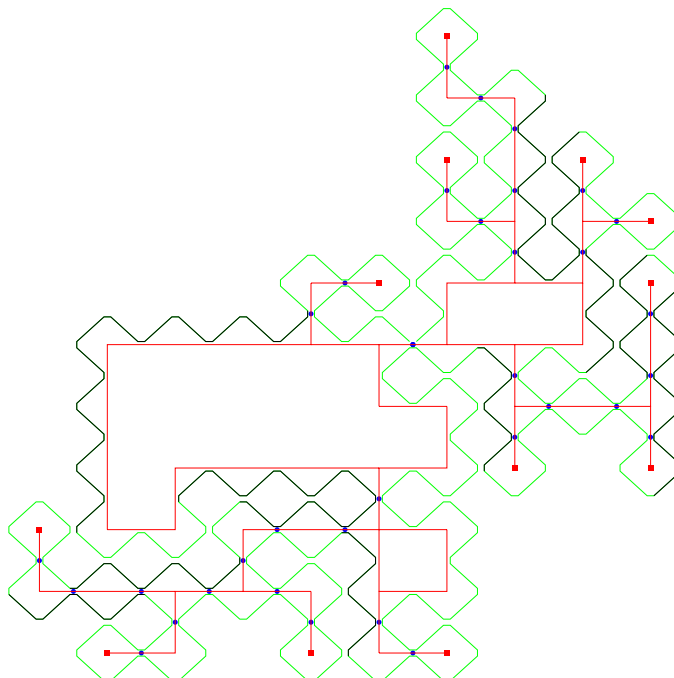
Reaalseid füüsilisi objekte samas lõpmatuseni ei saa suurendada või vähendada. Seal toimib fraktaalsus ainult mingis pikkuse vahemikus  $[\lambda_{min}, \lambda_{max}]$ . Lõpmatu klasteri puhul oleks see vahemik  $[\lambda_0, \infty]$ , kus  $\lambda_0$  on kommunikueeriva objekti suurus. Kastidimensiooni kastide arv oleks:

$$N_\lambda \simeq \left( \frac{\lambda_{max}}{\lambda} \right)^D.$$

Massi hindamine kera raadiusega  $a$ :

$$M(a) \simeq \left( \frac{a}{\lambda_{min}} \right)^D, \quad (a > \lambda_{min})$$

## 7 Eksponentide arvutamine



Antud joonisel on näha kahedimensionaalse sideme perkolatsiooni klastri koorik. Kooriku fraktaalse dimensiooni arvutamiseks kasutatavad võimalikud erinevad karakteristikud on:

- SIDES - sidemete arv, mida koorik mõlemalt poolt puudutab
- LINES - järjestikku nelja samas sihis olevate perimeetri segmentide arv
- ENDS - väljaulatuvate sidemete otste arv
- HULL - kooriku segmentide arv
- BONDS - sidemete arv, mida koorik puudutab.

Mõõdetud karakteristiku väärtus saadakse luues  $N \times N$  võre ja alustades võre keskelt liigutakse piki koorikut, kuni tuleb serv. Liikumise ajal arvutatakse karakteristiku väärtus. Seda tehakse palju kordi (miljoneid) ja nendest arvutatakse keskmine.

