

Automaty komórkowe

v. 2.71828182845904523536028

Krzysztof Malarz

Niniejsze opracowanie “Notatek do wykładu z automatów komórkowych” jest **prywatną** własnością Krzysztofa Malarza i wykorzystywane jest wyłącznie dla celów **dydaktycznych**. Publikowanie bądź dalsza jego dystrybucja naruszy prawa autorskie osób trzecich.

Podziękowania. Chciałbym podziękować Krzysztofowi Kułakowskiemu za wprowadzenie mnie w tematykę będącą przedmiotem niniejszego wykładu i nieustanną pomoc w jego przygotowaniu i prowadzeniu oraz udostępnienie prywatnych notatek.

Podziękowania należą się również moim Koleżankom i Kolegom z ZIS WFiIS AGH: Małgorzacie Krawczyk, Pawłowi Paściakowi, Tomaszowi Sitkowskiemu i Maciejowi Wołoszynowi, którzy udostępnili wyniki swoich prac oraz rysunki do rozdziałów 11, 15 i 17.

Dziękuję również B. Jagodzie i P. Bialicowi z Instytutu Chemii UJ za udostępnienie swoich prac magisterskich wykorzystanych w rozdziale 18.

Skład komputerowy systemem L^AT_EX 2_ε.

Spis treści

I Teoria	7
1 Wstęp	8
1.1 Czym są automaty komórkowe (AK)?	8
1.2 Trochę historii	8
1.3 Literatura	9
2 Skala trudności	10
2.1 Maszyna Turinga	10
2.2 Twierdzenie Gödla	10
3 Definicje i inne kłamstwa	12
3.1 <i>Life</i> Conwaya	12
3.2 Najprostsza notacja	13
3.3 Elementarne AK	13
3.3.1 Legalne AK	14
3.3.2 Automaty głosujące	15
4 Klasyfikacja AK	16
4.1 Klasyfikacja na podstawie obserwacji	16
4.1.1 Klasyfikacja Wolframa	20
4.1.2 Diagramy de Bruijna	22
4.2 Klasyfikacja na podstawie reguł	24
4.2.1 Metody średniego pola	25
4.2.1.1 Aktywność AK	25
4.2.1.2 Stabilność rozwiązań równania iteracyjnego	25
4.2.1.3 Równania ewolucji	26
4.3 Teoria struktury lokalnej	30
4.4 Szybkość rozprzestrzeniania się różnic	30
5 Odwracalność	33
5.1 Przykład: $(2,1/2)$	33
5.2 Rajski ogród	34
5.2.1 Przykład: <i>Life</i>	35
5.3 Symetria T	35
6 Liniowość i iniektywność AK	37
6.1 Iniektywność	38
6.2 Sekwencje aperiodyczne	38

7	Pochodna dyskretna	40
7.1	Zapis odwzorowań na zbiorach skończonych	40
7.2	Boole'owska odległość wektorowa	43
7.3	Pochodna Boole'a	43
8	Model odwzorowań przypadkowych	46
8.1	Średnia długość cyklu	46
8.2	Model Kauffmana	47
9	Samorganizowany stan krytyczny	49
9.1	SOC w piasku	49
9.2	SOC w <i>Life</i>	50
II	Zastosowania	52
10	AK w biofizyce: model Penny	53
10.1	Parametry kontrolne modelu	53
10.2	Algorytm	54
10.3	Charakterystyka populacji	55
10.4	Kilka (o'okay — kilkanaście) przykładów zastosowań	56
10.4.1	Wpływ parametrów modelu na liczebność populacji	56
10.4.2	Groźba wyginięcia	60
10.4.3	Ciśnienie ewolucyjne	64
10.4.4	"Katastrofa dojrzałości"	64
10.4.5	Polowanie/odławianie/wojny	65
10.4.6	Poza partenogenezę	66
10.4.7	Dlaczego Natura wynalazła płęć?	67
10.4.8	Dlaczego kobiety żyją dłużej?	69
10.4.9	Dlaczego wśród niektórych gatunków ssaków pojawia się menopauza u samic?	72
10.4.10	Wierność czy rozwiązłość?	72
10.4.11	Czy długowieczność jest dziedziczna?	73
10.4.12	Współzawodnictwo: ofiara (1) i drapieżnik (2)	74
10.4.13	Dlaczego drzewa żyją dłużej?	75
10.4.14	Inne próby zastosowania	76
11	AK w fizyce magnetyzmu: model Isinga	77
11.1	Dowód Derridy	78
11.2	Metody Monte Carlo	78
11.2.1	Metody obliczeń	79
11.2.1.1	Schemat Metropolis'a	79
11.2.1.2	Dynamika Glaubera	80
11.2.1.3	Kąpiel cieplna	80
11.2.2	Kilka uwag natury technicznej	80
11.3	Rozprzestrzenianie się uszkodzeń	81
11.4	Ergodyczność	82
11.5	Przykład zastosowania	84
11.5.1	Temperatura Curie na sieciach regularnych z dodatkowymi sąsiadami	84
11.5.2	Temperatura Curie na sieciach Archimedes'a	84
11.5.3	Dygresja: Oznaki SOC w antyferromagnetykach $J = -1$ na sieciach rosnących?	86

11.5.4	Efektywny algorytm obliczania sumy statystycznej	92
11.6	Dynamiczny diagram fazowy	94
11.6.1	Sieć kwadratowa z oddziaływaniem jak w modelu Isinga	95
11.6.1.1	Konstrukcja DDF	95
11.6.1.2	Magnetoelastyczne przejście fazowe w YMn_2	96
12	AK w socjofizyce: formowanie opinii społecznej	97
12.1	Model Nowaka–Szamreja–Lataného	97
12.1.1	Przejścia fazowe w obecności <i>guru</i>	98
12.2	Sieci króla Salomona	99
12.3	Model Sznajdów	100
12.4	Dlaczego w sylwestrową noc nie można się do nikogo dodzwonić	101
12.4.1	Scheff Theory of an Emergency Scenario	102
12.4.2	Models of a Phone Communication Jam	102
12.4.3	Kinds of networks	104
12.4.4	The Network Approach	109
12.5	Sieć Barabásiego–Alberta–Isinga	110
12.6	Zastosowanie: przewidywanie wyników wyborów	111
12.6.1	Histogram liczby głosów	111
12.6.2	Do której partii i kiedy się zapisać?	111
13	AK w fizyce powierzchni: modelowanie wzrostu warstw i ich powierzchni	114
13.1	Podstawowe procesy w skali atomowej	114
13.2	Charakterystyka powierzchni i dynamiki jej wzrostu	114
13.3	Deterministyczne modele SOS	115
13.3.1	Model nanoszenie przypadkowego (MNP)	115
13.3.2	Model Family’ego	116
13.3.3	Model Wolfa–Villaina	116
13.3.4	Model Das Sarmy–Tamborenea	116
13.4	Probabilistyczne modele SOS	117
13.4.1	Model 1	117
13.4.2	Model 2	119
13.5	Przykłady zastosowania	120
13.5.1	Początkowe stadia wzrostu	120
13.5.2	Samoafiniczność powierzchni	125
14	Problemy transportu	129
14.1	Hydrodynamika	129
14.1.1	Model HPP	130
14.1.2	Model FHP	131
14.1.3	Gaz siatkowy Boltzmannna	133
14.1.4	Inne przykłady zastosowań	133
14.1.5	Symulacja przepływów lepkich	133
14.2	Korki	134
14.2.1	Podstawowy model jednowymiarowy	134
14.2.2	Model Nagela–Schreckenberga	135
14.2.3	Model Chowdhuryego–Schadschneidera	136
14.3	Materiały granulowane	137

15 Pożary lasów, ekspresy do kawy, dżuma i fraktale	140
15.1 Pożary lasów	140
15.1.1 Klasyczne podejście bazujące na technice AK	140
15.1.2 Czy pożary lasów da się przewidzieć?	141
15.1.2.1 Perkolacja, czyli naukowe spojrzenie na proces parzenia kawy	141
15.1.2.1.1 Algorytm Hoshena–Kopelmana	144
15.1.2.2 Średniopolewe podejście do problemów pożarów lasów oparte na teorii perkolacji	145
15.1.2.2.1 Model	146
15.1.2.2.2 Diagramy bifurkacyjne	147
15.1.2.2.3 Wykładnik Lyapunova	149
15.1.2.2.4 Rozkłady rozmiarów pożarów	151
15.1.2.2.5 Porównanie z danymi „eksperymentalnymi”	153
15.1.2.2.6 Wnioski	156
15.2 Modele epidemii	156
15.2.1 SIR = Susceptible, Infected, Recovered (Removed)	156
15.2.1.1 Podejście analityczne	157
15.2.2 SIS = Susceptible, Infected, Susceptible	158
15.2.2.1 Podejście analityczne	158
15.3 Fraktale	159
15.3.1 Wymiar fraktalny	159
15.3.2 Skalowanie i podobieństwo	159
16 AK w chemii: modelowanie reakcji katalitycznych	165
16.1 Reakcja katalityczna	165
16.2 Symulacja kinetyki procesu desorpcji termicznej z powierzchni ciała stałego	166
16.2.1 Wyniki symulacji dla powierzchni $\text{SiO}_2/\text{Si}(110)$ z zaadsorbowanym potasem	167
16.3 Symulacja reakcji katalitycznego utleniania tlenku węgla	167
16.4 Podsumowanie	170
17 AK w fizyce medycznej: elektroforeza żelowa	171
17.1 DNA	171
17.2 Elektroforeza	171
17.3 Model reptonowy	172
17.3.1 Zastosowanie modelu do opisu elektroforezy	172
17.3.2 Obliczenia analityczne (dla $E = 0$)	173
17.3.3 Symulacja komputerowa — zastosowanie metod Monte Carlo	174
17.3.3.1 Przypadek bez pola	174
17.3.3.2 Przypadek z polem	174
17.3.3.3 Ulepszanie algorytmu	174
17.3.3.4 Dalsze poprawki	174
17.3.4 Wyniki	175
17.3.4.1 Symulacja dla $E = 0$	175
17.3.4.2 Symulacja dla $E \neq 0$	175
17.3.4.3 Różne koncentracje żelu	176
17.3.5 Model reptonowy jako model cząstkowy	176
18 Sieć sprzężonych odwzorowań	177
18.1 Jak zostać bankrutem...	177
18.1.1 Model	178
18.1.2 Wyniki symulacji	179
18.2 ...albo chociaż małżonkiem	181

18.2.1 Model	181
18.2.2 Wyniki symulacji	182
18.3 Książę i żebrak, czyli modelowanie hierarchii społecznych	184
18.3.1 Model	185
18.3.2 Wyniki symulacji	185
19 Podsumowanie	191

<http://home.agh.edu.pl/malarz/dyd/ak/>

Część I

Teoria

<http://home.agh.edu.pl/malarz/dyd/ak/>

Opowieść 1

Wstęp

— Tak to właśnie wygląda, kiedy ludzie próbują edukować swoje dzieci — stwierdził kruk — zamiast mówić im o różnych rzeczach...

[Terry Pratchett, *Muzyka duszy*, Prószyński i S-ka (Warszawa 2002)]

1.1 Czym są automaty komórkowe (AK)?

- alternatywną matematyką, szczególnie przydatną w obliczeniach równoległych, wolną od błędów zaokrążeń,
- narzędziem do symulacji procesów fizycznych, w których bierze udział wiele układów oddziałujących ze sobą,
- obiektami matematycznymi, interesującymi z punktu widzenia teorii procesów dynamicznych,
- zabawką,
- oraz — przedmiotem tego wykładu...

1.2 Trochę historii

- Za twórcę automatów komórkowych uważa się Janosa von Neumanna, Węgra pracującego w Princeton. Jak wiadomo, wprowadził do swego modelu “pierwotnej zupy” dyskretny czas i przestrzeń z inspiracji Stanisława Ulama, lwowskiego matematyka, który przebywał wtedy w Los Alamos. Ulam jest też autorem określenia automatów komórkowych jako “fizyki urojonej”...
- Najsłynniejszym chyba automatem jest *Life* autorstwa angielskiego matematyka Johna H. Conwaya. Ten automat miał kiedyś swój fanclub wśród naukowców i studentów USA. W konkursie na konfigurację komórek, która będzie rosła nieskończenie, zwyciężyła w listopadzie 1970 grupa z MIT, publikując “działo szybowcowe” i zgarniając nagrodę w wysokości 50 dolarów amerykańskich. W *Life* można widzieć model żyjącego środowiska; w użyciu jest terminologia “żywych” i “martwych” komórek. Ale jest to automat uniwersalny, czyli zdolny do każdej operacji logicznej.
- AK weszły do bibliotek fizyków na początku lat 80-tych. Jednym z głównych popularyzatorów tej idei był Stephen Wolfram, znany jako twórca pakietu Mathematica. Próbował on również sklasyfikować AK — gdyby się ten zamiar powiodł, można by mówić o klasyfikacji **wszystkich** dyskretnych procesów dynamicznych.

1.3 Literatura

1. K.Kulakowski, *Automaty komórkowe*, OEN AGH, Kraków 2000.
2. H.Gutowitz (ed.), *Cellular Automata. Theory and Experiment*, MIT Press, 1991.
3. S.Wolfram, *Cellular Automata and Complexity. Collected Papers*, Addison-Wesley, 1994.
4. E.R.Berlekamp, J.H.Conway, R.K.Guy, *Winning Ways for Your Mathematical Plays*, Academic, New York, 1982.
5. S.Wolfram, *Rev. Mod. Phys.* **55** (1983) 601.
6. S.Wolfram *Theory and Applications of Cellular Automata*, World Scientific, 1986.
7. S.Wolfram, *A New Kind of Science*, Wolfram Media, 2002.
8. A.Ilachinski, *Cellular Automata. A Discrete Universe*, World Scientific, 2001.
9. T.Toffoli, N. Margolus, *Cellular Automata Machines*, MIT Press, 1987.
10. E.Bienenstock, F.Fogelman Soulié, G.Weisbuch (eds.), *Disordered Systems and Biological Organization*, Springer-Verlag, 1986.
11. A.Bunde, S.Havlin (eds.), *Fractals and Disordered Systems*, Springer, 1996.
12. D.Stauffer, *J. Phys.* **A24** (1991) 909.

Opowieść 2

Skala trudności

— Oczywiście, nadrektorze. Ale zdaje pan sobie chyba sprawę, że odnalezienie go może nam zabrać całe lata?

— Ehm... — wtrącił Myślak. — Gdybyśmy odszyfrowali jego sygnaturę thaumiczną, HEX poradziłby sobie z tym w jeden dzień.

Dziekan rzucił mu gniewne spojrzenie.

— To nie jest magia — burknął. — To... mechanika!

[Terry Pratchett, *Ciekawe czasy*, Prószyński i S-ka (Warszawa 2003)]

2.1 Maszyna Turinga

Deterministyczna maszyna Turinga składa się:

- z **modułu sterującego** mogącego się znajdować w jednym ze skończonej ilości stanów w danej chwili,
- **głowicy** czytająco-piszącej,
- **taśmy** będącej układem pamięciowym podzielonym na jednostki i prawostronnie nieskończonym,

i może być traktowana jako **model** każdego obliczenia sekwencyjnego.

Każde obliczenie można przedstawić poprzez siedem elementarnych operacji, tworzących język Turinga-Posta mogący realizować dowolne możliwe obliczenia. Np. DRUKUJ-0 — ma kod 000, DRUKUJ-1 — ma kod 001, IDŹ-W-LEWO — ma kod 010, aż STOP — ma kod 100. Tym sposobem, wszystkie możliwe algorytmy (a między nimi i dowody twierdzeń) można ustawić w ciąg i ponumerować — tworzą one zbiór przeliczalny.

Swój numer ma również sama maszyna Turinga — czyli algorytm odczytujący i wykonujący dowolny zadany algorytm.

2.2 Twierdzenie Gödla

- Swój numer ma również dowód, że niektórych algorytmów **nie ma** na liście — inaczej mówiąc, nie istnieją.
- **Nie istnieją więc dowody niektórych twierdzeń!** Można je wypowiedzieć, ale nie sposób udowodnić.

- Ta teza jest treścią słynnego twierdzenia Gödla, opublikowanego w 1931 roku: **“W ramach każdego formalizmu można wypowiedzieć twierdzenia, których nie można udowodnić w ramach tego formalizmu”**.
- Problem stopu: Czy dla danego programu Turinga–Posta P, można za pomocą obliczenia sprawdzić czy dla pewnej danej tego programu, program P zatrzyma się jeśli obliczenie programu P zostało rozpoczęte z tą daną?
- Problem stopu i inne problemy tej klasy nazywamy **nierozwiązywalnymi** bądź **nierozstrzygalnymi** (undecidable).
- Inną kategorię trudności stanowią problemy w zasadzie rozwiązywalne, których czas rozwiązywania jest jednak bardzo długi.
- Problem komiwojażera: dane są położenia N miast, które komiwojażer chce odwiedzić. W jakiej kolejności powinien je odwiedzać, jeśli w każdym musi być dokładnie jeden raz a całkowita droga powinna być najkrótsza?
- Czas wykonania takiego algorytmu jest proporcjonalny do $N!$, czyli rośnie z N szybciej, niż N^α , gdzie $\alpha \in \mathbb{N}$.
- Ta zależność czasu obliczeń od rozmiaru problemu może służyć do naiwnego rozróżnienia między problemami klasy P (polynomial) a problem klasy NP (non-polynomial). Te drugie są uważane za **praktycznie nierozwiązywalne** (intractable).
- Istnieje cała grupa problemów klasy NP które da się wzajemnie na siebie przetłumaczyć (w formalnej definicji problemy mają być wielomianowo redukowalne jeden w drugi) — tworzą one grupę problemów **NP-zupełnych** (NP-com).
- Gdy zaczynaliśmy dzisiejszy wykład problem komiwojażera był na liście problemów NP-com ($P \neq NP$)...

Porównanie czasów obliczeń problemów klasy P i klasy NP.

Typ	$N = 10$	$N = 20$	$N = 40$	$N = 60$
N	10^{-5} s	$2 \cdot 10^{-5}$ s	$4 \cdot 10^{-5}$ s	$6 \cdot 10^{-5}$ s
N^2	10^{-4} s	$4 \cdot 10^{-4}$ s	0.0016 s	0.0036 s
N^3	0.001 s	0.008 s	0.064 s	0.216 s
N^4	0.1 s	3.2 s	1.7 min.	13 min.
2^N	0.001 s	1 s	12.7 dni	36600 lat
3^N	0.059 s	58 min.	385500 lat	$1.2 \cdot 10^{15}$ lat

- Złożoność problemu definiuje się jako minimalną długość algorytmu jego rozwiązania.
- O nieprzewidywalności obliczeniowej mówimy, gdy algorytmu nie można skrócić: jedyną drogą uzyskania wyniku jest wykonanie obliczeń krok po kroku.

[K.Kulakowski, *Automaty komórkowe*, OEN AGH, Kraków 2000]

Opowieść 3

Definicje i inne kłamstwa

Elfy są przedziwne. Budzą zdziwienie.

Elfy są cudowne. Sprawiają cuda.

Elfy są fantastyczne. Tworzą fantazje.

Elfy są urocze. Rzucają urok.

Elfy są czarowne. Splatają czary.

Ich uroda powala. Strzałą.

Kłopot ze słowami polega na tym, że ich znaczenie może się wić jak wąż. A jeśli ktoś chce znaleźć węże, powinien ich szukać za słowami, które zmieniły swój sens.

Nikt nigdy nie powiedział, że elfy są miłe.

Elfy są złe.

[Terry Pratchett, *Panowie i damy*, Prószyński i S-ka (Warszawa 2002)]

Deterministyczny automat komórkowy jest pojęciem matematycznym definiowanym poprzez:

- **sieć** komórek $\{i\}$ D -wymiarowej przestrzeni,
- zbiór $\{s_i\}$ **stanów** pojedynczej komórki — zwykle ten sam dla wszystkich komórek i k -elementowy,
- **regułę** F określającą stan komórki w chwili $t + 1$ w zależności od stanu w chwili t tej komórki i komórek ją otaczających:

$$s_i(t + 1) = F(\{s_j(t)\}), \text{ gdzie } j \in O(i)$$

i $O(i)$ jest otoczeniem i -tej komórki.

Do najpopularniejszych otoczeń na sieci 2-wymiarowej należy zaliczyć otoczenie von Neumanna (1+4) i Moore'a (1+8).

Jeśli ponadto funkcja F zależy od zmiennej losowej to automat nazywamy **probabilistycznym automatem komórkowym**.

3.1 *Life* Conwaya

- AK *Life* jest zdefiniowany na **dwuwymiarowej sieci kwadratowej**, a więc $D = 2$.
- Zbiór stanów każdej komórki zawiera tylko dwa elementy ($k = 2$), a mianowicie “1” i “0”. Inaczej mówiąc, komórka jest “żywa” lub “martwa”. Otoczeniem i -tej komórki w automacie *Life* są wszystkie komórki z nią sąsiadujące, a więc stykające się z nią krawędziami lub rogami (otoczenie Moore'a).

- Reguła tego automatu jest następująca:
 - jeśli w otoczeniu komórki (nie licząc jej samej) są w czasie t trzy komórki żywe, to w czasie $(t + 1)$ ta komórka jest żywa,
 - jeżeli w jej otoczeniu w czasie t są dwie komórki żywe, a ona sama również jest żywa, to pozostaje żywa również w czasie $t + 1$,
 - w pozostałych przypadkach jest ona martwa w czasie $t + 1$.
- *Life* jest AK deterministycznym.

3.2 Najprostsza notacja

- Jak widać, ważne parametry AK to:
 - wymiar sieci D ,
 - ilość stanów pojedynczej komórki k ,
 - oraz otoczenie.
- Często używanym parametrem jest promień r otoczenia. Dla automatu *Life* $r = 1$; argumentem funkcji F są tylko najbliżsi sąsiedzi danej komórki.
- Często używaną notacją dla określenia całej rodziny automatów jest podanie dwóch liczb: (k, r) . W tej notacji automat *Life* jest zapisany jako $(2,1)$.
- Notacja ta nie jest precyzyjna: nie podaje wymiaru sieci, w związku z czym nie musi być jasne, czy np. dla automatu dwuwymiarowego otoczenie jest otoczeniem von Neumanna czy Moore’a. Niemniej często jej się używa zwłaszcza, gdy chodzi o automaty jednowymiarowe.

3.3 Elementarne AK

- Najdokładniej zbadaną rodziną automatów są jednowymiarowe ($D = 1$) automaty deterministyczne o dwóch stanach komórki ($k = 2$) i otoczeniu składającym się z najbliższych sąsiadów ($r = 1$) — zgodnie z najprostszą notacją te automaty oznaczamy jako $(2,1)$.
- Argumentem funkcji F jest stan $2r + 1 = 3$ komórek, każda z nich może być w $k = 2$ stanach — funkcja F musi być więc określona dla $2^3 = 8$ różnych konfiguracji. Dla każdej z nich funkcja F może przyjmować $k = 2$ wartości. Można ją więc określić na $2^8 = 256$ sposobów.
- Za Wolframem te 256 jednowymiarowych AK nazywamy **elementarnymi**.
- Często określa się AK elementarny, podając wartości funkcji F stanów otoczenia w następującej kolejności:

111 110 101 100 011 010 001 000

- Do zdefiniowania reguły wystarczy więc podać ciąg ośmiu liczb “0” i “1” — tworzących w zapisie binarnym kolejny numer automatu elementarnego
- Np. automat $90_{\text{dec}} = 1011010_{\text{bin}}$ to automat o regule:

111	110	101	100	011	010	001	000
0	1	0	1	1	0	1	0

oscylacji,

- oraz wykazują symetrię: $F(001) = F(100)$ i $F(110) = F(011)$,

co daje $2^5 = 32$ legalne AK o regule typu:

111	110	101	100	011	010	001	000
α	β	γ	δ	β	ε	δ	0

3.3.2 Automaty głosujące

- Jeszcze mocniejszym żądaniem jest ograniczenie reguł do tzw. AK **głosujących** (liczących) dla których istotna jest tylko ilość “1” w otoczeniu:

111	110	101	100	011	010	001	000
α	β	β	γ	β	γ	γ	δ

- Tych automatów (nawet wraz z tymi które nie zachowują stanu próżni) jest tylko $2^4 = 16$.
- Sposób zapisu reguł takich automatów polega na
 - podaniu litery symbolizującej otoczenie: D=2, T=3, Q=4, H=8 i C=center,
 - oraz liczby, która oznacza ilość “1” w otoczeniu komórki, aby wartość reguły była “1”.
- W tej konwencji otoczenie von Neumanna zapisuje się jako $Q+C=V$, zaś otoczenie Moore’a jako $H+C=M$.
- Np. dwuwymiarowy AK, który zwraca “1” wtedy gdy wśród najbliższych sąsiadów dwie komórki mają wartość “1” nosi nazwę Q2.
- Można też wyróżniać pojedyncze komórki: N, E, S, W.
- Inne notacje pozwalające kodować reguły automatu w formie ich nazw raczej trudno się przyjmują...

Opowieść 4

Klasyfikacja AK

- Po co?
 - AK = modele, czy też matematyczne realizacje procesów dynamicznych w dyskretnym czasie i dyskretnej przestrzeni.
 - Wspomnieliśmy już, że klasyfikacje AK — gdyby się powiodła — stała by się jednocześnie klasyfikacją wszystkich procesów dynamicznych.
- Jak?
 - Ewolucja sieci zależy od **reguł** i **stanu początkowego** sieci.
 - Wszystkie znane próby klasyfikacji próbują uniezależnić się od tej drugiej zależności.
- Do jakiej klasy zaliczyć dany automat? Problem ten dla AK pracujących na **nieskończonej sieci** jest nierozstrzygalny — ogólnego algorytmu nie ma!

4.1 Klasyfikacja na podstawie obserwacji

Klasyfikacja AK na podstawie obserwacji jest

- trudna, bo czasochłonna i pamięciożerna,
- ale za to wiele wskazuje na to... że wysoce nieskuteczna.

Najstarsza, pierwsza — i najpopularniejsza — klasyfikacja AK pochodzi od Wolframa. Zgodnie z nią AK podzielić można na cztery klasy:

1. AK prowadzące do jednorodnych konfiguracji sieci, w których stan wszystkich komórek jest taki sam i nie zmienia się w czasie.
2. AK prowadzące do nie zmieniających się lub periodycznych prostych konfiguracji.
3. AK prowadzące do konfiguracji chaotycznych.
4. AK prowadzące do złożonych konfiguracji lokalnych, często o długich czasach życia.

Klasyfikacja Wolframa oparta jest na

- **długo** obserwacji stanów sieci,
- przy **przypadkowo** dobranych konfiguracjach początkowych.

Przypadkowo dobrana oznacza w rzeczywistości **uśrednienie** po wielu konfiguracjach początkowych. Rodzi to podstawowe pytania:

- Jak typowe są wyniki naszych symulacji?
- Czy statystyka jest wystarczająco bogata?
- Czy czas obserwacji był dostatecznie długi?
- Co w przypadku automatów działających na **skończonej** sieci oznacza klasa III skoro za chaos uważamy **stałe zwiększanie** się różnic między stanami sieci?
- Problem Poincarego: powrót do tych samych punktów w przestrzeni fazowej.
- Granica termodynamiczna: przejście z rozmiarem układu do nieskończoności.
- Analogia do namagnesowania układów skończonych: ważna kolejność wykonywania przejść granicznych z $N \rightarrow \infty$ i $H \rightarrow 0$.
- Klasyfikując AK mamy podobną sytuację: też musimy wykonać dwa przejścia graniczne: $N \rightarrow \infty$ i $t \rightarrow \infty$.
- Jeśli najpierw wykonać drugie z nich — każdy automat okaże się periodyczny — i tego wyniku przejście do granicy termodynamicznej **nie** zmieni.
- Jeśli jednak najpierw wykonać $N \rightarrow \infty$, przyjmując **skończony** czas obserwacji, to możemy zaobserwować zachowania chaotyczne: mała zmiana konfiguracji początkowej sieci prowadzi do narastających w czasie modyfikacji kolejnych stanów układu.
- Uzasadnienie tej właśnie kolejności daje fizyka eksperymentalna.
- Najpopularniejszą miarą różnic między stanami sieci σ_1 i σ_2 jest **odległość Hamminga**:

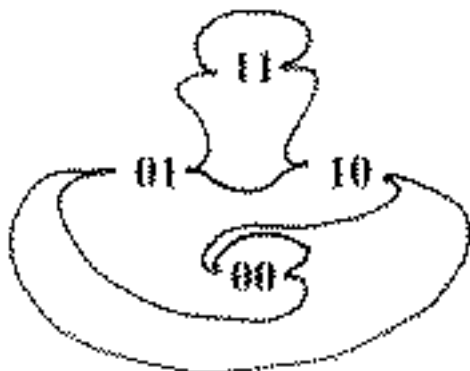
$$d(\sigma_1, \sigma_2) = \sum_{i=1}^N |s_i(\sigma_1) - s_i(\sigma_2)|$$

gdzie s_i oznacza stan i -tej komórki w konfiguracji σ .

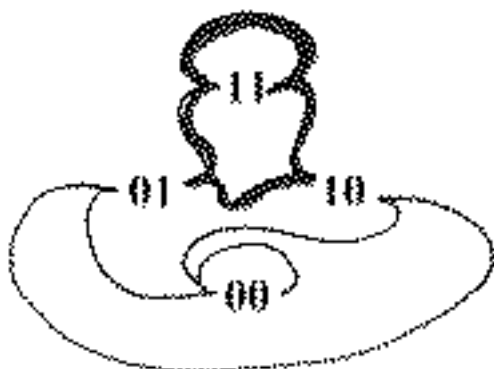
- Przykład: 32.

[K.Kulakowski, *Automaty komórkowe*, OEN AGH, Kraków 2000]

- Te wierzchołki, które mogą sąsiadować, są połączone krawędziami (8 konfiguracji otoczenia dla $(2, 1)$ — więc i 8 krawędzi).



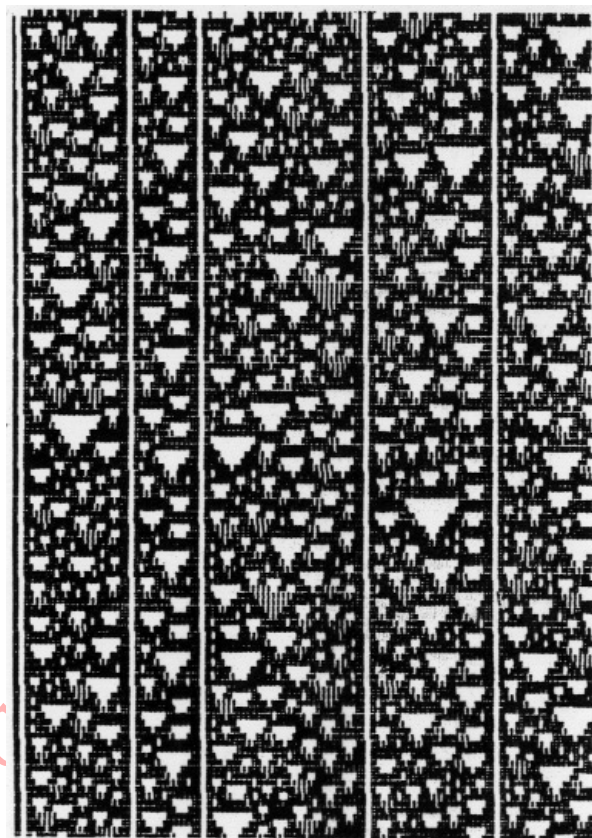
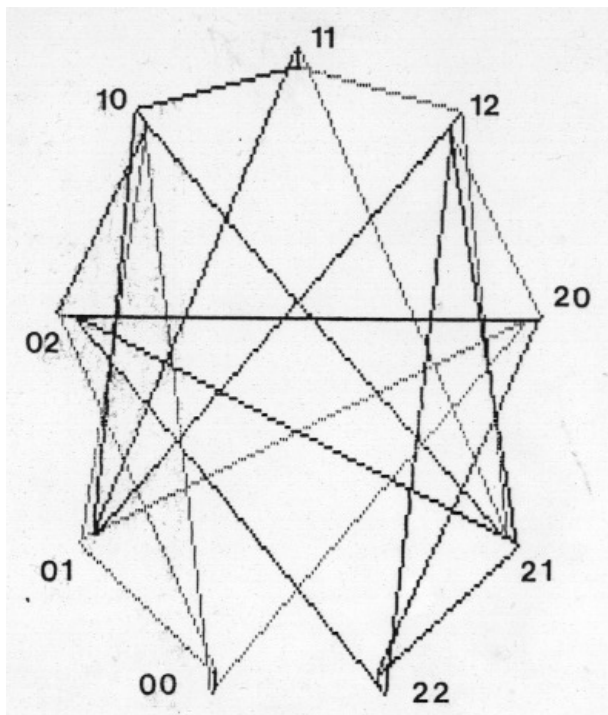
- Diagram może również nieść informację o danym automacie: Jeśli $xyz \rightarrow y$ to krawędź $xy - yz$ pogrubiamy.



- Jeśli na diagramie zobaczymy **wzmocnioną pętlę**, to pewna konfiguracja jest stabilna i granica rozchodzących się uszkodzeń nie może jej pokonać. Wtedy automat nie może być chaotyczny! Z pewnością **nie** jest on AK z klasy trzeciej.

- Np. dla AK, którego diagram przedstawiono powyżej mamy

- wzmocnioną krawędź 11-11, więc $111 \rightarrow 1$,
- wzmocnioną krawędź 01-11, więc $011 \rightarrow 1$,
- wzmocnioną krawędź 11-10, więc $110 \rightarrow 1$,
- wzmocnioną krawędź 01-10, więc $010 \rightarrow 1$,
- a więc “1” jest **stabilna**: $*1* \rightarrow 1$



4.2 Klasyfikacja na podstawie reguł

- Chcielibyśmy skutecznie klasyfikować AK na podstawie formalnego badania ich reguł.
- Próbujemy więc zdefiniować (jeden lub kilka) parametr, którego wartość pozwoliłaby określić przynależność AK do tej czy innej klasy.

- Na ogół parametry te są definiowane w sposób probabilistyczny — tj. z użyciem rachunku prawdopodobieństwa.

4.2.1 Metody średniego pola

Metody średniego pola = metody zaniedbujące korelacje między komórkami.

4.2.1.1 Aktywność AK

- Najprostszym takim parametrem jest λ = względna ilość jedynek w tabeli definiującej regułę F automatu. Np. dla automatu 22_{dec} , tj.:

111	110	101	100	011	010	001	000
0	0	0	1	0	1	1	0

zwanego jednowymiarowym *Lifem*. Jak wynika z reguły $\lambda = 3/8 = 0.375$.

- Gdyby automat był probabilistyczny, aktywność można by określać jako prawdopodobieństwo otrzymania “1” i z takim właśnie prawdopodobieństwem AK generowałby “1” — np. automat 22_{dec} zachowuje w czasie średnią ilość “1” o koncentracji $3/8$.
- Traktowanie jednak **deterministycznego** AK za pomocą pojęć **probabilistycznych** jest równoznaczne z zaniebdaniem informacji o dalekozasięgowych korelacjach, czyli o tym co jest w AK najbardziej interesujące.
- Można by więc spodziewać się, że **wszystkie** metody probabilistyczne okażą się nieskuteczne.
- Jednak poza nimi i poznanymi wcześniej metodami opartymi na obserwacji nie dysponujemy żadnymi innymi.

4.2.1.2 Stabilność rozwiązań równania iteracyjnego

- Rozważmy równanie iteracyjne typu $x_{n+1} = G(x_n)$, które przy zadanej wartości początkowej x_0 pozwala generować kolejne wartości x_n i $n \in \mathbb{N}$.
- Wskaźnik n można traktować jak dyskretny czas.
- Punkty spełniające równość $x^* = G(x^*)$ nazywamy **punktami stałymi**.
- Pytanie o stabilność punktu stałego, jest pytaniem, czy jeśli punkt x_n przyjmuje wartość bliską punktowi stałemu x^* to kolejne wyrazy $x_{n+1}, x_{n+2}, x_{n+3}, \dots$ będą coraz bliższe x^* , czy też coraz dalsze?
- Innymi słowy czy małe odchylenie od punktu stałego jest wzmacniane czy osłabiane przez ewolucję czasową?
- Jeżeli jest wzmacniane — to punkt stały jest **niestabilny**.
- $\delta_n = x_n - x^*$ jest n -tym odchyleniem od punktu stałego.
- $G(x) = G(x^*) + G'(x^*)(x - x^*) + \frac{1}{2}G''(x^*)(x - x^*)^2 + \dots$
- $x_{n+1} - x^* = G(x_n) - x^* \approx G(x^*) + G'(x^*)(x_n - x^*) - x^* = (x_n - x^*)G'(x^*)$
- $\delta_{n+1} = G'(x^*) \cdot \delta_n$
- Jeżeli więc $|G'(x^*)| < 1$ to punkt stały x^* jest **stabilny**.

4.2.1.3 Równania ewolucji

Metoda uproszczonego równania ewolucji stosuje się do AK, które zachowują stan próżni (000 → 0).

- Oznaczmy częstość zer w czasie t przez ν_t .
- Równanie iteracyjne ma postać

$$\nu_{t+1} = \nu_t^3 + (1 - \nu_t^3)(1 - \kappa) = G(\nu_t)$$

gdzie κ jest znormalizowaną aktywnością, bez uwzględnienia stanu próżni (który na pewno zwróci zero).

- Np. dla 22_{dec} $\kappa = 3/7$.
- Konfiguracje inne niż 000 zdarzają się z częstością $1 - \nu_t^3$ a prawdopodobieństwo, że zwrócą 0 wynosi $1 - \kappa$.
- Punkty stałe równania ewolucji dla 22_{dec} znajdujemy rozwiązując równanie

$$\nu = \nu^3 + (1 - \nu^3)(1 - 3/7)$$

- Pierwszy z nich $\nu_1^* = 1$ jest niestabilny $G'(\nu_1^*) = 9/7 > 1$.
- Drugi $\nu_2^* = \frac{1}{6}\sqrt{57} - \frac{1}{2}$ jest stabilny $|G'(\nu_2^*)| < 1$.
- Oznacza to, że AK 22_{dec} zachowuje średnią koncentrację “1” $\lambda^* = 1 - \nu^* \approx 0.242$.
- Dokładniejsze podejście polega na wyseparowaniu w funkcji G konfiguracji o różnych ilościach zer:

$$\nu_{t+1} = \sum_{i=0}^3 b_i \nu_t^i (1 - \nu_t)^{3-i},$$

gdzie b_i jest ilością konfiguracji otoczenia o i zerach, które dają “0”.

- Np. dla 22_{dec} b_i są następujące:
 - $b_3 = 1$ — zachowanie stanu próżni,
 - $b_2 = 0$ — każdy stan z dwoma “0” daje “1”,
 - $b_1 = 3$ — każdy stan z dwoma “1” daje “0”,
 - $b_0 = 1$ — trzy “1” dają “0”.
- Analogiczne równanie można napisać dla koncentracji “1”

- Dla 22_{dec}

$$\lambda_{t+1} = 3\lambda_t(1 - \lambda_t)^2$$

co oznacza, że “1” otrzymujemy gdy w otoczeniu jest jedna “1” i dwa “0” a są trzy takie konfiguracje.

- Punkty stałe to $\lambda^* = 0$ (zachowany stan próżni — niestabilny) oraz $\lambda^* = 1 - 1/\sqrt{3} \approx 0.423$ — stabilny.
- W tym przybliżeniu średnia koncentracja “1” którą zachowuje automat wynosi więc ok. 42%.
- Symulacja komputerowa dla 22_{dec} pozwala szacować λ na ok. 35%.

konfiguracja	λ
1110010100111000111110011110100111010001111011010100101110110010	0.499
000111011100010100000110000011100001101000000010111100000001111	0.374
0010000000101101100010010001000100100011000000110000010000010000	0.344
0111000001100000010111111011101111110100100001001000111000111000	0.384
1000100010010000110000000000000000000000111110011111101000101000101	0.361
11011101111100100100000000000000000000001000001100000001101101101100	0.356
000000000000011111110000000000000000000011100010010000010000000000010	0.355
000000000000100000001000000000000000100010111111000111000000000111	0.361
100000000001110000011100000000000001110110000000101000100000001000	0.356
1100000000100010001000100000000010000001000001101101110000011100	0.352
0010000001110111011101110000000111000011100010000000001000100010	0.355
011100001000	0.356
100010011100	0.355
11011110001001	0.353
0000000101110011	0.354
000000110000100000000100100	0.354
0000010010011100000111000000011100000001110011000000000000000000000	0.354
0000111111000100010001000001000100000100011001000000000111010000	0.353
00010000001011101110111000111011000111010011110000001000011001	0.353
0011100000110011	0.353
0100010001001000	0.352
1110111011111000	0.352
00	0.353
0000000000000111000010001010000000101110000000110110001001010000	0.352
000000000000100010011110110110000011000010000010000010011111011000	0.351
0000000000001110111100	0.352
000000000001000000001000000001110111111000101000101001000000001110	0.352
100000000111000000111000001000	0.352
010000001000100001000100011100	0.352
11100001110111001110111010001000000010010000000000000000000000000000	0.352
00010010000000110000000011011100000111110000000000000000000000000000	0.351
00111111000001001000000100000010001000000100000000000000000000000000	0.352
01000000100011111100001110000110110000111000000010001111111000	0.353
1110000111010000001001000100100000001001000100000111010000000100	0.352
00010010000110000111111011111000001111101110001000011000001111	0.350
10111111001001001000	0.352
00000000111111111100	0.352
00000001000000000001000000000100000001000000100100100000000000000000	0.352
00000011100000000111000000011100000111000011111111000000000000000000	0.351
00000100010000001000100000100010001000100010000000000000000000000000	0.351
000011101110000111011100011101110111011111000000011100000111011	0.350
0001000000010010000000101000	0.351
0011100000111111000001101100	0.351
110001000100000010001000001000	0.352
001011101110000111011100011100	0.351

$\langle \lambda \rangle \approx 0.353$

4.3 Teoria struktury lokalnej

Zastępuje ona ewolucję konfiguracji sieci zgodną z reguła deterministyczną AK poprzez ewolucję rozkładu prawdopodobieństwa lokalnych konfiguracji.

Podstawowym założeniem teorii jest zaniedbanie korelacji między odpowiednio dalekimi komórkami sieci (metody średniopolewe zaniedbują korelacje w ogóle).

- Dla danej konfiguracji $\sigma(n)$ o rozmiarze n znajdujemy wszystkie konfiguracje $\xi(m)$, które ją produkują zgodnie z deterministycznymi regułami AK ($m = n + 2r$).
- Znając $P_n(\sigma)$ korzystając z formuły Bayesa na prawdopodobieństwo warunkowe obliczamy rozkład prawdopodobieństwa $P_m(\xi)$.
- Np. dla AK 1D $P_{n+1}(\xi)$ konfiguracji lokalnej $\xi(n + 1)$, która powstała z konfiguracji $\sigma(n)$ przez dołączenie do niej z prawej strony jednej komórki w stanie s , otrzymujemy ze wzoru

$$\frac{P_{n+1}(\xi)}{P_n(\sigma)} = \frac{P_n(L\xi)}{P_{n-1}(L\sigma)}$$

gdzie $L\pi$ jest konfiguracją otrzymaną z konfiguracji π przez odjęcie z lewej strony jednej komórki.

- Obliczamy zmodyfikowane prawdopodobieństwo $P_n(\sigma)$ konfiguracji σ , sumując prawdopodobieństwa $P_m(\xi)$ wszystkich konfiguracji ξ , które ją produkowały.

Kolejne powtarzanie sekwencji tych kroków powinno doprowadzić do ustalenia się pewnego rozkładu prawdopodobieństwa $P_n(\sigma)$, którego dalsze obliczenia już nie będą modyfikowały.

Przewidywania teorii struktury lokalnej okazały się zgodne z wynikami obliczeń deterministycznych jedynie dla niektórych AK, spełniających określone własności.... [H.A.Gutowitz et al, *Physica D*28 (1987) 18]

4.4 Szybkość rozprzestrzeniania się różnic

- Wyobraźmy sobie dwie konfiguracje początkowe jednowymiarowej sieci

$$a = (\dots, a_{-2}, a_{-1}, a_0, a_1, a_2, \dots)$$

$$b = (\dots, b_{-2}, b_{-1}, b_0, b_1, b_2, \dots)$$

takie, że $a_i = b_i$ dla $i < 0$, $a_0 \neq b_0$, oraz b_i losowane niezależnie od a_i dla $i > 0$.

- Różnica w czasie t :

$$\delta_i(t) = \begin{cases} 0 & \text{gdy } a_i(t) = b_i(t), \\ 1 & \text{gdy } a_i(t) \neq b_i(t). \end{cases}$$

- Położenie frontu $i_f(t)$ określa się jako $\min\{i : \delta_i(t) = 1\}$.

- Szybkość rozprzestrzeniania się różnic (w lewo)

$$\gamma_L = \lim_{t \rightarrow \infty, \tau \rightarrow \infty, t/\tau \rightarrow 0} \frac{i(\tau) - i(\tau + t)}{t}$$

o ile ta granica oczywiście istnieje.

Analogicznie definiuje się szybkość rozprzestrzeniania się różnic w prawo γ_P . Całkowita szybkość $\gamma = \gamma_L + \gamma_P$. Taki pomiar γ powinien być przeprowadzony dla dużej sieci i możliwie wielu stanów początkowych.

- Maksymalna γ_L i γ_P wynosi r — zasięg AK. Maksymalna $\gamma = 2r$ — zazwyczaj jednak żadna z γ nie osiąga wartości maksymalnej.
- Niech λ będzie prawdopodobieństwem otrzymania wyniku różnego od “0”.
- Wybrane w sposób przypadkowy dwie konfiguracje $2r + 1$ liczb dadzą
 - to samo z prawdopodobieństwem $P_{ts} = \lambda^2 + (1 - \lambda)^2$
 - a co innego z prawdopodobieństwem $1 - P_{ts} = 2\lambda(1 - \lambda)$
- Prawdopodobieństwo, że $\gamma_L = r$ wynosi:

$$P \left(\begin{array}{c} a_{-r}, a_{-r+1}, \dots, a_{r-1}, 1 \\ a_{-r}, a_{-r+1}, \dots, a_{r-1}, 0 \end{array} \rightarrow \text{co innego} \right) = 1 - P_{ts}$$

- Wkład takiego przypadku do γ_L wynosi $r(1 - P_{ts})$
- Prawdopodobieństwo, że $\gamma_L = r - 1$ wynosi:

$$P \left(\begin{array}{c} a_{-r}, a_{-r+1}, \dots, a_{r-1}, 1 \\ a_{-r}, a_{-r+1}, \dots, a_{r-1}, 0 \end{array} \rightarrow \text{to samo} \right) = P_{ts}$$

i

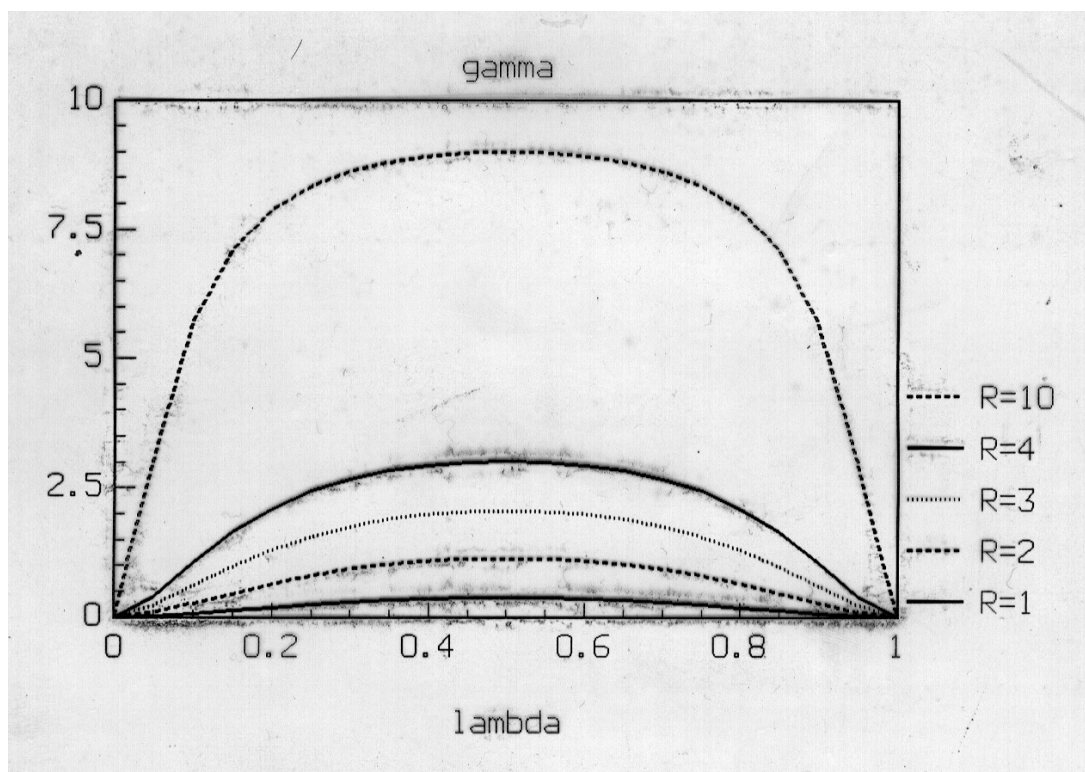
$$P \left(\begin{array}{c} a_{-r}, a_{-r+1}, \dots, a_{r-2}, 1, a_r \\ a_{-r}, a_{-r+1}, \dots, a_{r-2}, 0, a_r \end{array} \rightarrow \text{co innego} \right) = 1 - P_{ts}$$

czyli $P_{ts}(1 - P_{ts})$.

- Wkład takiego przypadku do γ_L wynosi $(r - 1)P_{ts}(1 - P_{ts})$
- Sumując wkłady od wszystkich prędkości $0 \dots r$:

$$\gamma_L = \sum_{i=0}^r (r - i) P_{ts}^i (1 - P_{ts}) = \dots$$

- Dla $\gamma > 0$ automat uważa się za chaotyczny.
- Aktywność λ jest związany z klasyfikacją Wolframa:
 - $\lambda \rightarrow 0$ — AK jest na ogół klasy I lub II,
 - gdy $\lambda \rightarrow 0.5$ AK najprawdopodobniej należy do klasy III,
 - trudny do określenia obszar przejściowy między klasami II a III zajmują AK IV klasy.
- Obszar przejścia fazowego między klasami AK możemy badać przez $\gamma(\lambda) = 0$.
- Równanie na γ_L pokazuje, że $\gamma_L = 0$ **tylko** dla $\lambda = 0$ i $\lambda = 1$.



- Oznacza to, że w/g metod probabilistycznych prawie wszystkie AK są chaotyczne...

Opowieść 5

Odwracalność

Babcia i pani Plinge przeciskały się między przechodniami na ulicach, podążając w kierunku Mroków — części miasta tłocznej jak gniazdo gawronów, a pachnącej jak wysypisko śmieci. I odwrotnie.
[Terry Pratchett, *Maskarada*, Prószyński i S-ka (Warszawa 2003)]

- generalnie \rightarrow nierozwiązywalne
- wyjątek stanowią AK 1D
- zasadnicza trudność: reguła AK jest funkcją stanu **kilku** komórek ale zwraca wartość **tylko jednej** komórki:

$$\begin{array}{ccc} \text{odwzr. lokalne} & \Rightarrow & \text{odwzr. globalne} \\ & & \downarrow \\ (\text{odwzr. lokalne})^{-1} & \Leftarrow & (\text{odwzr. globalne})^{-1} \end{array}$$

5.1 Przykład: (2,1/2)

Np. rozważmy grupę AK (2,1/2), tzn. grupę automatów o dwóch stanach komórki sieci i zależności jej stanu w chwili $(t + 1)$ tylko od jej stanu w chwili t jak i jej jednego (np. lewego) sąsiada:

$$\begin{array}{cccc} 11 & 10 & 01 & 00 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \end{array}$$

Rodzina automatów (2,1/2)			
nr AK	reguła	nr AK	reguła
0	0000	8	1000
1	0001	9	1001
2	0010	10	1010
3	0011	11	1011
4	0100	12	1100
5	0101	13	1101
6	0110	14	1110
7	0111	15	1111

Takich AK jest tylko 16.

Ale z góry można odrzucić te, które mają przewagę “1” nad “0” w regule bądź przewagę “0” nad “1”.

Z kolei w części spośród pozostałych AK ewolucja komórki zależy tylko od stanu jednej z komórek otoczenia:

- 3, $yx \rightarrow \sim y$

11	10	01	00
0	0	1	1
- 5, $yx \rightarrow \sim x$

11	10	01	00
0	1	0	1
- 10, $yx \rightarrow x$

11	10	01	00
1	0	1	0
- 12, $yx \rightarrow y$

11	10	01	00
1	1	0	0

Te AK są z pewnością odwracalne — nawet można łatwo wskazać AK do nich odwrotne...
 Pozostały więc do przebadania tylko dwa automaty z rodziny (2,1/2): 6 i 9.

- Metody sprawdzanie zależy od przyjętych warunków brzegowych
- Dla periodycznych w.b. i skończonego rozmiaru sieci N można to zrobić w sposób wyczerpujący: jeśli znajdziemy dwie konfiguracje w następnym kroku dające jedną — automat jest nieodwracalny.
- Zasadnicza trudność \rightarrow rozmiar sieci N
- Np. dla $N = 3$ i periodycznych w.b. mamy $2^N = 2^3 = 8$ stanów **układu**:

stan sieci:	111	110	101	100	011	010	001	000
6	000	101	011	110	110	011	101	000
9	111	010	100	001	001	100	010	111

Można się więc spodziewać, że jeśli lista stanów komórek zawiera k symboli, to otrzymamy $k!$ równoważnych automatów — wszystkie odwracalne lub wszystkie nieodwracalne.