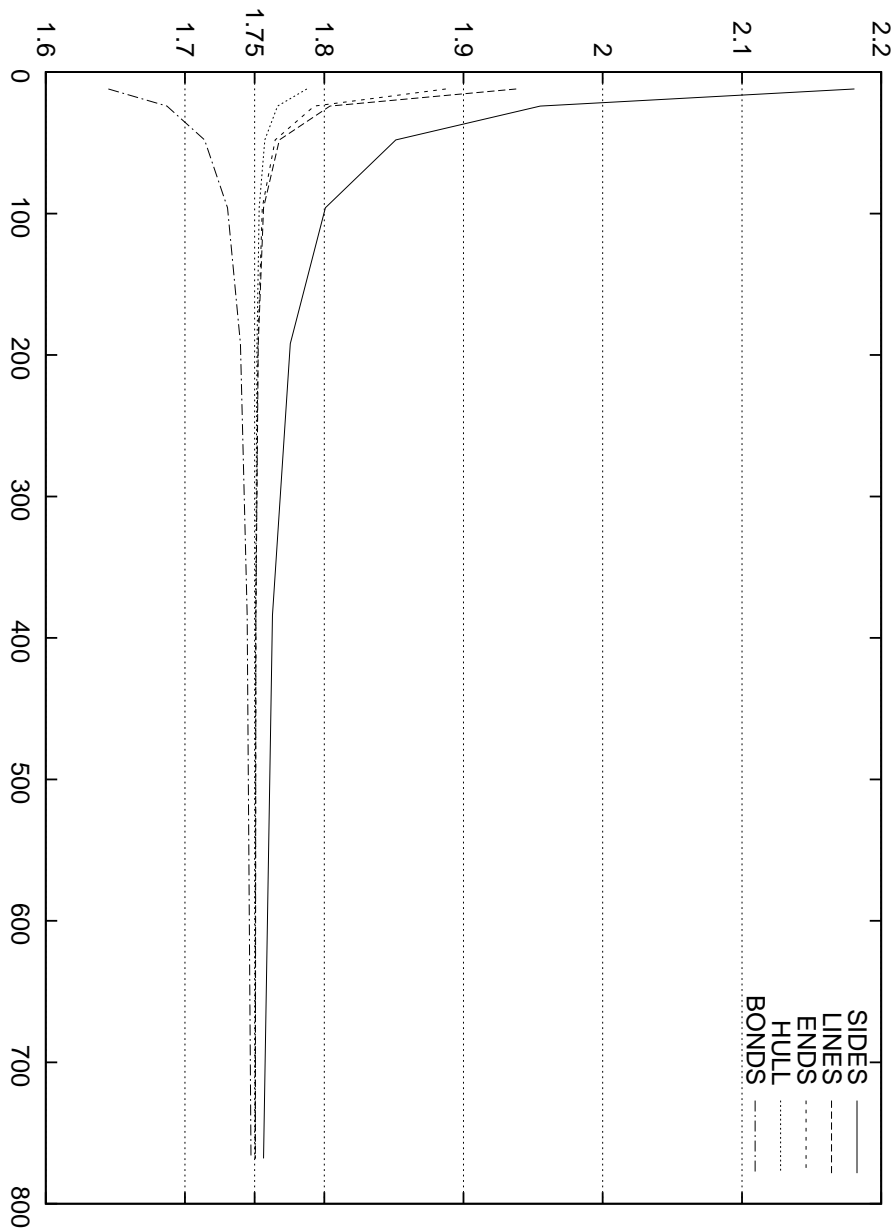
Iga konkreetse karakteristiku puhul kehtib

$$L \propto N^d,$$

kus  $L$  on mõõdetud karakteristiku väärtus,  $N$  on kasti serva pikkus ja  $d$  on perimeetri fraktaalne dimensioon. Ehk siis  $L = L_0 N^d$ . Samas see kehtib asümptootiliselt, st. siis kui  $N \rightarrow \infty$ . Joonistame graafiku tehes  $n$  mõõtmist saades  $L_1, \dots, L_n$  vastavatele võre serva pikkusele  $N_1, \dots, N_n$ . Siis x-teljel punktile

$(N_{k-1} + N_k)/2$  saame vastava y-telje  $d$  järgnevalt:

$$L_{k-1} \propto A_{k-1}^d, L_k \propto A_k^d \Rightarrow \frac{L_1}{L_2} = \left(\frac{N_1}{N_2}\right)^d \Rightarrow d = \ln \frac{L_1}{L_2} / \ln \frac{N_1}{N_2}.$$



Tulemus peaks olema 1.75. Probleem - eksponentide leidmist segab arvutus-  
tel kasutatava võre lõplik suurus - tekib lõplikust suurusest tulenev efekt. Võre

väikeste suuruste juures on tulemus tegelikult oluliselt erinev.

Traditsiooniline viis eksponendi  $d$  leidmiseks valemi  $L = L_0 N^d$  järgi on joonistada mingi ühe kindla karakteristiku punktid log-log skaalal ja leida joone tõus kasutades lineaarset regressiooni ehk vähimruutude meetodit. Samas väikeste võre suuruste korral antud seadus ei kehti ja need tuleb graafikult eemaldada. Siin on lihtne liiga palju või liiga vähe ära võtta. Tulemuse vea hindamine on raskendatud. Lisaks väga suurte võre suuruste juures võib arvutusmaht osutuda väga suureks ja ebapraktiliseks. Ja vaadates eelneva joonise pealt näiteks BONDS näitajat - näitaja võib koonduda ikka liiga aeglaselt.

Eksponentide arvutamise raskus ei ole spetsiifiline siin toodud ruutvõre kooriku näitele. Kas saaks kuidagi paremini?