- Zawsze jednak pozostaje wątpliwość czy dla większego N reguła nie przestaje być bijekcją.
- Możemy więc jedynie być pewni wyniku negatywnego: jak jest nieodwracalny dla danego układu — to jest nieodwracalny w ogóle...

[K.Kułakowski, *Automaty komórkowe*, OEN AGH, Kraków 2000]

5.2 Rajski ogród

- Czy istnieją konfiguracje, które nigdy nie powstaną jako wynik działania danego automatu?
- Taka konfiguracja mogłaby być tylko stanem początkowym układu; ewolucja zgodna z regułami gry nigdy do niej nie powróci.
- Metoda szukania konfiguracji nieosiągalnej również zależy od przyjętych warunków brzegowych.

[E.Moore, *Proc. Symp. Appl. Math.* **14** (1962) 17]

5.2.1 Przykład: *Life*

Spróbujmy np. oszacować minimalny rozmiar układu, dla którego **istnieje** konfiguracja nieosiągalna:

- Idea rachunków zasadza się na porównaniu liczby N_w **wszystkich** stanów wyjściowych z liczbą N_o stanów **otrzymanych** pod działaniem automatu.
- Jeśli $N_w > N_o$ to *istnieją* konfiguracje, których nie można otrzymać...
- Rozważmy układ składający się z $M \times M$ kwadratów 5×5 .
- Liczba stanów takiej sieci wynosi $(2^{25})^{M^2}$.
- Załóżmy, że jeden z kwadratów 5×5 składa się wyłącznie z martwych komórek.
- Taki stan jest równoważny stanowi, w którym taki kwadrat zastąpimy kwadratem 5×5 z dokładnie jedną żywą komórką centralną w tym sensie, że **w następnym kroku** oba te stany wybranego kwadratu 5×5 dają ten sam stan końcowy **całego układu**.
- Tak więc wystarczy rozważać

$$(2^{25} - 1)^{M^2} = 2^{24.999999957004337... \cdot M^2} (= N_o)$$

z 2^{25M^2} konfiguracji układu $5M \times 5M$.

- Rozważmy “środkową” część takiego kwadratu z kwadratów: $(5M - 2) \times (5M - 2)$
- Część ta posiada dokładnie $N_w = 2^{(5M-2)^2}$ dostępnych stanów.
- Tak więc w sytuacji, gdy

$$24.999999957004337... \cdot M^2 < 25M^2 - 20M + 4$$

część z konfiguracji **nie** będzie miała swojego poprzednika!

- $M > 2315816000$

Poszukiwanie “rajskiego ogrodu” jako drogi do badania odwracalności automatu jest wolna od wad metody wyczerpującej.

5.3 Symetria T

- Rozszerzmy regułę F AK w sposób następujący:

$$s(t+1) = [F(\{s(t)\}) - s(t-1)].\text{MOD}.k$$

- Tak skonstruowane AK są nie tylko odwracalne ale i sekwencje stanów przejawiają symetrię względem odbicia w czasie: wystarczy zmienić kolejnością dwa następujące po sobie stany całego układu, a dalszy rozwój układu opisany tymi regułami będzie polegał na cofaniu się w czasie [G.Y.Vichniac, *Physica* **D10** (1984) 96].
- Istnieją AK odwracalne, które tej symetrii nie wykazują: warunek symetrii T jest silniejszy od warunku odwracalności.
- Np. 6R:

$t - 1:$	1	0	1	0	1	0	1	0
$t:$	11	11	10	10	01	01	00	00
$t + 1:$	1	0	0	1	0	1	1	0

- Już z samej tabeli widać symetrię T: zmieniając jej pierwszy wiersz z trzecim otrzymamy tę samą regułę.
- Można automat 6R sprowadzić do automatu który nie wymaga pamięci o poprzednich stanach komórki — ceną jaką trzeba zapłacić jest rozszerzenie stanów komórki o tę właśnie informację: 11, 10, 01, 00 = 3, 2, 1, 0.
- Taka reguła wykazuje pewną nadmiarowość: nie odróżnia stanu 3X od 1X oraz stanu 2X od 0X.

33	32	31	30	23	22	21	20	13	12	11	10	03	02	01	00
3	0	2	1	2	1	3	0	3	0	2	1	2	1	3	0

[K.Kułakowski, *Automaty komórkowe*, OEN AGH, Kraków 2000]

Opowieść 6

Liniowość i iniektywność AK

- Zastanawiałem się tylko, nic więcej. Prawdopodobnie wszyscy to wiedzą, prawdopodobnie pytając, wychodzę na głupca, prawdopodobnie jest to rzecz powszechnie znana....

[Terry Pratchett, *Wiedźmikołaj*, Prószyński i S-ka (Warszawa 2004)]

- Reguły AK (2,1) liniowych spełniają zasadę superpozycji:

$$F(xyz.\mathbf{XOR}.uvw) = F(xyz).\mathbf{XOR}.F(uvw)$$

- $x.\mathbf{XOR}.y = 0 \Leftrightarrow x = y$
- Dla określenia liniowego AK wystarczy podać regułę dla trzech konfiguracji otoczenia tworzących tzw. bazę.
- Np. (100), (010) i (001) tworzą bazę bo można z nich i operacji **XOR** odtworzyć wszystkie stany otoczenia:
000 100.**XOR**.100
001 001
010 010
011 010.**XOR**.001
100 100
101 100.**XOR**.001
110 100.**XOR**.010
111 100.**XOR**.010.**XOR**.001
- Wartość reguły dla trzech bazowych konfiguracji otoczenia na $k^3 = 8$ sposobów.
- Łatwo je otrzymać jeden po drugim podstawiając "0" i "1" za $F(001)$, $F(010)$ i $F(100)$ a następnie korzystać z definicji AK liniowego. Są nimi automaty: 0_{dec} , 60_{dec} , 90_{dec} , 102_{dec} , 150_{dec} , 170_{dec} , 204_{dec} i 240_{dec} :
 - 0 jest automatem produkującym "0" bez względu na stan otoczenia,
 - 60_{dec} , 90_{dec} i 102_{dec} są równoważne regule $x.\mathbf{XOR}.y$, $x.\mathbf{XOR}.z$ oraz $y.\mathbf{XOR}.z$,
 - 150_{dec} odpowiada $x.\mathbf{XOR}.y.\mathbf{XOR}.z$,
 - 170_{dec} i 240_{dec} przesuwiają całą sieć w lewo i prawo o jedną komórkę,
 - 204_{dec} to transformacja identycznościowa.

6.1 Iniektywność

Reguła AK jest **iniektywna** w $(i+k)$ -tej składowej (gdzie $k = -r, \dots, r$), jeśli dla każdego stanu otoczenia $(x_{i-r}, \dots, x_{i+r})$ reguła jest jedno–jednoznaczny odwzorowaniem

$$x_{i+k} \Leftrightarrow F(x_{i-r}, \dots, x_{i+r})$$

gdy pozostałe x_{i+j} (dla $j \neq k$) są stałe.

- 15: $\begin{array}{cccc} 100 & 101 & 110 & 111 \end{array} \rightarrow 1$
 $\begin{array}{cccc} 000 & 001 & 010 & 011 \end{array} \rightarrow 0$
 jest iniektywna w $(i-1)$ składowej.

- 150: jest iniektywny we wszystkich trzech składowych:

– w $(i-1)$, bo:

$$\begin{array}{cccc} 110 & 000 & 101 & 011 \end{array} \rightarrow 0$$

$$\begin{array}{cccc} 010 & 100 & 001 & 111 \end{array} \rightarrow 1$$

– w i , bo:

$$\begin{array}{cccc} 110 & 000 & 101 & 011 \end{array} \rightarrow 0$$

$$\begin{array}{cccc} 100 & 010 & 111 & 001 \end{array} \rightarrow 1$$

– w $(i+1)$, bo:

$$\begin{array}{cccc} 110 & 000 & 101 & 011 \end{array} \rightarrow 0$$

$$\begin{array}{cccc} 111 & 001 & 100 & 010 \end{array} \rightarrow 1$$

Każdy liniowy automat jest iniektywny w przynajmniej jednej składowej, lub jest równy zero.

Twierdzenie odwrotne nie jest prawdziwe, np. 30:

$$\begin{array}{cccc} 000 & 101 & 110 & 111 \end{array} \rightarrow 0$$

$$\begin{array}{cccc} 100 & 001 & 010 & 011 \end{array} \rightarrow 1$$

jest iniektywny w $(i-1)$ składowej a nie jest liniowy, bo

$$0 = F(101) = F(110.\mathbf{XOR}.011) \neq$$

$$\neq F(110).\mathbf{XOR}.F(011) = 0.\mathbf{XOR}.1 = 1.$$

6.2 Sekwencje aperiodyczne

- Reguła AK pozwala na generację ciągu $s_i(t)$ stanów pojedynczej komórki nie potrafimy odkryć żadnej prawidłowości.
- Podobnie jak w eksperymencie fizycznym mamy więc generator liczb prawdziwie losowych.
- Np. AK 90_{dec}, czyli reguła **XOR** zdefiniowana na stanach sąsiadów:

$$s_i(t+1) = s_{i-1}(t).\mathbf{XOR}.s_{i+1}(t)$$

mamy

$$s_i(t) = s_{i-t}(0).\mathbf{XOR}.s_{i+t}(0)$$

co wiąże się z jego liniowością.

- Jeśli przyjrzymy się stanom centralnej komórki, widać, że nie może być ona periodyczną funkcją czasu, gdyż napotykamy dowolnie długie ciągi "0". Jest to tzw. sekwencja *aperiodyczna*.

- Zdolność automatów do generowania sekwencji aperiodycznych określa twierdzenie: Jeżeli reguła jest iniektywna w $(i+1)$ składowej i konfiguracja (100) daje “1”, lub jeśli reguła jest iniektywna w $(i-1)$ składowej i konfiguracja (001) daje “1”, to dla dowolnych skończonych warunków początkowych może istnieć najwyżej jedna sekwencja periodyczna.
- Niektóre automaty nieliniowe potrafią “naśladować” AK 90_{dec} jeśli pozbawimy stan początkowy niektórych skończonych konfiguracji. Taką operację określa się czasem jako *linearyzacje* AK chociaż właściwie powinno się mówić o linearyzacji sieci...

[K.Kułakowski, *Automaty komórkowe*, OEN AGH, Kraków 2000]

Opowieść 7

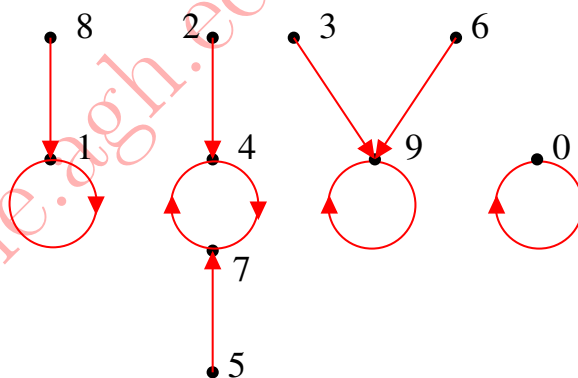
Pochodna dyskretna

Nadeszła chyba właściwa chwila, by — dla uzyskania ciągłości akcji i późniejszych wydarzeń — poinformować, że największy matematyk świata Dysku leżał w tej chwili i spokojnie jadł kolację. Interesujące jest to, że ze względu na swoją przynależność gatunkową, matematyk jadł na kolację swój obiad.

[Terry Pratchett, *Piramidy*, Prószyński i S-ka (Warszawa 1998)]

7.1 Zapis odwzorowań na zbiorach skończonych

- Odwzorowania F skończonych zbiorów X na siebie dadzą się przedstawić w postaci grafów.
- Np. dla zbioru 10 punktów jedno z takich odwzorowań można przedstawić jako:



- Ponieważ zbiór jest skończony, “ścieżka” może kończyć się albo w cyklu granicznym, albo w punkcie stałym (cyklu granicznym o długości 1).
- Baza wektorowa:

$$\hat{e}_j = \begin{bmatrix} e_j^1 \\ e_j^2 \\ \vdots \\ e_j^N \end{bmatrix}$$

gdzie $e_j^i = \delta_{ij}$ dla $j = 1, \dots, N$.

- Każdemu odwzorowaniu można przyporządkować **macierz odwzorowania**:

- jeśli punkt i ma przejść w punkt j , to w j -tym wierszu w i -tej kolumnie musi się pojawić “1”,
- ponieważ punkt i może przejść tylko w jeden stan, więc w i -tej kolumnie może się pojawić **dokładnie** jedna “1”,
- ponieważ w j -ty stan może przechodzić więcej niż jeden stan, więc w j -tym wierszu może być więcej “1”,
- ponieważ niektóre stany mogą być tylko stanami początkowymi — niektóre wiersze mogą mieć same “0”.

- Np. dla “naszego” odwzorowania z grafu mamy macierz $\mathbf{A}(F)$ postaci:

$$\mathbf{A}(F) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

- Generalnie nie ma sposobu na skrócenie dowolnego przepisu: u nas akurat przepis jest taki: (1) numer punktu podnieś do kwadratu, (2) cyfry użyte do zapisu wyniku dodaj do siebie, (3) jeśli wynik jest większy niż 9 idź do (2).
- Wprowadzenie liczb $0 \dots 9$ ułatwiło nam sprawę — generalnie jednak możemy je uznać za symboliczny zapis **stanów układu**, którego komórki sieci mają tylko $k = 2$ stany: “0” i “1” (zmiennie *Boole’a*).
- Zbiór stanów układu o rozmiarze N jest wówczas iloczynem kartezjańskim N zbiorów $\{0, 1\}$.
- Elementem takiego zbioru jest ciąg N “0” i “1”.
- Jest 2^N takich ciągów — każdy z nich może być uważany za wierzchołek n -kostki w n -wymiarowej przestrzeni ($n = 2^N$).
- Odwzorowanie $F: X \ni \vec{x} \rightarrow F(\vec{x}) = \vec{y} \in X$ można przedstawić (choć nie zawsze wiadomo jak) w postaci:

$$\begin{aligned} y_1 &= f_1(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ y_2 &= f_2(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ &\vdots \\ y_{N-1} &= f_{N-1}(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ y_N &= f_N(x_1, x_2, \dots, x_N) \end{aligned}$$

gdzie $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{N-1}, x_N)$ i $\vec{y} = (y_1, y_2, \dots, y_{N-1}, y_N)$

- **Macierz zależności \mathbf{B}** odwzorowania $F: \mathbf{B}(F) = [b_{ij}]$, gdzie

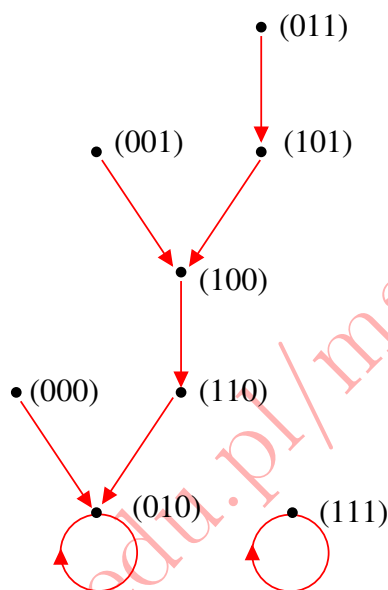
$$b_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{gdy } f_i \text{ nie zależy od } x_j \\ 1 & \text{gdy } f_i \text{ zależy od } x_j \end{cases}$$

- Macierz $\mathbf{B}(F)$ nie daje pełnej informacji o odwzorowaniu F : na jej podstawie nie można odtworzyć F , ale za to jest to macierz $N \times N$ zamiast $2^N \times 2^N$ (jak to było w przypadku macierzy odwzorowania $\mathbf{A}(F)$).

Np. dla $X = \{0, 1\} \times \{0, 1\} \times \{0, 1\}$ i F danej przepisem:

$$\begin{cases} y_1 = x_1 \cdot \bar{x}_2 + x_3 = f_1(x_1, x_2, x_3) \\ y_2 = x_1 + \bar{x}_3 = f_2(x_1, x_2, x_3) \\ y_3 = x_2 \cdot x_3 = f_3(x_1, x_2, x_3) \end{cases}$$

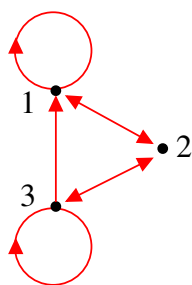
- Funkcja F w postaci grafu:



- Na tej podstawie można podać również macierz $\mathbf{A}(F)$.
- Natomiast macierz $\mathbf{B}(F)$ dla tego odwzorowanie ma postać:

$$\mathbf{B}(F) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

- Macierz zależności $\mathbf{B}(F)$ można też przedstawić w postaci **grafu połączeń**, pokazującego od których zmiennych x_i zależy y_i :



7.2 Boole'owska odległość wektorowa

- Dla dwóch punktów $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, $\vec{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N)$ definiujemy odległość:

$$\vec{d}(\vec{x}, \vec{y}) = (\delta(x_1, y_1), \delta(x_2, y_2), \dots, \delta(x_N, y_N)),$$

gdzie

$$\delta(x_i, y_i) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x_i = y_i \\ 1 & \text{dla } x_i \neq y_i \end{cases}$$

Odległość ta jest **wektorem!**

- Odległość Hamminga można otrzymać, sumując elementy tego wektora.
- Odległość ta spełnia aksjomaty (przyzwoitej) odległości, tj.:

- $\vec{d}(\vec{x}, \vec{y}) = \vec{0} \Leftrightarrow \vec{x} = \vec{y}$
- $\vec{d}(\vec{x}, \vec{y}) = \vec{d}(\vec{y}, \vec{x})$
- $\vec{d}(\vec{x}, \vec{z}) \leq \vec{d}(\vec{x}, \vec{y}) + \vec{d}(\vec{y}, \vec{z})$

W trzecim aksjomacie + jest oczywiście boolowskie, natomiast nierówność jest spełniona dla **każdej składowej z osobna**.

- Przy okazji jedno twierdzenie...

$$\vec{d}(F(\vec{x}), F(\vec{y})) \leq \mathbf{B}(F) \cdot \vec{d}(\vec{x}, \vec{y}),$$

gdzie $\mathbf{B}(F)$ jest macierzą zależności funkcji F

- ...no i może jeszcze jedno:

$$\mathbf{B}(E \circ F) \leq \mathbf{B}(E) \cdot \mathbf{B}(F)$$

- Sąsiedztwo: Każdemu (z $n = 2^N$) wierzchołków n -kostki $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ możemy przypisać N jego sąsiadów:

$$\begin{aligned} \tilde{x}_1 &= (\bar{x}_1, x_2, \dots, x_N) \\ \tilde{x}_2 &= (x_1, \bar{x}_2, \dots, x_N) \\ &\vdots \\ \tilde{x}_N &= (x_1, x_2, \dots, \bar{x}_N) \end{aligned}$$

- Np. dla $N = 3$ sąsiadami punktu $(0,1,1)$ są $(1,1,1)$, $(0,0,1)$ i $(0,1,0)$ — nazwa jest więc geometrycznie całkiem uzasadniona.

7.3 Pochodna Boole'a

- Pochodna dyskretna odwzorowanie F w punkcie $\vec{x} \in \{0, 1\}^N$ jest macierzą Boole'a $N \times N$ o wyrazach:

$$f'_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{gdy } f_i(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \neq \\ & f_i(x_1, \dots, \bar{x}_j, \dots, x_N) \\ 0 & \text{gdy } f_i(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) = \\ & f_i(x_1, \dots, \bar{x}_j, \dots, x_N) \end{cases}$$

- Innymi słowy, $f'_{ij}(\vec{x}) = 1$, gdy $f_i(\vec{x}_j) \neq f_i(\tilde{x}_j)$; i $f'_{ij}(\vec{x}) = 0$ w przeciwnym wypadku, dla $i, j = 1, \dots, N$.
- Np.: $N = 2$, $X = \{0, 1\} \times \{0, 1\}$ i F dana przepisem:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2) &= x_1 + \bar{x}_2 \\ f_2(x_1, x_2) &= x_1 \cdot \bar{x}_2 \end{aligned}$$

W punkcie $\vec{x} = (1, 0)$ mamy dwóch sąsiadów: $\tilde{x}_1 = (0, 0)$ oraz $\tilde{x}_2 = (1, 1)$

- Dla sąsiada \tilde{x}_1 mamy:

$$\left. \begin{aligned} f_1(\vec{x}) &= 1 \\ f_1(\tilde{x}_1) &= 1 \end{aligned} \right\} \Rightarrow f'_{11} = 0$$

oraz

$$\left. \begin{aligned} f_2(\vec{x}) &= 1 \\ f_2(\tilde{x}_1) &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow f'_{21} = 1$$

- Dla sąsiada \tilde{x}_2 :

$$\left. \begin{aligned} f_1(\vec{x}) &= 1 \\ f_1(\tilde{x}_2) &= 1 \end{aligned} \right\} \Rightarrow f'_{12} = 0$$

oraz

$$\left. \begin{aligned} f_2(\vec{x}) &= 1 \\ f_2(\tilde{x}_2) &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow f'_{21} = 1$$

Czyli pochodna funkcji F w punkcie $(1,0)$ jest

$$\mathbf{F}'(1, 0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

i należy ją chyba sobie kojarzyć raczej z pochodną kierunkową.

- Mając pochodną funkcji F w punkcie \vec{x} , możemy odtworzyć wartości funkcji F dla sąsiadów \vec{x} : dla sąsiada \tilde{x}_1 funkcja $F(\tilde{x}_1)$ powinna różnić się od $F(\vec{x})$ tam gdzie w pochodnej są jedynki, a więc $F(\tilde{x}_1) = (1, 0)$ a $F(\tilde{x}_2) = (1, 0)$.
- Np.: założmy, że przy $N = 3$ wartość funkcji F w $(0,1,1)$ wynosi $F(0, 1, 1) = (1, 0, 1)$, zaś pochodna w tym punkcie

$$\mathbf{F}'(0, 1, 1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Wówczas można odtworzyć wartość funkcji F dla wszystkich N sąsiadów $(0,1,1)$: $F(\tilde{x}_1) = (0, 1, 0)$, $F(\tilde{x}_2) = (1, 0, 1)$ i $F(\tilde{x}_3) = (0, 0, 0)$.

- Twierdzenie:

$$\begin{aligned} \forall \vec{x} \in \{0, 1\}^N \quad \forall \vec{y} \in \{\tilde{x}_i\}_{i=1, \dots, N} : \\ \vec{d}(F(\vec{x}), F(\vec{y})) = \mathbf{F}'(\vec{x})\vec{d}(\vec{x}, \vec{y}) \end{aligned}$$

- Twierdzenie: Jeżeli $\mathbf{B}(F)$ — macierz zależności odwzorowania F , $\vec{x} \in \{0, 1\}^N$ to:

$$\forall \vec{x} : \mathbf{F}'(\vec{x}) \leq \mathbf{B}(F)$$

oraz

$$\sup_{\vec{x}} \{\mathbf{F}'(\vec{x})\} = \mathbf{B}(F)$$

(tu kres górny jest równy maksimum).

- Jedną z nadziei jaką fizycy wiązali z AK była próba przełożenia języka równań różniczkowych na formalizm AK — stąd cały ten dość egzotyczny aparat matematyczny.
- Niestety tu akurat AK nie spełniły pokładanych w nich nadziei — aparat zaś pozostał...

[K.Kułakowski, *Automaty komórkowe*, OEN AGH, Kraków 2000]

<http://home.agh.edu.pl/malarz/dyd/ak/>

Opowieść 8

Model odwzorowań przypadkowych

ISTOTNIE.

- Zdziwiający przypadek, prawdę mówiąc.

CZASEM TAK BYWA.

- Wręcz niewiarygodny, można by uznać.

ŻYCIE SPRAWIA CZASEM TAKIE NIESPODZIANKI.

- Nie tylko życie, pozwól sobie zauważyć [...]

[Terry Pratchett, *Wiedźmikołaj*, Prószyński i S-ka (Warszawa 2004)]

Szukając własności charakteryzujących dane odwzorowanie, możemy je porównać z ich średnimi po *wszystkich możliwych odwzorowaniach*. Zakładamy przy tym, że każde odwzorowanie jest równie prawdopodobne. Uzyskujemy w ten sposób model dynamiki zwany **modelem odwzorowań przypadkowych**.

Własności które możemy porównywać to

- średnia długość cyklu granicznego,
- średni czas relaksacji,
- średni rozmiar basenu atrakcji (ilość konfiguracji, które kończą się w tym samym cyklu granicznym).

Obliczając te wielkości dla danego odwzorowania obliczamy średnią po wszystkich stanach początkowych. W MOP dokonujemy jeszcze jednego uśrednienia: po wszystkich możliwych odwzorowaniach.

Dla zbioru o N elementach istnieje N^N odwzorowań zbioru w siebie.

8.1 Średnia długość cyklu

Obliczając średnią długość cyklu granicznego dla każdego z N^N odwzorowań musimy uwzględnić N możliwych stanów początkowych — pełna statystyka obejmuje więc N^{N+1} przypadków.

Ile jest przypadków, w których ewolucja już w pierwszym kroku pozostawi układ w stanie początkowym?

- W macierzy przejścia jest wówczas jedynka na diagonalu. Jest to możliwe na N sposobów. Ponieważ nie narzucamy innych warunków na położenie innych jedynek w macierzy odwzorowania: jedynki w $(N - 1)$ kolumnach można rozmieścić w N możliwych miejscach. Liczba takich przypadków

$$K(c = 1, t = 0) = N \cdot N^{N-1}.$$

- Obliczając liczbę przypadków gdzie drugi stan jest powtórzony ($c = 2$) a stan początkowy należy do cyklu granicznego ($t = 0$) liczymy jako:

$$K(c = 2, t = 0) = N \cdot (N - 1) \cdot N^{N-2}.$$

- Ogólny wzór na prawdopodobieństwo danej długości cyklu c i danego czasu włączeniowego t :

$$P_N(c, t) = \frac{K(c, t)}{N^{N+1}} = \frac{N!}{(N - t - c)!} N^{N-t-c}.$$

Rozkłady prawdopodobieństwa zmiennych c i t można otrzymać jako rozkłady brzegowe:

$$P_N(c) = \sum_{t=0}^{N-c} P(c, t),$$

$$P_N(t) = \sum_{c=1}^{N-t} P(c, t).$$

Tym sposobem możemy określić np. średnią długość cyklu:

$$\langle c \rangle = \sum_c c P(c) = \sqrt{\frac{\pi N}{8}}$$

a jego dyspersja

$$\langle (c - \langle c \rangle)^2 \rangle = \frac{16 - 3\pi}{24} N$$

i względny błąd wielkości c

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{\langle (c - \langle c \rangle)^2 \rangle}}{\langle c \rangle} \approx 0.7.$$

Średnia długość cyklu granicznego jest więc przykładem tzw. silnego braku samouśrednienia.

8.2 Model Kauffmana

Badanie MOP przy użyciu symulacji komputerowych, nastęcza pewnych problemów: przy $k = 2$ dla $L = 10$ komórek mamy $N = k^L = 2^{10} = 1024$ stanów układu. Ilość odwzorowań do przebadania byłaby więc rzędu $N^N \approx 10^{3000}$.

Przykładem zagadnienia o dużym stopniu złożoności jest **model Kauffmana**:

- $k = 2$, L — liczba komórek w układzie, $N = k^L$,
- stan komórki w $(t + 1)$ -wszym kroku jest określony przez stan K innych komórek w t -tym kroku czasowym,
- regułę automatu losuje się na początku dla każdej komórki z osobna,
- losuje się również otoczenie każdej komórki.

oryginalnie: do symulacji oddziaływania układu N genów (binarnych)

- $r \rightarrow \infty$: każdy gen wybiera losowo M sąsiadów spośród $L - 1$ pozostałych
- wówczas dla $L \rightarrow \infty$ udaje się rodzaj rachunków średniopółowych: system jest niestabilny pod względem rozprzestrzeniania się uszkodzeń dla dużych M
- tu, duży oznacza już $M = 2$: mówimy o *katastrofie złożoności*

- mutację, która zmienia *cały* garnitur genów (zmieniając np. fizyka w informatyka) nazywamy *katastrofą mutacyjną*

Symulacje modelu Kaufmanna na sieciach regularnych z oddziaływaniem do najbliższych sąsiadów wyznaczonych przez tę właśnie sieć.

Wówczas dla każdego węzła pozostaje tylko wybrać jedną z 2^M reguł.

- dla 1D i 2D-miodoplastrowej sieci system jest stabilny ze względu na rozprzestrzenianie się uszkodzeń (mutacji)
- dla kwadratowej, trójkątnej, 3D-SC, 4D-SC — już nie: mutacje propagują się na *całą* sieć
- $L = 10^5$ genów: $N = 2^L$ zestawów
- w rzeczywistości zaś tylko $10^3 \ll N$ różnych rodzajów komórek i dobry model powinien wyjaśnić czemu ich tak mało
- każdy gen wybiera regułę
- przy $M = 4$ sąsiadach mamy $2^{16} = 65536$ możliwych reguł i każdy z $L = 10^5$ genów stać na własną
- reguły dla każdej komórki (genu) są wybierane losowo na początku symulacji i nie ulegają zmianie w czasie
- wówczas system kończy w cyklu granicznym
- różne cykle graniczne odpowiadają różnym rodzajom komórek
- liczba rodzajów tych cykli jest rzędu \sqrt{L} — no i tyle właśnie miało wyjść
- dla $L = 10^5$ osiągnięcie atraktora może trwać dłużej niż wiek Wszechświata — układ genów znajduje z pewnością sposób na ominięcie większości możliwych stanów i znalezienie stanu stacjonarnego
- katastrofa złożoności: przy przejściu z $M = 1$ do $M = 2$ przechodzimy od krótkich cykli granicznych do chaotycznych i skomplikowanych.

[S.A.Kauffman, J. Theor. Biol. **22** (1969) 437], [D.Stauffer, J. Phys. **A24** (1991) 909], [K.Kułakowski, *Automaty komórkowe*, OEN AGH, Kraków 2000]

Opowieść 9

Samorganizowany stan krytyczny

Większość mieszkańców Lancre, jak mówi stare powiedzenie, kładzie się spać z kurami a wstaje z krowami *.

* Ehm. To znaczy, że kładą się do łóżek o tej samej porze, kiedy zasypiają kury, a wstają o tej samej porze, kiedy wstają krowy. Takie nieprecyzyjne sformułowania mogą prowadzić do nieporozumień.

[Terry Pratchett, *Maskarada*, Prószyński i S-ka (Warszawa 2003)]

SOC = dalekie od równowagi stany uporządkowane. Jest to taki stan krytyczny, do którego prowadzą ośrodki rozchodzące się w nim zaburzenia. Gdy go już do niego doprowadzą, ośrodek pozostaje w SOC; jest to więc stan stabilny mimo dowolnie dużych (krytycznych) fluktuacji.

SOC wymaga ośrodka co najmniej dwuwymiarowego: w ośrodku jednowymiarowym fluktuacje są zawsze skończone, ponieważ istnieje skończone prawdopodobieństwo zatrzymania każdej fluktuacji. Istnieje skończone prawdopodobieństwo dowolnie wysokiej bariery, a więc gdzieś na nieskończonej osi taka bariera istnieje.

9.1 SOC w piasku

Wyobraźmy sobie stertę suchego piasku, uzupełnianą w sposób ciągły przez dosypywanie go z góry wąską stróżką.

- Nachylenie ścian utworzonego w ten sposób stożka fluktuuje wokół pewnej wielkości krytycznej.
- Same fluktuacje mają zaś postać lawin, schodzących w nieprzewidywalnych momentach i mające nieprzewidywalne rozmiary.
- Rozkład odstępów czasu między lawinami

$$P(T) \propto T^{-\alpha}$$

może być użyty do otrzymania

$$P(f = 1/T) \propto f^{-2+\alpha}.$$

- Wynik eksperymentu komputerowego dla układu 3D brzmi: $\alpha = 0.94$. Modelowa sterta piasku opisuje zjawisko szumu $1/f$.
- Numeryczne badanie rozkładu rozmiaru s lawin

$$P(s) \propto s^{-\tau}$$

dają dla układu 3D $\tau = 1.37$. Reguły automatu były takie, że lawina zaczynała się obсыпать, gdy przekroczony został pewien kąt krytyczny \rightarrow ziarno piasku przesuwało się wtedy o jedną komórkę \rightarrow co mogło powodować przekroczenie kąta krytycznego w kolejnej komórce \rightarrow itd.

- Kłopot — co robić gdy w danym punkcie spotykają się dwie lawiny (problem komutacji reguł AK)?
- Co gorsza, dla *rzeczywistej* sterty piasku, jeśli średnica podstawy sterty przekracza 1.5 cala teoria SOC przestaje działać — przewagę zyskują większe lawiny budzone pod powierzchnią zbocza.

Przykład numeryczny:

- Sterta piachu *bez* zdefiniowanej odległości między ziarnami: sąsiedzi są dobierani przypadkowo spośród wszystkich ziaren na zboczu, niezależnie od ich położenia.
- Jeśli ziarno piasku wylądowuje na już zajętych miejscu to uruchamiana jest lawina: oba ziarna są przenoszone w losowo wybrane miejsca dopóki wszystkie ziarna nie upadną w wolnych miejscach.
- Wtedy dostarczane jest do układu nowe ziarno z zewnątrz.
- Rozmiar lawiny s — to ilość uruchomionych ziaren między uzupełnieniami.
- Czas trwania lawiny t to ilość kroków czasowych między uzupełnieniami.
- Część położań uważa się za brzeg stożka; ziarno które tam upadnie znika.
- W takim sformułowaniu znika również problem komutacji reguł: dla dużego układu jest małe prawdopodobieństwo spotkania się dwóch ziaren lądujących w tym samym położeniu.

[K.Kulakowski, *Automaty komórkowe*, OEN AGH, Kraków 2000]

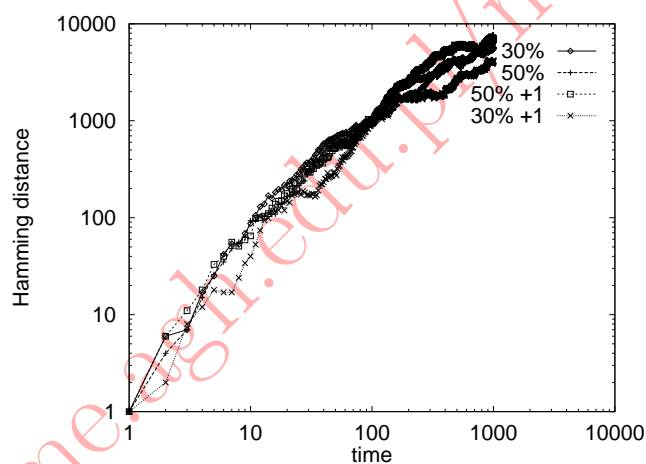
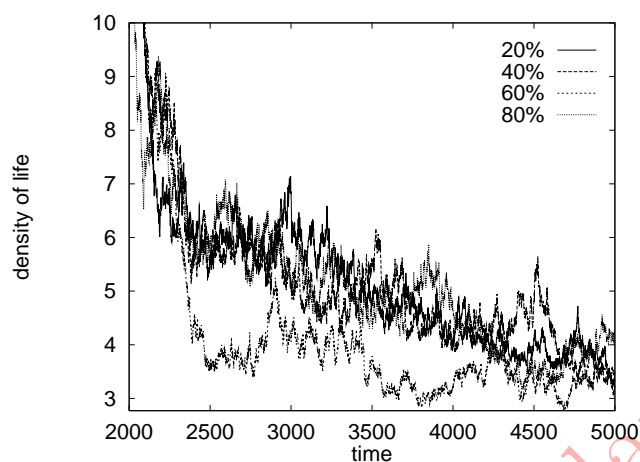
9.2 SOC w *Life*

Reguły *Life*: śmierć z natłoku jak i z samotności — można porównać do znanego równania logistycznego, z jego tłumiącą wzrost zależnością kwadratową (bądź członem Verhulsta)

$$x_{t+1} = r \cdot x_t(1 - x_t).$$

- *Life* pozostawiony sam sobie zastyga w formie “skamienielin” — małych izolowanych form statycznych bądź oscylujących z okresem 2.
- Niektóre z nich mogą się poruszać bez żadnych ograniczeń (np. szybowce).
- Czy przy pewnym rozmiarze układu reakcja szybowców ze skamienielinami będzie się samopodtrzymywać?
- No ale dla piasku sterta pozostaje w SOC tylko jeśli się ją zasila piaskiem: SOC jest stanem *stacjonarnym* układu *otwartego*.
- Stan krytyczny oznacza, że zasięg rozchodzących się w nim zaburzeń nieograniczony.
- Można więc stwierdzić SOC, zaburzając układ otwarty i obserwując rozchodzące się w nim zaburzenia.
- Jeśli jego zasięg przekroczy rozmiar sieci, mamy do czynienia ze stanem krytycznym.

- Dla odpowiednio długich czasów odległość Hamminga między zaburzoną i niezaburzoną siecią $H(t) \propto t^\mu$, gdzie $\mu = 1.1 \pm 0.1$.
- Wynik jest nieco kontrowersyjny gdyż *Life* jest uważany za AK klasy IV — dla klasyfikacji danego automatu istotne są warunki brzegowe.



[K.Malarz et al, *Int. J. Mod. Phys. C9* (1998) 449]

Część II
Zastosowania

<http://home.agh.edu.pl/malarz/dyd/ak/>

Opowieść 10

AK w biofizyce: model Penny

Umysły zwierząt są proste. Zwierzęta nigdy nie marnują czasu, dzieląc doświadczenie życiowe na małe kawałeczki i myśląc o tych wszystkich kawałeczkach, które straciły. Cały zakres wszechświata wyraża się dla nich jako rzeczy, które: a) nadają się do kopulacji, b) nadają się do jedzenia, c) należy przed nimi uciekać i d) kamienie. To uwalnia umysł od zbędnych myśli i daje konieczną bystrość wtedy, kiedy jest niezbędna.

[Terry Pratchett, *Równoumagicznienie*, Prószyński i S-ka (Warszawa 1999)]

Model Penny = model dynamiki populacji niejednorodnej genetycznie oparty na teorii akumulacji, głoszącej, że starzenie jest konsekwencją nagromadzenia szkodliwych mutacji zachodzących w trakcie życia [T.J.P.Penna, *J. Stat. Phys.* **78** (1995) 1629].

W procesie reprodukcji mutacje te dziedziczone są przez potomków, a proces ten jest biochemicznie niedoskonały, co powoduje, iż dzieci różnią się w pewnym stopniu od swoich rodziców. Ta niedoskonałość może być potężnym mechanizmem umożliwiającym przetrwanie populacji w sytuacji zmian warunków środowiskowych, kiedy lepiej przystosowane osobniki zaczynają dominować w populacji.

- Informacja genetyczna (genotyp) jest jedyną charakterystyką członka populacji (fenotyp jest zaniedbywany).
- Genotyp (słowo 16-, **32-** lub 64-bitowe) jest zapisywany w chwili urodzenia i nie zmienia się w czasie ewolucji osobniczej.

01	02	03	04	05	06	07	08	09	10	11	12	13	14	15	16
0	1	0	0	1	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0

- Jednak w wieku a osobnik zna tylko pierwsze a pozycji genomu.
- Długość słowa jest jednocześnie górnym ograniczeniem długości życia osobnika.
- Jeśli mutacje (negatywne) nie są dostatecznie rekompensowane przez odpowiedni mechanizm selekcji może nastąpić *mutational meltdown* — wyginięcie populacji.

10.1 Parametry kontrolne modelu

N_{bit} Długość genomu.

N_0 Początkowa liczebność populacji.

N_{max} Maksymalny dopuszczalny rozmiar populacji. (Typowa wartość to $N_{\text{max}} = 10 \cdot N_0$.)

m Prawdopodobieństwo dodatkowych mutacji otrzymywanych przy narodzinach.

- M Ilość dodatkowych mutacji otrzymywanych przy narodzinach.
- T Odporność organizmu na “choroby”.
- R_{\min} Wiek osiągnięcia dojrzałości płciowej.
- R_{\max} Wiek, po którym osobnik traci zdolność prokreacji (zazwyczaj $R_{\max} = N_{bit}$).
- b Prawdopodobieństwo reprodukcji.
- B Liczba potomstwa wydawanego przez osobnika w okresie reprodukcyjnym.
- T_{\max} Czas symulacji.

[T.Sitkowski, *M.Sc. thesis*, WFiTJ AGH, 1997].

10.2 Algorytm

- Startujemy z N_0 osobnikami o określonym genomie (często losowym bądź z samymi “0”).
- W każdym kroku ($0 \leq t \leq T_{\max}$) dla każdego osobnika:
- Inkrementujemy wiek osobnika: $a \rightarrow a + 1$
 - jeśli $a > N_{bit}$ — usuwamy tego osobnika,
 - sprawdzamy liczbę odsłoniętych **i** aktywnych genów:

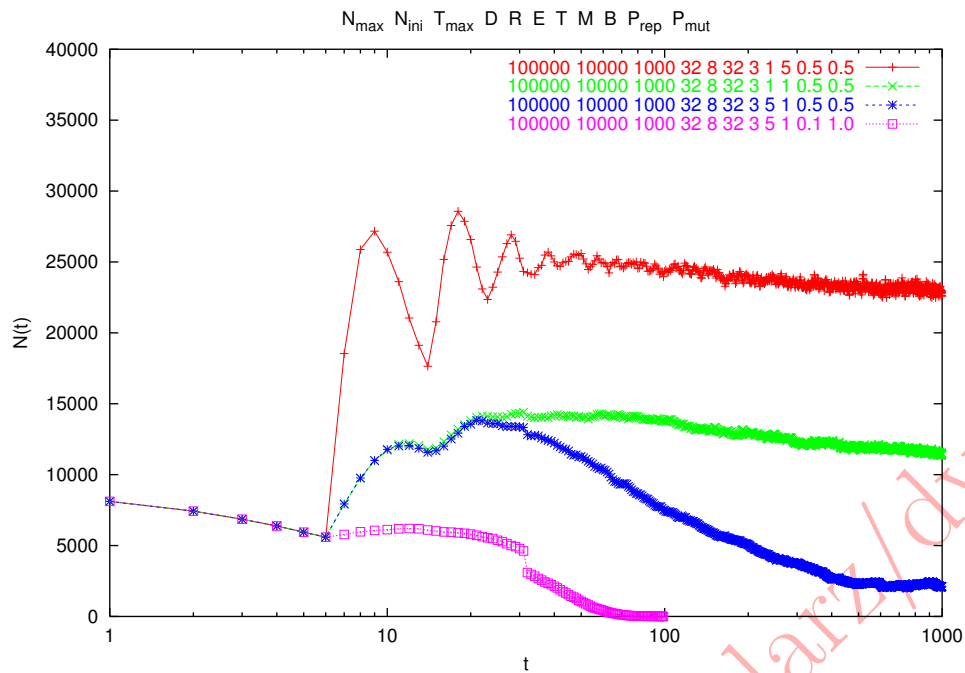
$$bad = \sum_{i=1}^a bit(i)$$

- jeśli dla danego osobnika: $bad \geq T$ — usuwamy go z populacji,
- bez względu na stan “zdrowia” usuwamy z prawdopodobieństwem

$$1 - V(n, t) = n(t)/N_{\max}$$

osobnika uwzględniając w ten sposób ograniczoną pojemność środowiska — czynnik Verhulsta.

- Jeśli wiek osobnika na to pozwala ($R_{\min} \leq a \leq R_{\max}$) wydaje on z prawdopodobieństwem b , B potomków dziedziczących po nim “garnitur” genów z wyjątkiem M (zazwyczaj) szkodliwych mutacji dodawanych z prawdopodobieństwem m w losowych miejscach genomu.



10.3 Charakterystyka populacji

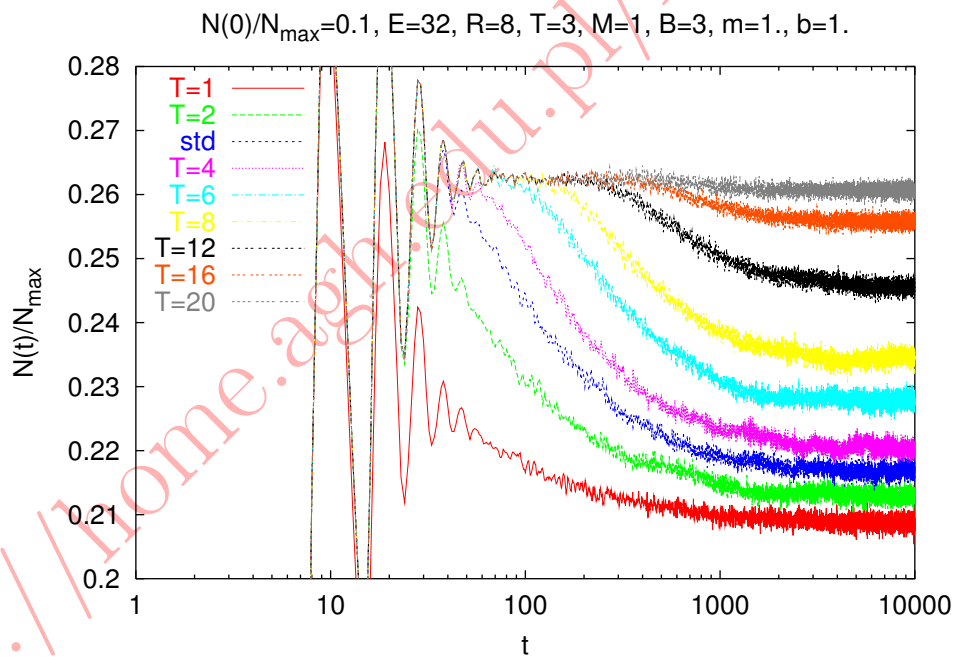
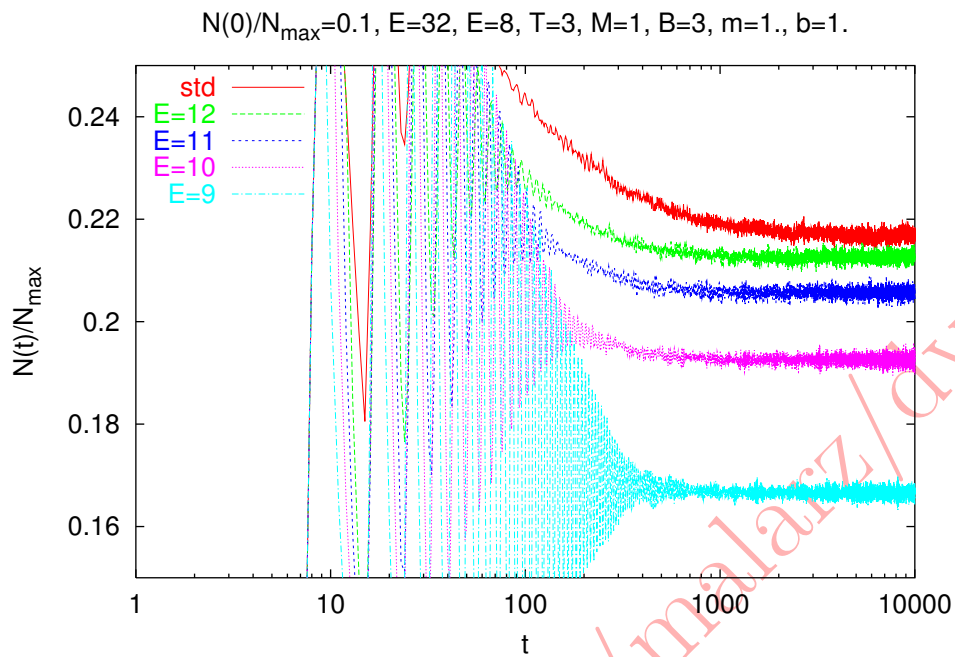
- Liczebność populacji $\sum_a n(a, t)$.
- Prawdopodobieństwo przeżycia:

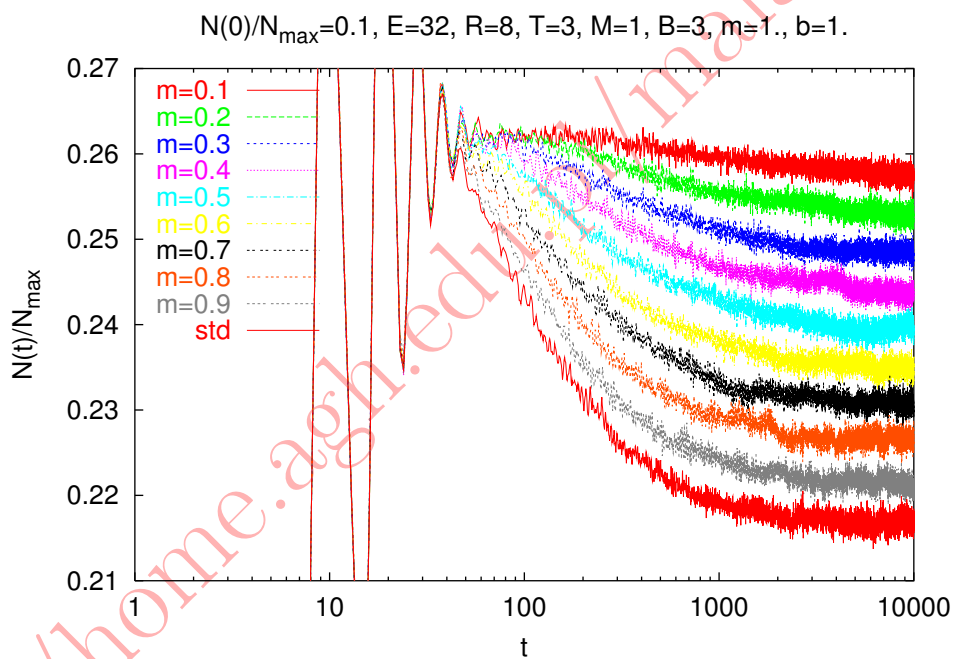
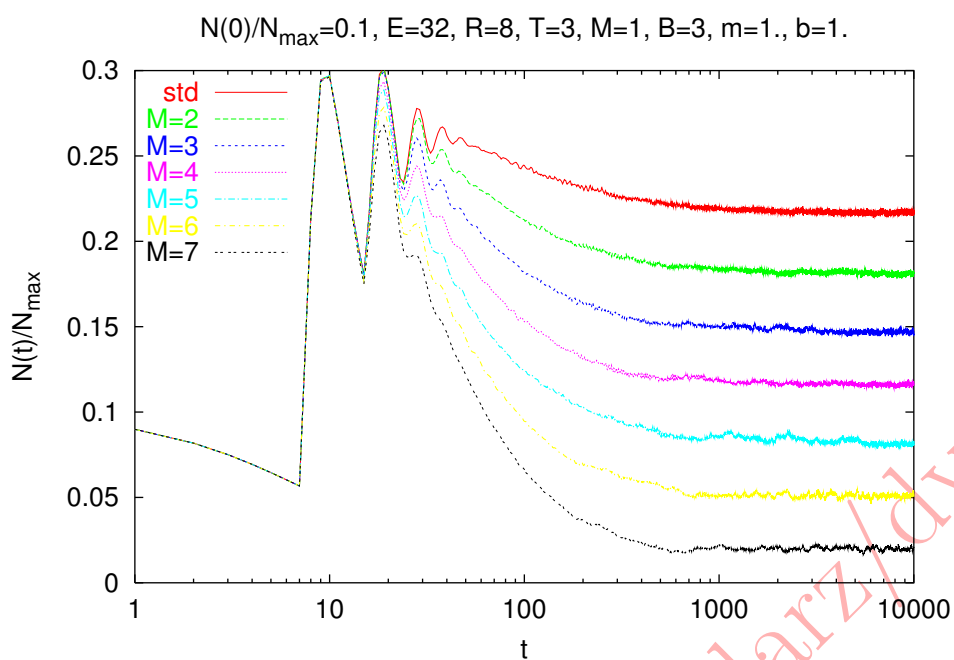
$$S(a, t) = n(a + 1, t) / n(a, t - 1).$$

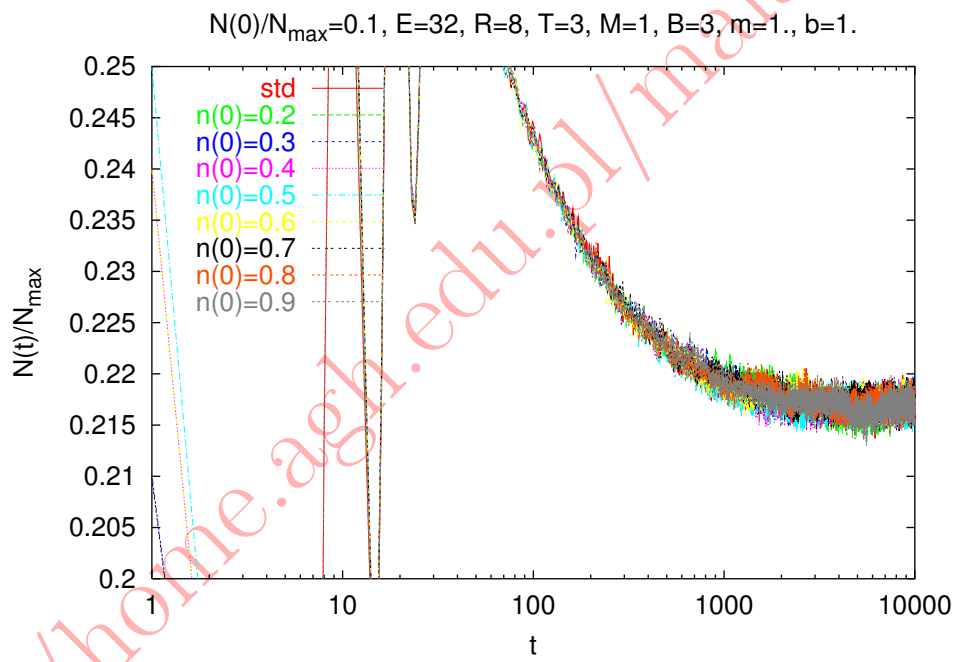
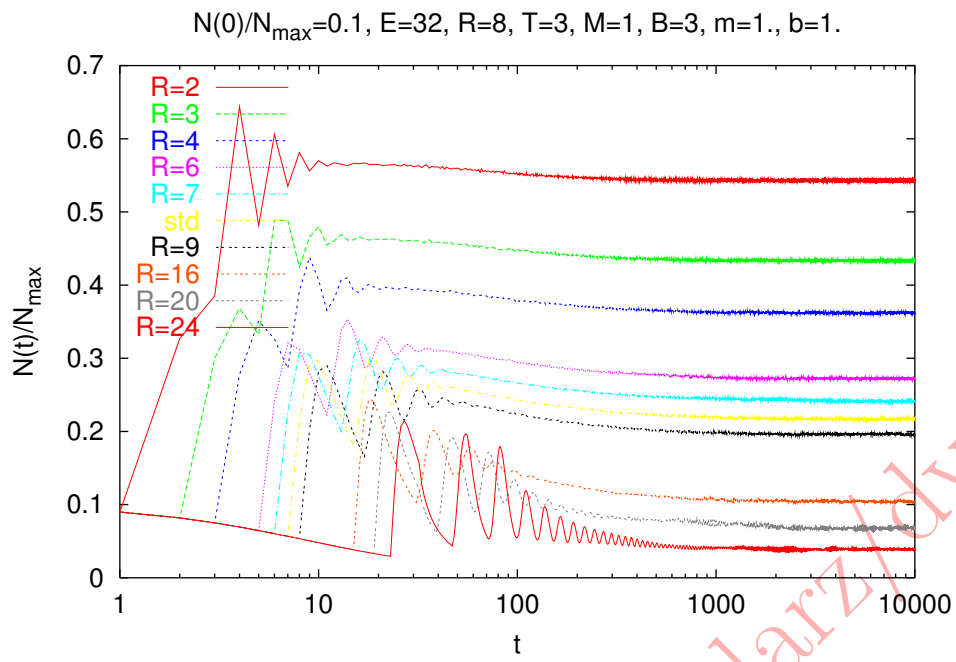
- Struktura wiekowa: $n(a, t) / \sum_a n(a, t)$.
- Rozkład mutacji: procentowy rozkład ustawionych na określonej pozycji bitów.
- Śmiertelność: $q(a, t) = -\partial \ln n(a, t) / \partial a = 1 - S(a, t)$.

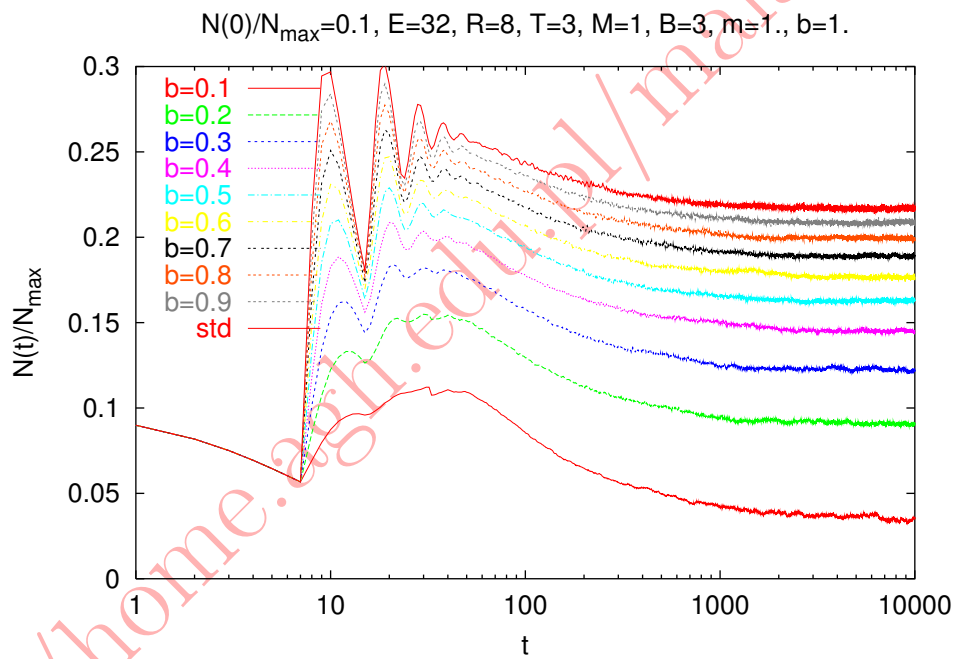
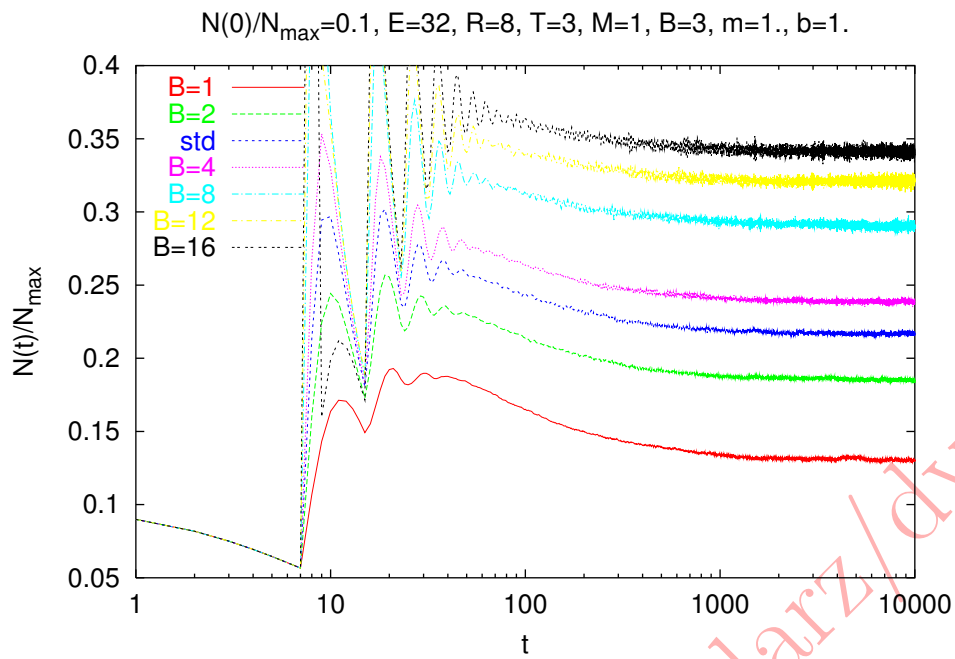
10.4 Kilka (o'kay — kilkanaście) przykładów zastosowań

10.4.1 Wpływ parametrów modelu na liczebność populacji





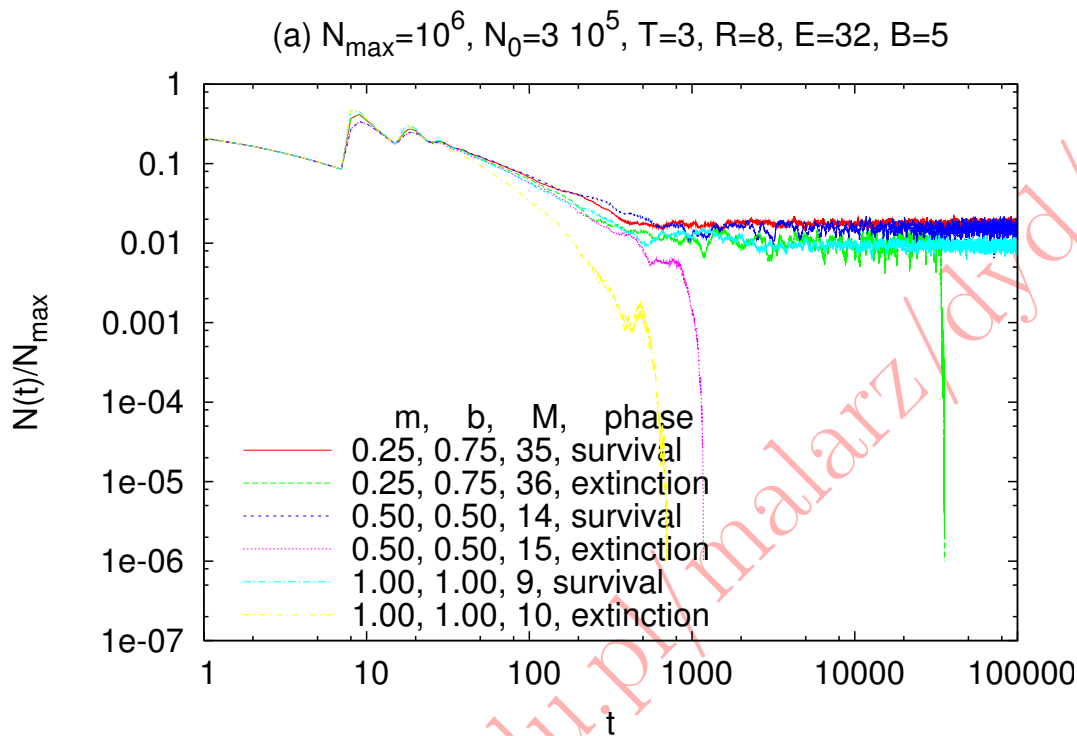




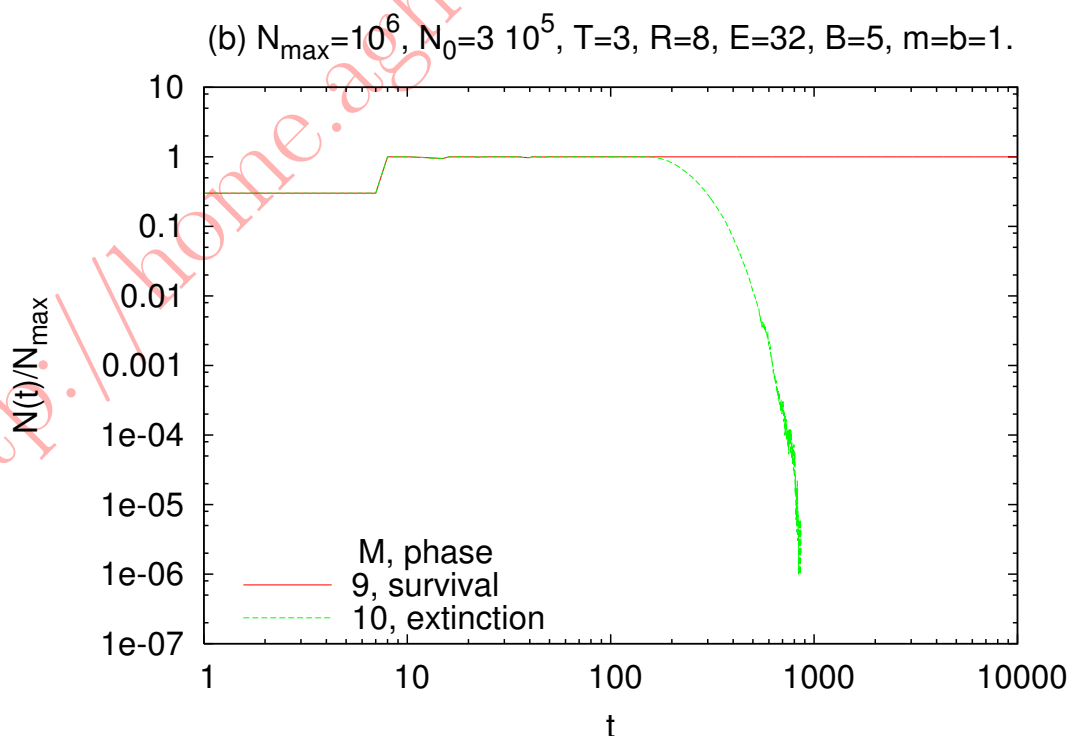
[K.Malarz et al, *Lec. Notes Comput. Sci.* **3037** (2004) 638]

10.4.2 Groźba wyginięcia

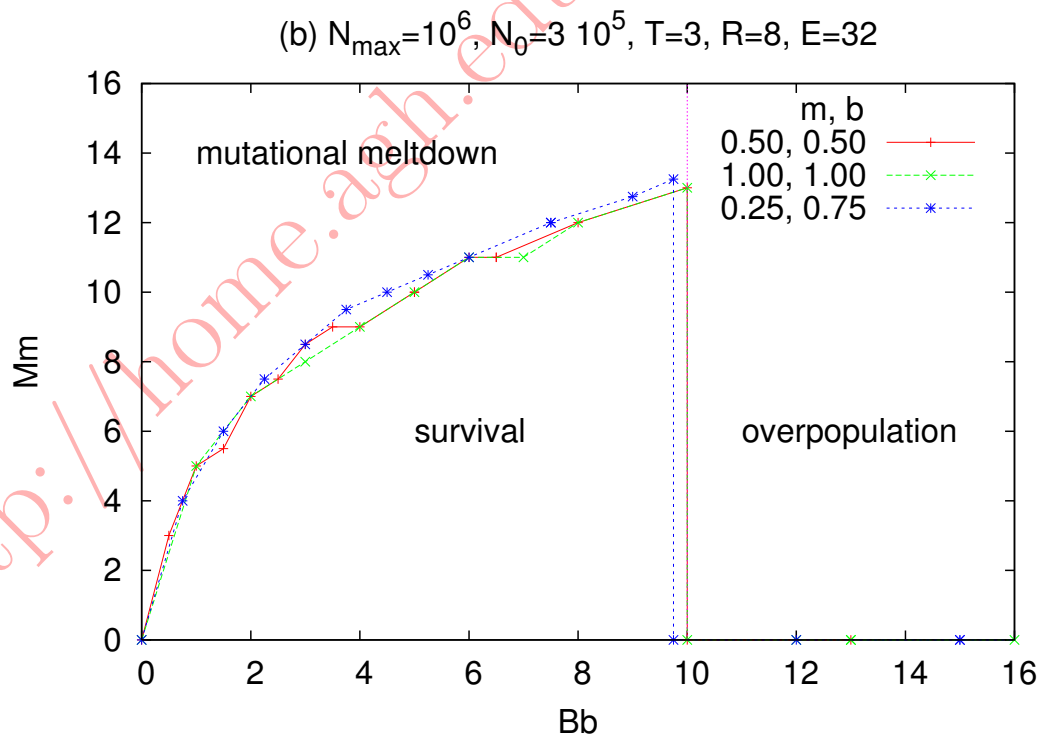
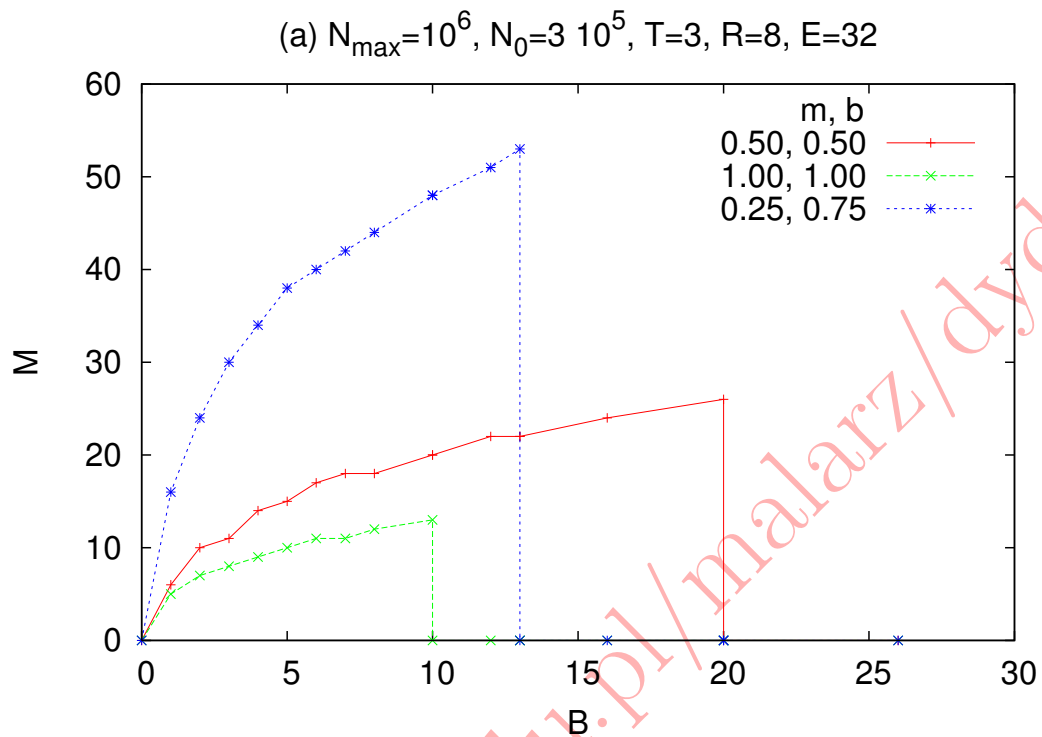
A few examples of population size dynamics for different mutation and birth rates (M, B) and probabilities (m, b). The subsequent pairs of curves have identical set of parameters except of mutation rates which are M and $M + 1$. The Verhulst's factor applies either to all individuals or...



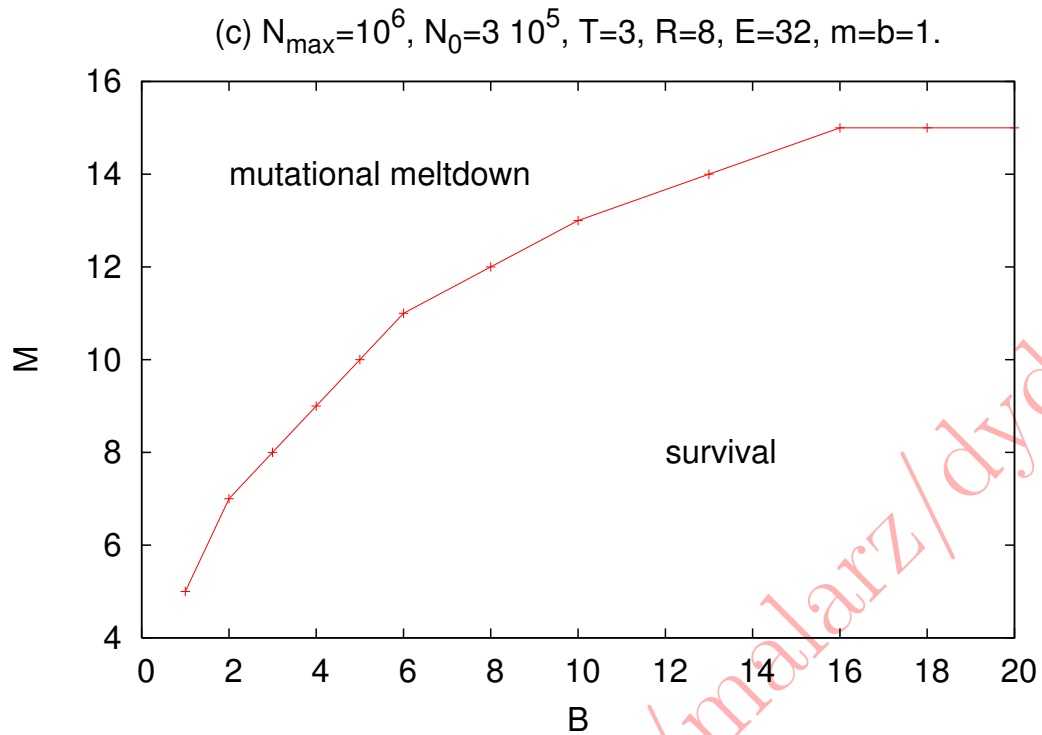
... only to newly born babies.



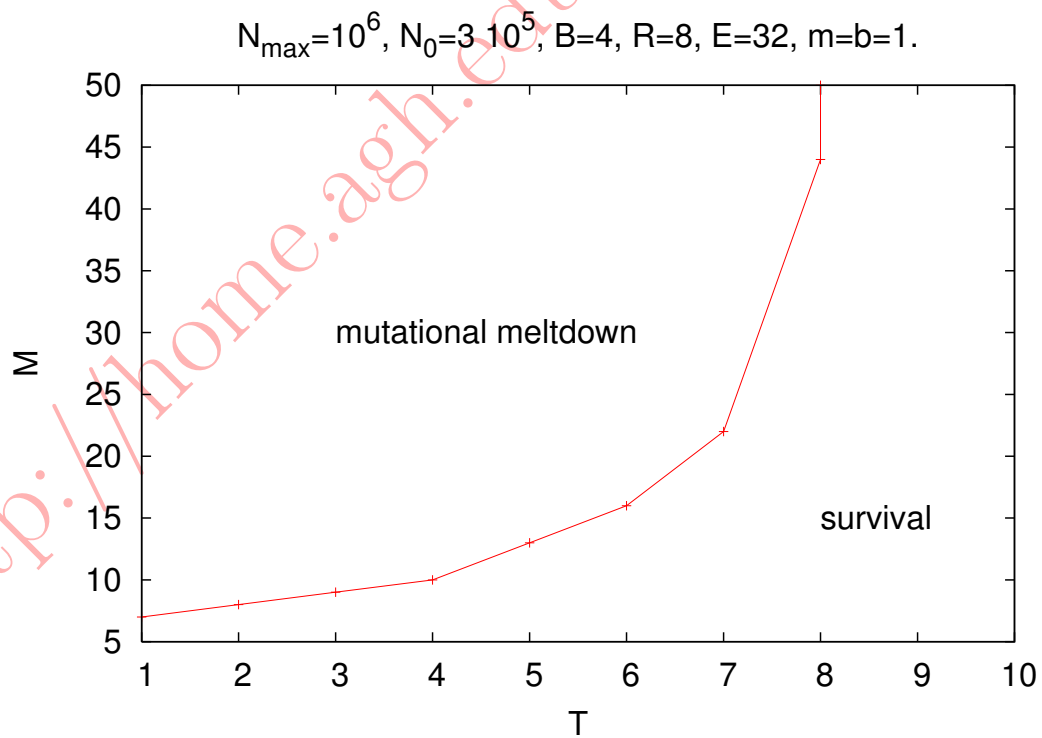
The phase diagram survival-extinction for (a) various values of the mutation and birth rates (M, B) and probabilities (B, b) and (b) for average numbers of mutations Mm and births Bb per “season” and per individual. Below arc-like lines the species survival is possible. At and above them individuals die due to too many mutations pumped into their genome. On the right side of the vertical line the extinction process is caused by overpopulation.



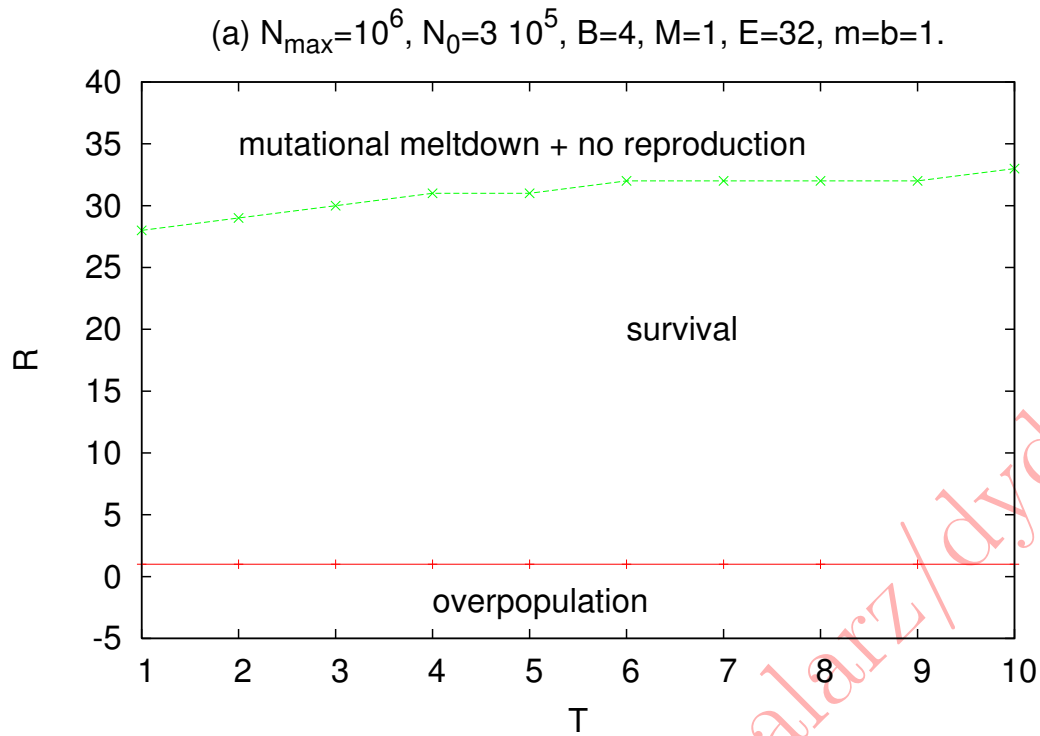
The latter may be avoided when Verhulst's factor acts only on newly born babies:



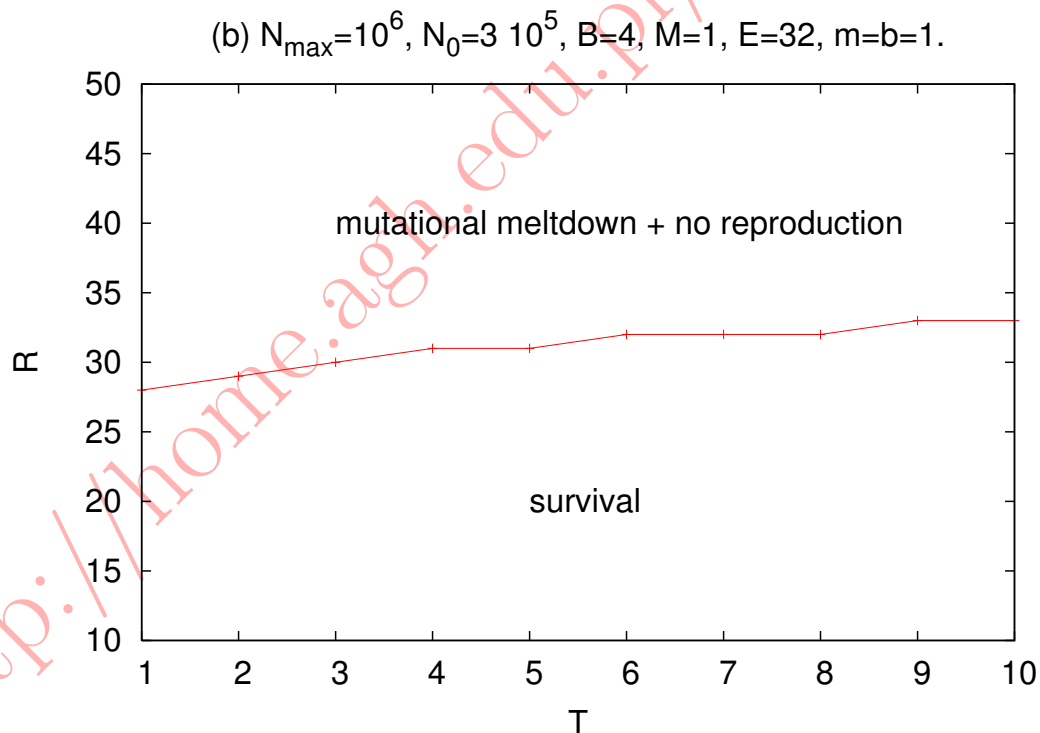
The phase diagram survival-extinction on (harmful mutation threshold T)-(mutation rate M) plane.



The phase diagram survival-extinction on (harmful mutation threshold T)-(minimal reproduction age R) plane for Verhulst's factor acting on all individuals and...



... only on newly born babies. In the latter case the overpopulation is avoided.



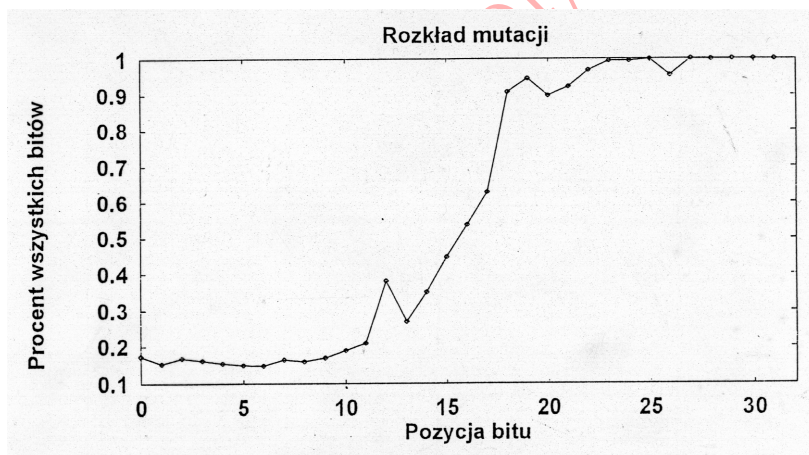
Our results agree with independent work of H. Dudzus, [B.Sc. thesis, Cologne University, 2006], who also found the critical birthrate as $B = [32/(31 - R + T)]^M$.

[K.Malarz, *Theor. Biosci.* **147** (2007) 147, q-bio.PE/0607045]

10.4.3 Ciśnienie ewolucyjne

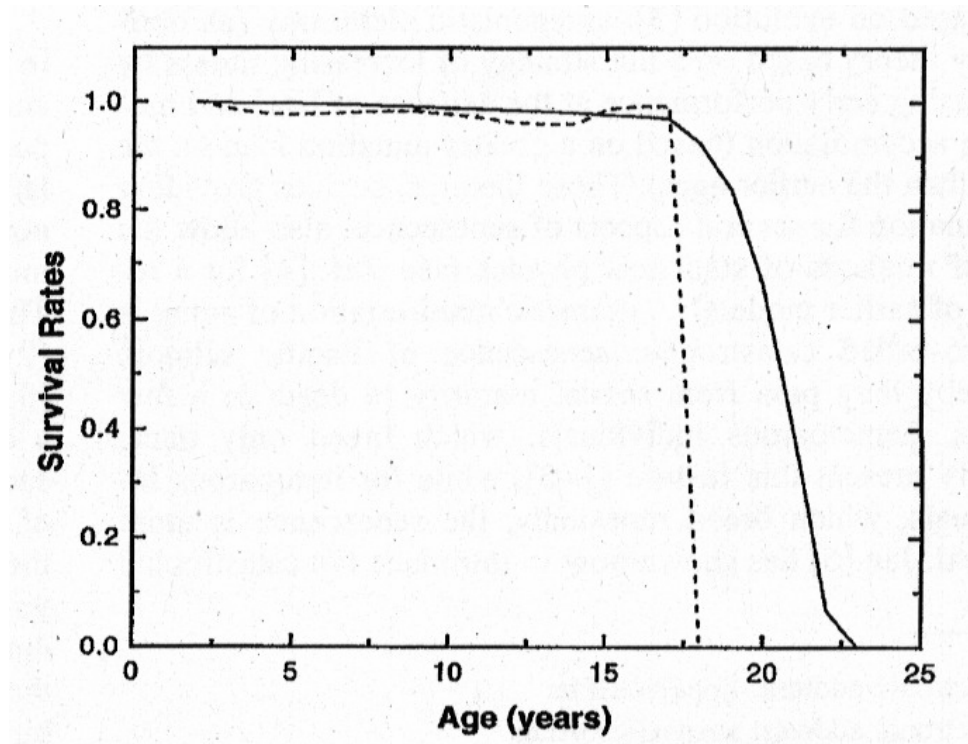
Ciśnienie ewolucyjne wypycha uszkodzone geny powyżej wieku dojrzałości R_{\min} : podobnie jak dla modelu Baka–Sneppena [P.Bak, K.Sneppen, *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993) 4083]:

- N komórek zawierające liczby $x_i \in \mathbb{R}$.
- Początkowo x_i są losowane z rozkładu jednorodnego.
- Komórka, która w danej chwili ma najmniejszą zawartość otrzymuje nową wartość losowaną również z rozkładu jednorodnego.
- Jednocześnie takiej zmianie poddawane jest k jej sąsiadów.
- W wyniku takiej ewolucji rozkład przechodzi w jednorodny powyżej pewnej wartości ($R \approx 2/3$).
- Średnia $\langle x(t \rightarrow \infty) \rangle \approx 0.83$.
- Model BS (dla $k = 2$) doczekał się wersji średniopolowej — która przewiduje $R \approx 1/3$ — jeszcze raz okazuje się, że zaniebywanie informacji o lokalnych korelacjach (że te komórki są najbliższymi sąsiadami) prowadzi do błędnych wyników.
- Model BS jest też ilustracją obowiązującej w ewolucji zasady Czerwonej Królowej: do każdego następnego “wyścigu” stają tylko zwycięzcy — wartość R stale rośnie a słabszych od nas jest coraz mniej...



10.4.4 “Katastrofa dojrzałości”

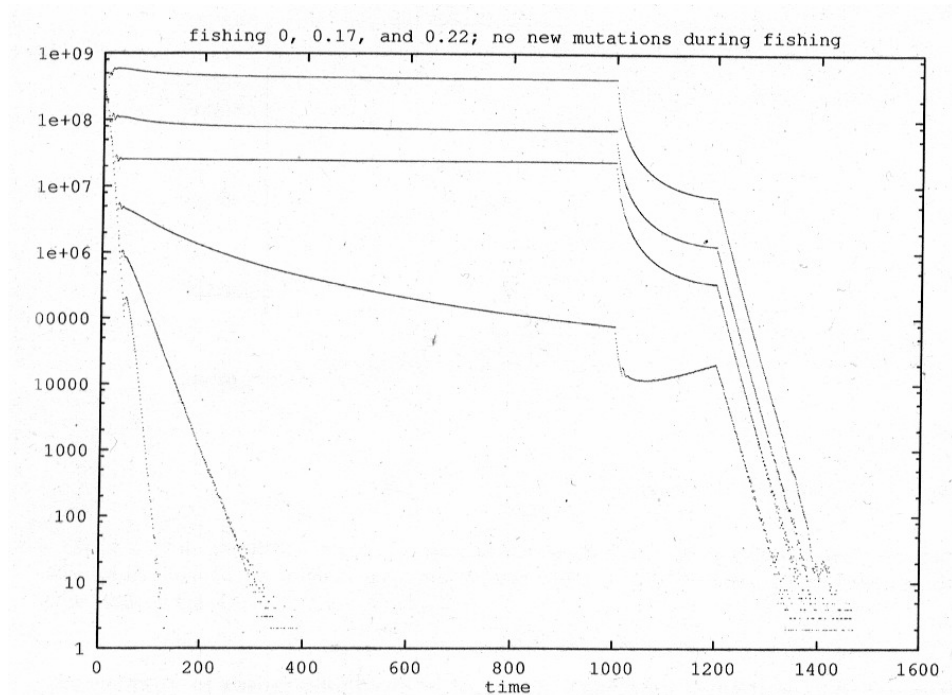
Dramatycznym przykładem starzenia się jest rozwój osobniczy łososi, które umierają w kilka tygodni po osiągnięciu dojrzałości płciowej i prokreacji. Czy łosie dlatego się tylko raz rozmnażają bo natychmiast potem umierają czy dlatego umierają, że się rozmnożyły? Wydaje się, że model Penny każe wierzyć w drugą hipotezę: zmodyfikujmy model tak by reprodukcja została ograniczona do dokładnie jednego “roku” $a = R_{\min} = R_{\max}$ zamiast całego przedziału $R_{\min} \leq a \leq R_{\max}$ i $R_{\min} \neq R_{\max}$. Osobniki rozmnażające się kilkakrotnie w ciągu życia mają łagodniejszy rozkład prawdopodobieństw przeżycia $S(a)$ [T.J.P. Penna et al, *Phys. Rev.* **E52** (1995) R3309].



10.4.5 Polowanie/odławianie/wojny

Załóżmy, że dodatkowo oprócz czynnika Verhulsta wprowadzamy dodatkowe usuwanie części osobników z populacji bez względu na ich wiek i zdrowie.

- Dodatkowe odławianie/odstrzał oczywiście zmniejsza liczbę osobników — jeśli populacja ma odpowiednio dużo czasu i możliwość dopasowania się do zmiany środowiska — dokona odpowiedniego przesunięcia wieku reprodukcji R_{\min} ...
- Jeśli jednak dodatkowe odławianie/odstrzał nastąpi zbyt szybko — populacja wygnie.
- Populacje może się jednak — mimo nawet nadmiernego odławiania — ustabilizować o ile tylko zostanie wprowadzony wiek (rozmiar) ochronny... [S.Moss de Oliveira et al., *Physica A* **215** (1995) 298]
- Te dodatkowe czynniki zmniejszające liczebność populacji mogą być bezpośrednio umieszczone w czynniku Verhulsta: $1 - V(n, t) = n(t)/N_{\max} - P_{\text{hunt}}$ [A.Z.Maksymowicz et al, *Comput. Phys. Commun.* **121-122** (1999) 113]

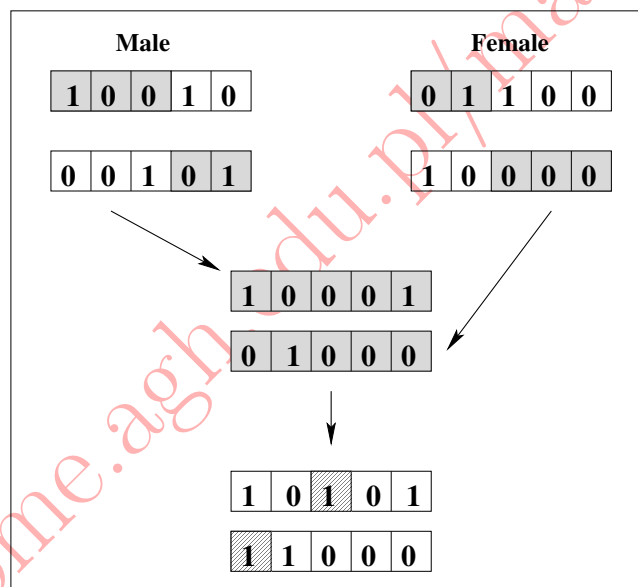
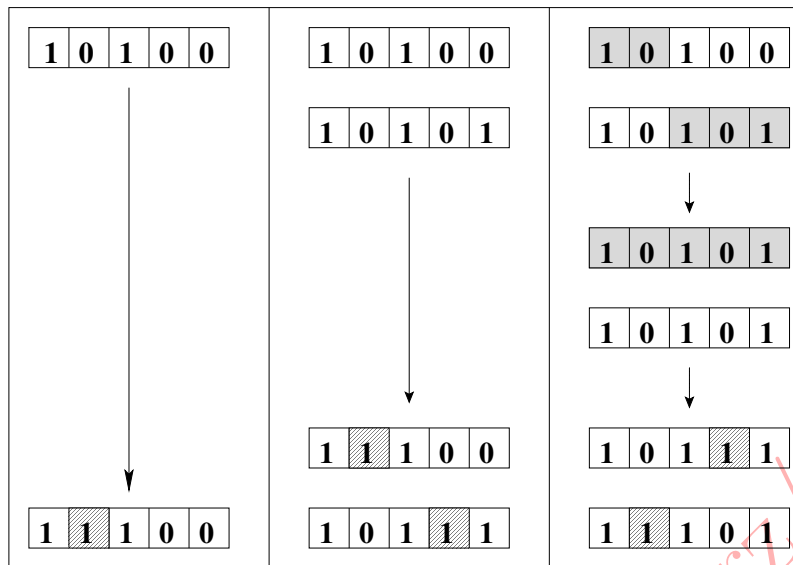


10.4.6 Poza partenogenezę

Konieczna modyfikacja modelu wprowadzająca rozmnażanie płciowe:

- Każdy osobnik jest definiowany przez **dwa** słowa komputerowe.
- Jeśli w określonej pozycji *a* **oba** bity są ustawione — poczynając od tego właśnie wieku osobnik zaczyna cierpieć z powodu “choroby”.
- Jeśli **tylko jeden** z dwóch bitów jest ustawiony — to będzie cierpiał tylko wtedy, jeśli pozycja ta została wcześniej określona jako **dominująca**.
- Wybór *loci* które są dominujące następuje losowo na początku symulacji: jest taki sam dla wszystkich osobników i nie zmienia się w czasie symulacji.
- Genom potomstwa jest tworzony poprzez połączenie genomów rodziców:
 - Produkowana jest gameta żeńska: podział genomu w losowym miejscu + łączenie fragmentów z różnych łańcuchów + M_f mutacji.
 - Analogicznie dla genomu ojca (M_m).
 - Genom potomka tworzony jest z gamety żeńskiej i męskiej.
 - Płeć potomka wybierana jest losowo.

[A.T.Bernardes, *Ann. Rev. Comp. Phys.* **IV** (1996) 359]



10.4.7 . Dlaczego Natura wynalazła płęć?

Organizmy żywe na Ziemi prezentują generalnie dwa typy reprodukcji koegzystujące od setek milionów lat:

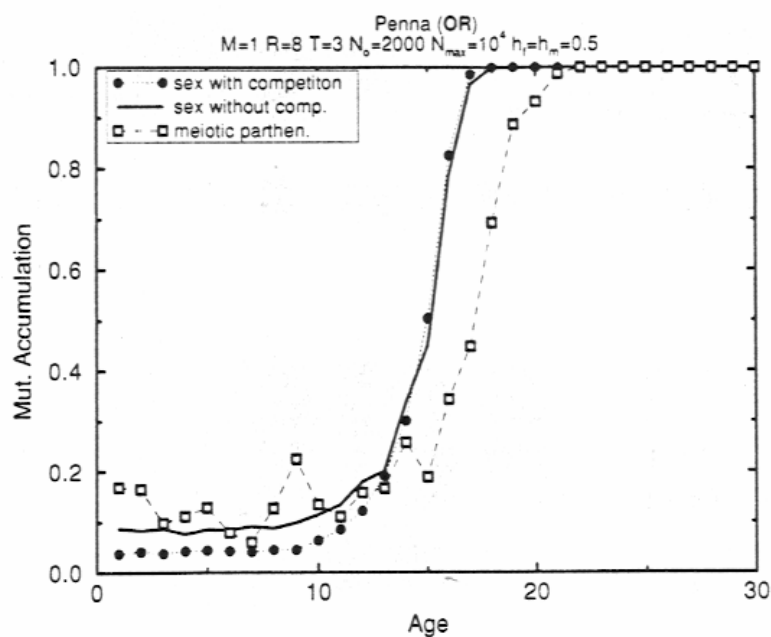
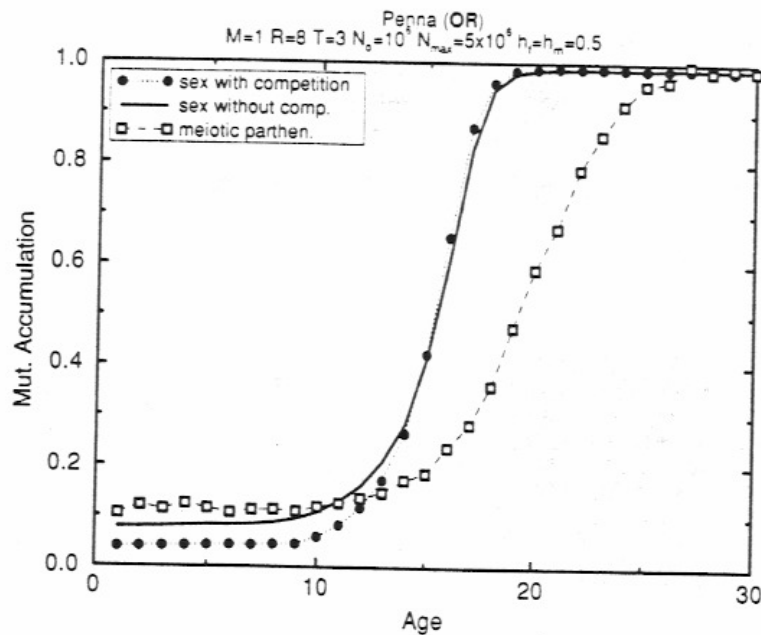
- z ssakami rozmnażającymi się wyłącznie płciowo,
- i bakteriami prawie wyłącznie dokonującymi klonowania.

Istnieje też “trzecia droga”, która powinna być powszechnie preferowana przez organizmy żywe: *mejotyczna partenogeneza*:

- brak samców

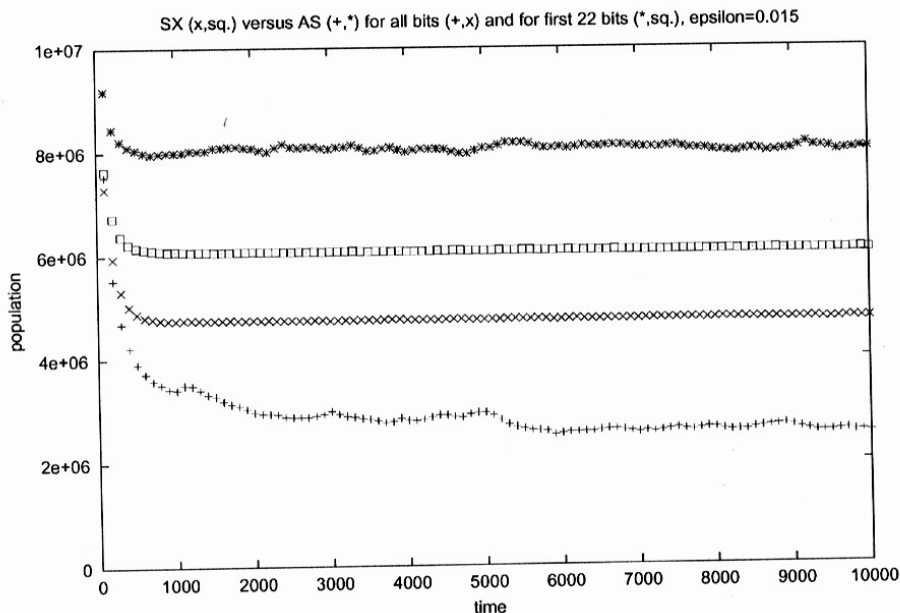
- osobniki (samice) posiadają **dwie** pary genów w każdej komórce dające możliwość losowego ich mieszania przy przekazywaniu ich potomstwu

W takiej sytuacji informacja genetyczna jest nadal przechowywana podwójnie i uszkodzenia w jednym z łańcuchów genów może być maskowane w ten sam sposób jak już mówiliśmy w przypadku recesywnych i dominujących *loci* w genomie. Dodatkową zaletą takiego rozwiązania jest **nieobecność** niezachodzących w ciążę samców podbierających samicom pokarm. [D.Stauffer, *Physica A*273 (1999) 132]

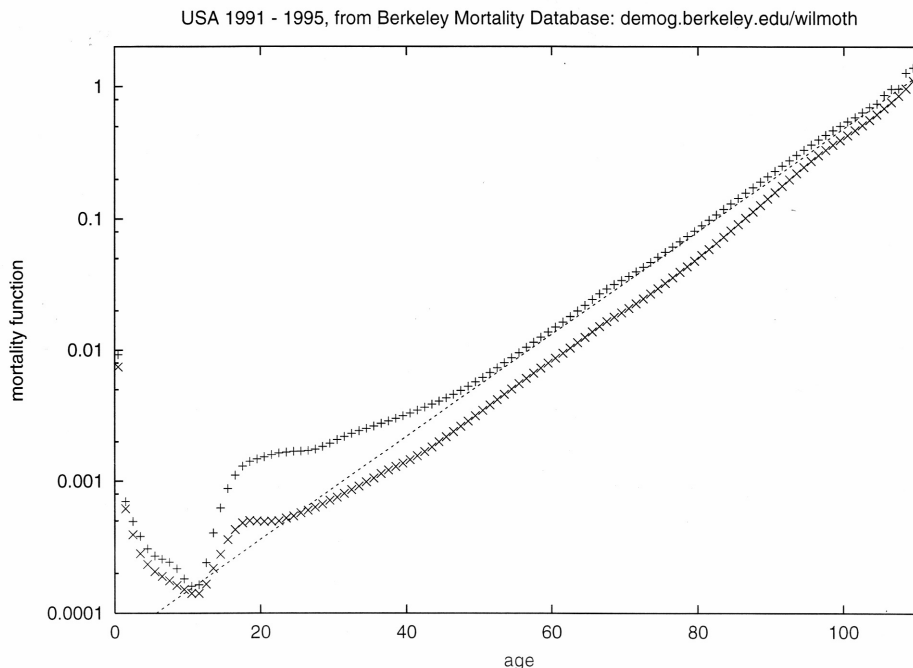


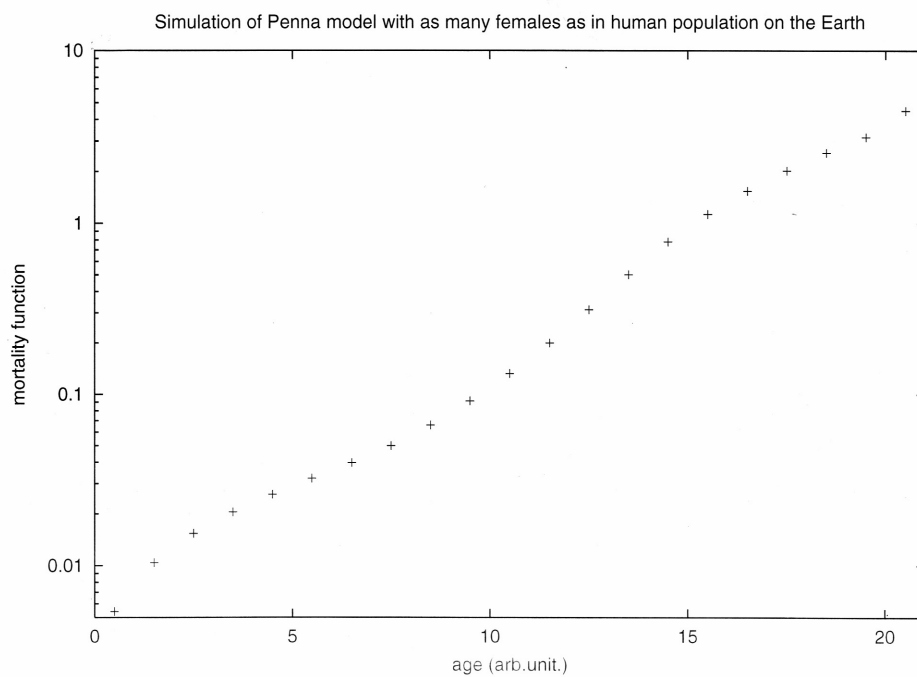
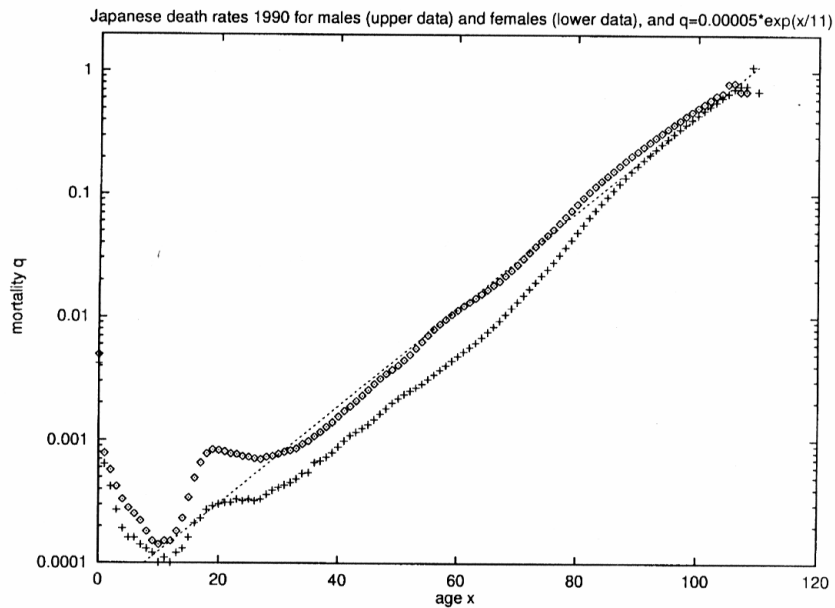
Mimo to jakieś 10^9 lat temu ewolucja “wyprodukowała” płęć! Obecność samców najwyraźniej podyktowana jest możliwością produkcji większej **różnorodności genetycznej** osobników tworzących populację i tym sposobem zapobiegający wyginięciu populacji w wyniku **katastrof**.