Oletame, et me saame mõõta  $m$  erinevat karakteristikut  $L_k(A)$  (näiteks nagu eelmisel joonisel on neid viis tükki). Oletame, et kehtib järgmine seos:

$$L_k(N) = \sum_{\mu=1}^{\infty} A_{k\mu} N^{\alpha_{k\mu}}, \quad \text{kus } \alpha_{k(\mu+1)} < \alpha_{k\mu}.$$

Teeme teise oletuse, et esimesed  $m$  eksponenti  $\alpha_{\mu k}$  on võrdsed, ja kirjutame

$$\alpha_{\mu} \equiv \alpha_{\mu k}, \quad \text{kus } \mu \leq m.$$

Suurte  $N$ -de juures hakkab domineerima kõige suurem astendaja  $\alpha_{k1}$ , mis oleks meie otsitav eksponent.

Eeldades, et liikmed  $A_{k\mu} N^{\alpha_{k\mu}}$  ( $\mu > m$ ) on väiksemad, kui mõõdetud väärtustest saadav statistiline kõikumine, viskame nad ära ja saame süsteemi:

$$\begin{cases} A_{11}N^{\alpha_1} + A_{12}N^{\alpha_2} + \dots + A_{1m}N^{\alpha_m} = L_1(N) \\ A_{21}N^{\alpha_1} + A_{22}N^{\alpha_2} + \dots + A_{2m}N^{\alpha_m} = L_2(N) \\ \dots \\ A_{m1}N^{\alpha_1} + A_{m2}N^{\alpha_2} + \dots + A_{mm}N^{\alpha_m} = L_m(N) \end{cases}$$

ehk maatrikskujul

$$\mathbf{AN} = \mathbf{L}.$$

Teeme veel ühe eelduse -  $\det \mathbf{A} \neq 0$ , siis võttes  $\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}$  saame

$$\mathbf{N} = \mathbf{BL}$$

ehk

$$\begin{cases} B_{11}L_1(N) + B_{12}L_2(N) + \dots + B_{1m}L_m(N) = N^{\alpha_1} \\ B_{21}L_1(N) + B_{22}L_2(N) + \dots + B_{2m}L_m(N) = N^{\alpha_2} \\ \dots \\ B_{m1}L_1(N) + B_{m2}L_2(N) + \dots + B_{1m}L_m(N) = N^{\alpha_m} \end{cases}$$

Siin on tegu lineaarse suhtega. Kui meil oleks teada eksponent  $\alpha_k$ , saaksime leida vastavad konstandid  $B_{kl}$  kasutades vähimruutude meetodit. Siin tuleb nüüd trikk. Proovime erinevaid eksponente  $d$  valemile sobitada konstantidega

$$C_1 L_1(N) + C_2 L_2(N) + \dots + C_m L_m(N) = N^d$$

ja vaatame vähimruutude valemi jääki kui funktsiooni eksponendist  $d$ :