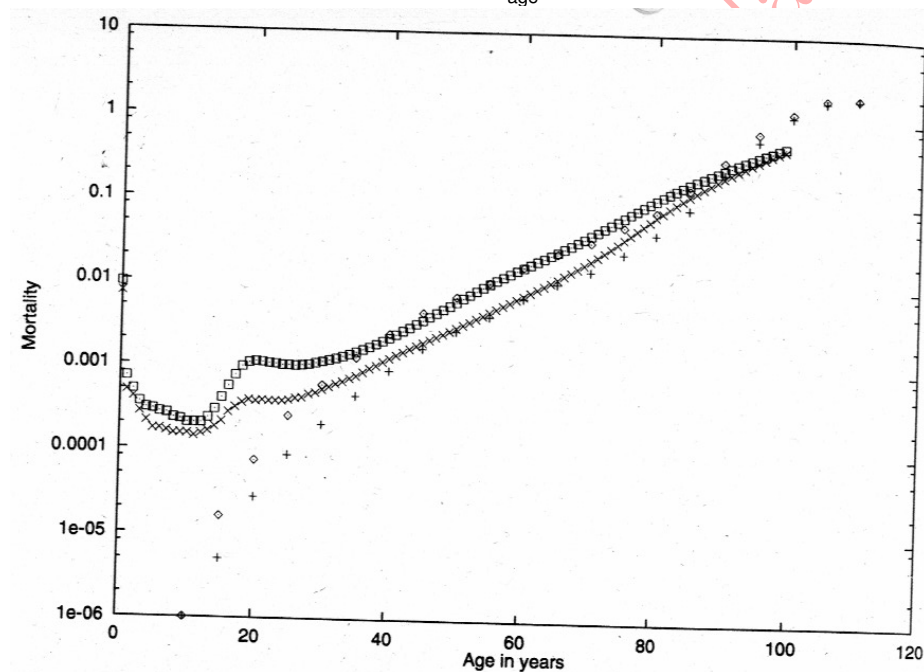
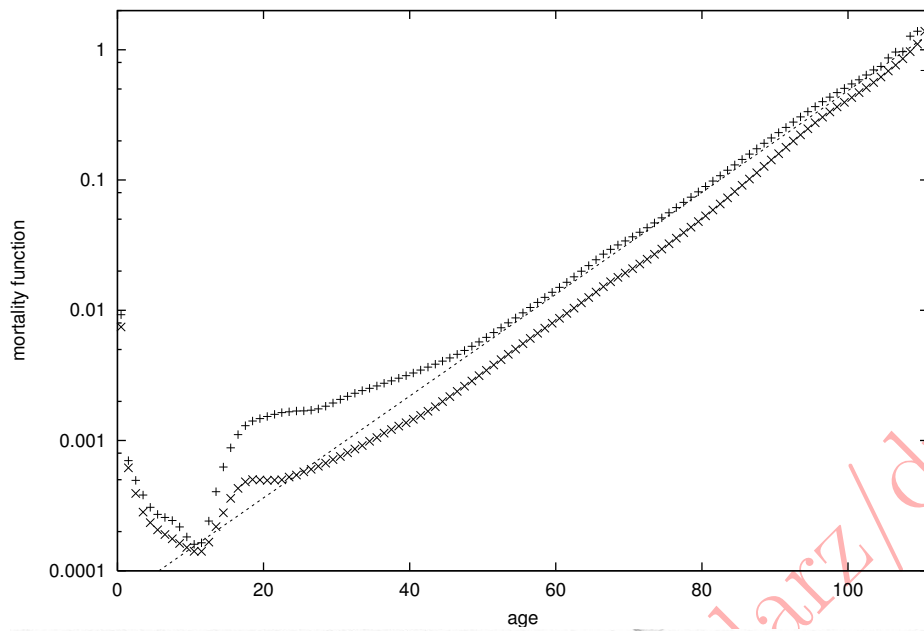
Zdaje się, że materiał genetyczny “gromadzony” w samcach pełni rolę *back-up* umożliwiającego odtworzenie populacji w razie zbyt nagłych zmian środowiska! [S.Dasgupta, *Int. J. Mod. Phys. C8* (1997) 605], [S.G.F.Martins et al, *Int. J. Mod. Phys. C9* (1998) 491] Jedyną wadą takiego rozwiązania jest jednak **zmniejszenie** długości życia osobników w populacjach różniących się tylko sposobem rozmnażania na **niekorzyść** populacji rozmnażającej się płciowo. [A.T.Bernardes, *J. Stat. Phys.* 86 (1997) 431]



10.4.8 Dlaczego kobiety żyją dłużej?







[D.Stauffer — priv. commun.]

[???

[D.Stauffer, *Physica* **A273** (1999) 132]

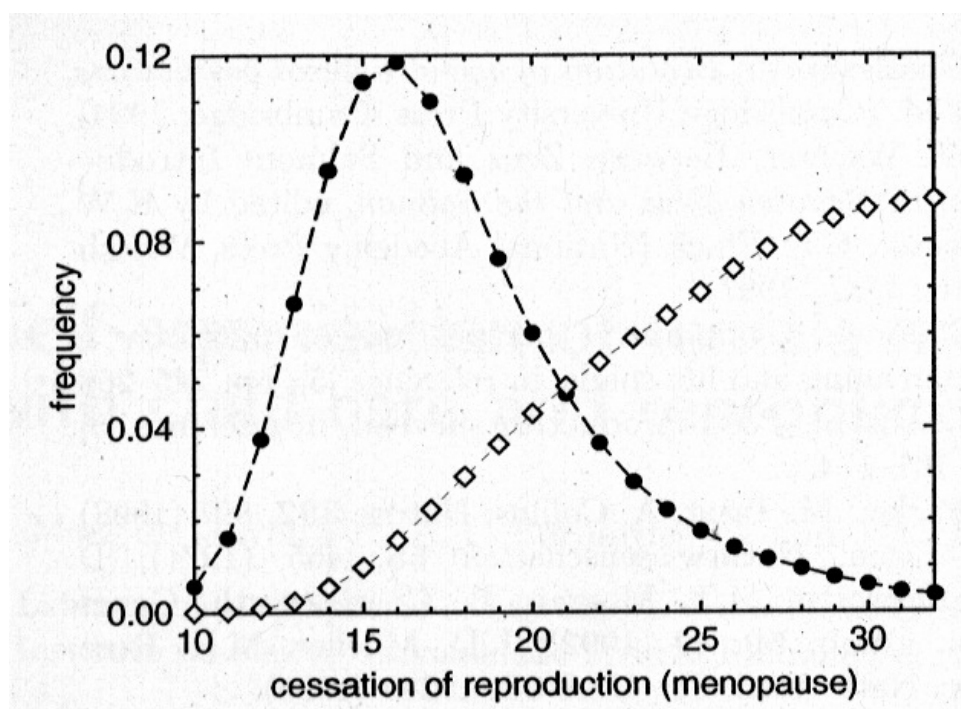
[J.Schneider et al, *Int. J. Mod. Phys.* **C9** (1998) 721]

Z wyjątkiem chromosomów płciowych (X i Y) wszystkie chromosomy występują w parach. W modelu tylko mała część *loci* jest dominująca i u kobiet “1” w genomie mają szanse być maskowane ich brakiem w drugim chromosomie X (o ile jest w tym samym *loci* “0” i *loci* to jest recesywne). U mężczyzn *każda* “1” w genomie X jest (niestety) dominująca! Wcześniejsze teorie sugerujące, iż przyczyną podwyższonej śmiertelności wśród mężczyzn jest stresujący tryb życia (wykłady, ćwiczenia, konferencje) bądź konsumpcja piwa należy uznać za istotnie naciągane: różnica w śmiertelności pojawia się już wśród niemowląt... [J.Schneider et al, *Int. J. Mod. Phys.* **C9** (1998) 721]

10.4.9 Dlaczego wśród niektórych gatunków ssaków pojawia się menopauza u samic?

- Opieka matczyna: jeśli ginie matka ginie również jej potomstwo młodsze niż A .
- Ryzyko reprodukcji: $\alpha G/T$, gdzie G jest aktualnie odsłoniętą liczbą ustawionych bitów w genomie
- Górną granicę wieku reprodukcji R_{\max} : córki dziedziczą po matce R_{\max} bądź $R_{\max} \pm 1$.

Długość menopauzy się samoorganizuje — co gwarantuje przeżycie potomstwa i generalnie lepszą przeżywalność zarówno samic jak i samców [S.Moss de Oliveira et al, *Eur. Phys. J. B7* (1999) 501].



10.4.10 Wierność czy rozwiąłość?

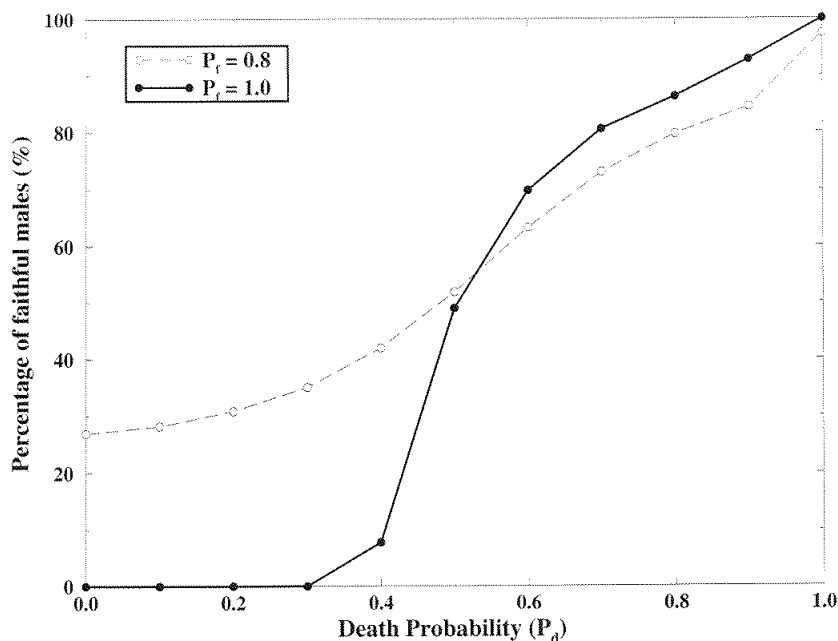
Przyroda może preferować niższą rozrodność dla zapewnienia ochrony potomstwa już urodzonego: np. wierność samców w czasie wychowywania potomstwa.

Wprowadzamy opiekę matczyną — bez reprodukcji przez dwa “lata” po urodzeniu.

To samica wybiera partnera: wierny odmawia w czasie opieki nad potomkiem — niewierny godzi się na taką propozycję za każdym razem: płaci za to jego potomstwo dodatkowym prawdopodobieństwem zejścia P_d .

Męskie potomstwo dziedziczy “wierność” z p-stwem P_f .

Rozpoczynamy symulację z dokładnie połową samców wiernych.



[A.O.Sousa et al, *Eur. Phys. J. B10* (1999) 781]

10.4.11 Czy długowieczność jest dziedziczna?

Odstępstwa od prawa Gompertza (1825 r.)

$$q(a) \propto \exp(\alpha a)$$

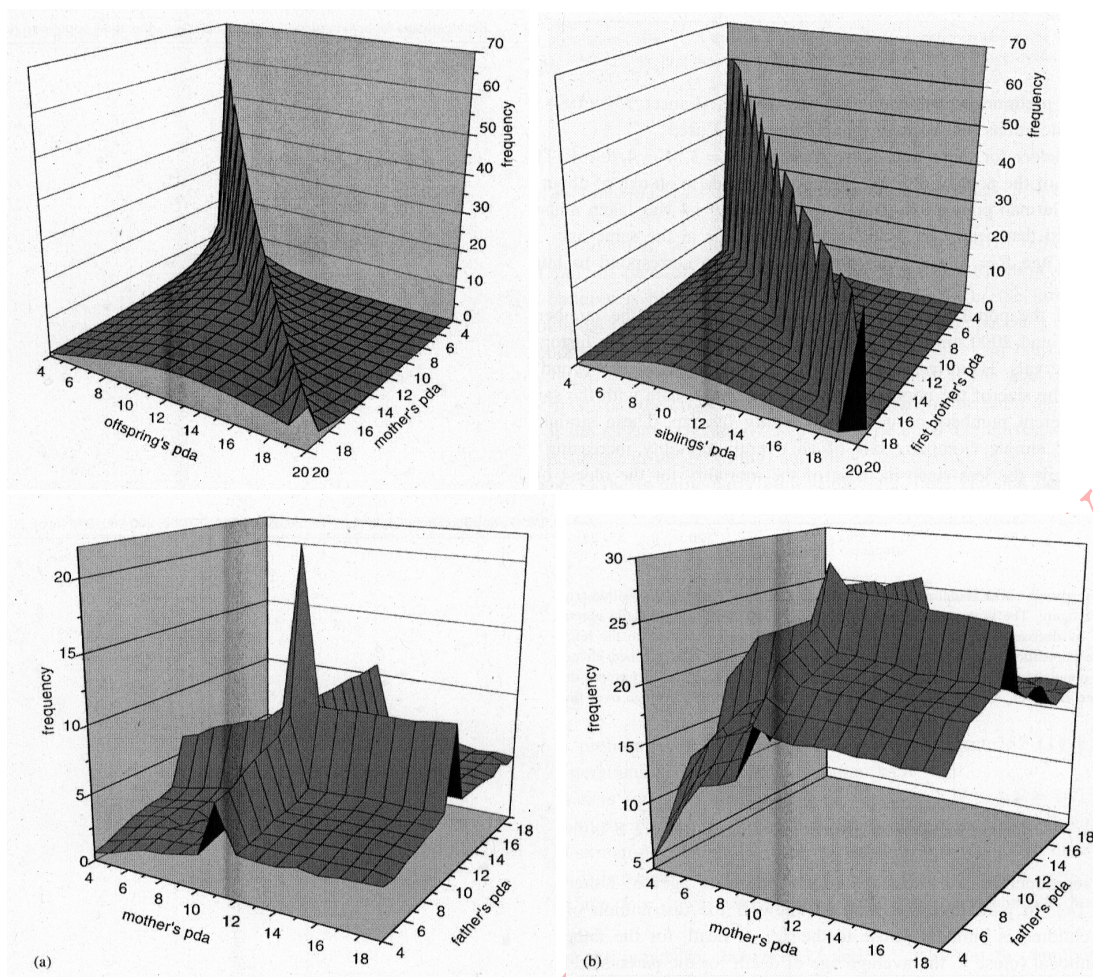
można zaobserwować na obu końcach tej eksponencjalnej krzywej:

- jest to wynikiem większej śmiertelności noworodków/niemowląt,
- pikiem w okolicach uzyskiwania przez młode osobniki dokumentów uprawniających do prowadzenie pojazdów mechanicznych,
- no i właśnie na drugim końcu krzywej: śmiertelność wśród 90-cio latków jest mniejsza (no przynajmniej nie większa) niż wśród 80-cio latków: prawdopodobieństwo opuszczenia tego świata dla 90-95-latków jest niewiększe niż dla 80-85-latków

Jak taki efekt wywołać? → uprzywilejować osobniki o charakterystycznym genomie poprzez dopuszczenie również “korzystnych” mutacji ($0 \rightarrow 1$). [S.Moss de Oliveira, *Physica A221* (1995) 453]

Stąd już tylko krok od możliwości sprawdzenia czy w modelu Penny długowieczność nie okaże się dziedziczną: potomstwo osobników żyjących bardzo długo najprawdopodobniej również wykaże się długowiecznością.

- Eksperymentalnie (ze względu na to, że czas potrzebny na uzyskanie przyzwoitej statystyki przekracza typowy okres grantów) bada się raczej korelacje długości życia najmłodszego z rodzeństwa w porównaniu z pozostałymi braćmi i siostrami...
- ...No przynajmniej średnio rzecz ujmując...
- Jeśli model uwzględni reprodukcję płciową: najczęściej potomstwo umiera w takim wieku w jakim zmarł jeden z rodziców.



[P.M.C.de Oliveira et al, *Physica A*262 (1999) 242].

10.4.12 Współzawodnictwo: ofiara (1) i drapieżnik (2)

Dwa gatunki + pewne sprzężenie między nimi: zamiast tradycyjnego czynnika Verhulsta $n(t)/N_{\max}$, wprowadzamy dwa prawdopodobieństwa przeżycia:

- $1 - n_2/N_2$ dla pierwszego gatunku (ofiary)
- $i n_1/N_1$ dla drugiego gatunku (drapieżników)

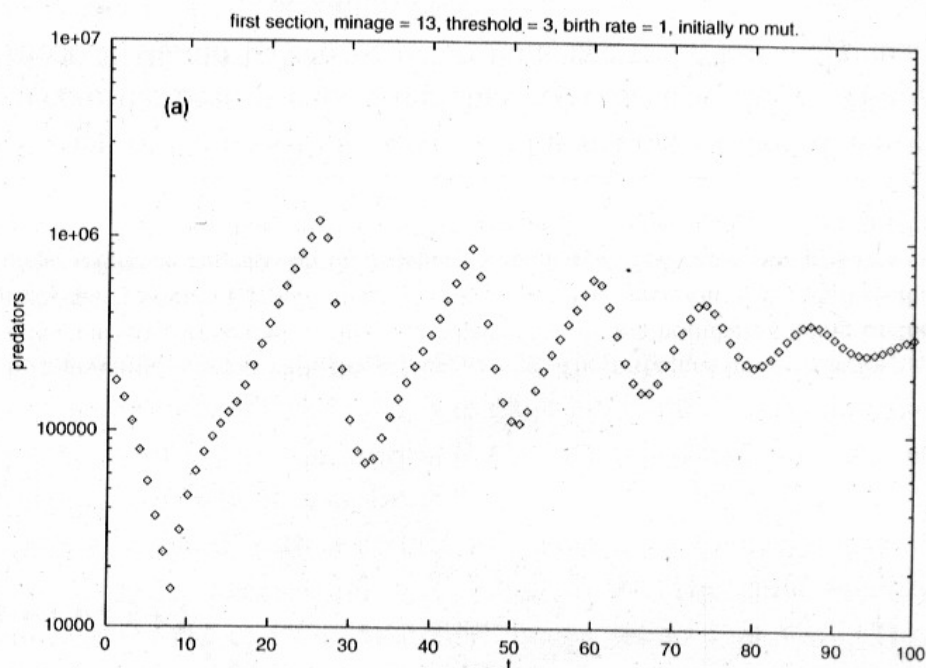
Czego się spodziewamy? Podobieństwo do klasycznych rezultatów otrzymywanych z trójskładnikowego modelu Lotka–Volterra:

$$A + B \rightarrow 2A$$

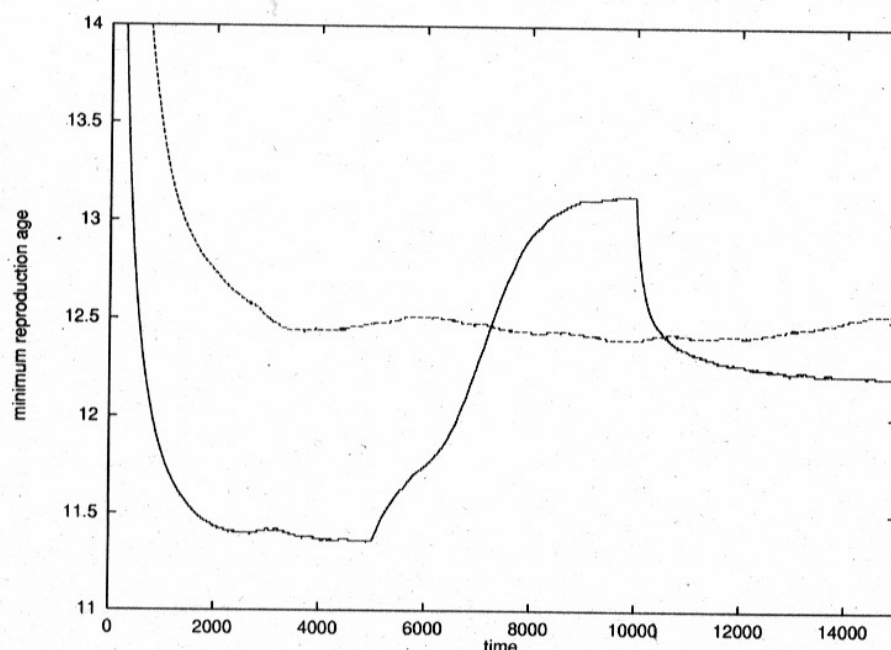
$$B + C \rightarrow 2B$$

$$C + A \rightarrow 2C$$

cykliczna wersja łańcucha pokarmowego, lub przekonujące się nawzajem elektoraty trzech partii. Jak wyglądałaby reguła AK realizującego taki schemat? Można więc uznać model Penny dla współzawodniczących gatunków za rozszerzenie równań L–V na populację posiadającą strukturę wiekową. [H.Puhl et al, *Physica A*221 (1995) 445]



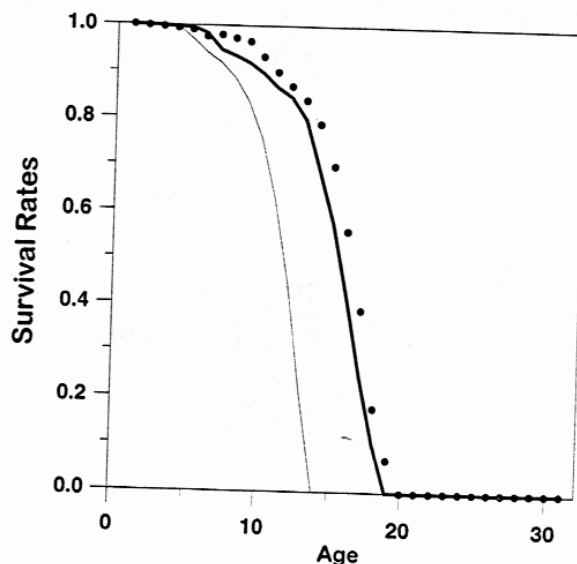
Populacja oposów żyjąca od ponad 4000 lat w izolacji (nie tylko przestrzennej ale co ważniejsze również genetycznej) na wyspie ewolucyjnie przesunęła wiek dojrzałości płciowej (R_{min} w górę) i liczby potomstwa (B w dół) w stosunku do grupy osobników tego samego gatunku żyjących na kontynencie. Jediną różnicą środowisk była nie/obecność drapieżników. Jak modelować: każdy osobnik w chwili urodzenia otrzymuje “swój” prywatny wiek dojrzałości różniący się o ± 1 (z prawdopodobieństwem $1/2$) w stosunku do wieku dojrzałości matki. [A.K.Altevolmer, *Int. J. Mod. Phys. C10* (1999) 717]



10.4.13 Dlaczego drzewa żyją dłużej?

Najdłuższe czasy życia mają organizmy których płodność **zwiększa** się wraz z wiekiem. W tym celu dotychczas stały czynnik odpowiadający za rozrodczość ($b=\text{const}$ i $B=\text{const}$) zastępujemy zależnością (wszystko jedno czy b czy B) będącą rosnącą funkcją wieku osobników a :

$B(a) = B_0 a / N_{\text{bit}}$, czy $B(a) = B_0 (a / N_{\text{bit}})^2$. Choć różnice między liniową a kwadratową zależnością $B(a)$ są niewielkie — to wyraźnie widać natomiast różnicę w prawdopodobieństwie przeżycia $S(a)$ między nimi a standardową zależnością $B(a) = B_0$. [M.A.de Menezes, *Physica A* **233** (1996) 221]



10.4.14 Inne próby zastosowania

- Wpływ opieki rodzicielskiej [A.O.Sousa et al, *Eur. Phys. J.* **B9** (1999) 365], [S.Moss de Oliveira, *Physica A* **273** (1999) 140]
- Wpływ polepszenia się opieki medycznej na spadek śmiertelności w XX w. (obniżenie nachylenia krzywej Gompertza) [P.M.de Oliveira et al, *Physica A* **273** (1999) 145]
- Migracje osobników [M.S.Magdoń, A.Z.Maksymowicz, *Physica A* **273** (1999) 182]
- Wpływ struktury “socjalnej” na populacje (np. wilków) powodujący wzrost liczby osobników mogących zasiedlać daną nisze ekologiczną [S.Cebrat et al, *Int. J. Mod. Phys.* **C8** (1997) 417]
- Kwadratowa sieć geometrycznego środowiska zamiast czynnika Verhulsta [D.Makowiec, *Physica A* **289** (2001) 208]
- Hipoteza skalowania [K.Malarz, *Int. J. Mod. Phys.* **C11** (2000) 309], [R.M.C.de Almeida et al, *Int. J. Mod. Phys.* **C11** (2000) 1209], [E.Brigatti et al, *Eur. Phys. J.* **B42** (2004) 431], [J.B.Coe, Y.Mao, *Phys. Rev.* **E72** (2005) 051925], [A.Łaszkiwicz et al, *Adv. Complex Syst.* **8** (2005) 7]

Opowieść 11

AK w fizyce magnetyzmu: model Isinga

- Oryginalnie sformułowany w 1920 przez W. Lenza [W.Lenz, *Z. Phys.* **21** (1920) 613] i rozwiązany dla jednowymiarowego ferromagnetyka przez Isinga w 1925 [E.Ising, *Z. Phys.* **31** (1925) 253].

- Całkowita energia układu:

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i,$$

gdzie zmienna spinowa S_i przyjmuje tylko dwie wartości $S_i = \pm 1$ (czasami $S_i = \pm 1/2$, czasami $S_i = 0, 1$)

- Całka oddziaływania wymiany

$$J_{ij} = \begin{cases} J_{ji} = J & \text{dla } ij \text{ będących najbliższymi sąsiadami} \\ 0 & \text{w przeciwnym wypadku} \end{cases}$$

(W magnetyzmie jest to prawie zawsze prawdą.)

- $J > 0$ — sprzężenie ferromagnetyczne — preferowane ustawienie $\uparrow - \uparrow$ i/lub $\downarrow - \downarrow$
- $J < 0$ — sprzężenie antyferromagnetyczne — preferowane ustawianie $\downarrow - \uparrow$ i/lub $\uparrow - \downarrow$
- Na H możemy patrzeć jak na energię oddziaływania spinów z zewnętrznym polem magnetycznym bądź wprost jak na pole \mathbf{H} . Wówczas $H \sum_i S_i$ jest sumą energii Zeemanskich $\mathbf{H} \circ \mathbf{S}_i$.
- Pole \mathbf{H} stara się ustawić spiny zgodnie ze sobą.
- DAK: reguła = tendencja układu do zmniejszania własnej energii:

$$S_i(t+1) = \text{sign}\left(\sum_j J_{ij} S_j + H\right) \quad (11.1)$$

- Fizycznie odpowiada to $T = 0$.
- Można też patrzeć na model Isinga jak na gaz sieciowy.
- Mosiądz β = miedź + cynk na dwóch przenikających się sieciach regularnych = Ising bez pola przy zmiennych $\{0, 1\}$ ($T_K = 739$ K).

11.1 Dowód Derridy

- Dla prostoty dowodu założmy $H = 0$.
- $g_i(t) = \sum_j J_{ij} S_j(t)$
- Funkcja pracy:

$$W(t) = - \sum_{ij} J_{ij} S_i(t) S_j(t+1)$$

- $W(t)$ można zapisać na dwa sposoby:

$$\begin{aligned} W(t) &= \\ &= - \sum_i g_i(t) S_i(t+1) \\ &= - \sum_i g_i(t+1) S_i(t) \end{aligned} \quad (11.2)$$

- Z reguły (11.1) DAK mamy:

$$S_i(t+2) = \text{sign}(g_i(t+1))$$

- Z pierwszej równości w (11.2):

$$W(t+1) = - \sum_i g_i(t+1) S_i(t+2) = - \sum_i |g_i(t+1)|$$

- Z drugiej równości w (11.2):

$$\begin{aligned} W(t) &= \\ &= - \sum_i |g_i(t+1)| \cdot \text{sign}[g_i(t+1)] S_i(t) \\ &= - \sum_i |g_i(t+1)| \cdot S_i(t+2) S_i(t) \end{aligned}$$

- Różnica

$$W(t+1) - W(t) = - \sum_i |g_i(t+1)| \cdot [1 - S_i(t+2) S_i(t)]$$

jest **niedodatnia**.

- Z tego wnioskujemy, że $W(t)$ jest **nierosnąca**.
- Dla układów skończonych wiecznie maleć nie może, więc $S_i(t+2) = S_i(t)$.
- Mamy więc do czynienia z AK klasy II. A gdy $S_i(t \rightarrow \infty) \rightarrow \text{const}$ — z AK klasy I.

11.2 Metody Monte Carlo

- Do obliczania równowagowych wartości charakterystycznych wielkości układu opisanego modelem Isinga możemy się posłużyć formalizmem sumy statystycznej:

$$Z = \sum_{\sigma} \exp[-\beta E(\sigma)].$$

Sumowanie odbywa się po **wszystkich stanach** układu σ .

- Odwrotność energii termicznej:

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

- Dla układu N spinów mamy jednak 2^N możliwych stanów układu i tyle samo składników Z — problem jest więc klasy NP.
- Ścisłe obliczenia (oprócz pracy doktorskiej Isinga dla 1D) powiodły się [L. Onsager, *Phys. Rev.* **65** (1944) 117] dla sieci dwuwymiarowej pod nieobecność pola magnetycznego.
- Dlatego w celu obliczenia *magnetyzacji* w zależności od pola H i temperatury T musimy posilkować się *probabilistycznymi automatami komórkowymi*.
- Niech p_i będzie prawdopodobieństwem, że i -ty spin jest zwrócony w górę.
- Zmiana tego p_i może być zapisana w czasie:

$$\frac{dp_i}{dt} = -p_i w_i(\uparrow \rightarrow \downarrow) + (1 - p_i) w_i(\downarrow \rightarrow \uparrow),$$

gdzie $w_i(\uparrow \rightarrow \downarrow)$ jest prawdopodobieństwem odwrócenia i -tego spinu z \uparrow na \downarrow .

- W równowadze

$$\frac{dp_i}{dt} = 0.$$

- A samo p_i dane jest rozkładem Gibbsa $p_i \propto \exp[-\beta E(\uparrow)]$.
- Skąd

$$\frac{w_i(\uparrow \rightarrow \downarrow)}{w_i(\downarrow \rightarrow \uparrow)} = \exp\{\beta[E(\uparrow) - E(\downarrow)]\} = \exp[2\beta E(\uparrow)]$$

niezależnie czy w równowadze czy nie (bo w_i nie zależą od p_i).

11.2.1 Metody obliczeń

11.2.1.1 Schemat Metropolis

W schemacie Metropolis, prawdopodobieństwo akceptacji nowej konfiguracji jest dane poprzez

$$p_{\mu_i \rightarrow \eta_i}^M = \min\{1, \exp[-(E_{\eta_i} - E_{\mu_i})/k_B T]\}. \quad (11.3)$$

W przeciwieństwie jednak do dynamiki glauberowskiej spiny są odwiedzane w losowej kolejności (losowa permutacja etykiet spinów strzeże by każdy spin był odwiedzony i to dokładnie raz na MCS).

[N. Metropolis, A.W. Resenbluth, M.N. Resenbluth, A.H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21** (1953) 1087]

- Wybieramy losowo komórkę i .
- Odwracamy jej spin $S_i = -S_i$ i obliczamy z wiązaną z tym odwróceniem zmianę energii ΔE :

$\Delta E < 0$ — akceptujemy odwrócenie

$\Delta E > 0$ — akceptujemy z prawdopodobieństwem $\exp(-\beta \Delta E)$

11.2.1.2 Dynamika Glaubera

Dla każdego spinu i znajdującego się w otoczeniu (rozumianym żazem z nim) o konfiguracji μ_i , nowa konfiguracja η_i powstała poprzez odwrócenie i -tego spinu ($S_i \rightarrow -S_i$) jest tworzona i akceptowana z prawdopodobieństwem

$$p_{\mu_i \rightarrow \eta_i}^G = \frac{\exp(-E_{\eta_i}/k_B T)}{\exp(-E_{\mu_i}/k_B T) + \exp(-E_{\eta_i}/k_B T)}, \quad (11.4)$$

gdzie E_{η_i} jest energią konfiguracji η_i , $E_{\mu_i} = -E_{\eta_i}$ jest energią konfiguracji μ_i a k_B jest stałą Boltzmana.

[R.J. Glauber, J. Math. Phys. 4 (1963) 294]

- Dla każdego i obliczamy:

$$r_i(t) = \frac{1}{1 + \exp\{-2\beta[\sum_j J_{ij} S_j(t)]\}}$$

- Losujemy liczbę $R \in [0; 1]$
- Jeśli $S_i(t) = -1$
 - $R \leq r_i(t) \rightarrow S_i(t+1) = +1$
 - $R > r_i(t) \rightarrow S_i(t+1) = -1$
- Jeśli $S_i(t) = +1$
 - $R \leq 1 - r_i(t) \rightarrow S_i(t+1) = +1$
 - $R > 1 - r_i(t) \rightarrow S_i(t+1) = -1$

11.2.1.3 Kąpiel ciepła

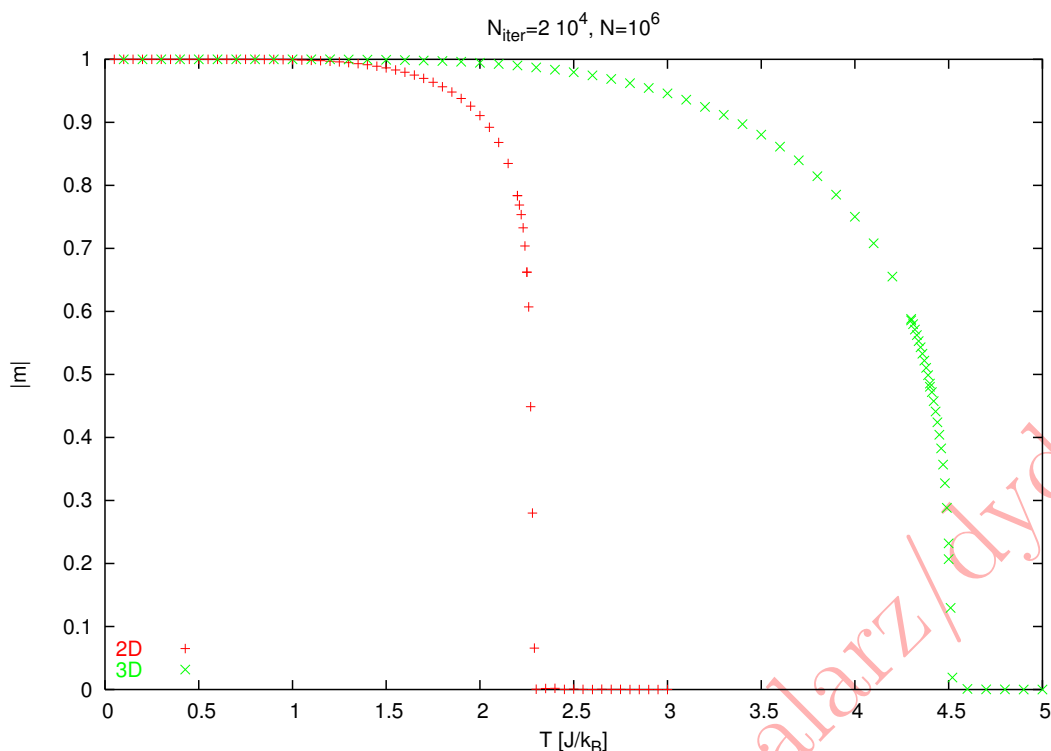
- Komórki modyfikujemy jedna za drugą.
- Dla każdej obliczamy:

$$r_i(t) = \frac{1}{1 + \exp\{-2\beta[\sum_j J_{ij} S_j(t)]\}}$$

- Losujemy liczbę $R \in [0; 1]$
- $R \leq r_i(t) \rightarrow S_i(t+1) = 1$
- $R > r_i(t) \rightarrow S_i(t+1) = -1$

11.2.2 Kilka uwag natury technicznej

- Dla $T = 0$ wszystkie te trzy metody sprowadzają się do reguły deterministycznej (11.1).
- Dla niskich temperatur algorytm “lubi” się zawiesić na metastabilnej konfiguracji spinów (np. dla temperatury poniżej T_C i w polu równym zero $H = 0$ jeśli zaczniemy symulację od stanu z $m = 0$).
- Układ będzie dążył do stanu równowagi w sposób niewyobrażalnie powolny.
- Wprowadza się “demony Creutz’a” — błądzące po siatce i odwracające “domeny” niezależnie od reguł.



Rysunek 11.1: $T_C^{2D} = 2.27[J/k_B]$, $T_C^{3D} = 4.51[J/k_B]$

- Najlepiej więc rozpoczynać symulacje z $m = 1$.
- Dla najbardziej interesującego tj. 3D przypadku nie ma rozwiązań analitycznych i symulacja jest jedynym podejściem teoretycznym.
- “Multispin coding” jest techniką pozwalającą na przyspieszenie obliczeń poprzez operowanie na 32-bitach jednocześnie.
- Przy sprzężeniu antyferromagnetycznym w celu ominięcia przerzucania wszystkich stanów sieci z \uparrow na \downarrow przy początkowej $m = 1$ należy przechodzić przez siatkę rozsądnie (tj. co drugi węzeł).
- Energia spinu na siatkach regularnych jest „skwantowana”: nie ma co jej za każdym razem obliczać. To oznacza, że zmiana energii związana z odwróceniem spinu również przyjmuje kilka wielkości w zależności do liczby koordynacyjnej węzła sieci w której umieszczony jest spin. Wystarczy stworzyć tablicę prawdopodobieństw akceptacji nowej konfiguracji/odwrócenia spinu r w zależności od „zwrotu” spinu i ilości spinów skierowanych w określoną stronę w jego otoczeniu (nie licząc jego).

11.3 Rozprzestrzenianie się uszkodzeń

- Skończona (niezerowa) szybkość rozprzestrzeniania się uszkodzeń była cechą automatów klasy III (chaotycznych).
- Tak jak ostatnio musimy mieć dwie identyczne sieci (tym razem spinów): A i B .
- Uszkodzenie wprowadzamy utrzymując jeden ze spinów jednej z sieci (np. B) trwale w stanie \downarrow .

- Wprowadzamy prawdopodobieństwa spotkania uszkodzenia:
 - $d(\uparrow\downarrow) =$ w sieci $A \uparrow$ a w sieci $B \downarrow$
 - $d(\downarrow\uparrow) =$ w sieci $A \downarrow$ a w sieci $B \uparrow$
- Wprowadzamy nowe zmienne $\Pi_i = (1 + S_i)/2$ transformujące $\{-1, +1\} \rightarrow \{0, 1\}$:
 - $d(\uparrow\downarrow) = [\Pi_i^A(1 - \Pi_i^B)]$
 - $d(\downarrow\uparrow) = [\Pi_i^B(1 - \Pi_i^A)]$

gdzie $[\dots]$ oznacza średnią czasową

$$[x(t)] = \frac{1}{t} \cdot \sum_{\tau} x(\tau) \quad (11.5)$$

- Definiujemy

$$\Gamma_{0i} \equiv d(\uparrow\downarrow) - d(\downarrow\uparrow) = [\Pi_i^A] - [\Pi_i^B]$$

- Jeśli algorytm MC jest ergodyczny to dla sieci A mamy

$$[\dots] = \langle \dots \rangle \quad (11.6)$$

liczonej z użyciem formalizmu sumy statystycznej:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} x(\sigma) \exp(-\beta E(\sigma)) \quad (11.7)$$

- $[\Pi_i^B]$ liczymy z prawdopodobieństwa warunkowego:

$$\begin{aligned} [\Pi_i^B] &= P(S_i = +1 | S_0 = -1) = P(\Pi_i = 1 | \Pi_0 = 0) \\ &= P((\Pi_i = 1) \cdot \text{AND} \cdot (\Pi_0 = 0)) / P(\Pi_0 = 0) \\ &= \langle \Pi_i(1 - \Pi_0) \rangle / \langle 1 - \Pi_0 \rangle. \end{aligned}$$

- Wracając do zmiennych S_i możemy z rozprzestrzeniania się uszkodzeń wnioskować o równowagowych własnościach układu:

$$2(1 - \langle S_i \rangle) \Gamma_{0i} = \langle S_i S_0 \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_0 \rangle$$

$$\frac{\chi}{N} = \beta \sum_i [\langle S_i S_0 \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_0 \rangle]$$

11.4 Ergodyczność

Pod nieobecność pola magnetycznego oba kierunki namagnesowania są równoważne: każdej konfiguracji σ z namagnesowaniem $m(\sigma)$ odpowiada konfiguracja σ' z $-m(\sigma')$. W efekcie średnie namagnesowanie wynosi zero.

Tą niedogodność omijamy odpowiednią kolejnością przejść granicznych:

- Najpierw $N \rightarrow \infty$ w obecności niewielkiego pola H — co eliminuje (czyni mało prawdopodobnymi) konfiguracje spinowe σ z niezerowym momentem magnetycznym skierowanym przeciwnie do pola.
- Potem $H \rightarrow 0$.

Dlaczego tak się dzieje?

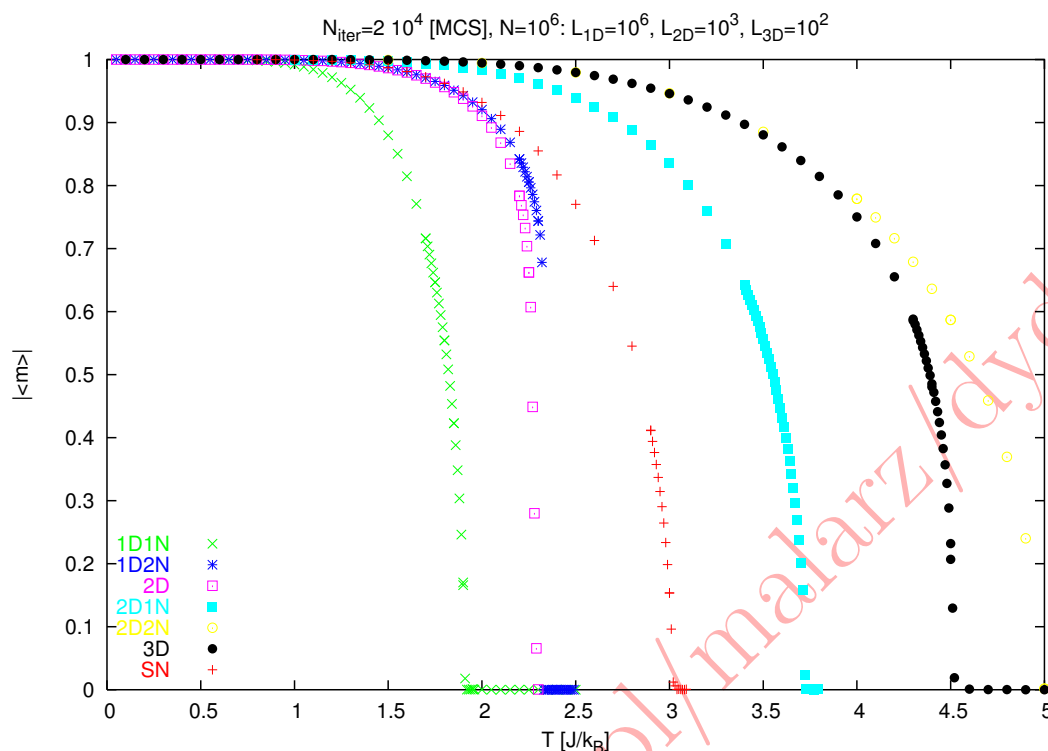
- Schładzamy układ **eksperymentalny** pod **nieobecność** pola H .
- Powyżej temperatury krytycznej (przejścia fazowego):
 - odchylenia m od zera są małe,
 - trwają bardzo krótko.
- Oznacza to, że m przyjmuje bardzo dużo razy wartości dodatnie i ujemne.
- W temperaturze krytycznej nadal $m = 0$ ale rozmiar i czas trwania **fluktuacji** rośnie przekraczając nawet czas trwania pomiaru!
- Tuż poniżej T_C przewagę osiąga jedna z orientacji — nie sposób jej jednak przewidzieć!
- Gdyby próbka była faktycznie nieskończona — żadnego przejścia fazowego byśmy nie zaobserwowali.
- Fluktuacje poniżej T_C stają się makroskopowe (w czasie i rozmiarze).

Hipoteza ergodyczna = równość średniej czasowej (11.5) $[\dots]$ i średniej po zespole (11.7) $\langle \dots \rangle$.

- Trajektoria $\{S_i(t)\}$, która powyżej T_C może swobodnie penetrować obszary o dodatnim i ujemnym namagnesowaniu traci tę możliwość poniżej T_C .
- Tak naprawdę to tylko **czas** przechodzenia z jednej części przestrzeni stanów do drugiej wydłuża się przekraczając czas trwania eksperymentu.
- Dlatego formalizm sumy statystycznej (procedura średniowania) musi być wspomagany sztuczkami...
- Hipoteza ergodyczna = zdolność trajektorii do wypełniania równomiernie całej przestrzeni fazowej.
- Procedura zachowująca równość $[\dots] = \langle \dots \rangle$ ale nie spełniająca mocniejszej hipotezy ergodycznej może być atrakcyjna ze względów czysto technicznych: ogranicza czas symulacji.
- AK Q2R — poruszający się po powierzchni stałej energii: odwraca spin tylko wtedy gdy spośród czterech jego sąsiadów dwa są \uparrow i dwa \downarrow .
- Czas powrotu do stanu początkowego dla sieci 8×8 dla Q2R wynosi $10^6 \ll 2^{64} \approx 10^{19}$.

11.5 Przykład zastosowania

11.5.1 Temperatura Curie na sieciach regularnych z dodatkowymi sąsiadami



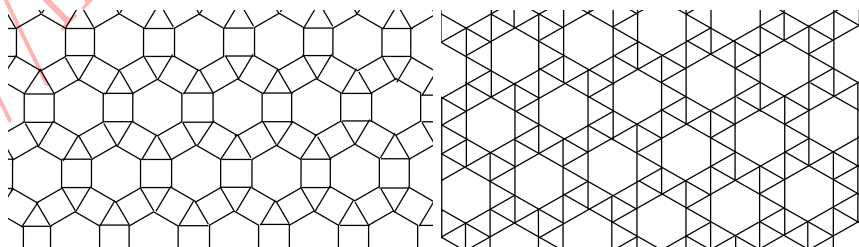
Wróćmy do tego i nadamy wynikowi (nad)interpretację socjologiczną...

[K.Malarz, *Int. J. Mod. Phys. C* **14** (2003) 561]

11.5.2 Temperatura Curie na sieciach Archimedesesa

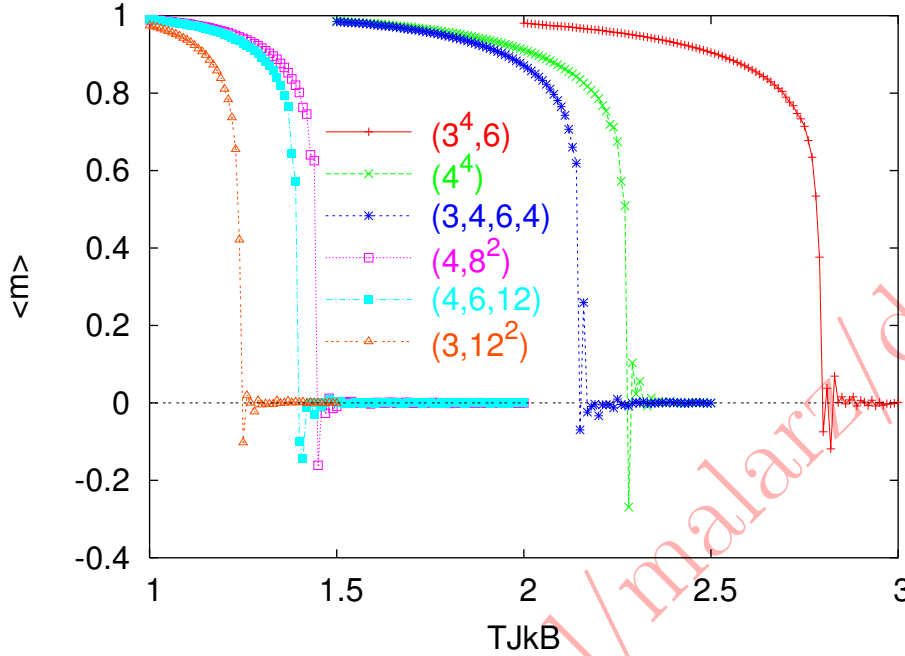
The Archimedean lattices are vertex transitive graphs that can be embedded in a plane such that every face is a regular polygon. Kepler showed that there is exactly eleven such graphs. The names of the lattices are given according to the sizes of faces incident to a given vertex. The face sizes are listed in order, starting with a face such that the list is the smallest possible in the lexicographical order. In this way, the square lattice gets the name (4, 4, 4, 4), abbreviated to (4⁴), honeycomb is called (6³) and Kagomé is (3, 6, 3, 6).

(3, 4, 6, 4) and (3⁴, 6) AL:



AL and associated critical temperatures T_C . [J.M. Dixon, J.A. Tuszyński, E.J. Carpenter, *Physica A* **349** (2005) 487], [J. Adler, *Annual Reviews of Computational Physics IV*, ed. D. Stauffer, (World Scientific, Singapore 1996) p. 241], [C.J. Thompson, M.J. Wardrop, *J. Phys. A* **7** (1974) L65]

Rysunek 11.2: Dependence of the average magnetisation $\langle m \rangle$ on temperature T expressed in $[J/k_B]$ units for $(3^4, 6)$, $(3, 4, 6, 4)$, $(4, 6, 12)$, $(4, 8^2)$ and (4^4) AL. The simulations are carried out for $N \approx 6 \cdot 10^4$ spins during $N_{\text{iter}} = 2 \cdot 10^5$ [MCS]. The magnetisation $\langle m \rangle$ is averaged over the last 10^5 [MCS].



z	lattice	$T_C [J/k_B]$
3	$(3, 12^2)$	1.25
	$(4, 6, 12)$	1.40
	$(4, 8^2)$	1.45
	(6^3)	1.52
4	$(3, 4, 6, 4)$	2.15
	(4^4)	$2/\text{arcsinh } 1 \approx 2.27$
	$(3, 6, 3, 6)$	2.27
5	$(3^4, 6)$	2.80
	$(3^3, 4^2)$	$2/\ln 2 \approx 2.89$
	$(3^2, 4, 3, 4)$	2.93
6	(3^6)	3.64

For all investigated AL, the shape of $m(T/T_C)$ curve is roughly the same as for the square lattice. In the latter case, an analytical expression is known

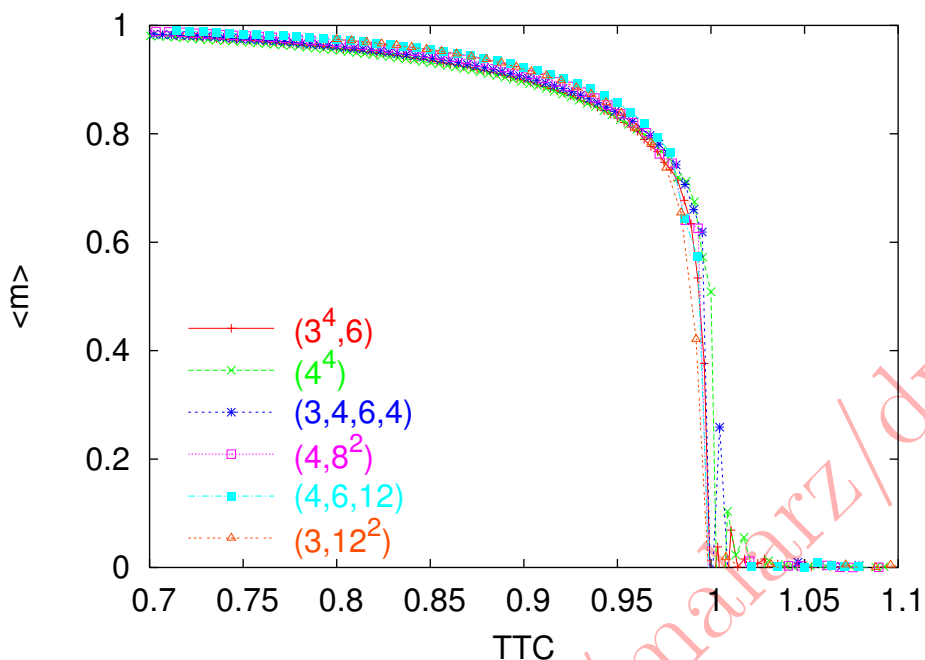
$$|m(\kappa)| = \sqrt[8]{\frac{\cosh^2(2/\kappa)}{\sinh^4(2/\kappa)} [\sinh^2(2/\kappa) - 1]},$$

where $\kappa \equiv T/T_C$.

In contrast to Galam–Mauger semi-exact formula for T_C dependence on system dimensionality d and lattice coordination number z , we show that critical temperature for IM differ slightly for several AL (where $d = 2$) with the same values of z . Similarly to the percolation phenomena, also for IM the dimensionality d and the coordination number z are not sufficient for determining the critical point T_C .

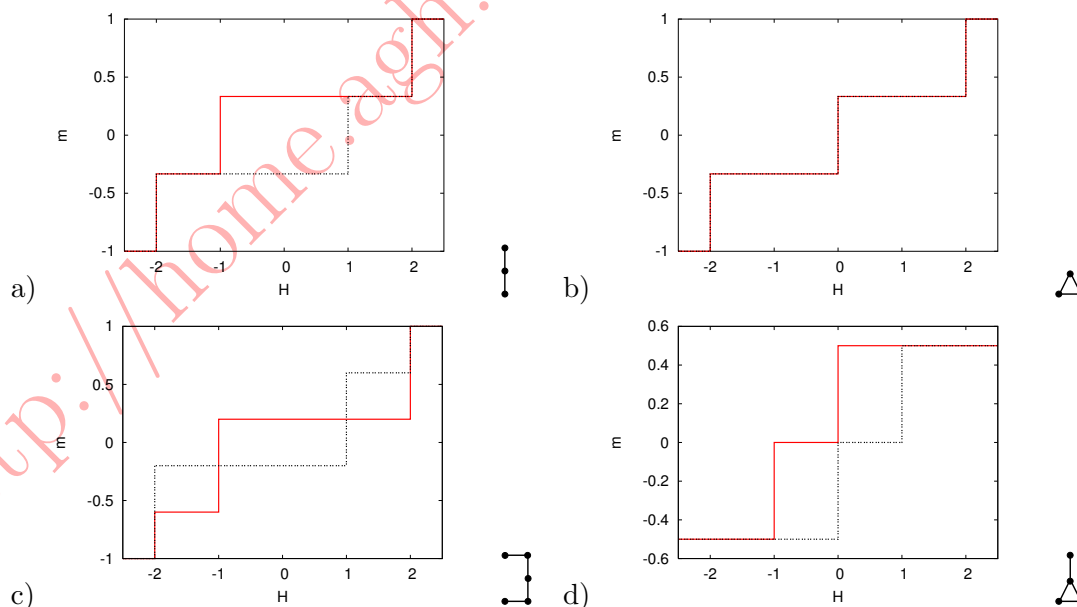
[K.Malarz, M.Zborek, B.Wróbel, TASK Quarterly **9** (2005) 475]

Rysunek 11.3: Dependence of the average magnetisation $\langle m \rangle$ on normalized dimensionless temperature T/T_C for $(3^4, 6)$, $(3, 4, 6, 4)$, $(4, 6, 12)$, $(4, 8^2)$ and (4^4) AL



11.5.3 Dygresja: Oznaki SOC w antyferromagnetykach $J = -1$ na sieciach rosnących?

Toy graphs and their hysteresis loops for decreasing field (continuous red line) and increasing field (dotted black line):



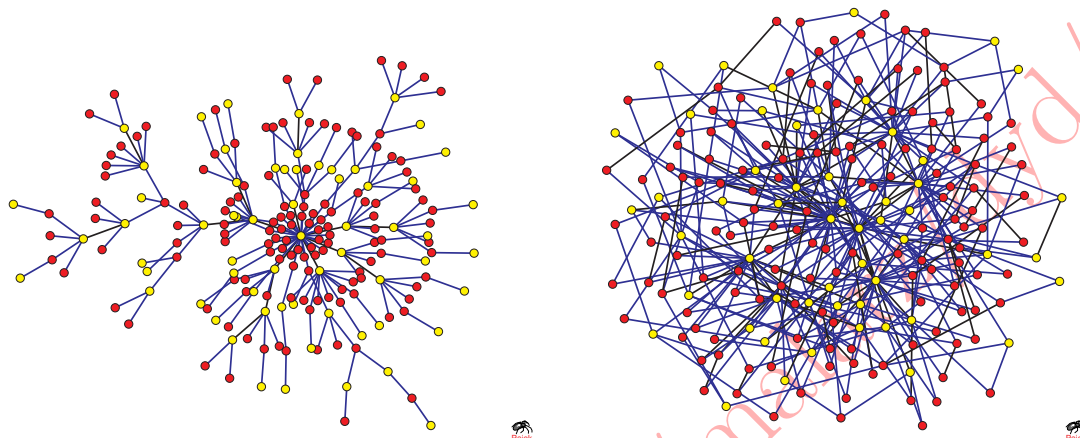
At each growth step i a node is added and linked to M nodes selected among $i - 1$ preexisting nodes. Selection of a target node, k , is given by a specified probability $p(k, i)$.

- $p(k, i) = 1/(i - 1) \rightarrow$ exponential degree distribution.

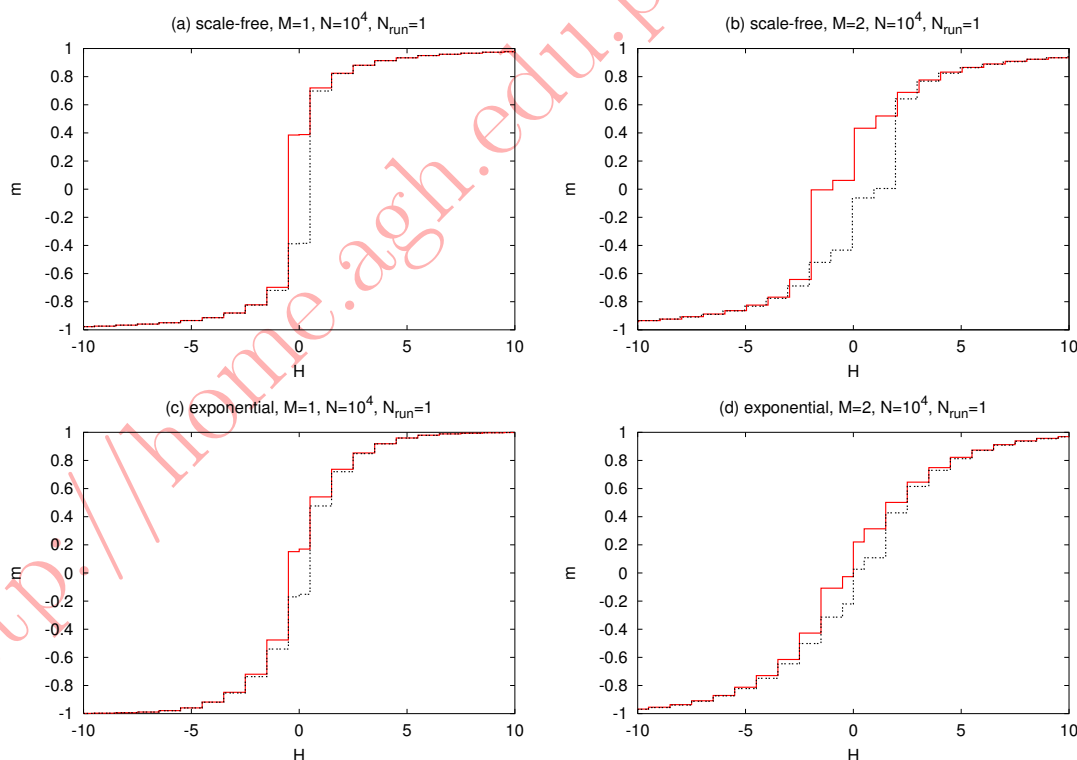
- $p(k, i) = [1 + q(k, i)/M]/2i \rightarrow$ scale-free degree distribution.

(do własności strukturalnych sieci bezskalowych wrócimy przy okazji dyskusji zagadnień z socjofizyki)

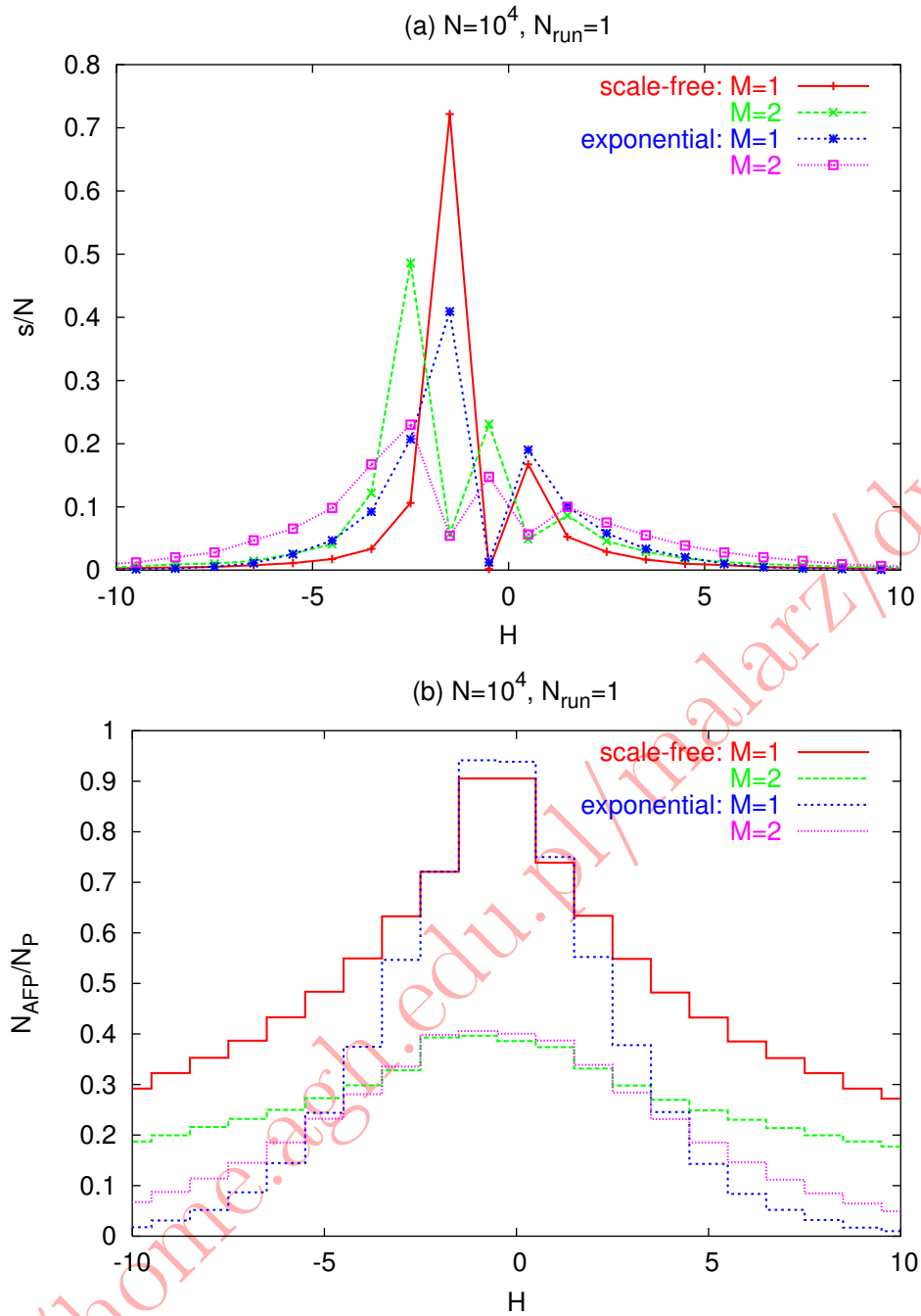
Snapshots from simulation for scale-free tree ($M = 1$, left) and scale-free simple graph ($M = 2$, right) for $N = 200$ and magnetic field $H = 0 - \delta$. Spins $S_i = -1$ (red) and $S_i = +1$ (yellow) and their pairs $S_i S_j = +1$ (black) $S_i S_j = -1$ (blue) for all $1 \leq i, j \leq N$. (Figures using Pajek.):



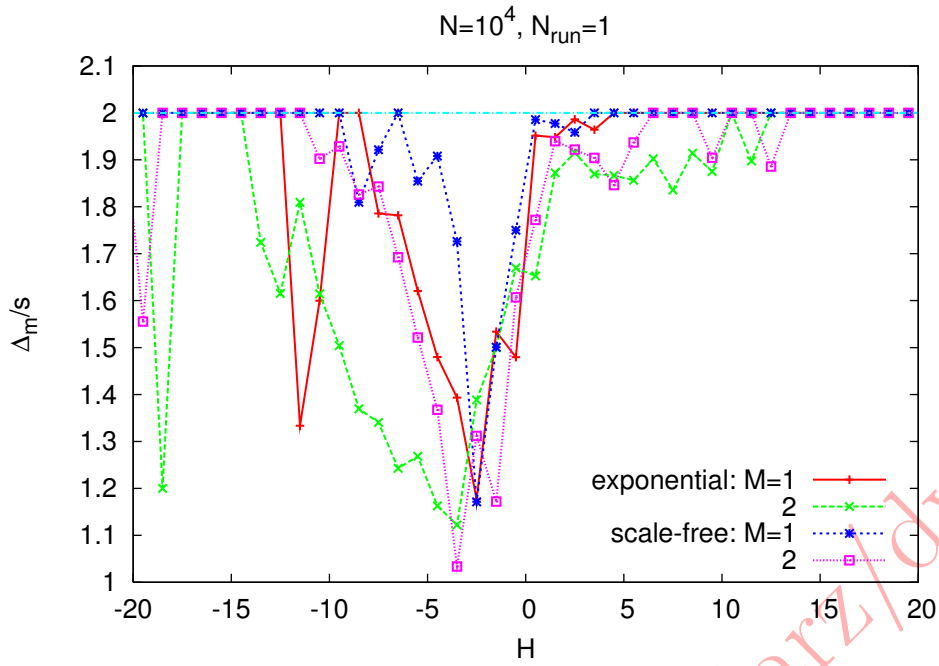
The field dependence of the magnetization $m(H)$. The field is expressed in $|J|$ units:



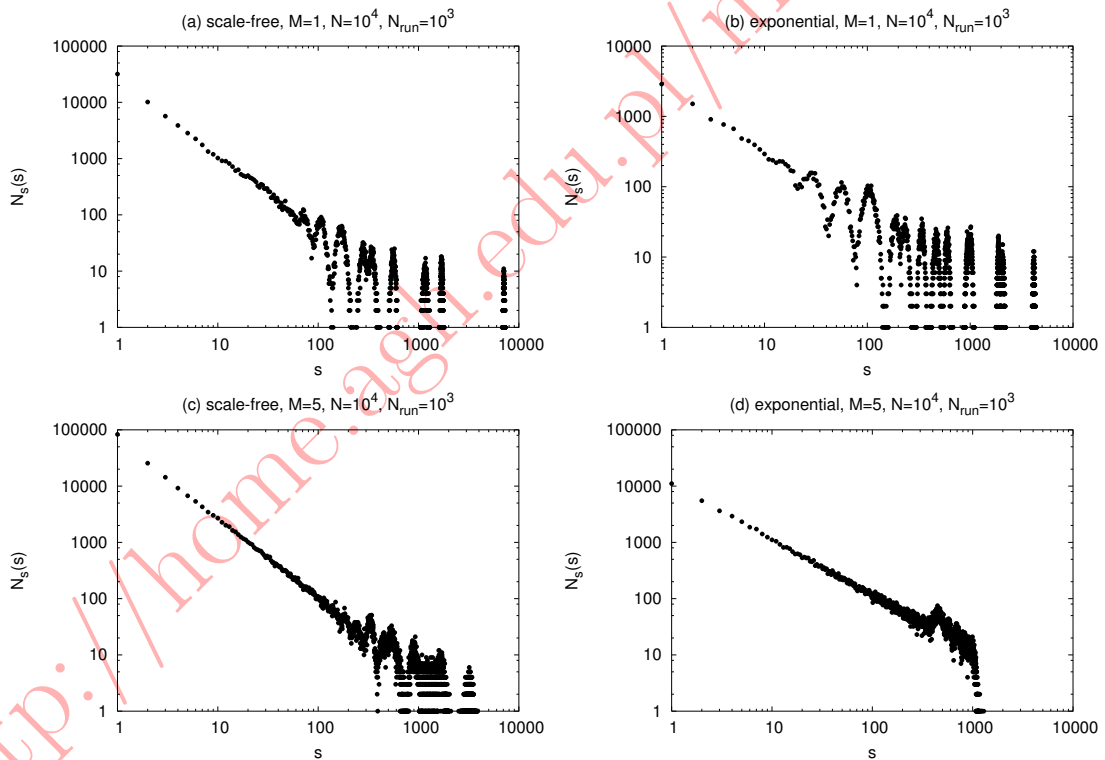
The field dependence of (a) the total number of flipped spins $s(H)/N$ in given field H and (b) density of walls (the number of antiferromagnetic pairs $N_{AFP}(H)$) normalized to the total number of bonds N_P for various kind of networks. The field is expressed in $|J|$ units:

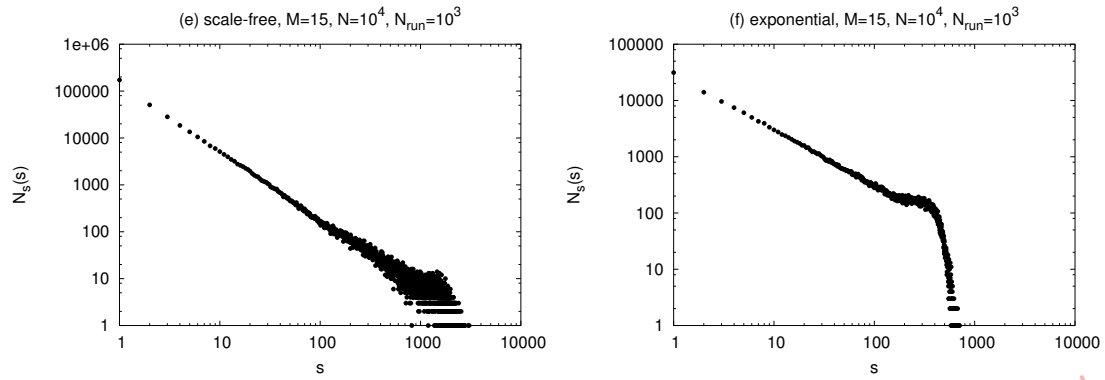


Ratio of the magnetization change Δ_m and the number s of the flipped spins within an avalanche:

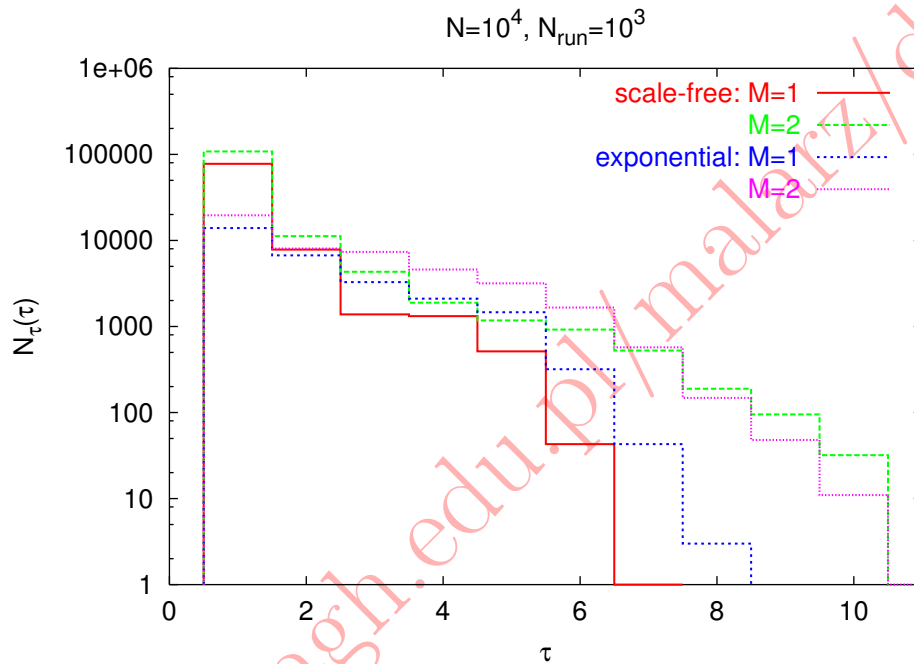


Histograms of size s of avalanches during hysteresis experiment:

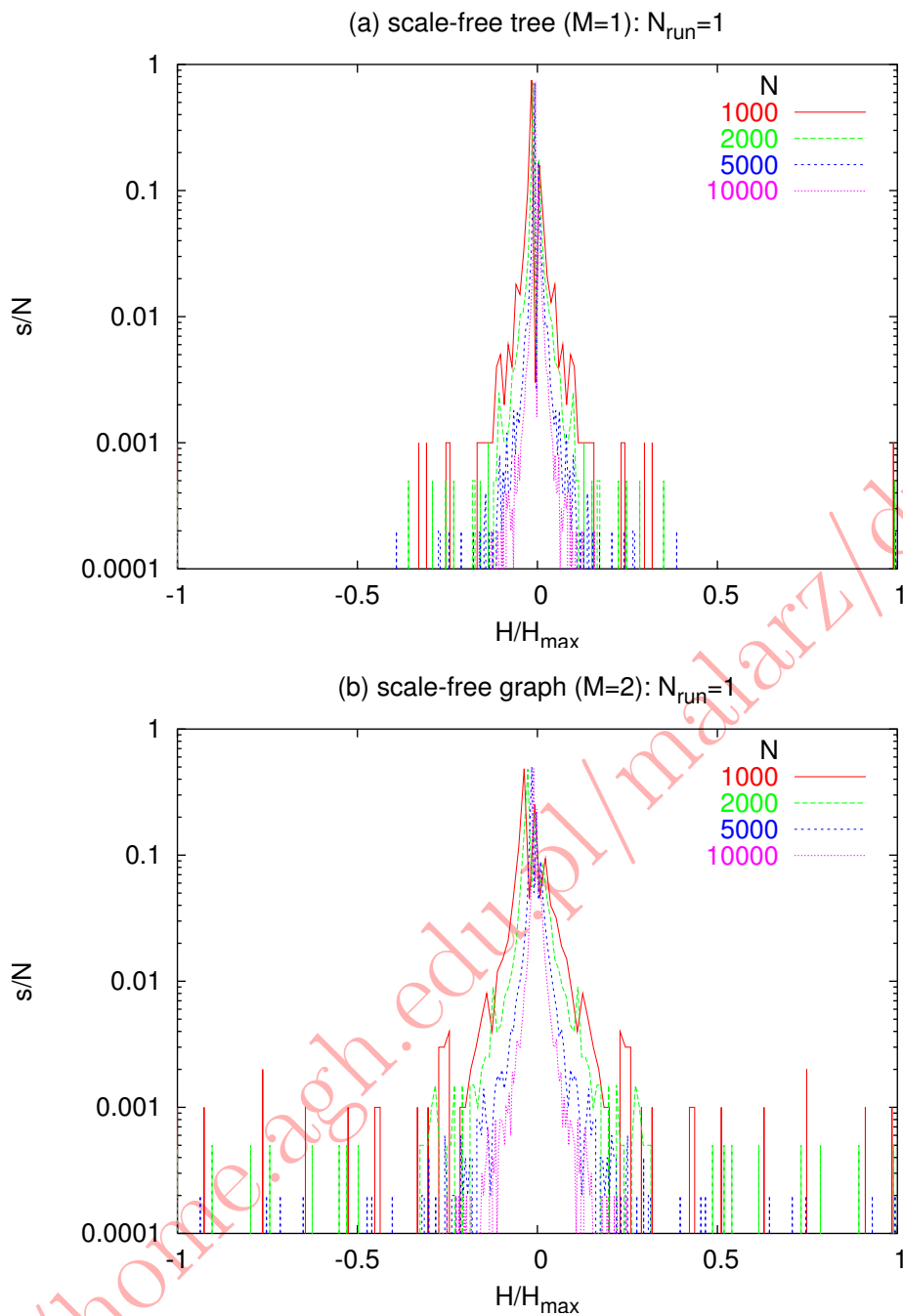




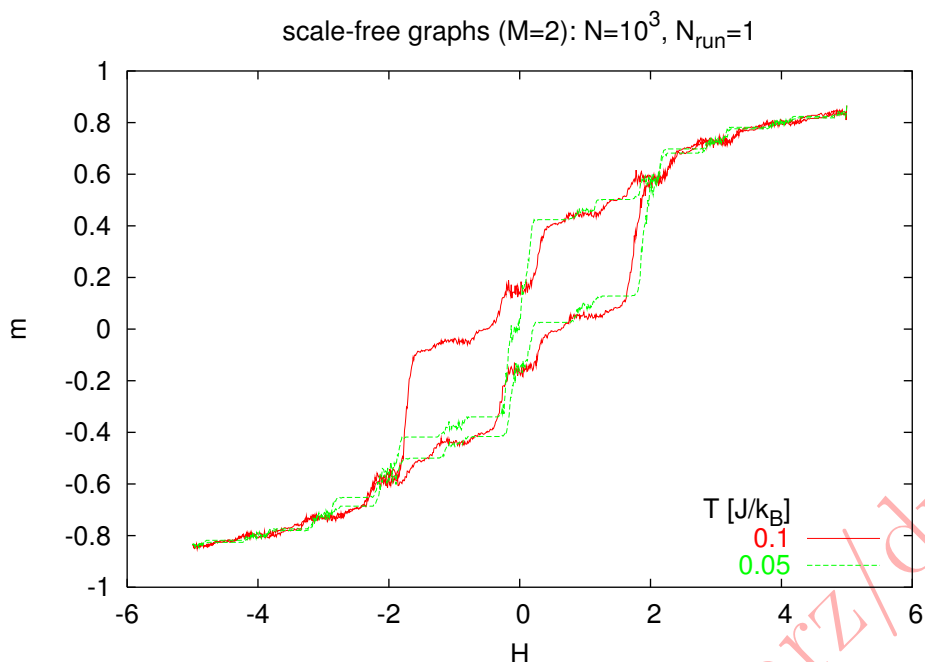
Histograms of duration time τ during hysteresis experiment:



Fraction of flipped spins s/N normalized to the network size N in increasing field H for various values N in the scale-free networks with (a) $M = 1$ and (b) $M = 2$:



Hysteresis loop for finite temperature $T = 0.05$ and 0.1 [$|J|/k_B$]. The field H is measured in $|J|$:



Fraction of spins flipped at $H = -M$ and maximal avalanche size s_{\max}/N as compared with fraction of spins with degree equal to M for various networks. The effective exponents α and β of power law distributions are included for $N_s(s)$ and $N_m(\Delta_m)$, respectively. The last line shows network diameters ℓ for $N = 10^4$:

	scale-free		exponential	
	M	1	2	1
s for $H = -M$	0.72	0.49	0.41	0.23
s_{\max}/N	0.73	0.54	0.44	0.25
$P(k = M)$	2/3	1/2	1/2	1/3
α	1.38	1.39	0.97	1.00
β	1.56	1.48	0.92	0.93
ℓ	9.1	5.1	15.6	5.1

[B.Tadić et al, Phys. Rev. Lett. **94** (2005) 137204], [K.Malarz et al, Physica **A373** (2007) 785]

11.5.4 Efektywny algorytm obliczania sumy statystycznej

- n — liczba spinów do góry ($S_i = +1$)
- k — liczba wiązań antyrównoległych ($S_i S_j = -1$)
- L — rozmiar sieci
- $N = L^2$ — liczba wszystkich spinów
- $\Omega(n, k)$ — liczba konfiguracji siatki $L \times L$ o zadanej liczbie n i k
- $1/\beta = k_B T$

$$E(n, k) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i = 2J(k - L^2 + L) - H(L^2 - 2n) \quad (11.8)$$

$$Z = \sum_{n, k} \Omega(n, k) \cdot \exp[-\beta E(n, k)] \quad (11.9)$$

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \sum_{n,k} A(n,k) \cdot \Omega(n,k) \cdot \exp[-\beta E(n,k)] \quad (11.10)$$

$$\chi = \beta[\langle S_i^2 \rangle - \langle S_i \rangle^2] = \beta[\langle (2n - L^2)^2 \rangle - \langle 2n - L^2 \rangle^2] \quad (11.11)$$

M	10^5	10^6	10^7	10^8	10^9	10^{10}
t_{CPU} [sec]	0.86	6.90	66.4	660	6648	65752

na SGI 2800 $\rightarrow 2^{64} \approx 10^{19}$ — 4.6 milionów lat!

$$\Omega_{8 \times 4}(b^8, n_1 + n_2, k_1 + k_2 + k') = \sum_{\substack{b_1^7, n_1, k_1 \\ b_2^7, n_2, k_2}} \Omega_{4 \times 4}(b_1^7, n_1, k_1) \cdot \Omega_{4 \times 4}(b_2^7, n_2, k_2),$$

gdzie $0 \leq k' \leq 4$ jest dodatkową liczbą wiązań antyrównoległych na “zgrzewie” dwóch sieci 4×4 a b^8 tworzy się na podstawie b_1^7 i b_2^7 .

Podobnie

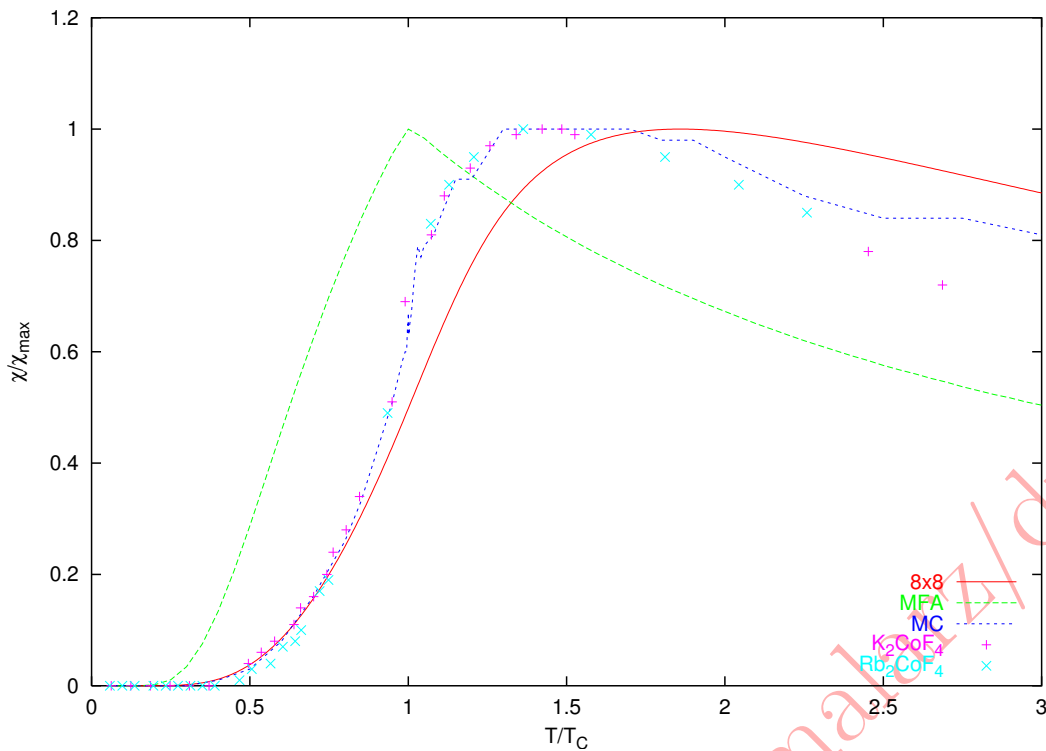
$$\Omega_{8 \times 8}(n_1 + n_2, k_1 + k_2 + k'') = \sum_{\substack{b_1^8, n_1, k_1 \\ b_2^8, n_2, k_2}} \Omega_{8 \times 4}(b_1^8, n_1, k_1) \cdot \Omega_{8 \times 4}(b_2^8, n_2, k_2),$$

i znów $0 \leq k'' \leq 8$ jest dodatkową liczbą wiązań antyrównoległych na złączu dwóch siatek 8×4 .

Na SGI 2800 procedura ta pozwala określić $\Omega_{8 \times 8}$ **w zaledwie 22 godziny!!!**

Podejście średniopolewe $J < 0$ i $\chi = (m_\alpha + m_\gamma)/H$ ($H \rightarrow 0$):

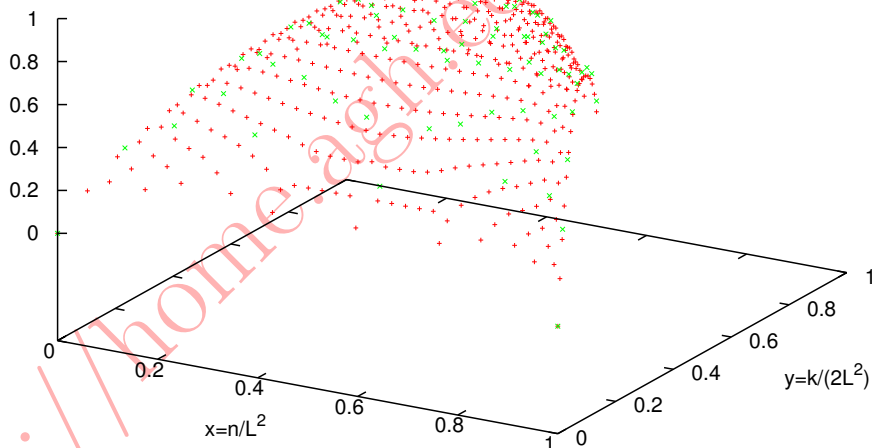
$$\begin{cases} m_\alpha = \tanh(\beta(Jm_\gamma + H)) \\ m_\gamma = \tanh(\beta(Jm_\alpha + H)) \end{cases} \quad (11.12)$$



periodic boundary conditions

6x6 +
4x4 x

$z = \log \Omega(n,k) / \log \max \Omega(n,k)$



[K. Malarz et al, *Int. J. Mod. Phys. C*14 (2003) 689]

11.6 Dynamiczny diagram fazowy

- Funkcja pracy = coś co chce zminimalizować AK.
- Tym razem pytamy jakie AK żądanie takiej minimalizacji generuje.

11.6.1 Sieć kwadratowa z oddziaływaniem jak w modelu Isinga

- Fizyczny przykład: przejście fazowe pierwszego rodzaju od fazy niemagnetycznej do magnetycznej poprzez zarodkowanie: obszar zajęty przez nową fazę narasta w sposób ciągły.
- Reguła AK: atomy na powierzchni klastra (zarodka) stają się magnetyczne, przy czym ich stan jest stanem o możliwie najniższej energii.
- Funkcja pracy (hamiltonian modelu Isinga):

$$H = -J \sum_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i, \tag{11.13}$$

przy czym bierzemy pod uwagę tylko dwóch sąsiadów: “lewego” i “górnego”.

- Określenie reguły polega na podaniu stanu atomu obliczonego na podstawie minimalizacji wyrażenia (11.13).
- Otoczenie może być w stanach: $(\uparrow\uparrow)$, $(\uparrow\downarrow)=(\downarrow\uparrow)$ lub $(\downarrow\downarrow)$.
- Jest więc osiem takich automatów:

	$(\uparrow\uparrow)$	$(\uparrow\downarrow)=(\downarrow\uparrow)$	$(\downarrow\downarrow)$
A	\uparrow	\uparrow	\uparrow
B	\uparrow	\uparrow	\downarrow
C	\uparrow	\downarrow	\uparrow
D	\uparrow	\downarrow	\downarrow
E	\downarrow	\uparrow	\uparrow
F	\downarrow	\uparrow	\downarrow
G	\downarrow	\downarrow	\uparrow
K	\downarrow	\downarrow	\downarrow

- Nie wszystkie AK mogą być realizowane: niektóre z nich nie dają stanu podstawowego dla żadnego z parametrów (J, h) .
- Przyporządkowanie parametrom (J, h) odpowiedniego AK nazywamy właśnie **dynamicznym diagramem fazowym**.
- Stan układu realizowany przez taki AK zależy od stanu początkowego sieci.

11.6.1.1 Konstrukcja DDF

- $$H(S_1, S_2, S) = -S[J(S_1 + S_2) + h]. \tag{11.14}$$

- Dla każdego stanu otoczenia (S_1, S_2) na płaszczyźnie (J, h) wykreślamy krzywą o równaniu

$$H(S_1, S_2, S) = H(S_1, S_2, -S).$$

- Na płaszczyźnie (J, h) oddziela ona obszary gdzie niższą energię ma stan \uparrow od obszarów gdzie niższą energię ma stan \downarrow .
- Są trzy stany otoczenia \rightarrow będzie więc trzy takie krzywe.
- Np. dla stanu otoczenia $(\uparrow\uparrow)$ z (11.14) krzywa ta dana jest równaniem $2J + h = 0$:
 - dla $h > -2J$ niższą energię ma stan \uparrow ,

- dla $h < -2J$ niższą energię ma stan \downarrow .
- Dla pozostałych konfiguracji otoczenia krzywe dane są równaniem: $h = 0$ i $-2J + h = 0$.
- Każdemu z obszarów, na które te trzy krzywe dzielą płaszczyznę (J, h) można przyporządkować któryś AK z tabeli — niektóre jednak nie będą występować: nie ma np. obszaru odpowiadającego automatowi F ($h > 0$ i $h < 2J$ i $h < -2J$).
- Dla oddziaływania również z kolejnymi najbliższymi sąsiadami otoczenia posiada 25 możliwych konfiguracji otoczenia.
- Dynamiczny diagram fazowy na płaszczyźnie $x = J_2/J_1$ i $y = h/J_1$ tworzy się poprzez przyporządkowanie obszarom powstałym przez przecięcie 25 krzywych niektórych z 2^{25} automatów (nie wszystkie realizują minimum energii).
- Dla niektórych z tych AK można też wskazać tzw. **struktury samoodtworzące się**.

11.6.1.2 Magnetoelastyczne przejście fazowe w YMn_2

- Zastosowanie do opisu przejścia fazy niemagnetycznej do magnetycznej w YMn_2 zachodzącego w ok. 100 K, jednak może też zachodzić w $T = 0$ przy zewnętrznym ciśnieniu.
- Wiązania Mn–Mn są antyferromagnetyczne oznacza to, że średnio co trzecie wiązanie jest sfrustrowane.
- Wiąże się to z nieprawdopodobną degeneracją stanu podstawowego: 16 atomów Mn w komórce elementarnej w stanie podstawowym może pozostawać w 90 stanach magnetycznych — wszystkie mające tę samą najniższą energię.
- Oprócz 90-krotnej degeneracji stanu podstawowego okazuje się że **wszystkie** one są bardzo wrażliwe na uszkodzenie (podmianę atomu magnetycznego na niemagnetyczny): można spodziewać się, że powstająca w przejściu fazowym struktura magnetyczna YMn_2 będzie nieuporządkowana.

[M. Antoniuk, *Ph.D. thesis*, WFiTJ AGH, Kraków 1999]

Opowieść 12

AK w socjofizyce: formowanie opinii społecznej

Patrycjusz nie lubił słowa “dyktator”. Urażało go. Nigdy nikomu nie mówił co ma robić. Nie musiał — to właśnie było najpiękniejsze. Spora część jego pracy polegała na takim zaaranżowaniu spraw, by aktualny stan trwał nadal.

[...]

Natura ludzka, zwyczaj powtarzać Patrycjusz, to wspinała rzecz. Kiedy już się odkryje, gdzie ma odpowiednie dźwignie.

[Terry Pratchett, *Straż! Straż!* Prószyński i S-ka (Warszawa 1999)]

- Ilościowy opis procesów socjologicznych i ekonomicznych metodami fizyki statystycznej.
- Z perspektywy nauk społecznych i ekonomicznych oczywiście należy obawiać się zbytniego uproszczenia skomplikowanych procesów jakie spotykamy w prostych “mechanicznych” modelach.
- Proces formowania opinii publicznej traktowany jako zjawisko kolektywne.
- Dwie alternatywne drogi podejścia:
 - “makroskopowy”: poprzez równania fundamentalne na pewne globalne (średnie) parametry opisujące populację,
 - “mikroskopowy”: poprzez standardowe metody fizyki statystycznej (a więc też probabilistyczne AK).

[W. Weidlich, *Sociodynamics; A Systematic Approach to Mathematical Modelling in the Social Science*. Harwood Academic Publishers (2000)]

12.1 Model Nowaka–Szamreja–Latanégo

- Wpływ grupy na jednostkę zależy od *społecznej bliskości* danego osobnika do pozostałych osobników w społeczności.
- Grupa społeczna składa się z N osobników, z których każdy może mieć jeden z dwóch radykalnych poglądów (tak/nie) w pewnej sprawie opisywanych jako $\sigma_i = \pm 1$.
- Każdy osobnik jest charakteryzowany przez dwa parametry p_i i s_i określające intensywność oddziaływań z osobnikami o przeciwnych bądź tych sam poglądach.

- Zazwyczaj są one wartościami losowymi z rozkładami o średnich \bar{s} i \bar{p} — co daje znacznie większe możliwości niż w oryginalnym sformułowaniu Isinga $J_{ij} = J_{ji} = J$ co jest pewnym analogiem *szkła spinowego*.
- Osobniki są umieszczone w *przestrzeni społecznej* ze zdefiniowaną odległością każdej pary osobników d_{ij} : intensywność oddziaływań jest malejącą funkcją wzajemnej odległości.
- Dynamika zmian opinii dana jest deterministyczną regułą:

$$\sigma_i(t+1) = -\text{sign}[\sigma_i(t)I_i(t) + h_i]$$

aplikowaną synchronicznie wszystkim osobnikom, gdzie I_i jest *społecznym wpływem* na osobnika i pochodzącym od wszystkich innych osobników j :

$$I_i = I_p \left(\sum_{j=1}^N \frac{t(p_j)}{g(d_{ij})} (1 - \sigma_i \sigma_j) \right) - I_s \left(\sum_{j=1}^N \frac{t(s_j)}{g(d_{ij})} (1 + \sigma_i \sigma_j) \right)$$

- h_i może być traktowane jako dodatkowa losowa wielkość wprowadzająca szum do układu bądź opisywać pewną tendencję wszystkich osobników w kierunku jednej z opinii (powodowanej np. polityką rządu, wierzeniami religijnymi, itp.).
- Najpowszechniej zauważanym zjawiskiem jest *klasteryzacja* i *polaryzacja* opinii.

[A.Nowak et al, *Psych. Rev.* **97** (1990) 362], [J.A.Hołyst et al, *Ann. Rev. Comput. Phys.* **IX** (2001) 253]

12.1.1 Przejścia fazowe w obecności guru

- Tylko jeden parametr opisujący intensywność $s_i > 0$ wpływu na innych — losowany dla i z zadany rozkładem $q(s)$ i o średniej \bar{s} .
- Osobniki zajmują położenia w węzłach kwadratowej sieci na dwuwymiarowym dysku o $R \gg 1$.
- W centrum osobnik o intensywności oddziaływania $s_L \gg s_i$ — lider, guru, itp.
- Dynamika opisana podobną do glauberowskiej regułą:

$$I_i = -s_i \beta - \sigma_i h - \sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{s_j \sigma_i \sigma_j}{g(d_{ij})},$$

$$\sigma_i(t+1) = \begin{cases} \sigma_i(t) & \text{z p-stwem } \frac{\exp(-I_i/T)}{\exp(-I_i/T) + \exp(I_i/T)}, \\ -\sigma_i(t) & \text{z p-stwem } \frac{\exp(I_i/T)}{\exp(-I_i/T) + \exp(I_i/T)}. \end{cases}$$

- Wielkość $-I_i \sigma_i$ odpowiada więc “lokalnemu” polu.
- T — temperatura społeczna — stopień przypadkowości w wyborach jednostki bądź jej średnia “indywidualność”.
- $I_i > 0$ — sugeruje jednostce zmianę jej poglądu, i *vice versa*.
- Podobnie jak w modelu Isinga, $T = 0$ oznacza deterministyczną regułę

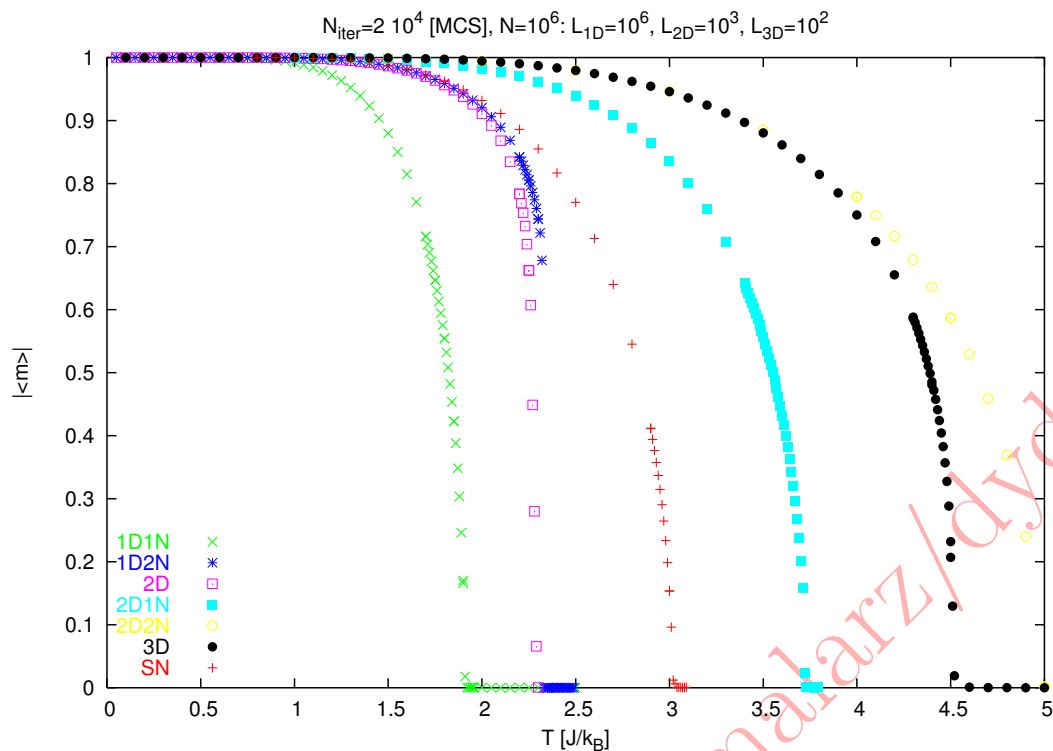
$$\sigma_i(t+1) = -\text{sign}[I_i \sigma_i(t)].$$

- Dla $T = 0$ obserwujemy albo trywialną unifikację, bądź klastery (koła o promieniu a zależnym od parametrów modelu) osobników dzielących opinię guru otoczonych przez jego przeciwników.
- Nieciągłe przejście fazowe klastery/unifikacja w funkcji parametrów s_L bądź h .
- Istnieje też minimalna s_L lidera, poniżej którego nie będzie on w stanie podtrzymać swojego zdania pod presją grupy.
- Oczywiście zachowanie osobników w grupie nie zależy tylko od wpływu innych — jednak modelowanie np. wpływu wewnętrznych czynników (choćby moralnych) jest *praktycznie niemożliwe*.
- Najprostszą próbą wprowadzenia takich czynników jest ustawienie niezerowej temperatury $T > 0$.
- Granice klastrów zaczynają być rozmyte.
- Z jednej strony wprowadzenie $T > T_c$ może doprowadzić do przejścia fazowego klastery/unifikacja ($0 < a < R \rightarrow a = R$), z drugiej wręcz przeciwnie \rightarrow do wytworzenia jednorodnej mieszaniny opinii w społeczeństwie: brak klastrów i $\langle \sigma_i \rangle = 0$.
- Jeśli dokonać sprzężenia T ze średnią opinią $\langle \sigma_i \rangle$ są obserwowane chaotyczne oscylacje obu tych sytuacji...

[K.Kacperski et al, *J. Stat. Phys.* **84** (1996) 169], [K.Kacperski et al, *Physica* **A269** (1999) 511], [K.Kacperski et al, *Physica* **A287** (2000) 631]

12.2 Sieci króla Salomona

- sąsiedzi w pracy na ogół różnią się od sąsiadów w miejscu zamieszkania
- dwie sieci, w drugiej z nich komórki są permutacją oryginalnej
- bądź prościej: na jednej sieci oprócz sąsiadów geometrycznych $S_{i\pm 1}$ pojawiają się losowani dodatkowi sąsiedzi S_{i+R}
- taka sieć sieci nazywa się siecią Solomona
- na każdej sieci typowe oddziaływanie między “spinami” (np. isingowskie)
- “socjologiczne przejście fazowe” również dla sieci 1D!



[K.Malarz, *Int. J. Mod. Phys. C14* (2003) 561]

12.3 Model Sznajdów

- w modelach socjologicznych opartych na modelu Isinga mamy do czynienia z oportunistami dostosowującymi się do otoczenia
- w modelu Sznajdów [K.Sznajd-Weron, J.Sznajd, *Int. J. Mod. Phys. C11* (2000) 1157] odwrotnie:
 - jedna osoba stojąca na ulicy i wpatrzona w niebo nie wywołuje odruchowego zerknięcia w górę...
 - ... cztery takie obok siebie — tak...
 - ...co właściwie kończy opis modelu
- każda komórka sieci $S_i = \pm 1$ (Republikanie/Demokraci, prawica/lewica, tak/nie)
- jeśli w losowo wybranym miejscu na sieci znajdują się dwa spiny równoległe — ich sąsiedzi w następnym kroku dołączą do tej “domeny”
- to losowe wybieranie miejsca *jest* kluczowe dla sprawy
- na sieci 1D — zgodna para przekonuje kolejną dwójkę, dla sieci regularnej prostej 2D — sześciu, dla heksagonalnej 2D — ośmiu, dla kubicznej prostej — dziesięciu
- jeśli wylosowana para $S_i S_{i+1} = -1$:
 - 1D — przeorientowuje sąsiadów ($S_i \rightarrow -S_i$)
 - 2D — pozostawia bez zmian ($S_i \rightarrow S_i$)

- system spinów kończy w stałym punkcie

$$\sum_{i=1}^N S_i = \pm N$$

- czas potrzebny na osiągnięcie konsensusu jest jednak relatywnie długi (sieć 1000×1000 jest właściwie poza naszym zasięgiem (listopad 2002))
- początkowa koncentracja p spinów w górę decyduje czy na końcu dostaniemy same spiny w górę czy w dół (przejście fazowe w $p_C = 1/2$)
- rezultaty nie zmieniają się ani na sieciach rozcieńczonych $S_i = 0, \pm 1$, ani gdy przekonywanie następuje tylko z pewnym prawdopodobieństwem $p < 1$ (w tym ostatnim przypadku potrzeba na to jednak dłuższego czasu!)
- również dla sieci heksagonalnej ze sprzężeniem *antyferromagnetycznym* ($J < 0$) osiąga się jednorodność opinii!
[I.Chang, *Int. J. Mod. Phys. C12* (2001) 1509]
- nawet gdy zamiast pary “misjonarzy” jest tylko jeden osiąga się konsensus
[R.Ochrombel, *Int. J. Mod. Phys. C12* (2001) 1091].
- niech $S_i = 1, \dots, q$ różnych opinii na sieci 2D:
 - przekonywanie możliwe tylko osób o zbliżonych poglądach.
 - konsensus jest osiągalny dla $q \leq 3$ ale już nie dla $q = 4$.
 - na sieci heksagonalnej ta granica przesuwana się do $q = 5$.
- rolę pola magnetycznego z modelu Isinga pełni reklama w mass-mediach: po wymianie informacji między sąsiadami niech spin zostaje ustawiony na reklamowany (np. +1) — dla dużych sieci nawet mała dawka reklamy jest w stanie wymusić skończenie sieci w stanie “same +1” mimo, że początkowo obie opinie były równoprawdopodobne
[C.Schulze, *Int. J. Mod. Phys. C14* (2003) 95]

12.4 Dlaczego w sylwestrową noc nie można się do nikogo dozwonić

Communication is a key process in social systems and it is of interest

- for a political scientists,
- for a system-oriented sociologists,
- in (social) psychology,
- in mathematics and computer science,
- in game theory, etc.

Here we show two models devoted to describe how effective **the communication** between group members is available.

12.4.1 Scheff Theory of an Emergency Scenario

A catastrophe, a terrorist attack, or any other strong threat is obviously a strong disturbance of current plans of its participants, accompanied perhaps with a direct threat for their health or even life. As such, it must give rise to **strong negative emotions**, triggered by fear. Here we are interested in **the communication between the participants**. For each one, there are three options:

- to communicate by phone with friends or relatives, who do not participate in the situation (**selfish, S**),
- to contact with other participants and in a search for a collective strategy (**collective, C**),
- or to withdraw and do nothing (**passive, P**).

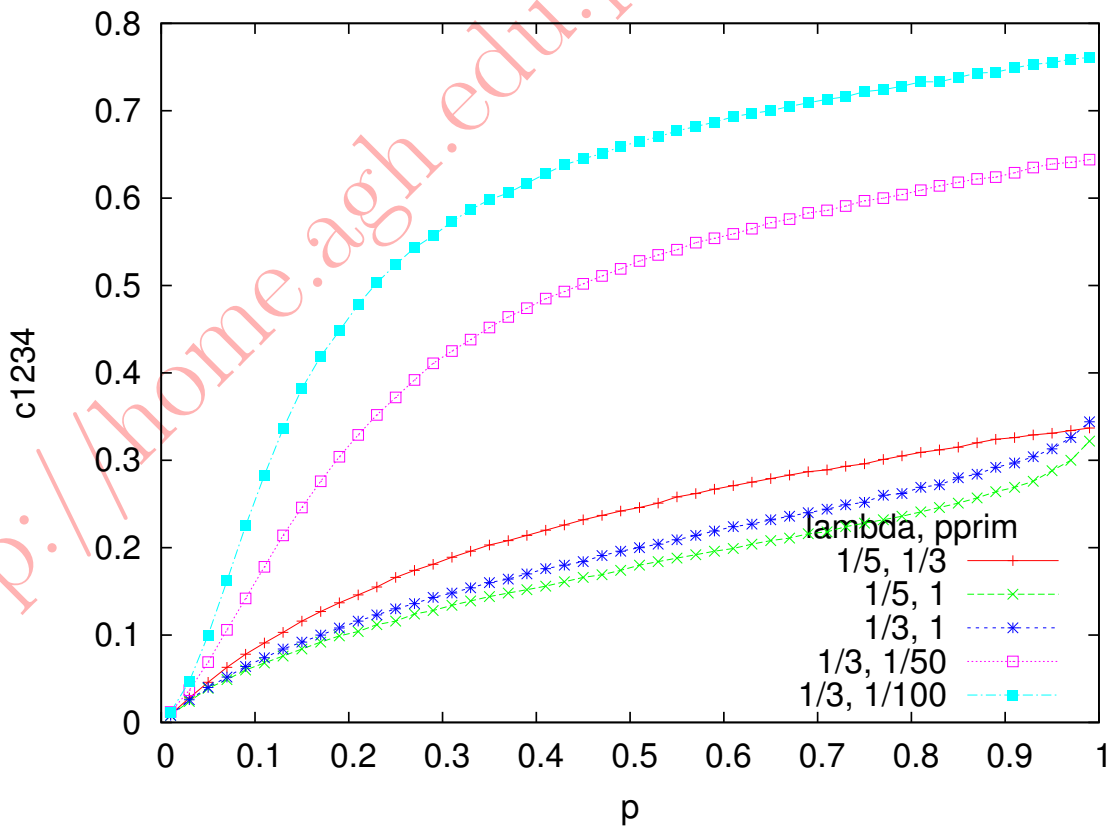
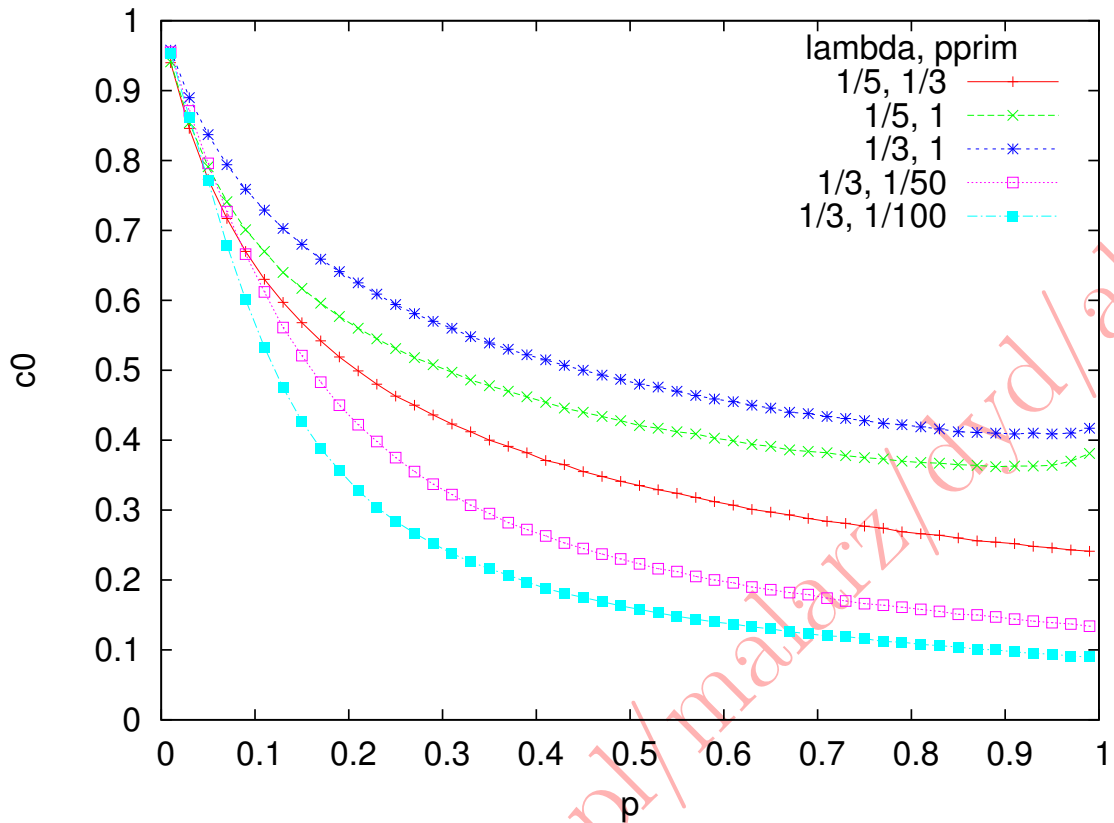
According to the theory of **pride and shame**, the strategy selected by the participants depends largely on conscious or unconscious **messages** which they send and receive. Namely, they try to evaluate how they are **perceived** by other participants: with respect or not.