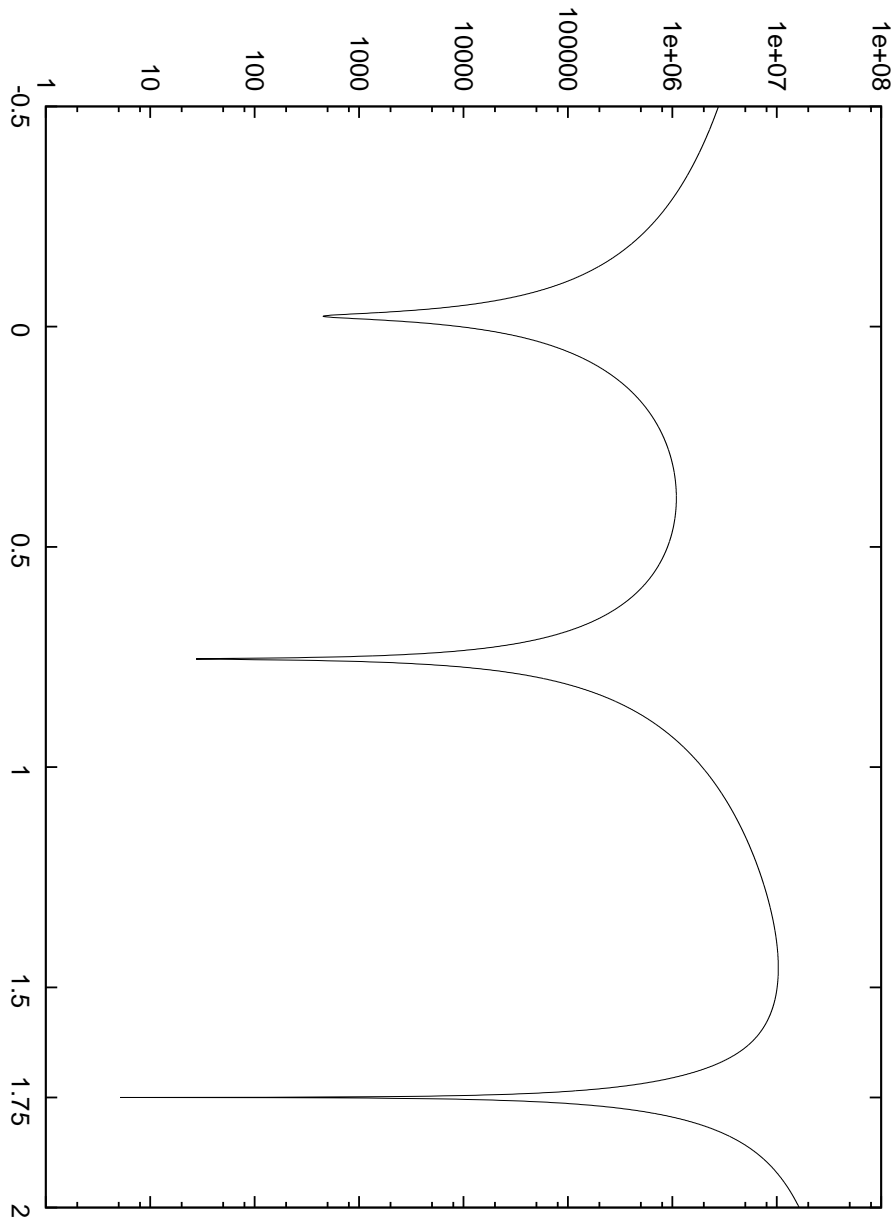
$$S(d) = \sum_{i=1}^n \frac{\left(N_i^d - \sum_{k=1}^m C_k^{(d)} L_{ik}\right)^2}{s_i^2}$$

kus  $C_k^{(d)}$  on optimeeritav kordaja ja  $s_i^2$  on sulgudes oleva avaldise dispersioon:

$$s_i^2 = \text{Var}\left(N_i^d - \sum_{k=1}^m C_k L_{ik}\right) = \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m C_k^{(d)} C_l^{(d)} \text{Cov}(L_{ik}, L_{il}) = \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^m C_k^{(d)} C_l^{(d)} \Sigma_{ikl}$$

$\Sigma_{ikl}$  on siin kovariatsioonimaatriks.

Kui meie eeldused kehtisid, joonistades funktsiooni  $S(d)$  graafikule saame järgmise pildi:



Tekib  $m$  selget miinimumi - vähimruutude viga on kõige väiksem vastavate eksponentide  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$  juures. Antud meetod ütleb, et kui tekib  $m$  selget miinimumi, siis tehtud eeldused (oletused) kehtivad. Lisaks miinimumi juures peaks  $S(d)$  omama hii-ruut jaotust  $n - m - 1$  vabadusastmega. Eriti hea on, kui  $S(\alpha_k) < \chi_{n-m-1}^2(p)$ . Saame leida vea vahemiku leides intervalli kus  $S(\alpha_k \pm \Delta_{\alpha_k}) \approx \chi_{n-m-1}^2(p)$ .

Antud graafikul on suurim eksponent  $1.74998226 \pm 0.00011$  (95%) ja kasutatud on mõõdetud väärtusi HULL, BONDS ja SIDES ning kasti suurusi  $N = 64..1024$ .

## 8 Korreleeritud perkolatsioon

Väga tihti ei ole perkolatsiooni mudel modelleeritava süsteemi juures juhuslik, vaid on korreleeritud.

$$c_\theta(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) = \langle \theta_i \theta_j \rangle - p^2$$

kus

$$p = \langle \theta_i \rangle.$$

Hetkel on uurimisel probleem, kus funktsioon käitub nagu

$$c_\theta \propto |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^{-a} \quad (0 \leq a \leq \frac{3}{4}).$$

Kui  $a > 3/4 = 1/\nu$ , siis käitub nagu korreleerimata perkolatsioon. On teada, et dimensioon  $d(a)$  on:

$$d(0) = 3/2 = 1.5;$$

$$d(3/4) = 1.75.$$

Uurimisel on siis, mis toimub nulli ja 3/4 vahel.