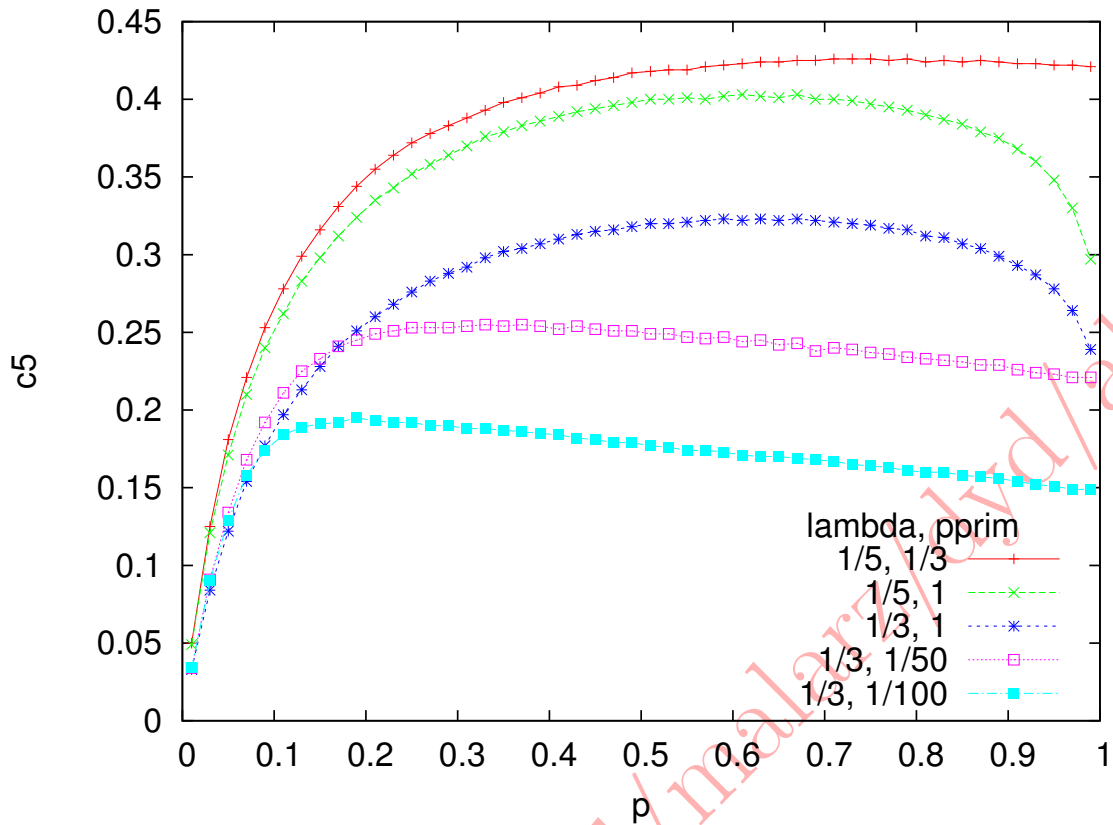
- In the former case their positive self-estimation is enhanced, what enables the interpersonal attunement and the social solidarity. Consequently, they are willing to select the strategy C, what stabilizes the mutual respect (**the loop of pride**).
- On the contrary, disrespectful signals lead to an enhancement of the negative self-evaluation, a shame and its repression and a hostility. As a consequence the lack of respect is stabilized and chances for C decrease; what is being selected is S or P (**the loop of shame**).

12.4.2 Models of a Phone Communication Jam

- The **selfish strategy S** is natural in the case of large catastrophes, where everybody wants to get know if the relatives or friends remain alive. However, the payoff heavily depends on the amount of persons who select this strategy.
- It is straightforward to expect that once the amount of phone speakers exceeds some percentage of the population, successive attempts to contact by phone **must fail** even if the phone network works properly.
- We demonstrate the effect by an evaluation of the percentage of agents **who successfully talk** to each other (p_2), and not only **try to get connection** (p_1). These probabilities are to be calculated against the percentage of people who **try to get connection** (p).
- A single variable $s_{i,j} \in \mathcal{S} = \{0, L, R, U, D, L^*, R^*, U^*, D^*\}$ is assigned to each site of the square lattice with the helical boundary conditions.
- Agents in the state '0' are **silent**. With the probability p an agent picks up his phone and starts to calling to his/her randomly selected neighbour.
- Agents in states L, R, D, U are **trying to connect** to his/her nearest neighbour situated on left, right, down or up, respectively. They stop unsuccessful attempts to connect with probability p' .
- Agents in states L^*, R^*, D^*, U^* **talk** with his/her left, right, down or upper neighbour, respectively. They finish their talk and return to the state '0' with the probability $\lambda = 1/\tau$.
- The probability $p_1 =$ the amount of agents in one of the states L, R, D, U , while the probability $p_2 =$ the amount of agents in one of the states L^*, R^*, D^*, U^* .

• $N = (10^3)^2$



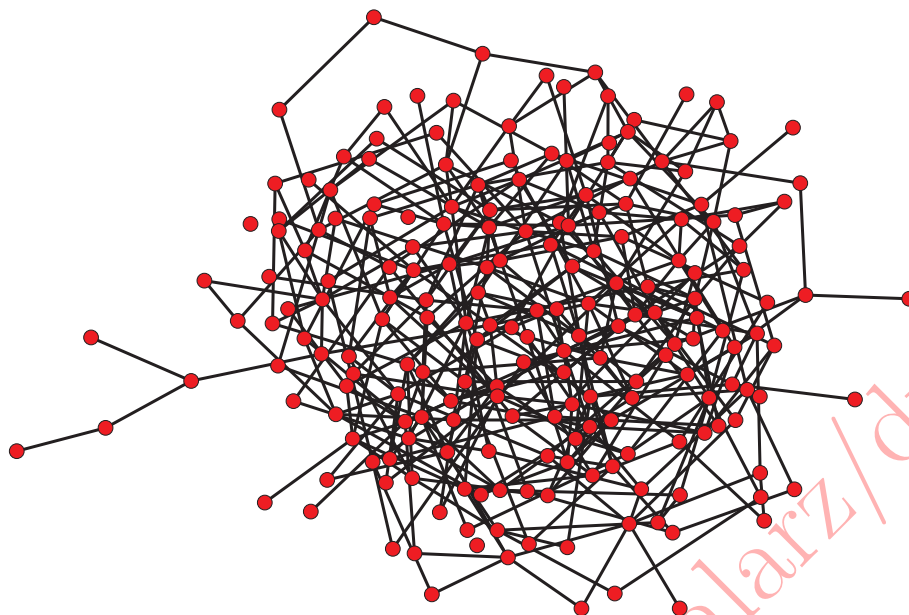


12.4.3 Kinds of networks

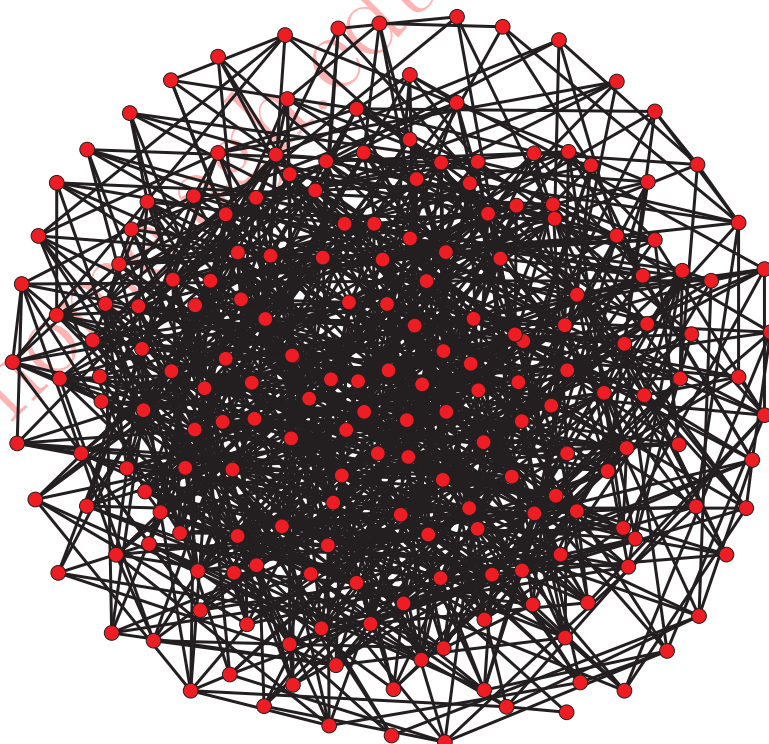
Kinds of networks:

- $P(q)$ = probability that a new node will be attached to existing node q
- for a **exponential** networks $P(q)$ is uniform
- for **scale-free** (preferential, Albert–Barabási) networks $P(q)$ is proportional to the node degree (i.e. its number of edges)
- a **classical random graph** (CRG) \equiv Erdős–Rényi and/or Gilbert model

CRG, $N = 200$, $p = 0.02$

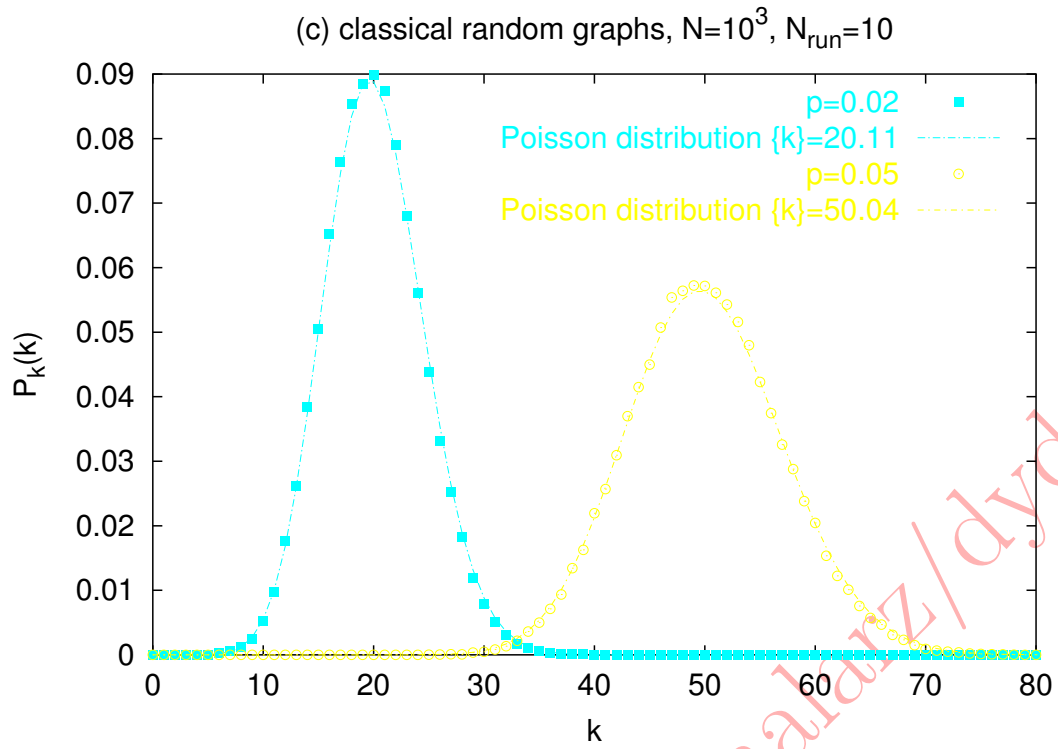


CRG, $N = 200$, $p = 0.05$

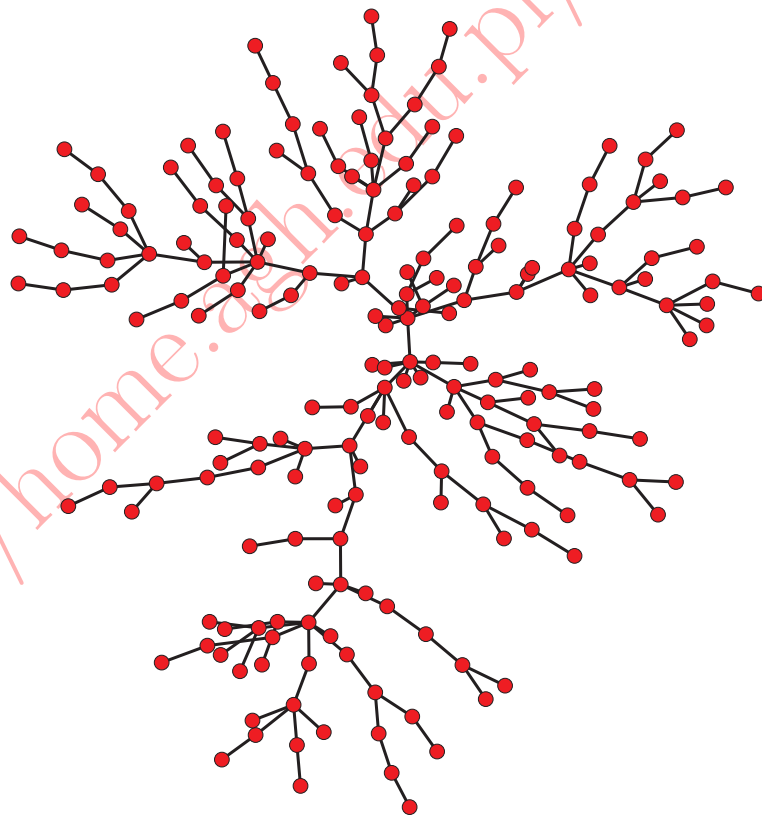


CRG, nodes degree distribution



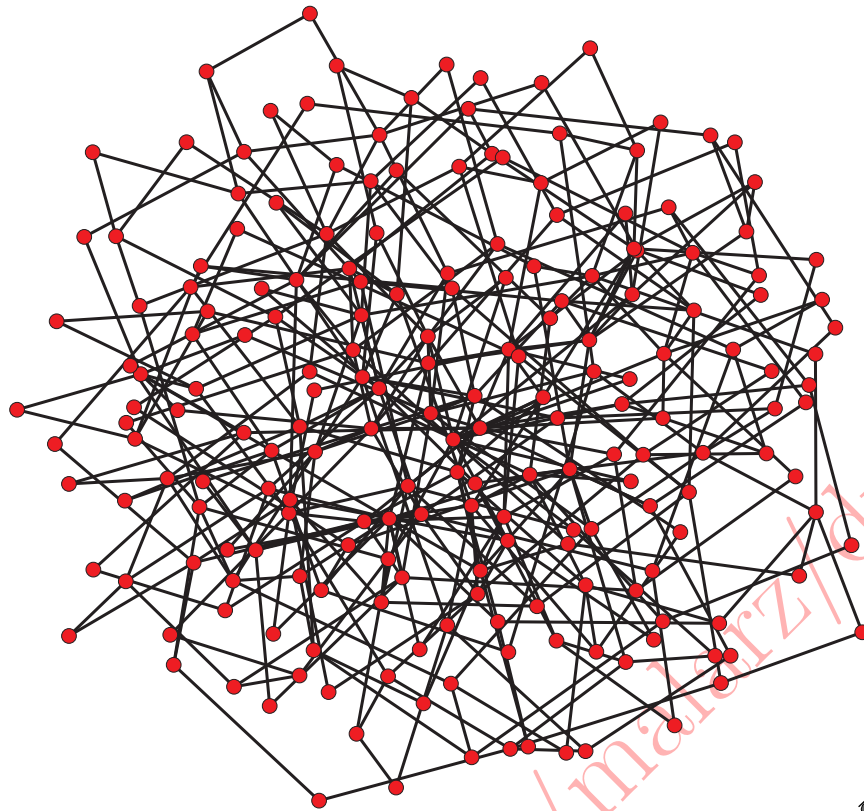


Exponential tree, $N = 200$, $M = 1$



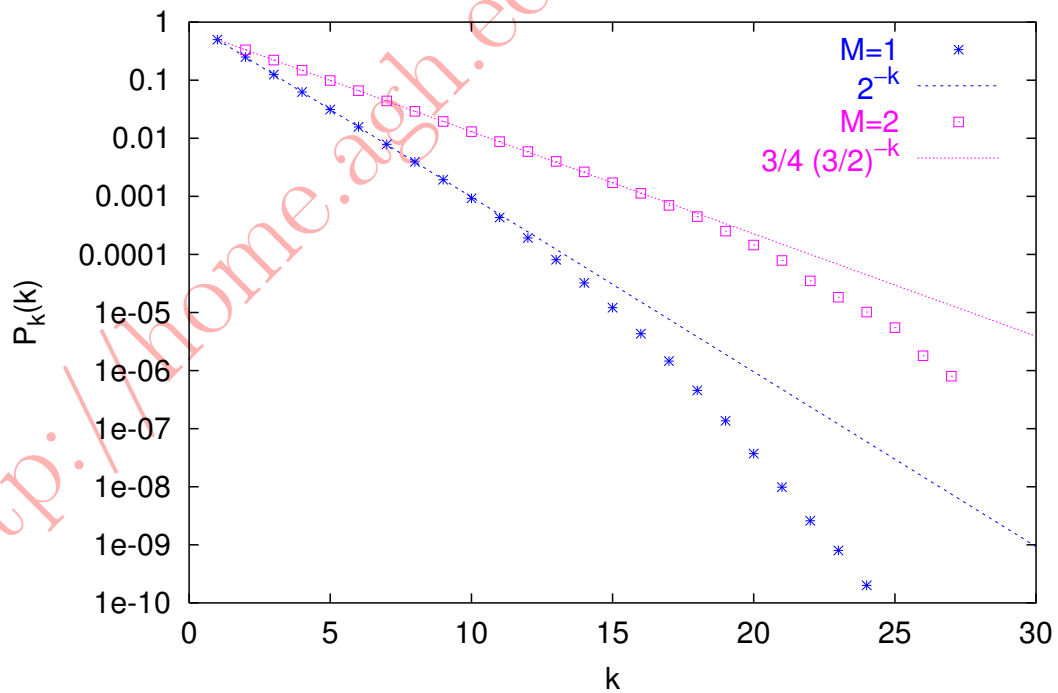
Exponential net, $N = 200$, $M = 2$



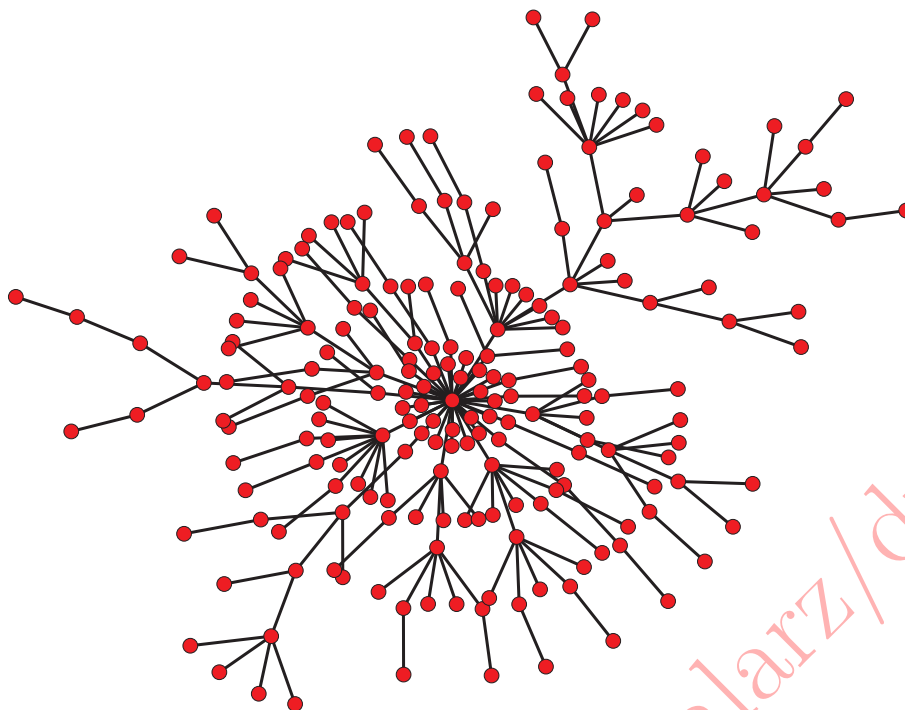


Exponential net, nodes degree distribution

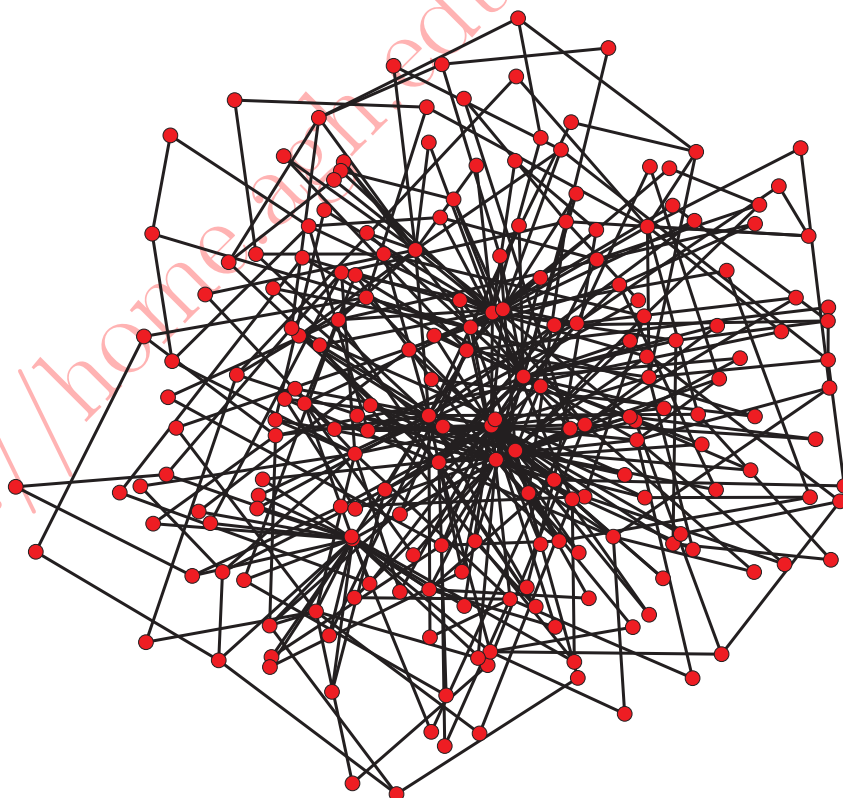
(b) exponential networks, $N=10^3$, $N_{run}=10^7$ ($M=1$), $N_{run}=10^3$ ($M=2$)



Scale-free tree, $N = 200$, $M = 1$

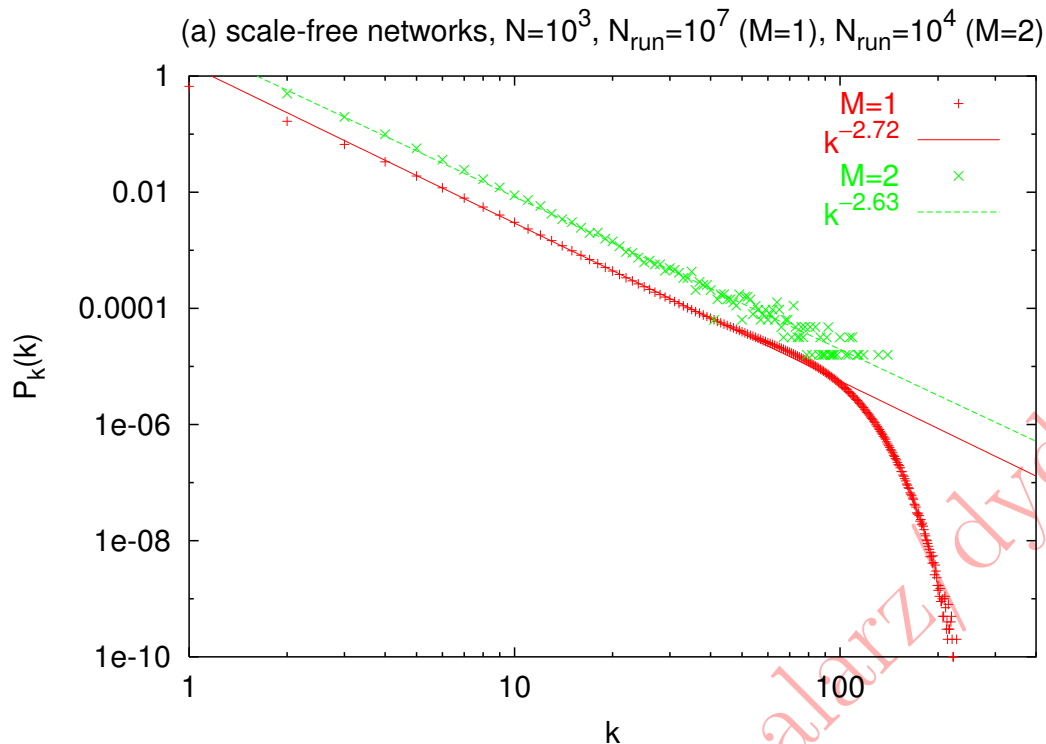


Scale-free net, $N = 200$, $M = 2$



Scale-free net, nodes degree distribution





12.4.4 The Network Approach

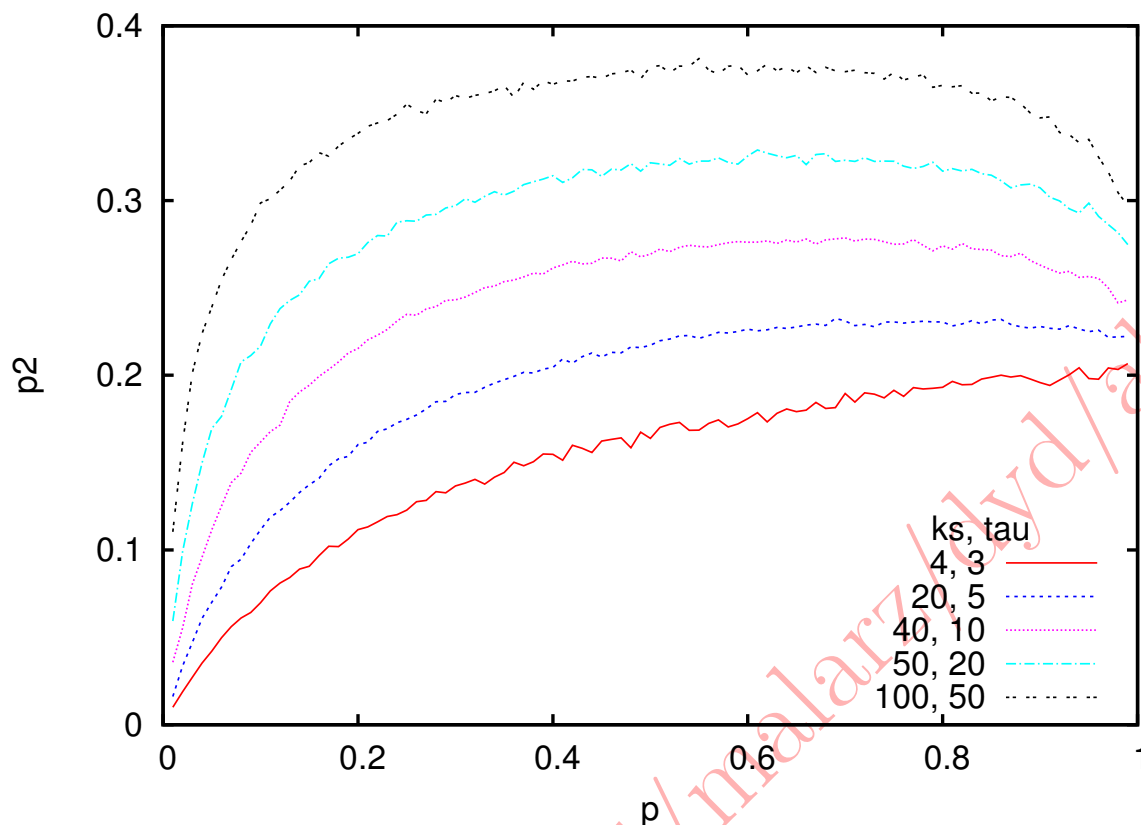
- Agents are distributed at nodes of Erdős–Rényi network, and the updating is sequential.
- The variables used $w_{i,j}$ deal with **the states of bonds** between agents;
 - $w_{i,j} = 1$ means that i **tries to phone** to j ,
 - while $w_{i,j} = 0$ means that he **does not try**.
- p_2 = the percentage of agents involved in mutual talks.
- p_1 = the amount of agents i such that $w_{i,j} = 1$, and $w_{j,i} = 0$.

Once i is selected randomly with repetitions, we ask if there is a neighbour $j(i)$ such that $w_{i,j} = 1$:

- If yes, we check if $w_{j,i} = 1$. If yes, i and j **are talking; the talk is broken** with probability λ .
- If $w_{j,i} = 0$, we check if there is any neighbour $k(j)$ such that $w_{j,k} = 1$.
 - If not, $w_{j,i}$ is set to one; this means that j **starts to talk** with i .
 - If yes, $w_{i,j}$ is set to zero; then i selects randomly one of his/her neighbours n and **tries to connect** him/her with probability p ; again $w_{i,n}$ is set to one.

Next possibility about i is that $w_{i,j} = 0$ for all his/her neighbours $j(i)$.

- Then, if any $w_{j,i} = 1$, $w_{i,j}$ is set to one.
- If $w_{j,i} = 0$ for all i 's neighbours $j(i)$, again i tries to communicate with one of his neighbours.
- $N = 100$

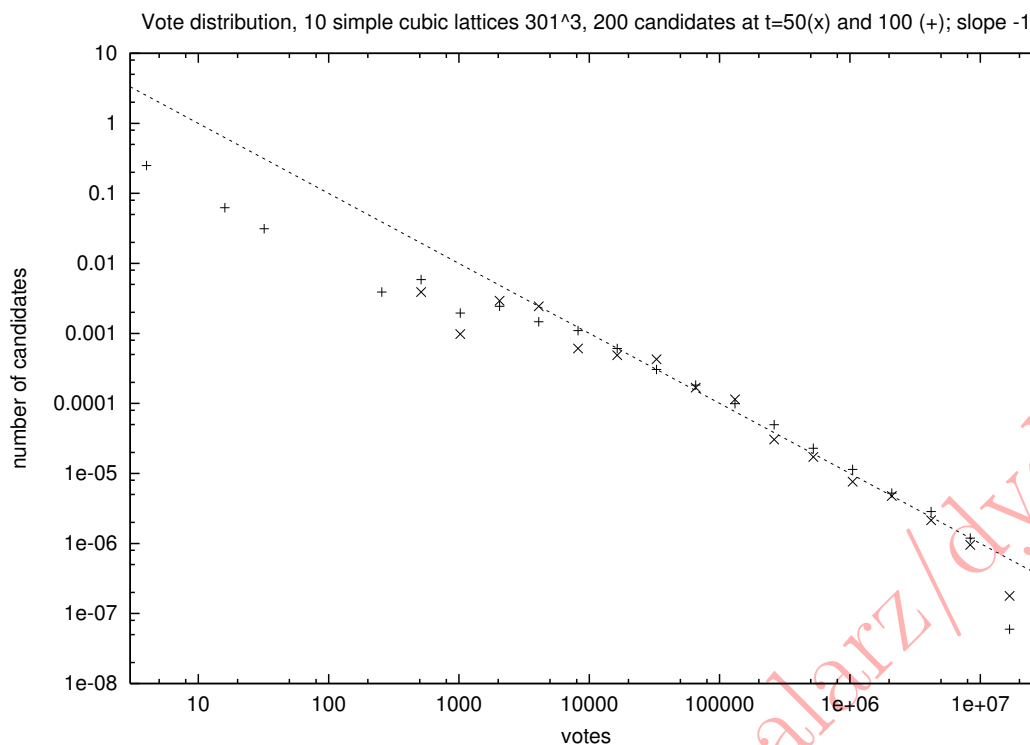


- These approaches are **very different** in details.
- In the cellular automaton we use von Neumann neighborhoods of four cells, and the topology is just a plane.
- On the contrary, in the case of the Erdős–Rényi network the topology is random with the small world property.
- Still, the result is **qualitatively the same**: in both models the curves $p_2(p)$ do not increase above some value p^* of p . As this result is obtained within two entirely different models, it can be considered as validated.
- It is clear that **the strategy S can be efficient only if it is chosen by a minority**.
- This effect allows to expect that **other strategies, P or C, can be active**.

[M. J. Krawczyk, K. Malarz, R. Korff, K. Kułakowski, *Communication and trust in the bounded confidence model*, Lect. Notes Artif. Int. **6421**, 90 (2010)], [K. Malarz, K. Kułakowski, *Matrix representation of evolving networks* Acta Phys. Pol. B **36** (8), 2523 (2005)], [Th. J. Scheff, *Microsociology. Discourse, Emotion and Social Structure*, The University of Chicago Press, Chicago (1990)]

12.5 Sieć Barabásiego–Alberta–Isinga

- bogatszy (łatwiej) staje się jeszcze bardziej (wręcz obrzydliwie) bogaty; często cytowana praca staje się jeszcze częściej cytowana; osoba mająca dużo znajomych łatwiej zdobywa nowych, etc.
- sieć N_0 komórek, z połączeniami $K_0 = N_0(N_0 - 1)/2$ między nimi (każda z każdą)



Rysunek 12.1:

- co krok czasowy i dodawana jest nowa porcja n komórek $N(i) = N_0 + in$ które tworzą powiązania do już istniejących $K(i) = K_0 + in$.
- ale prawdopodobieństwo dołożenia powiązania nowej komórki do już istniejącej jest proporcjonalne do liczby wiązań jakie ta istniejąca już posiada
- tak rosnąca sieć powiązań nosi nazwę sieci *Barabásiego–Alberta*

[A.L.Barabási, R.Albert, *Science* **286** (1999) 509]

12.6 Zastosowanie: przewidywanie wyników wyborów

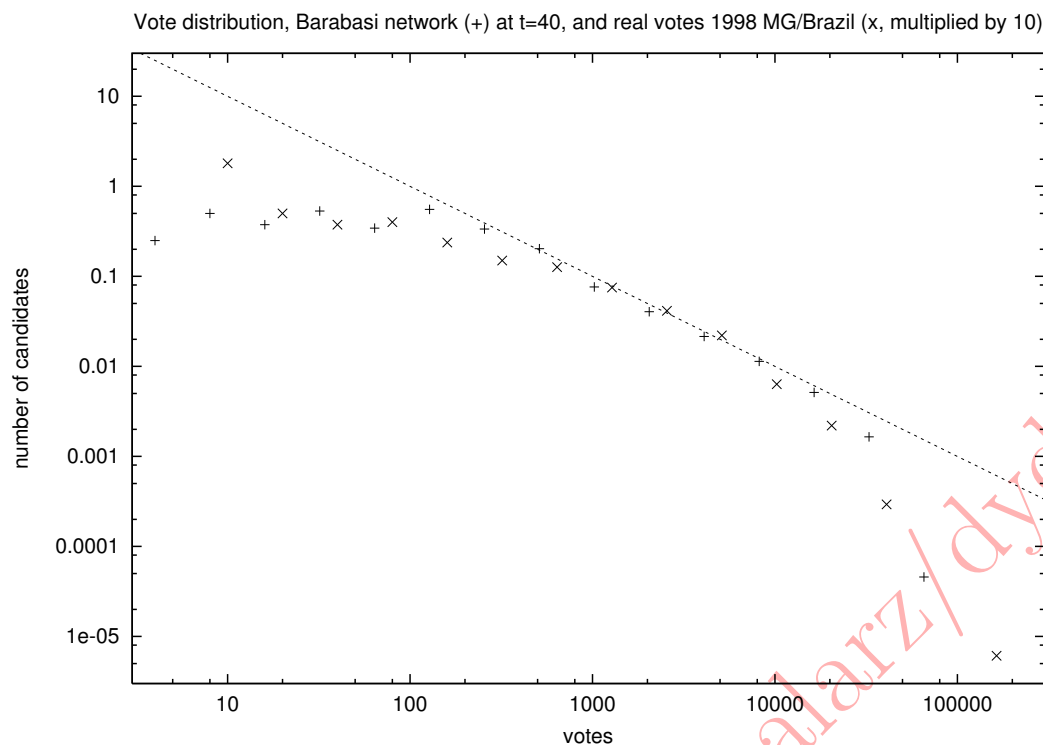
12.6.1 Histogram liczby głosów

- model Sznajdów ($S_i = 1, \dots, N$) na sieci Barabásiego–Alberta
- liczba kandydatów $N(\nu)$, którzy otrzymali ułamek ν głosów zmienia się jak $1/\nu$ (z wyjątkiem bardzo małych i bardzo dużych wartości ν)

[A.T.Bernardes et al, *Int. J. Mod. Phys.* **C12** (2001) 159]

12.6.2 Do której partii i kiedy się zapisać?

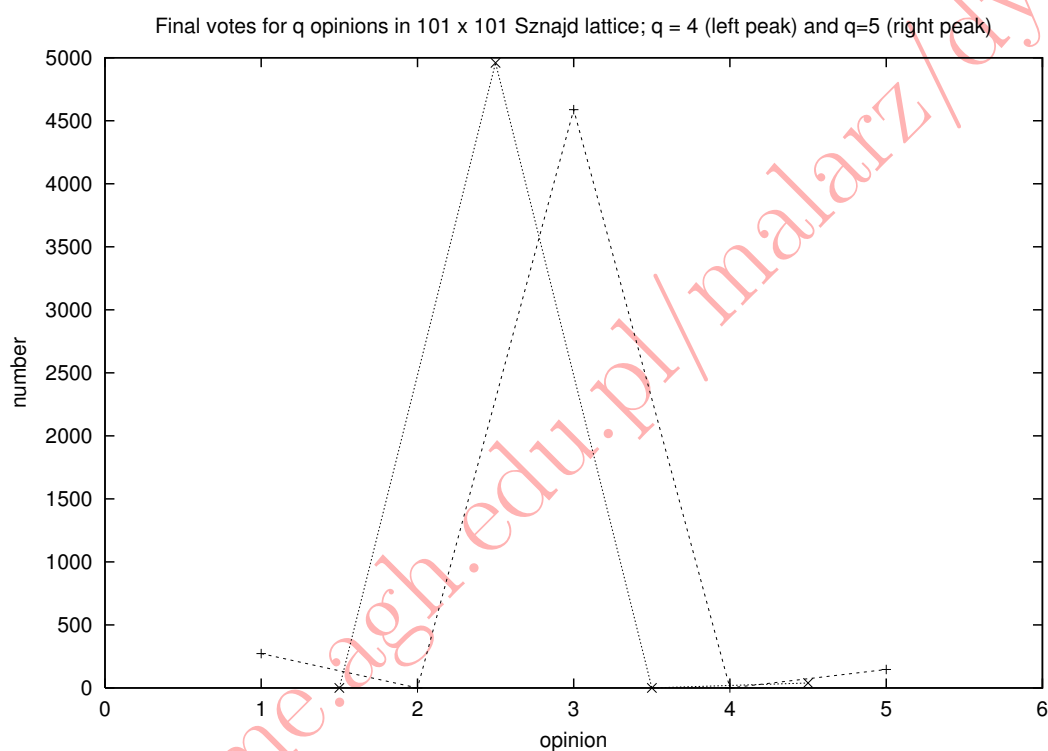
- w połowie wypełniona 2D sieć regularna prosta a na niej mobilni sznajdowscy agenci $S_i = 1, \dots, q$ (naganiacze, akwizytorzy czy tam misjonarze) będący w stanie przekonać nie podejrzanego napotkanego osobnika S_j do swego (coś sprzedać bądź go nawrócić) o ile ma *zbliżone* poglądy $S_j \rightarrow S_i \iff |S_j - S_i| = 1$
- dla $q = 5$: większość agentów przyjmuje za swoją opinię “3”, jest grupka ekstremistów (“1” i “5”) a wyznawcy “2” i “4” całkowicie zanikają



Rysunek 12.2:

- dla $q = 4$ wyniki są znacznie ciekawsze:
 - jedna z “centralnych” opinii (np. “2”) wygrywa całkowicie przekonując do swej racji zwolenników “1” i “3” pozostawiając niewielką grupę opozycjonistów (“4”)
 - należy przyglądać się “sondażom” przedwyborczym: kto przoduje w połowie wyścigu — wygra, kto jest drugi — nie dostanie nic, trzeci będą drugimi a czwarta partia w rankingach już się właściwie nie liczy — i za chwilę zniknie ze sceny politycznej...

[D.Stauffer, preprint cond-mat/0202357], [D.Stauffer, preprint cond-mat/0210213]



Rysunek 12.3:

Opowieść 13

AK w fizyce powierzchni: modelowanie wzrostu warstw i ich powierzchni

MBE = wzrost warstw monokrystalicznych jedno rodzaju materiału na monokrystalicznym podłożu drugiego materiału, gdy głównym procesem mikroskopowym jest dyfuzja powierzchniowa cząstek poprzedzona ich depozycją (a więc gdy resublimacja, odparowywanie i desorpcja materiału rosnącej warstwy jest zanedbywalnie mała).

Trzy typy wzrostu:

- Franka–van der Merwe’a — warstwa za warstwą (modele “cząstka na cząstce”),
- Volmera–Webera — trójwymiarowy, rośnie jednocześnie kilka warstw (modele z nanoszeniem balistycznym),
- Stranskiego–Krastanowa — początkowo 2D później 3D.

Rodzaj wzrostu może się zmieniać ze wzrostem temperatury podłoża (3D w niskich, 2D w wysokich).

13.1 Podstawowe procesy w skali atomowej

- naniesienie na powierzchnię/podkład,
- dyfuzja po powierzchni,
- tworzenie dwuelementowego załączka klastra,
- dołączanie cząstek do utworzonego już klastra.

13.2 Charakterystyka powierzchni i dynamiki jej wzrostu

- Wysokość warstwy $h(\vec{r}, t)$ o średniej θ .
- Funkcja korelacji wysokość-wysokość:

$$G(\vec{s}) \equiv \langle h(\vec{r} + \vec{s})h(\vec{r}) \rangle - \langle h(\vec{s}) \rangle^2.$$

- Chropowatość:

$$\sigma \equiv \sqrt{G(\vec{0})}$$

- Anizotropia:

$$\varepsilon \equiv \frac{G(1;0) - G(0;1)}{G(\vec{0})}$$

$$\varepsilon_1 \equiv \frac{\phi_x - \phi_y}{\phi_x + \phi_y},$$

$$\varepsilon_2 \equiv \frac{\phi_x}{\phi_y}$$

$$\varepsilon_3 \equiv \frac{\ell}{A}$$

gdzie ϕ_x i ϕ_y są długościami boków minimalnego prostokąta pokrywającego klaster, ℓ jest jego obwodem a A jego powierzchnią

- Samoafiniczność warstw rosnących poprzez nanoszenie — niezmienniczość kształtu warstwy i statystycznych parametrów ją opisujących przy jednoczesnym przeskalowaniu odległości między warstwami $r \rightarrow \lambda r$ i ich wysokości $h(r) \rightarrow \lambda^H h(r)$.
- Długość korelacji ξ w kierunku równoległym do podkładu.
- Dynamiczne prawo skalujące Family’ego–Vicseka:

$$\sigma \propto L^\alpha f(\theta/L^\gamma)$$

z funkcją skalującą $f(x)$ o asymptotyce:

$$f(x) = \begin{cases} x^\beta & \text{dla } x \ll 1, \\ 1 & \text{dla } x \gg 1, \end{cases}$$

gdzie L jest liniowym rozmiarem podłoża, α , β , γ wykładnikami chropowatości, wzrostu i dynamicznym.

$$\xi \propto L^{1/\gamma} \text{ i } \gamma = \alpha/\beta$$

[F.Family and T.Vicsek, *J. Phys.* **A18** (1985) L75].

Obecność skalowania jest bardzo miłą cechą — oznacza, że mając jakąś zależność $y(x)$ zmieniając jednostki x nie zmieniamy matematycznej postaci $y(x)$ a co najwyżej jednostki y .

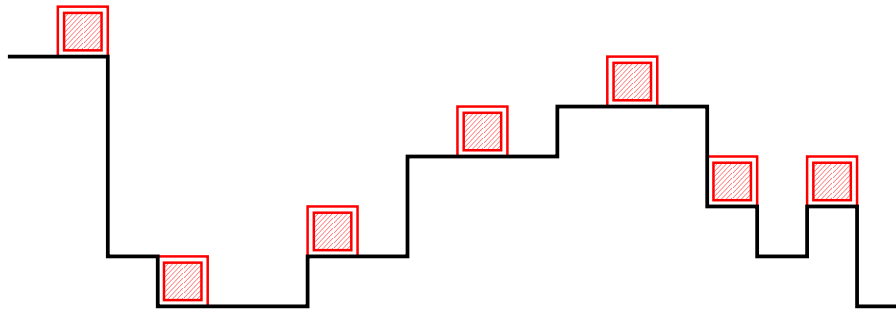
- Dynamika chropowatości samoafinicznej powierzchni warstwy: Przed osiągnięciem charakterystycznej grubości $\theta_\infty \propto L^\gamma$ chropowatość warstwy rośnie jak θ^β po czym nasycy się na poziomie $\sigma_\infty \propto L^\alpha$.

13.3 Deterministyczne modele SOS

13.3.1 Model nanoszenie przypadkowego (MNP)

najprostszy — fizycznie odpowiadający $T \rightarrow 0$ z zamrożeniem wszelkiej dyfuzji czy relaksacji cząstek.

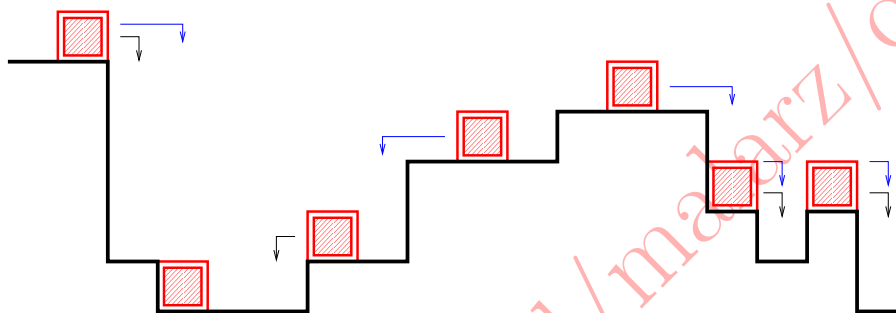
$$P(h;\theta) = \frac{\theta^h}{h!} \exp(-\theta); \quad \beta = 1/2; \quad \alpha = \infty$$



13.3.2 Model Family’ego

rozszerzenie MNP o relaksację cząstek do lokalnego minimum wysokości

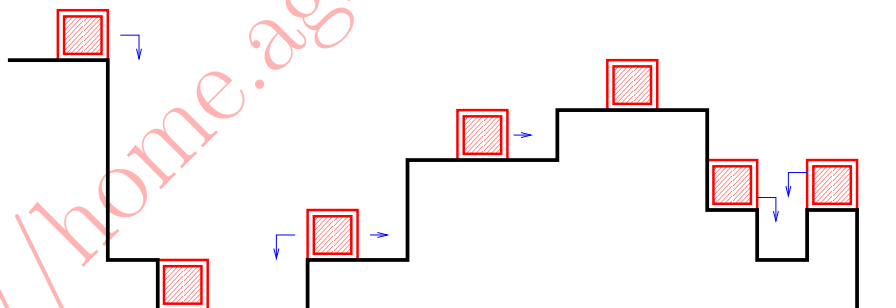
$$h_{\min} = \min\{h(r - R, t), \dots, h(r + R, t)\}$$



[F.Family, *J. Phys.* **A19** (1986) L441]

13.3.3 Model Wolfa–Villaina

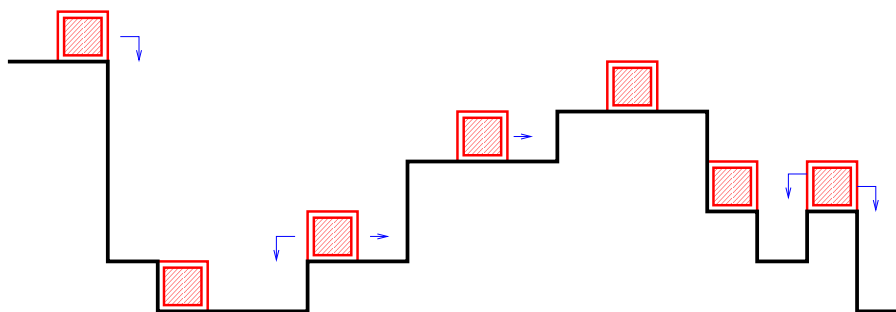
rozszerzenie MNP o relaksację cząstek do lokacji dającej cząstce maksymalną liczbą koordynacyjną z:



[D.E.Wolf and J.Villain, *Europhys. Lett.* **13** (1990) 389]

13.3.4 Model Das Sarmy–Tamborenea

rozszerzenie MNP o relaksację cząstek do “kąta”:



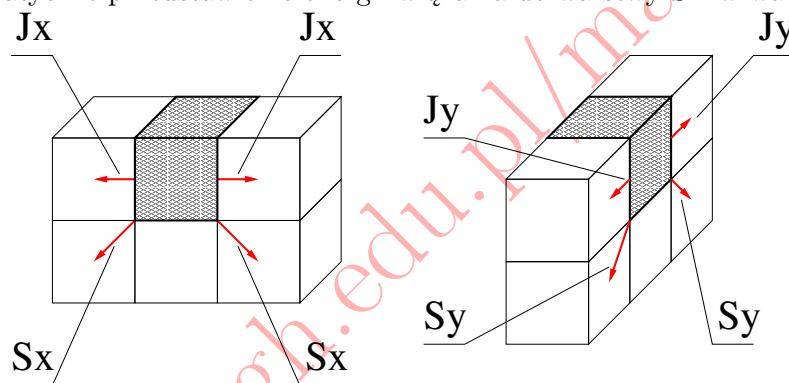
[S.Das Sarma and P.Tamborenea, *Phys. Rev. Lett.* **66** (1991) 325]

13.4 Probabilistyczne modele SOS

13.4.1 Model 1

Zamiast deterministycznej reguły opartej na ogół na żądaniu maksymalizacji liczby koordynacyjnej ale jeszcze przed prowadzeniem symulacji metodami dynamiki molekularnej (ze stałą dyfuzji $D = D_0 \exp(-E_a/k_B T)$) można się pokusić o konstruowanie modeli opartych na probabilistycznych AK.

Schematyczne przedstawienie energii wiązania do warstwy S i w warstwie J .



- Energia wiązania w miejscu depozycji i jego czterech najbliższych sąsiadach

$$E_{i,j} = n_x^{i,j} J_x + n_y^{i,j} J_y + n_x^{i,j-1} S_x + n_y^{i,j-1} S_y.$$

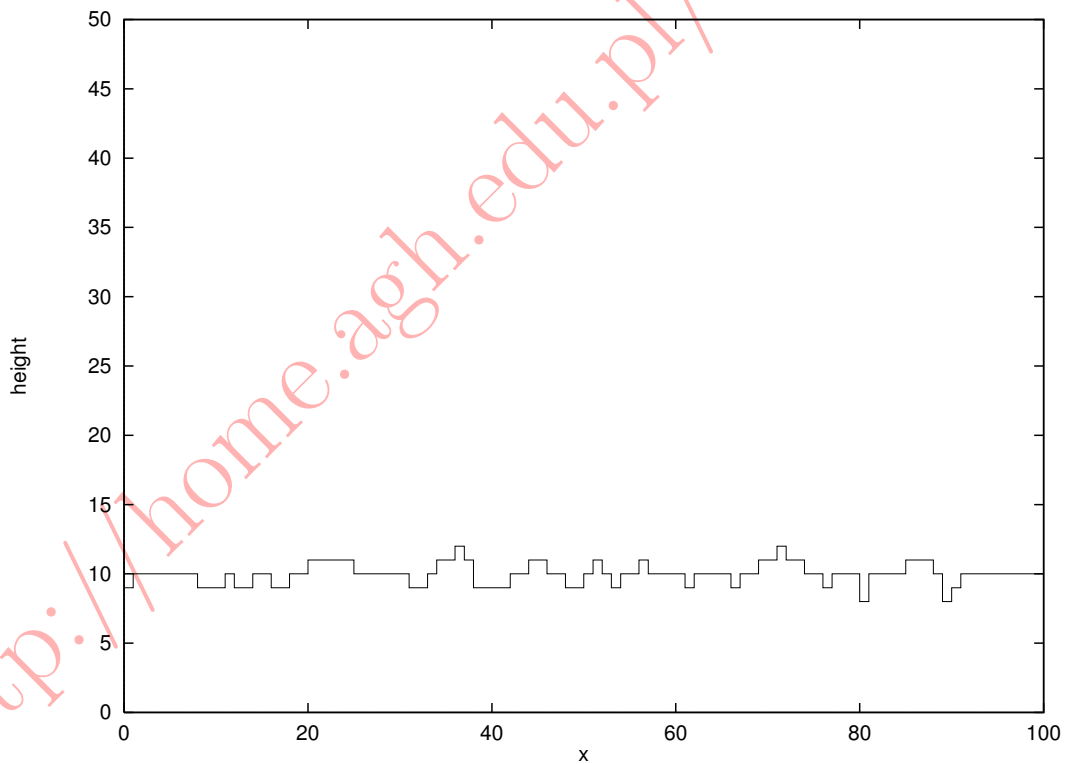
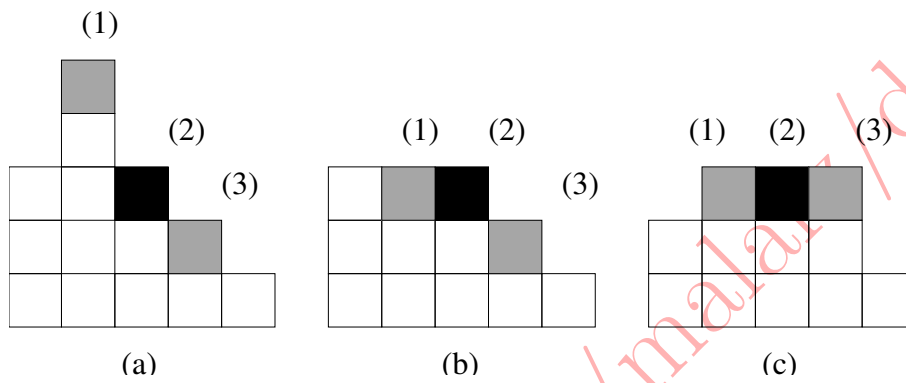
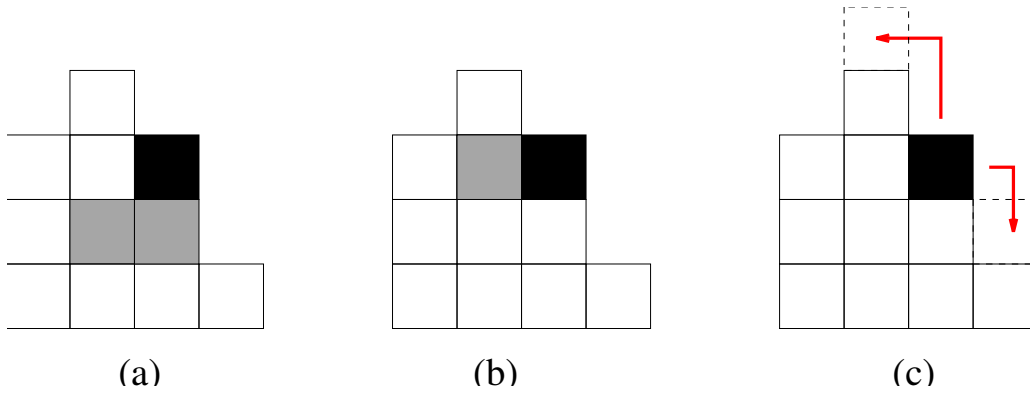
- Relaksacja cząstki do jednego z tych miejsc z prawdopodobieństwem P_i

$$P_i \propto \exp(-E_i/k_B T)$$

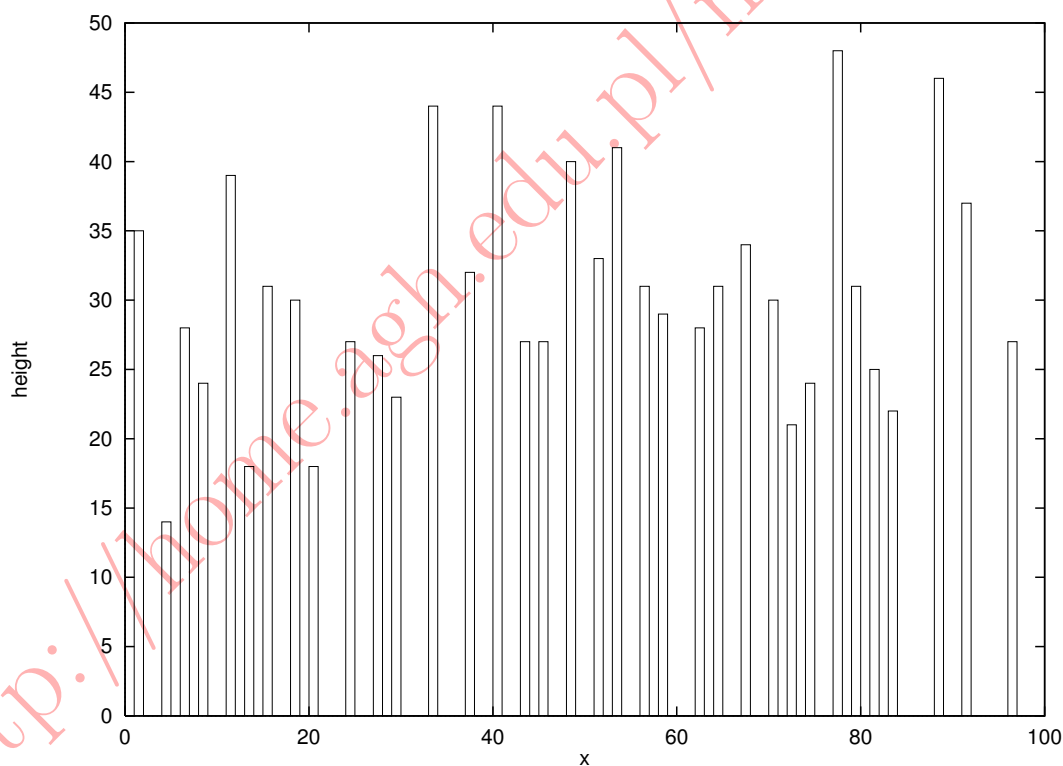
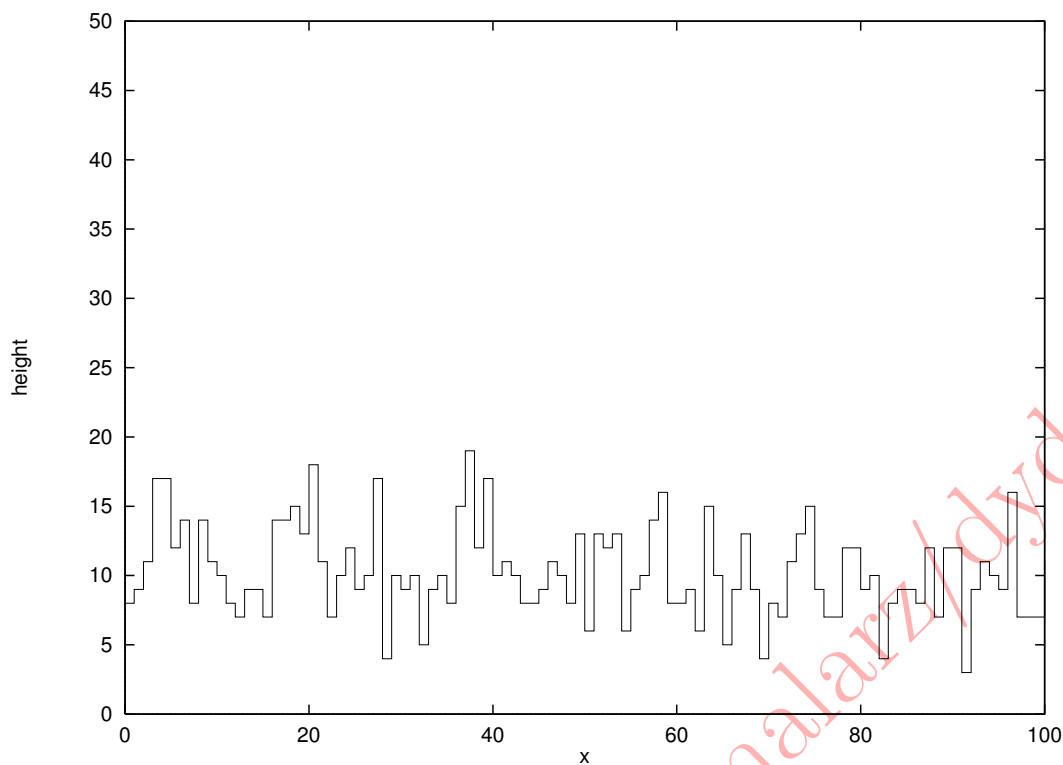
po zredukowaniu go o czynnik

$$\exp(V_x/k_B T) \text{ bądź } \exp(V_y/k_B T),$$

gdzie V jest barierą dyfuzji.



Warstwa powstała z modelu nanoszenia przypadkowego: $J = 0$ bądź $V \rightarrow \infty$:



[K.Malarz and A.Z.Maksymowicz, *Int. J. Mod. Phys. C10* (1999) 645], [K.Malarz and A.Z.Maksymowicz, *Int. J. Mod. Phys. C10* (1999) 659]

13.4.2 Model 2

- startujemy z idealnie gładkiego podłoża,
- co τL^2 kroków deponowana jest nowa porcja $\theta_{\text{dep}} L^2$ cząstek,

Tablica 13.1: Roughness α and growth exponents β dependence on the critical PPLB number z for $\theta_{\text{dep}} = 0.1$ [ML] and $\tau = 1$. The results are average over N_{run} independent simulations (from several thousand for $L = 5$ to a few for $L = 100$).

z	1	2	3	4
α	0.863	0.215	0.1005	0.0718
β	0.357	0.123	0.0405	0.0228

Tablica 13.2: Different measures of the surface morphology anisotropy ε for $L = 1000$, $\theta_{\text{dep}} = 0.01$ [ML], $\theta_{\text{max}} = 0.2$ [ML] and $\tau = 10$.

z_x	1	2	1	3	2	3
z_y	2	1	3	1	3	2
ε_1	0.424	-0.424	0.457	-0.457	0.013	-0.013
ε_2	3.05	0.443	3.32	0.408	1.11	1.04
ε_3	2.61	2.61	2.61	2.61	3.56	3.56

- w każdym kroku — pomiędzy kolejnymi aktami depozycji — cząstki powierzchniowe (będące na szczycie swojej “kolumny”) mogą dokonać jednokrokowej dyfuzji o ile mają mniej niż z_x bądź z_y wytworzonych wiązań *do* warstwy, odpowiednio w kierunku x i y ,
- w przypadku izotropowym tylko jedna liczba z strzeże mobilności cząstek,
- wybór aktywnych cząstek i kierunek jej ruchu jest wybierana losowo,
- cząstki nie mają możliwości wspinania się na wyższe tarasy,
- symulacja trwa do czasu zdeponowania $\theta_{\text{max}}L^2$ cząstek.

[R.Kosturek and K.Malarz, *Physica* **A345** (2005) 538]

13.5 Przykłady zastosowania

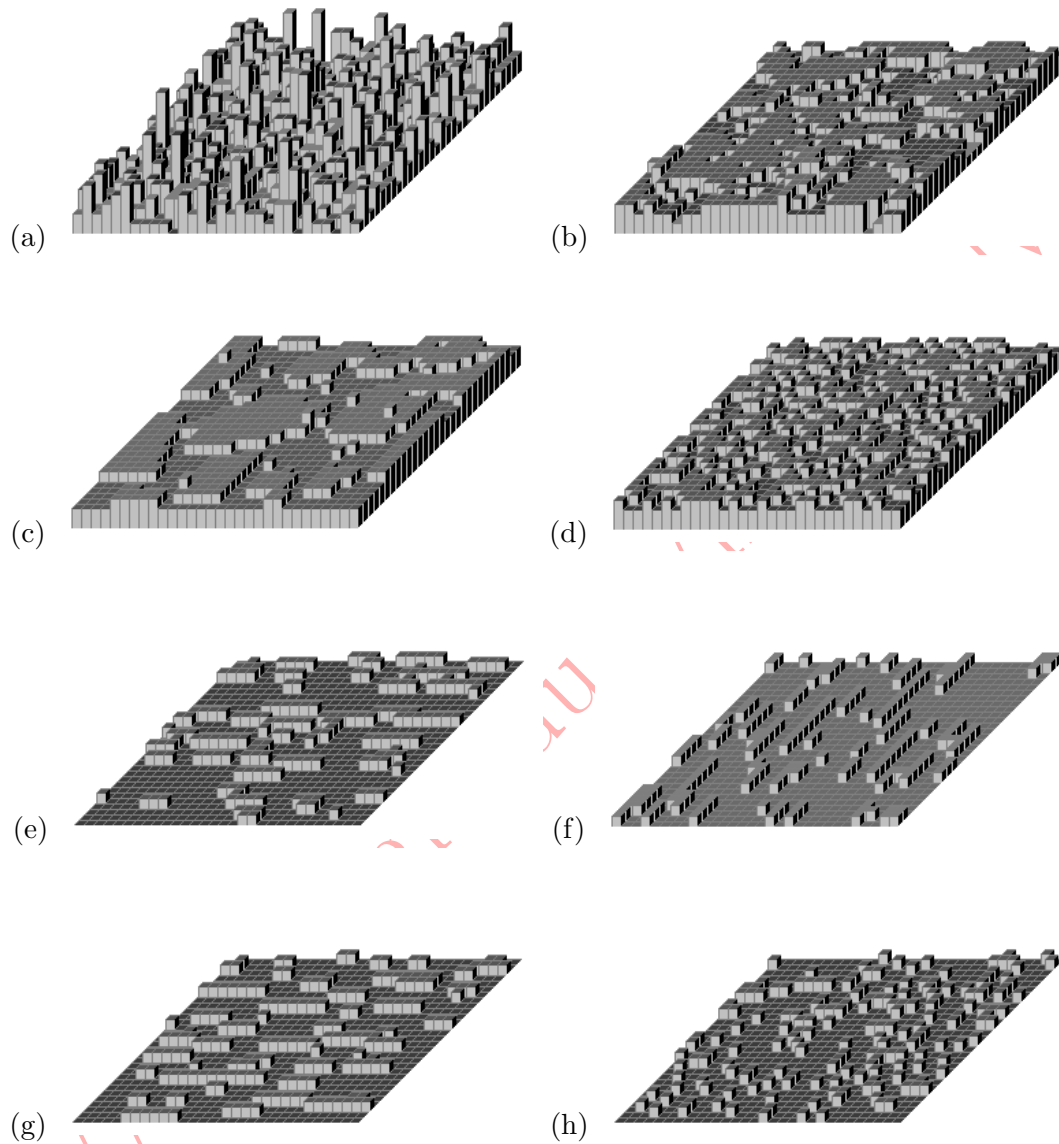
13.5.1 Początkowe stadia wzrostu

- Pokrycie podkładu tylko w kilkunastu procentach $\theta = 0.1$ ML.
- Anizotropia energii wiązań planarnych jak i barier dyfuzji:

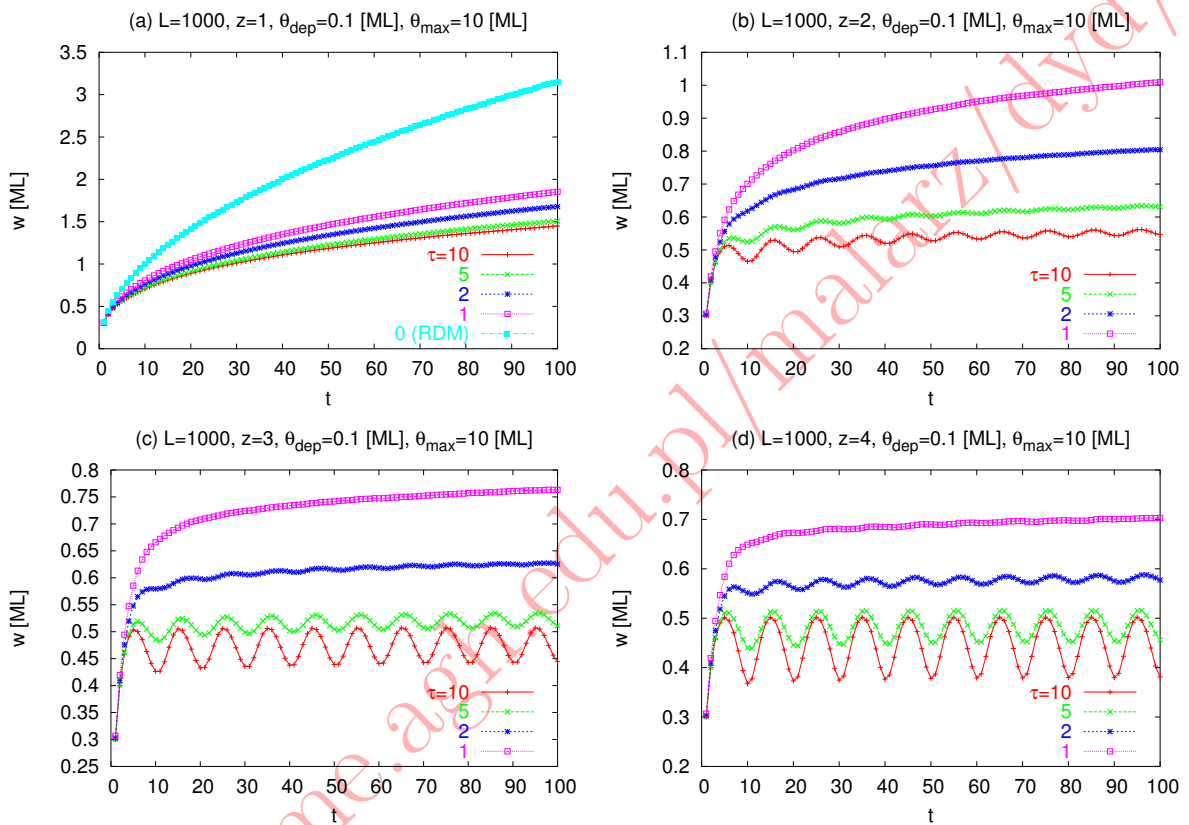
$$\text{Ag: } V_x/V_y = 0.736 \quad E_x/E_y = 9.000$$

$$\text{Cu: } V_x/V_y = 0.793 \quad E_x/E_y = 6.857$$

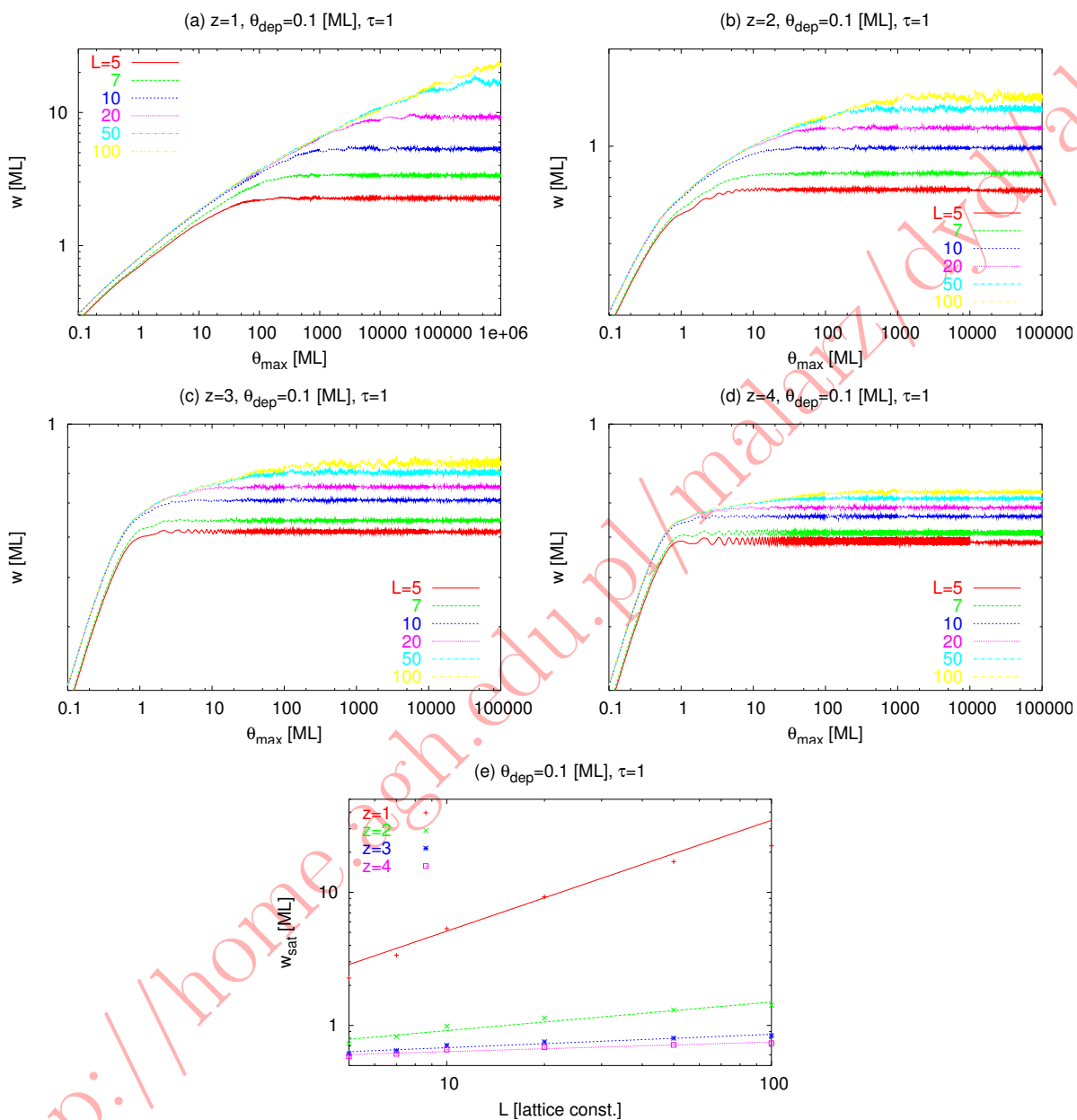
- Zmiana morfologii powierzchni ze wzrostem temperatury podkładu
 - od przypadkowej dystrybucji atomów,
 - poprzez długie jednowymiarowe łańcuchy atomów,
 - do większych, dwuwymiarowych ale nadal anizotropowych klastrów.



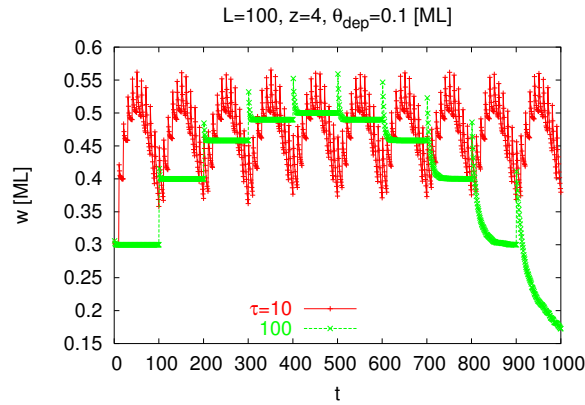
Rysunek 13.1: Samples of film for (a) RDM ($z_x z_y = 0$ and/or $\tau = 0$), isotropic case with (b) $z = 1$ (c) $z = 2$ (d) $z = 4$, and anisotropic cases (e) $z_x = 1, z_y = 2$ (f) $z_x = 2, z_y = 1$ (g) $z_x = 1, z_y = 3$ (h) $z_x = 2, z_y = 3$. Average film height $\theta_{\max} = 2.5$ [ML] for RDM and isotropic cases and $\theta_{\max} = 0.2$ [ML] for anisotropic ones. For all cases the deposition rate was given by $\theta_{\text{dep}} = 0.01$ [ML] and $\tau = 10$. 30×30 -large parts of lattices are presented.



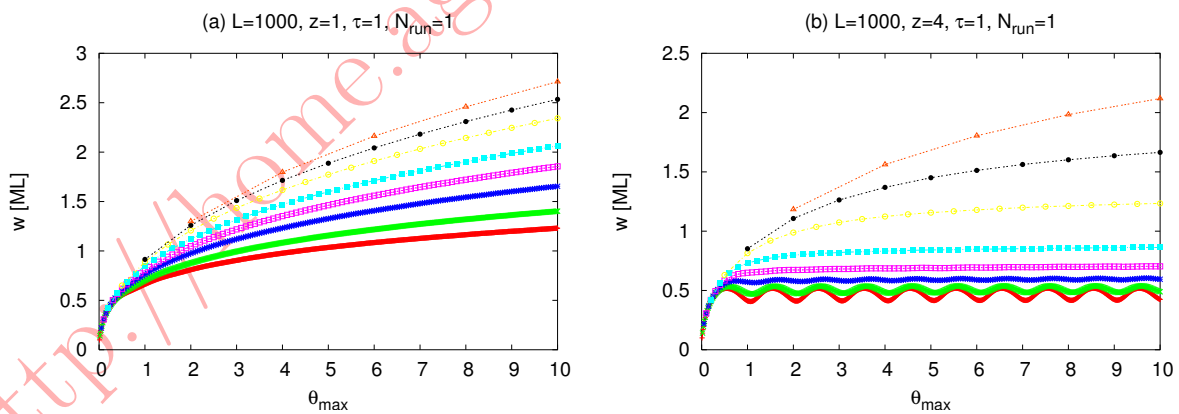
Rysunek 13.2: Time evolution of the surface roughness $w(t)$ for different number of the particle relaxations τ and different critical values of PPLB (a) $z = 1$, (b) $z = 2$, (c) $z = 3$ and (d) $z = 4$ ($L = 10^3$, $\theta_{\text{dep}} = 0.1$ [ML]).



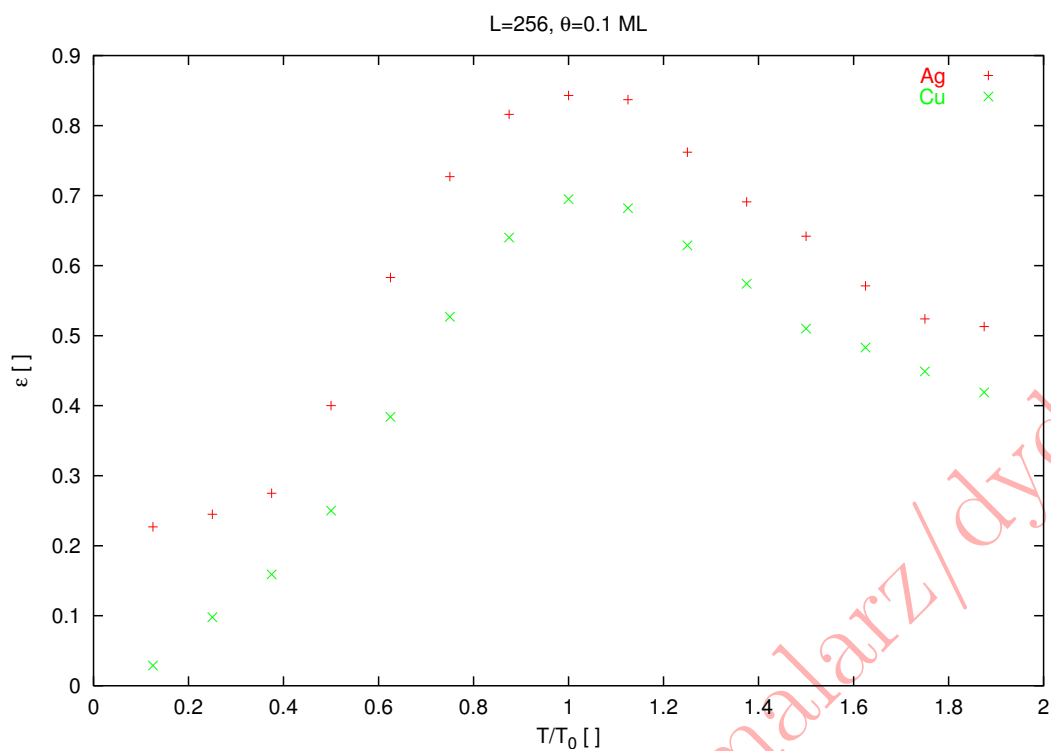
Rysunek 13.3: Dependence of the roughness dynamics $w(t)$ for (a) $z = 1$, (b) $z = 2$, (c) $z = 3$, (d) $z = 4$ and (e) the saturation level w_{sat} on linear lattice size L for $\theta_{\text{dep}} = 0.1$ [ML] and $\tau = 1$.



Rysunek 13.4: Time evolution of the surface roughness $w(t)$ for $L = 100$, $z = 4$, $\theta_{\text{dep}} = 0.1$ [ML] and different values of τ .



Rysunek 13.5: Dependence of the roughness dynamics $w(t)$ on θ_{dep} for $L = 1000$, $\tau = 1$ and (a) $z = 1$ (b) $z = 4$. $\theta_{\text{dep}} = 0.01, 0.02, 0.05, 0.1, 0.2, 0.5, 1.0, 2.0$ from bottom to top.



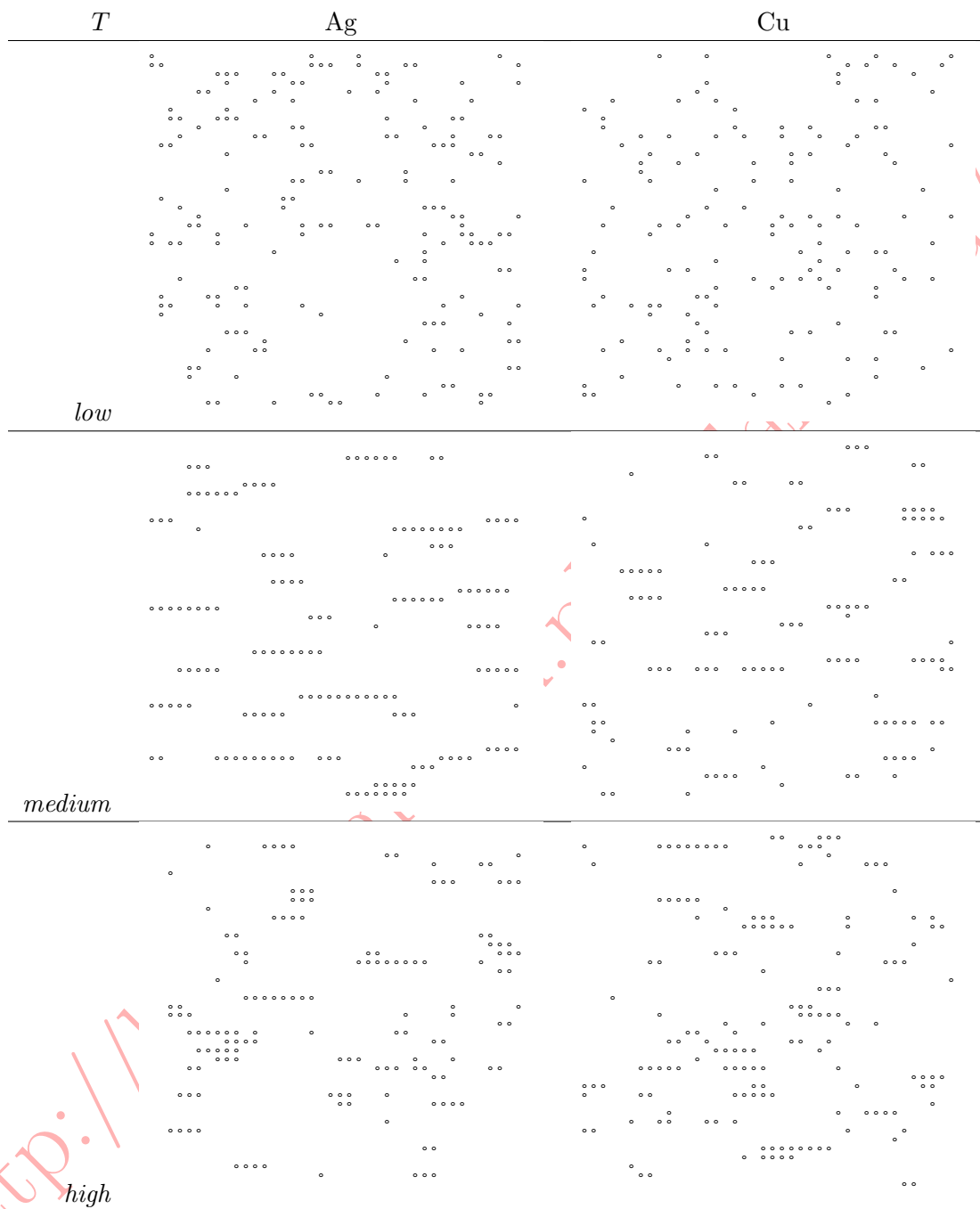
[K.Malarz, *Int. J. Mod. Phys. C*11 (2000) 1561]

13.5.2 Samoafiniczność powierzchni

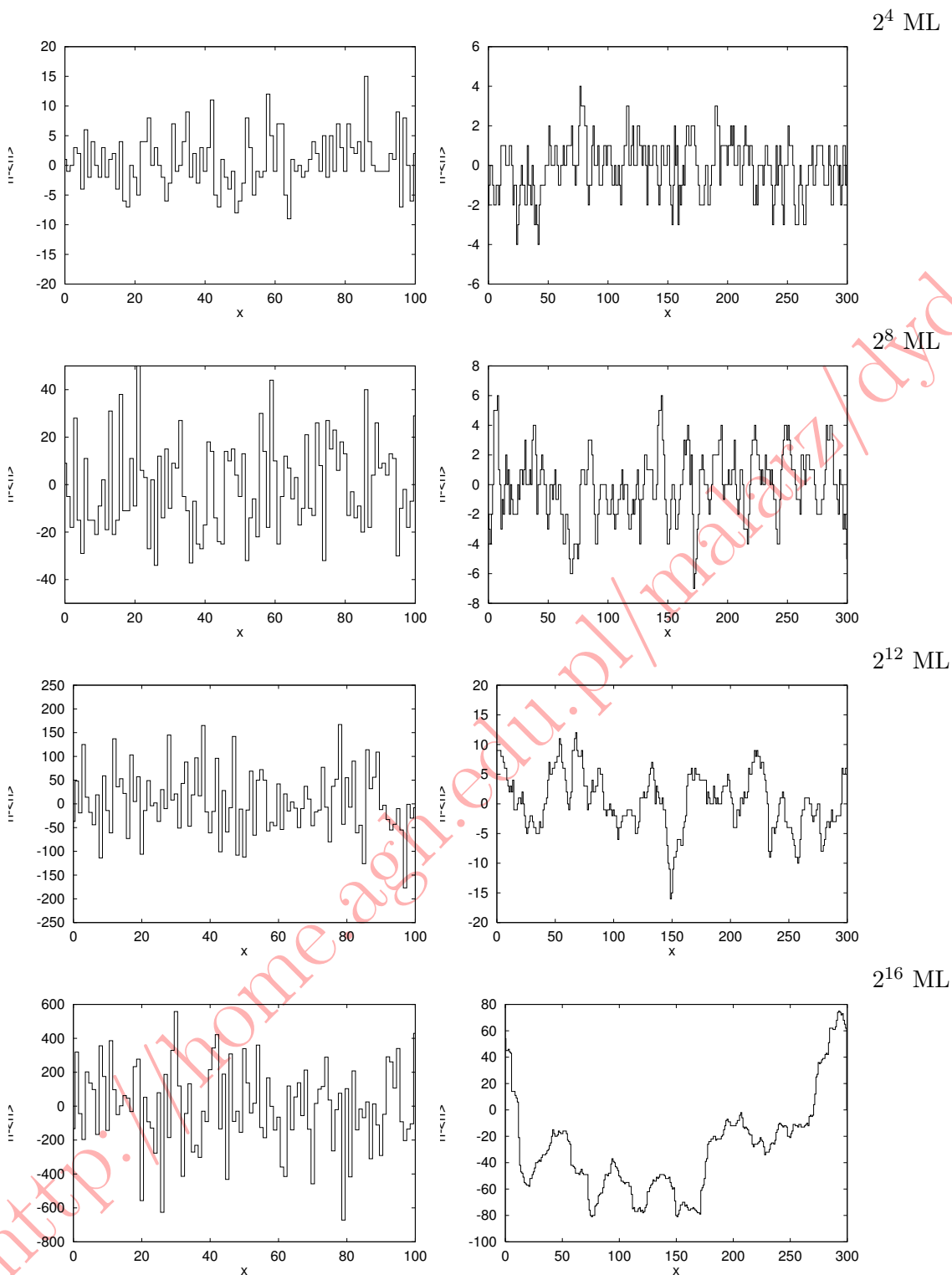
- $J \rightarrow -\infty$
- Zależność hiperskalująca:

$$2\alpha = \frac{\alpha}{\beta} - D + 1$$
- poszukiwanie wykładników poprzez “nakładanie” wykresów.

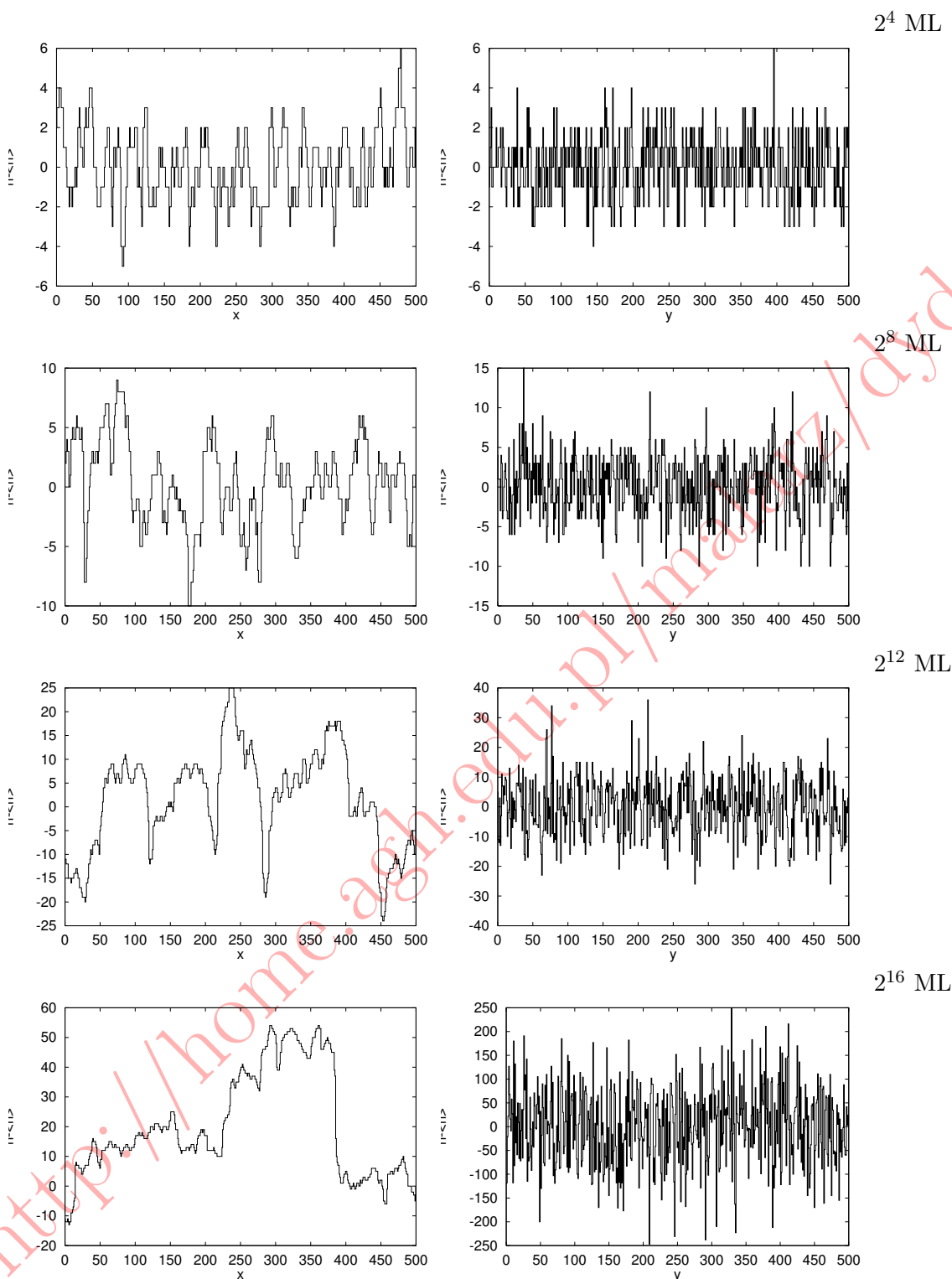
[K.Malarz, *Ph.D. thesis*, WFiTJ AGH, 2000].



Rysunek 13.6: Morfologia powierzchni dla różnych temperatur podkładu.



Rysunek 13.7: Przekrój poprzeczny (2+1)-D warstwy dla MNP (lewa kolumna, $J = S = V = 0$) i po dodatkowej jednokrokowej, izotropowej relaksacji (prawa kolumna, $J = -1, V = 1, S = 0$) dla części siatki o rozmiarze 512×512 i różnych średnich grubości warstwy θ .



Rysunek 13.8: Przekrój poprzeczny warstwy wzdłuż osi x i y dla warstwy (2+1)-D przy jednokrokowej anizotropowej relaksacji cząstek dla różnych grubości warstwy θ . $J_x = -10$, $V_x = 0$, $J_y = 0$, $V_y = 10$.

Opowieść 14

Problemy transportu

Królowa Morza nawet przez innych bogów uznawana była za dość tępą. Jednak nieobca jej była pewna logika. Ta logika kierowała jej myślami, gdy bogini sunęła poniżej wzburzonych sztormem fal. Mała łódź to kuszący cel... ale niedaleko dostrzegła większy, pełen ludzi, żeglujący prosto w burzę.

To już było coś...

Królowa Morza miała maksymalny okres skupienia uwagi porównywalny z cebulkową *bahji*.

Ogólnie rzecz biorąc, sama dbała o swoje ofiary. I wierzyła w duże liczby.

[Terry Pratchett, *Pomniejsze bóstwa*, Prószyński i S-ka (Warszawa 2001)]

-
- Skomplikowane na pozór przepływy cieczy, wiry, turbulencje są tylko makroskopowym wynikiem oddziaływanie ze sobą dużej ilości cząstek zgodnie z newtonowskimi równaniami ruchu.
 - Symulacje metodami dynamiki molekularnej dla takiego układu nie są jednak obliczalne w praktyce (10^7 cząstek przez kilka pikosekund) — a więc bezużyteczne.
 - Do tego metody badania oparte na technice “kul bilardowych” są niezwykle czułe na warunki początkowe które
 - nigdy nie są znane z dostateczną dokładnością,
 - w symulacji z konieczności zawężamy do dyskretnych wartości (błędy zaokrąglenia!).
 - Poszukiwanie modeli mogących zastąpić rozbudowane równania Naviera–Stokesa.

14.1 Hydrodynamika

Sztuczny zestaw reguł dla zderzeń i rozchodzenia się:

- identycznych cząstek,
- ruchu po wyznaczonej regularnej siatce,
- w dyskretnym czasie,
- z tylko jedną z niewielkiej ilości dostępnych prędkości.

14.1.1 Model HPP

Model 2-D przepływu

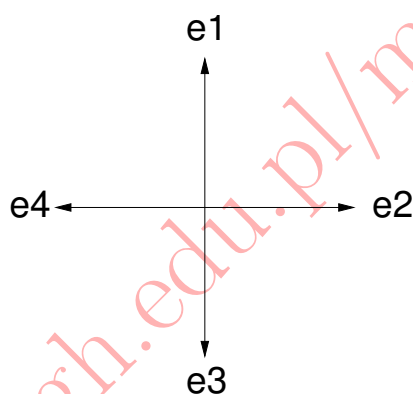
- kwadratowa sieć = miejsca, w których mogą znajdować się cząstki
- każda komórka (i, j) zajęta jest przez co najwyżej cztery “cząstki” których prędkości muszą wskazywać *różne* kierunki “geograficzne” (N,S,W,E)
- wartość prędkości $v = 1$
- jest więc $2^4 = 16$ możliwych “stanów” komórki: (NSWE) = (0000), \dots , (1111)

Rozpraszanie:

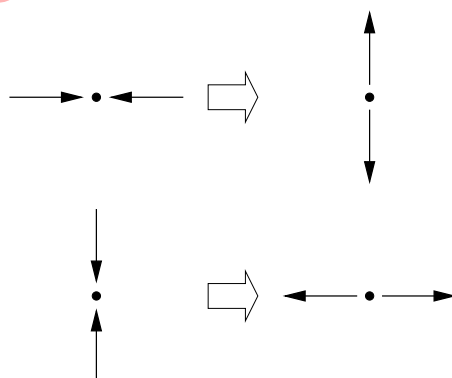
- jeśli po przesunięciu cząstki w komórce są co najmniej dwie — zmieniamy ich stan (prędkości) zgodnie z zasadami gry
- w przeciwnym wypadku nie zmieniamy prędkości (czytaj: kierunku i zwrotu) cząstki

Warunki brzegowe:

- sztywne: zmień prędkości przy dojściu do brzegu naczynia
- okresowe: nic nie rób

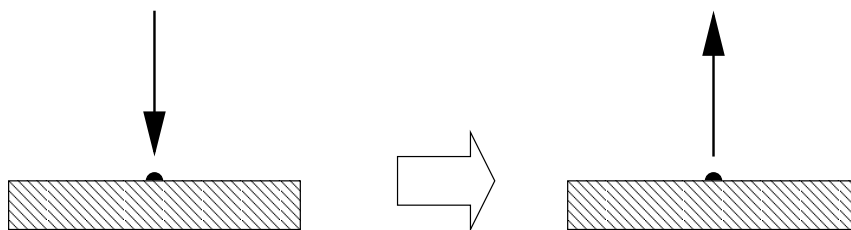


Rysunek 14.1: Siatka modelu HPP



Rysunek 14.2: Model HPP – niektóre reguły zderzeń. W pozostałych przypadkach, tj. gdy na wejściu mamy 1, 3 lub 4 cząstki, po zderzeniu wszystkie zachowują swój wcześniejszy kierunek ruchu.

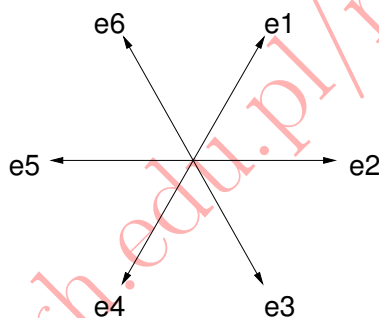
[J.Hardy, Y.Pomeau, O.de Pazzis, *J. Math Phys.* **14** (1973) 1746], [J.Hardy, Y.Pomeau, O.de Pazzis, *Phys. Rev.* **A13** (1976) 1949], [M.Wołoszyn, *M.Sc. thesis*, WFiTJ AGH, Kraków 2000]



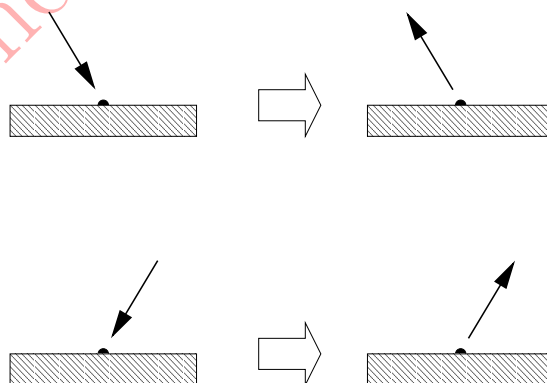
Rysunek 14.3: Model HPP – realizacja warunków brzegowych

14.1.2 Model FHP

- zmiana sieci kwadratowej na trójkątną
- W danym węźle może znajdować się *dokładnie* jedna cząstka o danym wektorze prędkości (może więc ich być w węźle maksymalnie sześć)
- sieć trójkątna jest najprostszą siecią zapewniającą izotropię modelu
- taka mikrodynamika pozwoliła na **odtworzenie** równań Naviera–Stokesa
- przy założeniu, że w wyniku zderzenia musi być zachowany zarówno pęd jak i masa cząstek łatwo wyobrazić sobie możliwe skutki kolizji.

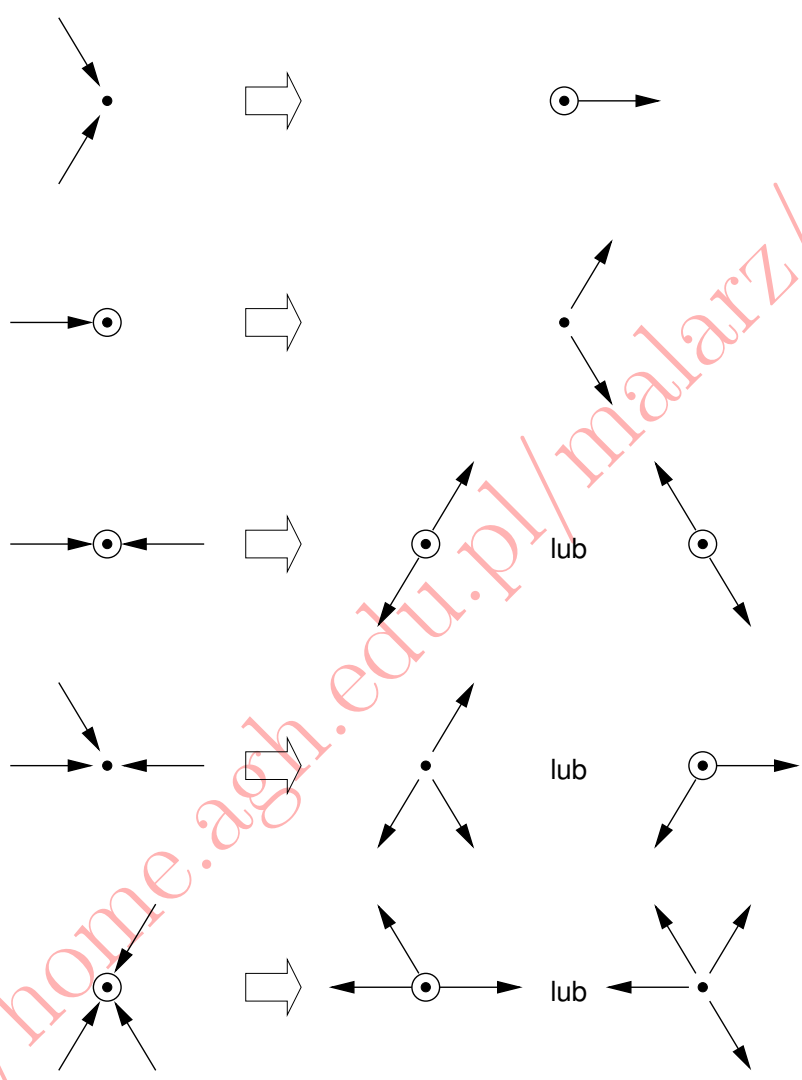


Rysunek 14.4: Siatka modelu FHP



Rysunek 14.5: Model FHP – realizacja warunków brzegowych

[U.Frisch, B.Hasslacher, Y.Pomeau, *Phys. Rev. Lett.* **56** (1986) 1505], [J.M.Buick, *Ph.D. thesis*, The University of Edinburgh, 1997], [M.Wołoszyn, *M.Sc. thesis*, WFiTJ AGH, Kraków 2000]



Rysunek 14.6: Reguły zderzeń dla modelu FHP z cząstkami spoczywającymi

14.1.3 Gaz siatkowy Boltzmanna

- ponieważ w każdym punkcie przy zderzeniu każda z dyskretnych prędkości może przybrać tylko co najwyżej jedną “cząstka” kolejne ulepszenie modelu przynosi założenie, że każda komórka jest zajęta cząstką tylko w pewnym stopniu
- cząsteczki w węzłach sieci (np. kwadratowej czy trójkątnej)
- zbiór liczb rzeczywistych reprezentujących jednocząstkowe funkcje rozkładu dla wszystkich możliwych (dyskretnych) prędkości (np. wektor 9D dla przestrzeni 2D, 15D dla 3D sieci kubicznej)
- ewolucja zgodnie z równaniem Boltzmanna dla gazu siatkowego:

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) + \Omega(f(\vec{x}, t)),$$

gdzie:

- $f_i(\vec{x}, t)$ — jednocząstkowa funkcja rozkładu: ilość cząstek w punkcie \vec{x} w chwili t poruszających się wzdłuż kierunku \vec{e}_i (i numeruje dozwolone kierunki ruchu — w tym $i = 0$ dla cząstek nie poruszających się).
- $\Omega_i = \Omega_i(f_i(\vec{x}, t))$ — lokalny operator zderzenia:

$$\Omega_i(f(\vec{x}, t)) = -\frac{f_i(\vec{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t)}{\tau}.$$

- f^{eq} — rozkład równowagowy.
- τ — czas relaksacji.

- np. dla sieci heksagonalnej rozkład równowagowy ma postać:

$$f_i^{\text{eq}} = \begin{cases} \rho \left(\frac{1}{12} + \frac{1}{3} \vec{e}_i \cdot \vec{v} + \frac{2}{3} (\vec{e}_i \cdot \vec{x})^2 - \frac{1}{6} v^2 \right) & \text{dla } i = 1, \dots, 6, \\ \rho \left(\frac{1}{2} - v^2 \right) & \text{dla } i = 0, \end{cases}$$

gdzie

$$\rho = \sum_i f_i(\vec{x}, t), \quad \text{zaś} \quad \rho \vec{v} = \sum_i f_i(\vec{r}, t) \vec{e}_i.$$

14.1.4 Inne przykłady zastosowań

- symulacje przepływów.
- symulacje rozdziału faz.
- niestabilności Rayleigha–Taylora.

14.1.5 Symulacja przepływów lepkich

- na cząstki działa siła grawitacji powodująca ruch w dół
- cząstki z danej komórki przesuwały się w dół gdy suma ilości cząstek z ośmiu sąsiadów i z danej komórki przekracza zadaną wartość progową

- z czterech wierszy komórek poniżej danej komórki z obszaru o kształcie zbliżonym do kropli wybiera się komórki w całości należące do tego obszaru
- dla każdej cząstki należącej do komórki “uprawnionej” do ruchu wykonuje się losowanie liczby, która wskazuje czy cząstka ma się przemieścić do którejś z komórek znajdujących się poniżej, czy do komórek poniżej po prawej lub lewej stronie
- prawdopodobieństwo tego gdzie trafi cząstka jest największe w tej komórce gdzie rzeczywista kropla byłaby najgrubsza i maleje z oddalaniem się od tej komórki
- zmieniając wartość progową w bardzo prosty sposób można pokazać jak tworzą się krople w zależności od temperatury i kiedy krople przestają się tworzyć — osiągnięta została temperatura krzepnięcia, lepkość osiągnęła wartość maksymalną a ciecz przymarzła do szyby.
- kiedy suma cząstek w komórce i w komórkach ościennych nie przekracza wartości progowej ustala się zasady, które pozwalają na zbieranie się większej ilości cząstek w jednej komórce co powoduje wzrost ich ilości na tyle duży, że wartość progowa zostaje przekroczona i może utworzyć się kropla — symulacja najlepiej przypomina rzeczywistość gdy bierze się pod uwagę komórkę wraz z jej trzema prawymi sąsiadami
- w tej czwórce znajdujemy komórkę z największą liczbą cząstek i do niej przesuwamy cząstki z pozostałych trzech komórek

[M.Puła, *Zeszyty Stud. Tow. Nauk.* **2** (2003) 242]

14.2 Korki

- samochody ($j = 1, \dots, N$)
- prędkości ($v_j = 0, \dots, v_{\max}$)
- każda komórka “drogi” może być pusta bądź zajęta przez *dokładnie jeden* pojazd

14.2.1 Podstawowy model jednowymiarowy

Najprostszy automat komórkowy, który symuluje przepływ typu ruchu pojazdów na jednokierunkowej i jednopasmowej drodze (lub też przepływ cząstek w rurze o średnicy równej rozmiarowi cząstki) należy do klasy elementarnych automatów zdefiniowanych przez Wolframa i odpowiada regule numer 184.

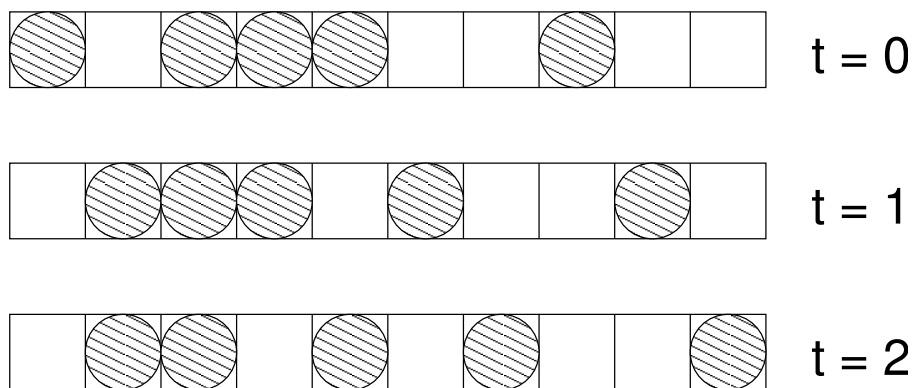
Droga, po której poruszają się cząstki (samochody) reprezentowana jest przez łańcuch komórek. Każda z nich może przyjmować jeden z dwóch stanów: pusta lub zajęta. Wszystkie obiekty poruszają się w jedną stronę, na przykład w prawo, zgodnie z następującymi zasadami:

- w każdym kroku cząstka może zostać przesunięta o jedno miejsce lub pozostać na poprzedniej pozycji
- przesunięcie następuje wtedy, gdy komórka docelowa jest pusta
- wszystkie pola są uaktualniane jednocześnie

Zakładając, że ruch odbywa się w prawą stronę, można napisać

$$n_i(t+1) = n_{i-1}(t) [1 - n_i(t)] + n_i(t)n_{i+1}(t), \quad (14.1)$$

gdzie: $n_i(t)$ — stan i -tej komórki w chwili t : wartość 0 odpowiada pustej komórce, 1 — zajętej [B.Chopard, P.O.Luthi, P.A.Queloz, *J. Phys. A* **29** (1996) 2325], [M.Wołoszyn, *M.Sc. thesis*, WFiTJ AGH, Kraków 2000]



Rysunek 14.7: Ilustracja przepływu opisywanego elementarnym automatem Wolframa nr 184.

14.2.2 Model Nagela–Schreckenberga

przyspieszanie:

$$v_j(t) \rightarrow v_j(t + 1/3) = \min\{v_j(t) + 1, v_{\max}\}$$

zwalnianie:

$$v_j(t + 1/3) \rightarrow v_j(t + 2/3) = \begin{cases} d_j(t) & \Leftrightarrow v_j(t + 1/3) > d_j(t), \\ v_j(t + 1/3) & \Leftrightarrow v_j(t + 1/3) \leq d_j(t), \end{cases}$$

gdzie $d_j(t)$ jest liczbą pustych komórek przed samochodem j w chwili t

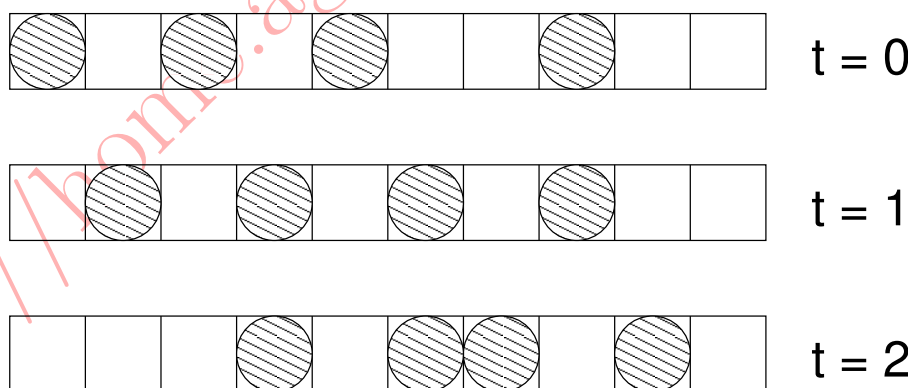
losowanie:

$$v_j(t + 2/3) \rightarrow v_j(t + 1) = \max\{0, v_j(t + 2/3) - 1\}$$

z prawdopodobieństwem p

ruch: j -ty samochód rusza się $v_j(t + 1)$ komórek do przodu

jeśli $\Delta t = 1$ [s] to “długość” komórki drogi wynosi ok. $\Delta x \approx 7.5$ [m]

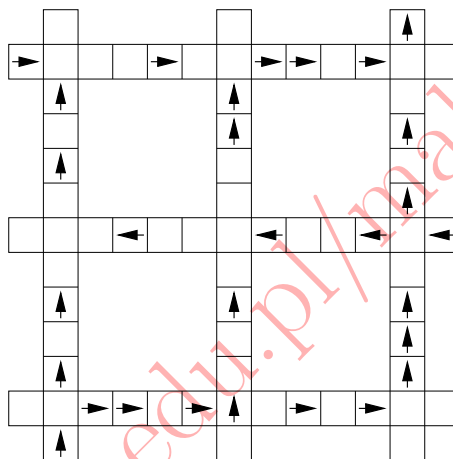


Rysunek 14.8: Przykładowy przepływ opisywany modelem Nagela–Schreckenberga

[K.Nagel, M.Schreckenberg, J. Phys. **12** (1992) 2221], [M.Wołoszyn, M.Sc. thesis, WFiTJ AGH, Kraków 2000]

14.2.3 Model Chowdhuryego–Schadschneidera

- sieć ulic jako kwadratowa siatka $N \times N$ z periodycznymi warunkami brzegowymi
- ulice są równoległe do osi X i Y i pozwalają na ruch w kierunku N i E
- na każdym skrzyżowaniu (węzle sieci) sygnalizacja świetlna
- każdy odcinek między węzłami jest podzielony na D komórek. D wprowadza nową skalę długości
- rozmiar komórki może być interpretowany jako typowa długość pojazdów: komórka jest więc pełna bądź pusta (jeden pojazd na komórkę)
- sygnalizacja jest zsynchronizowana w ten sposób, że jednocześnie ruch w *tylko* jednym kierunku jest możliwy
- światła zmieniają się co T jednostek czasu. T wprowadza nową skalę czasu



- zasady gry $t \rightarrow t + 1$:

przyspieszanie: jeśli $v_n < v_{\max}$ to $v_n \rightarrow v_n + 1$

zwalnianie: d_n do następnego pojazdu, s_n do następnego skrzyżowania:

– czerwone: jeśli $\min(d_n, s_n) \leq v_n$ to $v_n \rightarrow \min(d_n, s_n) - 1$

– zielone:

* $d_n < s_n$: $v_n \rightarrow d_n - 1$ jeśli $d_n \leq v_n$

* $d_n \geq s_n$: $v_n \rightarrow \min(v_n, d_n - 1)$ o ile $\min(v_n, d_n - 1) \times \tau > s_n$, gdzie τ jest liczbą kroków jakie pozostały do zmiany świateł na czerwone

losowanie: jeśli $v_n > 0$ to $v_n \rightarrow v_n - 1$ z prawdopodobieństwem $0 \leq p \leq 1$

ruch: każdy pojazd porusza się o v_n komórek w kierunku swojego ruchu, tj:

– $x_n \rightarrow x_n + v_n$ dla poruszających się na E

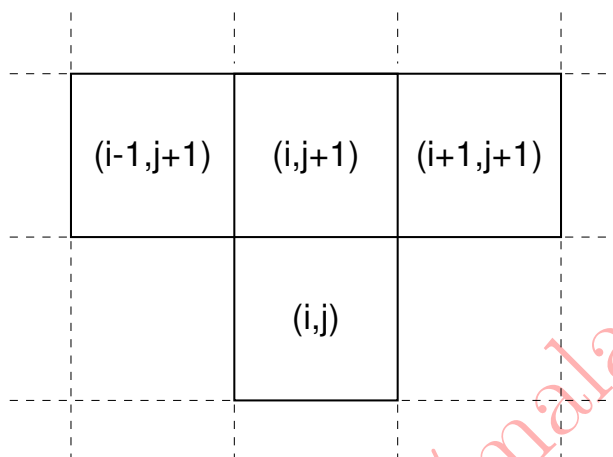
– i $y_n \rightarrow y_n + v_n$ dla poruszających się na N

[D.Chowdhury, A.Schadschneider, cond-mat/9810099]

14.3 Materiały granulowane

Symulacja granulatu przemieszczającego się w dół pod wpływem grawitacji, na przykład wysypującego się przez otwór w jakimś zbiorniku (silosie), jest możliwa przy użyciu prostego automatu komórkowego. W przypadku dwuwymiarowym używana jest prostokątna sieć komórek, z których każda może albo być pusta, albo zajęta przez ziarno.

Realizacja ewolucji takiego automatu polega na sprawdzaniu stanu komórek. Jeśli komórka (i, j) jest pusta, to może się do niej przemieścić ziarno, które znajduje się w którejś z komórek $(i - 1, j + 1)$, $(i, j + 1)$ lub $(i + 1, j + 1)$.



Wybór jednej z nich dokonywany jest losowo, zwykle z równym prawdopodobieństwem, aczkolwiek preferując komórkę znajdującą się bezpośrednio powyżej lub dobierając odpowiednio wysokość i szerokość komórki można obrazować zachowanie różnych granulatów charakteryzujących się odmiennymi kątami krytycznymi, powyżej których następuje obsypywanie się zbocza sterty materiału.

[*Disorder and Granular Media*, edited by: D. Bideau, A. Hansen (North-Holland, Amsterdam 1993).]

Zalety:

- duża ilość cząstek
- nieograniczone odkształcenia
- łatwa implementacja
- mała ilość czasu komputera wymagana do obliczeń
- daje wgląd do głównych cech fizycznych materiału na poziomie mikro i makro

Wady:

- model czysto kinematyczny (dynamika przepływu nie jest uwzględniona)

Rodzaje przepływów silosowych:

- przepływ kominowy
- przepływ masowy

Rodzaje wkładek silosowych:

- wewnętrzny lejek

- klin
- nachylone rury
- rura perforowana

Parametry modelu:

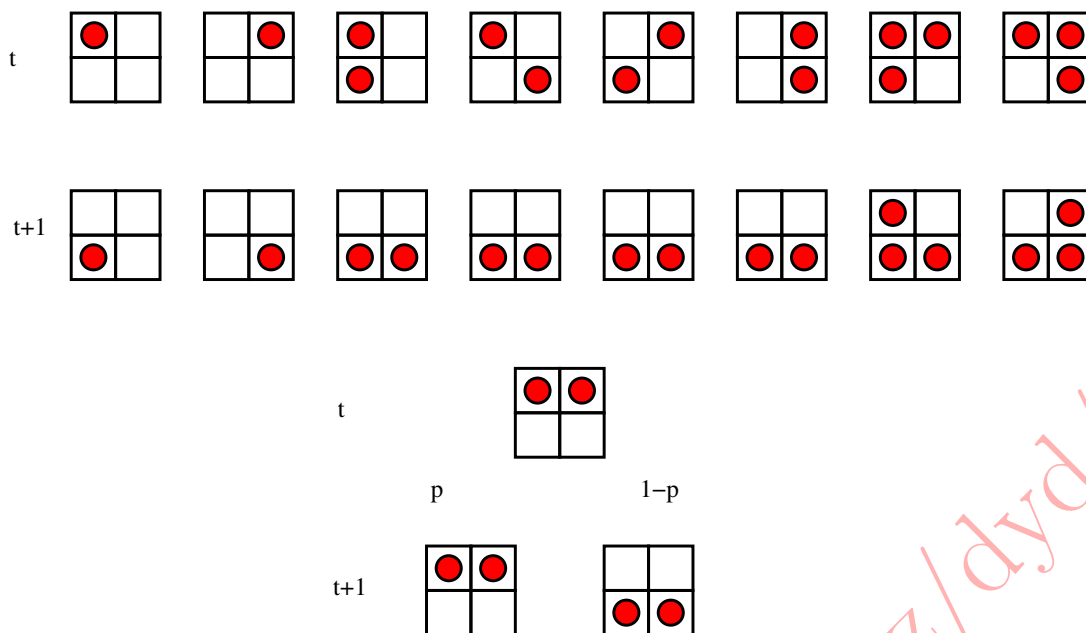
- rozmiar otworu wylotowego w silosie (przepływ masowy lub kominowy)
- ilość komórek
- położenie otworu wylotowego
- kształt silosu
- schematy migracji
- wagi prawdopodobieństwa przepływu (symetryczne, niesymetryczne)
- przepływ zakłócony lub niezakłócony
- prędkość wypływu (kontrolowana, niekontrolowana)
- szorstkość ścian
- rozluźnienie materiału

Podsumowanie:

- automaty komórkowe są modelami czysto kinematycznymi
- mimo swojej prostoty mogą być stosowane do symulacji przepływów silosowych.
- wyniki są w dużym stopniu zależne od parametrów (wag prawdopodobieństwa, schematów przepływu, ilości komórek)
- wagi mogą być dobrane na podstawie wcześniej wykonanych doświadczeń

[J.Kozicki, J.Teichman, *Materiały 37. Zjazdu Fizyków Polskich* (2003) 129]

	ul	ur		
	ll	lr		



Powyższe reguły daje się zapisać algebraicznie zakładając wartości $s \in \{0, 1\}$:

$$s_{ul}(t+1) = s_{ul}s_{ll}[s_{lr} + (1 - s_{lr})s_{ur}] \quad (14.2a)$$

$$s_{ur}(t+1) = s_{ur}s_{lr}[s_{ll} + (1 - s_{ll})s_{ul}] \quad (14.2b)$$

$$s_{ll}(t+1) = s_{ll} + (1 - s_{ll})[s_{ul} + (1 - s_{ul})s_{ur}s_{lr}] \quad (14.2c)$$

$$s_{lr}(t+1) = s_{lr} + (1 - s_{lr})[s_{ur} + (1 - s_{ur})s_{ul}s_{ll}] \quad (14.2d)$$

Pozostaje uwzględnić efekt podłoża po upadnięciu na który cząstki już nie spadają dalej. $g_{ij} = 1$ oznacza węzeł podłoża, z którego cząstka już się nie może wydostać.

Cząstka może opuścić górną część otoczenia Margolusa, tylko jeśli nie jest to część podłoża.

$$s_{ul}(t+1) = g_{ul}s_{ul} + (1 - g_{ul})s_{ul}s_{ll}[s_{lr} + (1 - s_{lr})s_{ur}] \quad (14.3a)$$

$$s_{ur}(t+1) = g_{ur}s_{ur} + (1 - g_{ur})s_{ur}s_{lr}[s_{ll} + (1 - s_{ll})s_{ul}] \quad (14.3b)$$

Cząstka z górnej części otoczenia Margolusa jest niewidoczna z niższych części jeśli stoi ona na podłożu:

$$s_{ll}(t+1) = s_{ll} + (1 - s_{ll})[s_{ul}(1 - g_{ul}) + (1 - s_{ul})s_{ur}(1 - g_{ur})s_{lr}] \quad (14.3c)$$

$$s_{lr}(t+1) = s_{lr} + (1 - s_{lr})[s_{ur}(1 - g_{ur}) + (1 - s_{ur})s_{ul}(1 - g_{ul})s_{ll}] \quad (14.3d)$$

[B.Chopard, M.Droz, *Cellular Automata Modeling of Physical Systems*, Cambridge UP, 2005.

Opowieść 15

Pożary lasów, ekspresy do kawy, dzuma i fraktale

To motyl burz.

Skrzydółka ma nieco bardziej wystrzępione niż u pospolitych motyli. W rzeczywistości, dzięki fraktalnej naturze wszechświata, oznacza to, że te postrzępione brzegi są nieskończone — tak jak nieskończona jest dowolna linia brzegowa, mierzona z ostateczną, mikroskopową dokładnością. A jeśli nawet nie, to przynajmniej jest tak bliska nieskończonej, że w pogodne dni można stamtąd zobaczyć samą Nieskończoność.

[...]

Kwantowy motyl pogody (*Papilio tempestae*) ma całkiem zwyczajny żółty kolor, choć mandelbrotowskie desenie na skrzydełkach powinny wzbudzić zainteresowanie. Jego najbardziej niezwykłą cechą jest zdolność wpływania na pogodę.

[Terry Pratchett, *Ciekawe czasy*, Prószyński i S-ka (Warszawa 2003)]

15.1 Pożary lasów

15.1.1 Klasyczne podejście bazujące na technice AK

W modelu Drossela i Schwabla na sieci kwadratowej przy założeniu otoczenia von Neumanna bądź Moore'a stany pojedynczej komórki odpowiadają przebywaniu w niej trawy, drzewa bądź płonącego drzewa. Reguła automatu (aplikowana synchronicznie do wszystkich komórek) dana jest algorytmem:

1. w komórce porosłej trawą kiełkuje drzewo z prawdopodobieństwem p ,
2. drzewo nie mające w swoim otoczeniu płonącego drzewa zaczyna samoistnie płonąć (np. wskutek trafienia piorunem albo samozapłonu) z prawdopodobieństwem f ,
3. drzewo mające w swoim otoczeniu płonące drzewo zajmuje się od niego,
4. płonące drzewo wypala się, zamieniając w komórkę porosłą trawą.

Parametrem kontrolnym modelu jest stosunek p/f informujący o średniej ilości kiełkujących drzew pomiędzy dwoma kolejnymi uderzeniami pioruna.

B. Drossel i F. Schwabl. „Self-organized critical forest-fire model”. *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992), 1629–1632

Las płonie szybko a rośnie wolno ($f \ll p$), albo można sobie wyobrazić modyfikację modelu, w której pożar rozprzestrzenia się tylko po koronach drzew — płoną tylko wysokie, tzn. stare.

Można też uwzględniać kierunek wiatru, nachylenie stoku, wilgotność drzew, etc.

15.1.2 Czy pożary lasów da się przewidzieć?

Efektywność propagacji pożaru jest uzależniona od obecności klastrow drzew. Przez klastery należy rozumieć spójny zbiór komórek będących w tym samym stanie. Spójność oznacza, że od każdej do każdej komórki w klastrze da się „dojść” przechodząc tylko przez inne komórki tego klastra a w jednym kroku wykonuje się ruch w obrębie przyjętego otoczenia. Czy istnieje taka gęstość drzew p_c , przy której jeden piorun jest w stanie podpalić „prawie cały” las?

15.1.2.1 Perkolacja, czyli naukowe spojrzenie na proces parzenia kawy

- Sieć.
- Każdy węzeł jest zajęty z prawdopodobieństwem p bądź pusty z prawdopodobieństwem $1 - p$.
- Zajęte węzły należą do jednego klastra jeśli istnieje możliwość połączenia ich linią łamaną przechodzącą przez zajęte węzły.
- Dla niskich koncentracji p **nie** ma przejścia między jednym a drugim brzegiem — sieć odpowiada np. izolatorowi.
- Istnieje krytyczne pokrycie sieci p_c powyżej którego sieć staje się przewodnikiem. To prawdopodobieństwo p_c nazywamy *progiem perkolacyjnym*.

sieć	$p_c(site)$	sieć	$p_c(site)$
kwadratowa (2D)	0.5927460	trójkątna (2D)	1/2
kubiczna (3D)	0.3116080	diament	0.4301
BCC (3D)	0.2459615	heksagonalna (2D)	0.697043
FCC (3D)	0.1992365	Kagomé	0.69704
4D	0.197	5D	0.141
FCC (4D)	0.0842	FCC (5D)	0.0431
6D	0.107	7D	0.089

http://en.wikipedia.org/wiki/Percolation_threshold

- Perkolacja może być więc dobrym przykładem przejść fazowych: przewodnictwo/nadprzewodnictwo, ciecz/ciało stałe, magnetyk/paramagnetyk, zol/żel, i służyć do badania rozprzestrzeniania się pożarów i epidemii.

Perkolacja, p, p_c	$d = 2$	$d = 3$
parametr porządku $P_\infty: \beta$	5/36	0.417(3)
długość korelacji $\xi: \nu$	4/3	0.875(8)
średni rozmiar klastra $S: \gamma$	43/18	1.795(5)
Magnetyzm, T, T_c		
parametr porządku $m: \beta$	1/8	0.32
długość korelacji $\xi: \nu$	1	0.63
podatność $\chi: \gamma$	7/4	1.24

- Łatwe uogólnienie na dowolny wymiar sieci.
- Przejście fazowe charakteryzowane jest poprzez właściwości geometryczne klastrow w pobliżu parametru krytycznego:

- prawdopodobieństwo, że węzeł należy do nieskończonego klastra:

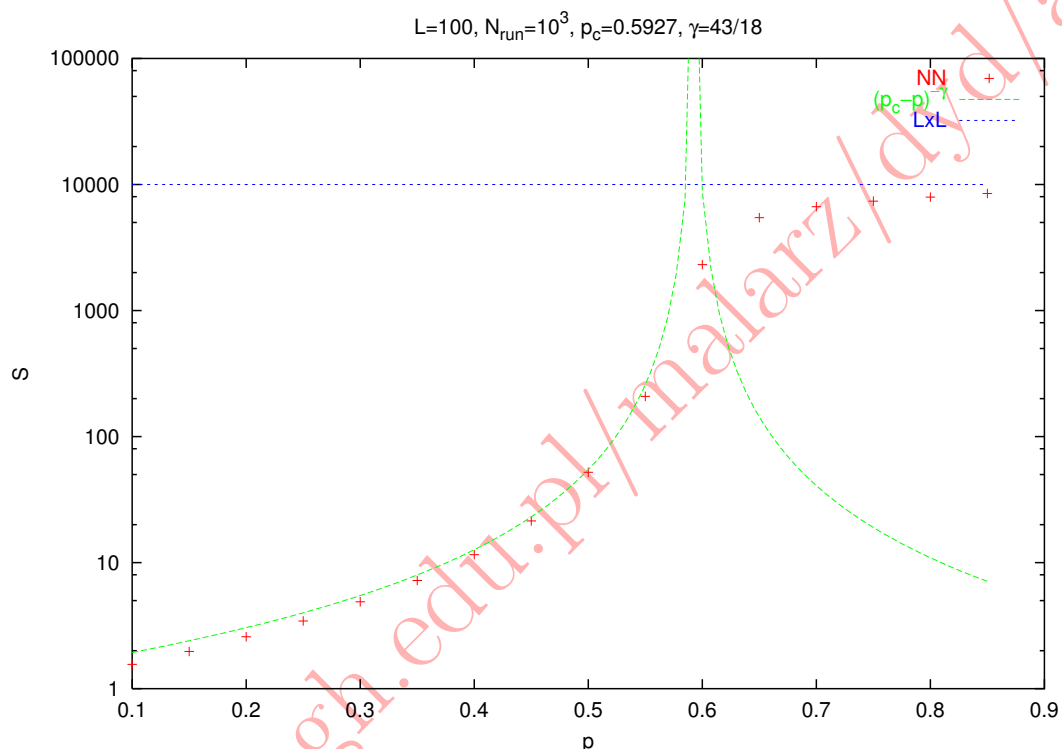
$$P_\infty \propto (p - p_c)^\beta$$

- długość korelacji:

$$\xi \propto |p - p_c|^{-\nu}$$

- masa klastra (średnia ilość węzłów w klastrze)

$$S \propto |p - p_c|^{-\gamma}$$



- ξ i S są otrzymywane po uśrednieniu po wszystkich klastrach o skończonych rozmiarach.
- I ogólnie w pobliżu progu perkolacyjnego wielkości X charakteryzujące klastry podlegają prawu skalującemu:

$$X(p; L) = L^{-x} \cdot \mathcal{F}((p - p_c)L^{1/\nu}), \tag{15.1}$$

gdzie $\mathcal{F}(\cdot)$ jest funkcją skalującą, x wykładnikiem skalowania a ν jest wykładnikiem krytycznym związanym z długością korelacji ξ .

Wartość $L^x \cdot X(p = p_c) = \mathcal{F}(0)$ nie zależy od rozmiaru liniowego L , co pozwala na łatwe wyznaczenie wartości p_c techniką poszukiwania przecięcia się wykresów $X(p)$ sporządzanych dla różnych L .

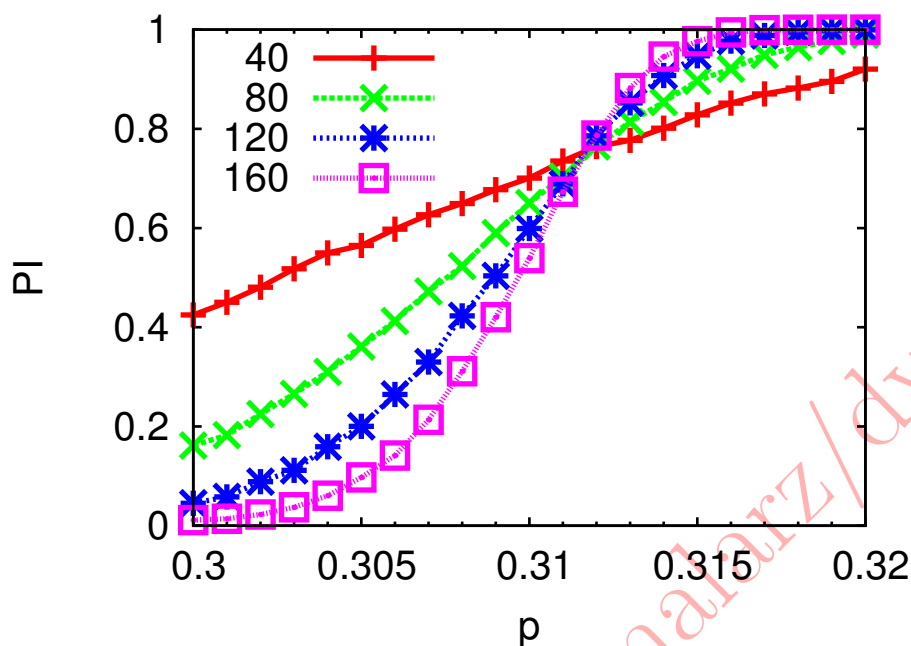
Co więcej wykresy te można nałożyć na siebie odpowiednio przeskalowując osie, czyli umiejętnie dobierając wykładniki x i ν .

Jeśli uda nam się zaproponować wielkość X , która ze swej natury do nałożenie się wykresów nie wymaga skalowania wzdłuż osi rzędnych to prawo (15.1) da się przepisać jako:

$$X(p; L) = \mathcal{G}((p - p_c)L^{1/\nu}). \tag{15.2}$$

Taką wielkością jest np. *wrapping probability* $W(p, L)$ mówiące o prawdopodobieństwie tego, że w układzie zaobserwujemy klastery łączący przeciwległe „krawędzie” układu.

Brak konieczności skalowania wzdłuż „osi y” bierze się stąd, że $W(p \rightarrow 0, L) = 0$ i $W(p \rightarrow 1, L) = 1$.



Dokładnie taką metodykę poszukiwania wartości krytycznej prawdopodobieństwa oglądaliśmy już dyskutując model Sznajdów: pokazywaliśmy, że to czy zwycięży opinia Czerwonych czy Niebieskich zależy od początkowego udziału ich opinii ($p_c = 1/2$) w grupie.

- Wykładniki krytyczne β, ν, γ są **uniwersalne** — nie zależą od szczegółów dotyczących sieci (kwadratowa czy trójkątna) czy typu perkolacji (węzłów czy wiązań) oraz przyjętego otoczenia a jedynie od wymiaru przestrzeni.
- Nieskończony klastrowy perkolacyjny dla $p = p_c$ ma podobnie jak dywan Sierpińskiego dziury wszelkich rozmiarów: jest samopodobny z dowolną skalą tego podobieństwa (większą niż długość jednostkowa ale mniejszą niż rozmiar sieci).
- Wymiar fraktalny definiujemy poprzez masę M klastra ograniczonego sferą o promieniu r :

$$M(r) \propto r^{d_f}.$$

- Długość korelacji ξ definiuje charakterystyczną długość (średnią odległość między węzłami w tym samym klastrze) odgarniającą strukturę samopodobną od homogenicznej:

$$M(r) \propto \begin{cases} r^{d_f}, & r \ll \xi \\ r^d, & r \gg \xi \end{cases}$$

- Wymiar fraktalny nieskończonego klastra jest powiązany z wykładnikami krytycznymi: $d_f = d - \frac{\beta}{\nu}$.

D. Stauffer i A. Aharony. *Introduction to Percolation Theory*. 2 wyd. London: Taylor i Francis, 1994


```

1***** 25 25***** 1 1***** 1***** 1 1 1*** 1 1 1 1 1***** 1 1***** 1 1 1***
*** 30 30***** 25 25***** 1 1***** 1*** 1 1*** 1 1 1 1***** 1 1*** 1 1*** 1*** 35 35*****
*** 30 30*** 36***** 37***** 1 1 1*** 1 1 1*** 1 1*** 1 1***** 1*** 1 1*** 35*** 1*** 1
41***** 37*** 37 37 37***** 1*** 1 1 1*** 1 1*** 1*** 1 1 1 1***** 1*** 35*** 1 1 1
*** 37***** 37 37 37 37 37 37*** 49*** 1 1*** 1 1 1 1*** 1***** 1*** 1*** 1 1 1*** 1*** 35*** 1 1 1
*** 37 37***** 37 37 37 37 37***** 1 1 1 1*** 1***** 1 1 1***** 1 1 1 1***** 1 1 1
37 37*** 55***** 37 37*** 37 37 37 37 37*** 1***** 1 1 1 1 1 1 1 1*** 1 1*** 1*** 1 1*** 1 1 1***
37 37*** 58*** 37 37***** 37*** 37***** 1 1 1***** 1 1*** 1 1*** 1 1 1***** 1 1*** 1 1 1
37*** 37 37***** 37 37***** 37 37 37*** 1 1*** 1 1*** 1 1 1 1*** 1***** 63*** 1*** 1***** 1
37 37 37 37*** 37 37 37 37 37*** 37***** 37*** 1 1***** 1 1 1***** 1*** 1 1 1***** 1 1 1 1 1 1
***** 37 37 37 37*** 37 37***** 37 37***** 1 1 1*** 1 1 1 1***** 1 1 1*** 67***** 1 1 1 1 1 1
37 37 37 37*** 37 37*** 37 37 37 37*** 1 1 1*** 1 1 1***** 1 1 1 1 1 1 1*** 67 67*** 1***** 1 1 1
37*** 37 37 37***** 37 37*** 37 37*** 1 1 1***** 1 1*** 1*** 1*** 1 1*** 1 1 1***** 1 1 1 1*****
*** 37 37 37 37 37 37 37 37 37 37 37 37 37*** 1 1 1 1*** 1 1 1 1 1 1 1 1*** 1*** 1***** 1 1 1 1 1 1***
37 37 37 37*** 37 37 37 37*** 37***** 1 1*** 1***** 1 1 1 1 1 1 1 1*** 79*** 1 1 1 1 1 1*** 1*** 1*****
37***** 81*** 37 37*** 82*** 37 37*** 1 1 1 1***** 1*** 1*** 84*** 1 1 1 1 1 1 1*** 1 1*** 86 86
37 37 37*** 81***** 37 37*** 37 37 37 37*** 1 1 1***** 88***** 1*** 84 84*** 1 1 1 1 1 1 1*** 89*** 86
37 37 37 37*** 37***** 37 37 37*** 37*** 1*** 1*** 91*** 1***** 1 1*** 84 84***** 1 1***** 1*** 89*****
37 37 37 37 37 37***** 37 37*** 1 1*** 91 91*** 1***** 1***** 84 84 84***** 1 1 1***** 89 89 89
*** 37 37*** 37*** 94 94***** 1***** 1 1 1 1*** 84 84 84***** 98 98***** 89 89 89 89
37 37 37 37 37 37*** 94*** 1 1*** 1 1*** 1 1 1***** 1 1***** 84 84***** 105*** 98 98 98 98***** 89 89 89
37***** 1*** 1*** 1 1 1*** 1 1*** 1 1*** 1 1*** 109***** 110*** 105***** 98 98 98 98 98 98 98 98
37***** 1 1*** 1 1 1 1 1 1 1 1 1*** 1 1 1 1*** 1 1***** 110***** 113113***** 98 98*****
*** 1 1*** 1 1 1 1 1 1*** 1***** 1 1 1 1 1*** 1 1 1 1*** 110110*** 98*** 113113*** 98 98 98***** 98 98
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1*** 1*** 1*** 1 1 1 1*** 1 1 1 1 1***** 98***** 113113***** 98*** 98 98
1***** 1***** 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1*** 98 98 98 98 98 98***** 98 98 98*** 98 98 98
***** 125*** 125*** 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1***** 1*** 128*** 98***** 98 98 98*** 98 98 98 98 98
*** 125125*** 125125*** 1***** 1 1 1***** 1 1*** 98***** 98 98*** 98*** 98 98 98 98 98*** 98 98*****
125125125*** 125125***** 134*** 1*** 1 1*** 1*** 98 98 98*** 98 98 98*** 98 98 98*** 98***** 98 98*** 138
125*** 125*** 125125125*** 134134*** 1*** 1***** 98 98 98 98 98 98 98 98 98 98 98*** 140*** 98 98***** 98*** 98 98 98*** 138
125*** 125125125125***** 134134*** 1 1 1 1*** 145145145***** 98*** 98*** 140*** 98 98*** 98 98*** 98***** 98***
***** 125125125*** 134134134134*** 1*** 1***** 145145145***** 98 98 98 98 98 98***** 98***** 98 98*** 98 98 98***
150150***** 125125***** 134134134*** 1 1***** 145145145***** 98***** 98 98 98*** 98 98*** 98 98 98 98 98*****

```

```

T T F T F F F T T T T F F F T F T F F T T T T F T F F F F T F T F T F F F
F T T T T F T T T F T F T T T T T F T T F F F T T F F F T T T F F T T T T
T F T T T T F F T T F F F F F F T T F F F F T T F F T T F F T T T T T F
T F T T T F T T T T T T T F F F F F F T T F T T T T T T T T T T T T T T T
F F T F T T T T T T T T T T F F F F F F T T T T T T T T T T T T T T T T
T T T T F F F T F T T T T F T T F T T F T T T T T F F F T T F F F T T T F
T F T T F F T T T T T T F F F F F F T F T T F T T F F F F F F T T F T F T
F T F F F T T T T T T F F F F F F T F T T F T T F T T F T T F T T F T T T
F T T F F T T T T T T F F F F F F T T F T T F T T F F F T T F F F T T T T
T T T F T T T T T T T T F F T T F T T T F T T T F T T T T F T T T T T T T
F F T T T T F T T T F F F T T F F F T T T F F T T T F F T T T F F T T T T T
T T T T T F T T F T T T F T T T F T T T F F T T T F F T T T F T T T T T T
T F T T T T F T T T F T T T F T T T F F T T F F T T F F T T F F T T T T T T
T T T T T F T T T T F T T T F T T T F F T T F F T T F F T T T F F T T T T T
T F T T T T F T T T F T T T F T T T F F T T F F T T F F T T T F F T T T T T
T T F F F F T T T T F T T T F T T T F F F F F F T F T T T T T T T T F T T T
T F F T T F T T T T T T T T T T T F T T T F T T F F T T F F T T F F T T T T
F T T F T T T T T T F F F T T T T F T T T T F T T T F F T T T F F T T T T T
T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T F F T T T F F T T T F F T T T T
F F T T F F T T T T T T T T T T T T T T T T F T T T T F F T T T F T T T T
T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T T F F T T T F F T T T F F T T T
T F T T T T F T T T F T T T F T T T F F F F F T T T T T F F T T T F F T T T
F F T T T F T T T T F T T T F T T T F F T T T F F T T T F F T T T F F T T T
T T F T T T T T T T F T T T F T T T F F T T T F F T T T F F T T T F F T T T
T F T T T T F T T T F T T T F T T T F F T T T F F T T T F F T T T F F T T T
F F T T T F T T T T F T T T F T T T F F T T T F F T T T F F T T T F F T T T
T T F F T T T F F T T T F T T T F F T T T F F T T T F F T T T F F T T T F F

```

W kontekście pożarów lasów szczególnie nas interesuje rozkład $\mathcal{N}(S)$ rozmiarów klastrow.

15.1.2.2 Średniopoloowe podejście do problemów pożarów lasów oparte na teorii perkolacji

- Z pewnością byłoby miło móc przewidywać pożary lasów
- Równie atrakcyjnym celem byłoby choć oszacowanie ryzyka pożarów lasów w danym roku znając statystykę pożarów w latach poprzednich.
- Oczywiście rzeczyste eksperymentowanie w tej sprawie raczej nie wchodzi w rachubę.
- Jednak posiadamy takie dane „eksperymentalne” w statystykach strażników lasu czy zakładów ubezpieczeniowych.

15.1.2.2.1 Model

- Modelowy las stanowi siatka kwadratowa.
- Każda komórka może być porośnięta trawą bądź drzewem z prawdopodobieństwem p .
- Drzewa, zarówno już istniejące jak i świeżo wykiełkowane tworzą klastry o różnych rozmiarach.
- Przez klastery rozumiemy zbiór drzew mających sąsiadów w otoczeniu von Neumanna.
- Odwzorowanie $p_n \rightarrow p_{n+1}$ (gdzie n numeruje lata) jest złożeniem dwóch funkcji:

– Pierwsza

$$p \rightarrow p + rp(1 - p) \tag{15.3}$$

opisuje okres wzrostu (pojawiania się drzew) ($0 \leq r \leq 1$).

– Potem następuje czas pożarów:

$$p \rightarrow p - S(p). \tag{15.4}$$

- Średnia gęstość drzew na siatce

$$S(p) = \frac{1}{L^2} \sum_i w_i s_i \tag{15.5}$$

może być wyznaczona na dwa sposoby:

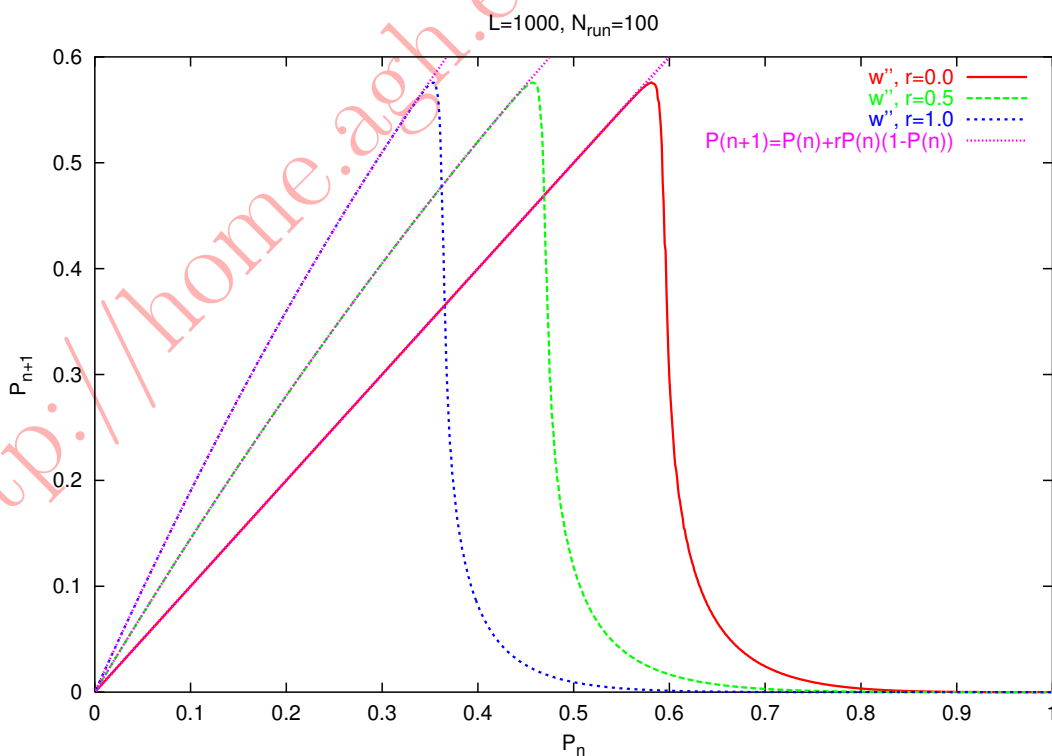
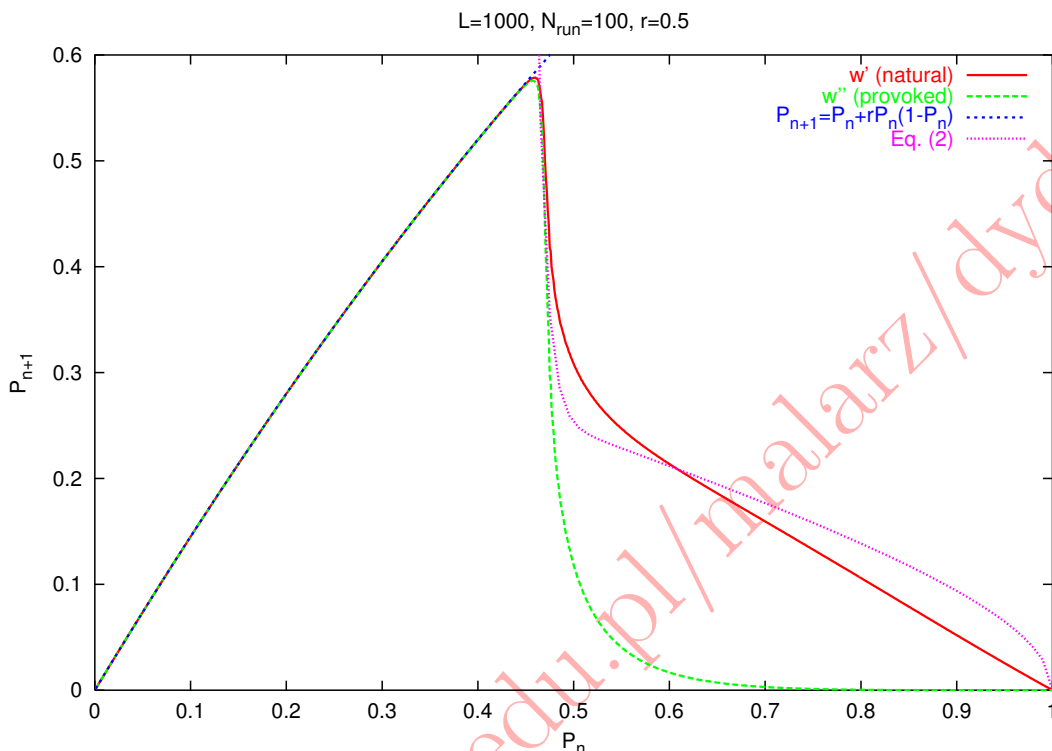
$$w'_i = s_i/L^2 \quad \text{bądź} \quad w''_i = s_i/\sum_i s_i.$$

- Przyjęcie wag w' oznacza, że piorun czasami będzie trafiał w trawę nie wywołując pożaru (jak w modelu Drossela i Schwabla).
- Natomiast wagi w'' odpowiadają intencjonalnemu wzniesieniu pożarów przez podpalaczy.
- Do ustalenia rozkładu prawdopodobieństwa napotkania klastra o rozmiarze s_i używamy algorytmu Hoshena–Kopelmana.
- Symulacja jest prowadzona na sieci kwadratowej o rozmiarze $10^3 \times 10^3$.
- Odwzorowanie $p_n \rightarrow p_{n+1}$ dla każdego p jest uzyskiwane poprzez uśrednienie po setce niezależnych realizacji sieci (tj. przypadkowego rozkładu drzew na niej).
- Odwzorowanie $p_n \rightarrow p_{n+1}$ tworzymy łącząc prostymi sąsiednie 1001 punktów uzyskanych z symulacji.
- Odwzorowanie $p_n \rightarrow p_{n+1}$ nie pozwoli nam co prawda na rekonstrukcję dynamiki frontu pożaru (jak to czyni AK) a raczej pozwoli symulować statystyki „gęstości” drzew w kolejnych latach n .
- Dopasowanie $p_n \rightarrow p_{n+1}$ dla wag w' (do analizy diagramu bifurkacyjnego):

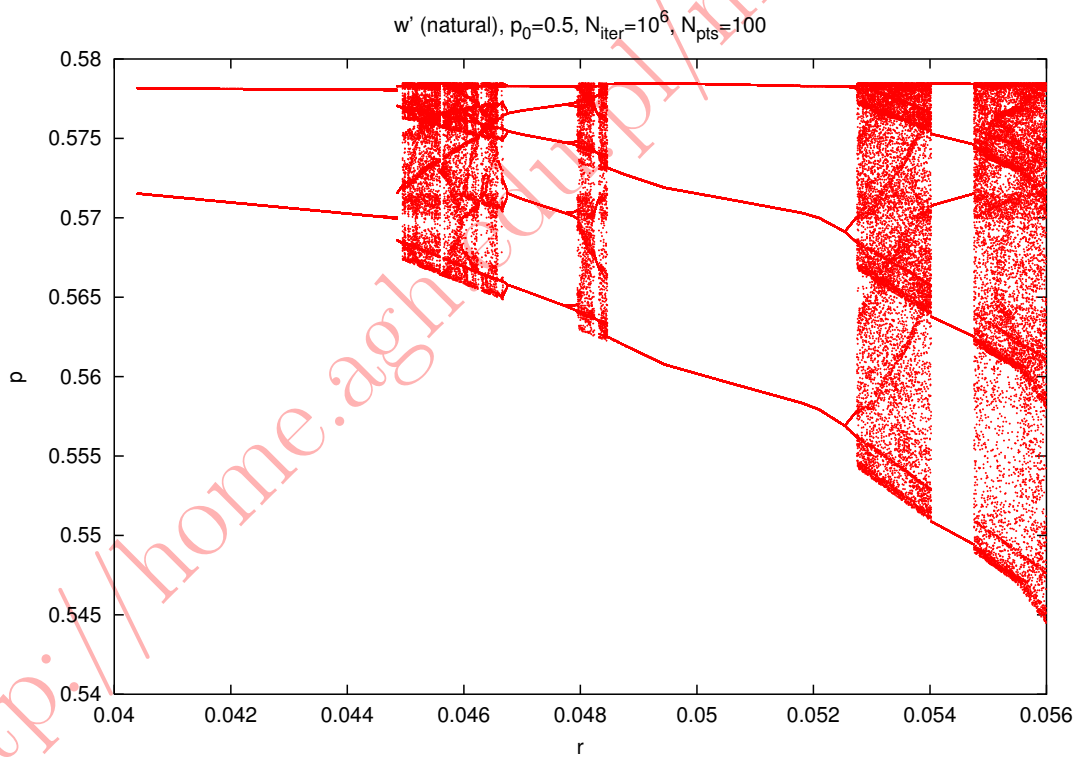
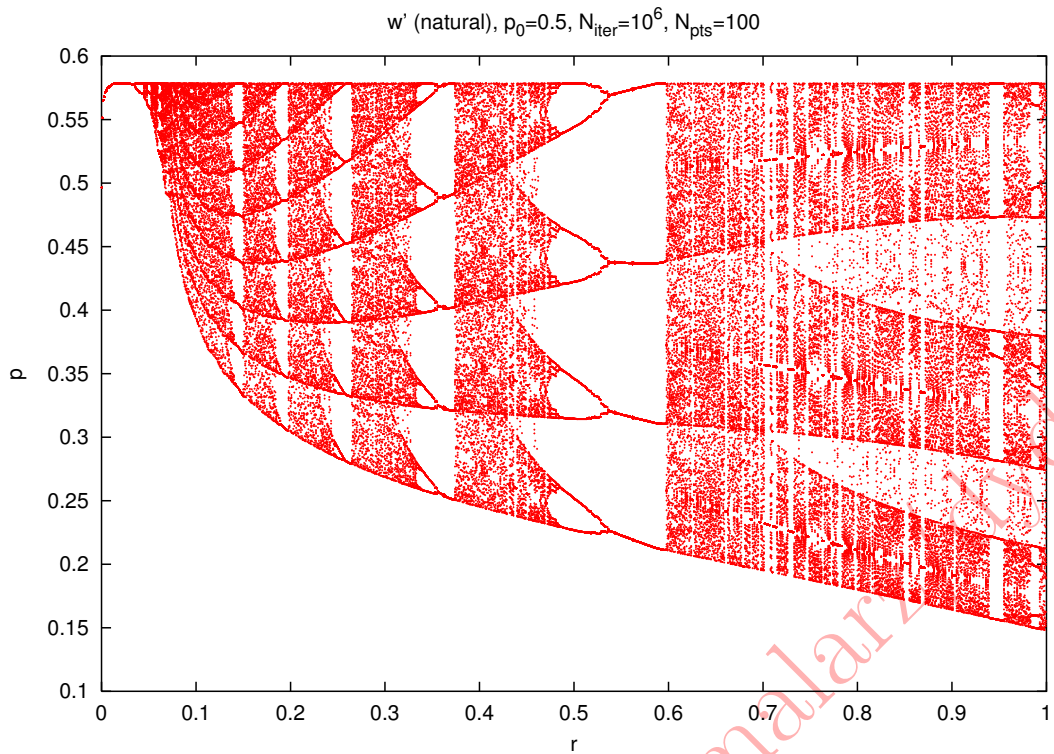
$$\begin{aligned} H(p) &= p + rp(1 - p) \\ G(p) &= \begin{cases} 0.1 \exp[100(0.6 - p)] + 0.4\sqrt{1 - p} & \iff p > 0.6 \\ p & \iff p \leq 0.6 \end{cases} \\ p_{n+1} &= G(H(p_n)) \end{aligned} \tag{15.6}$$

- Dopasowanie $p_n \rightarrow p_{n+1}$ dla wag w'' (do analizy rozkładu rozmiarów pożarów):

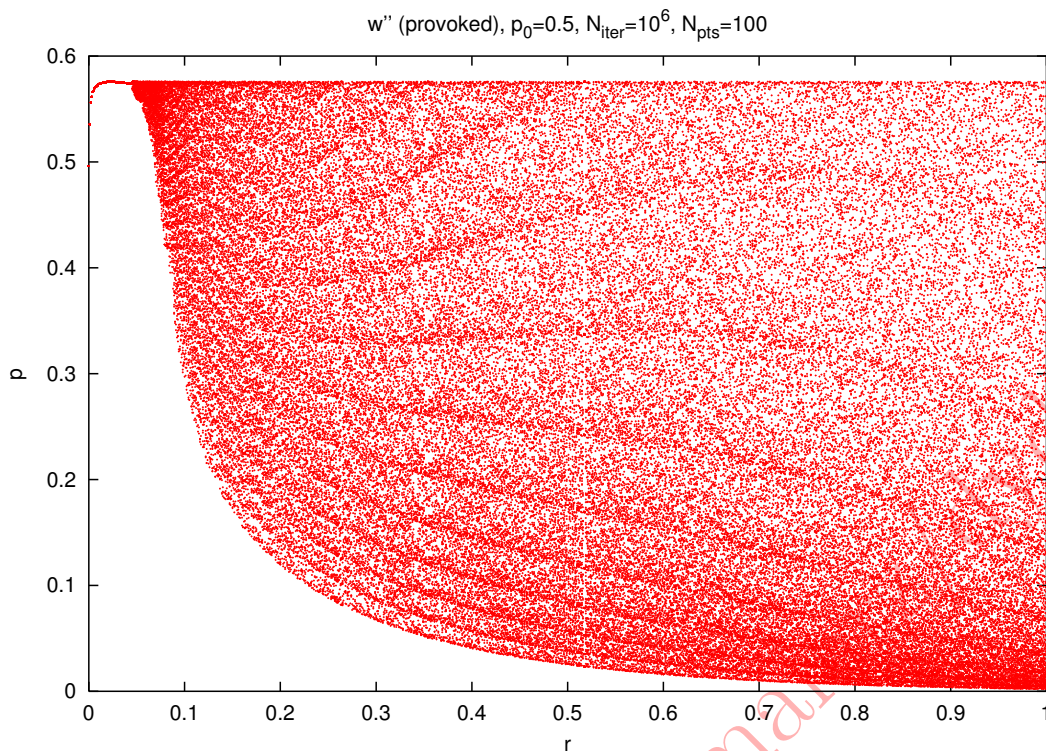
$$\begin{aligned}
 H(p) &= p + rp(1-p) \\
 G(p) &= \begin{cases} p_c \exp(-12.735\sqrt{p-p_c}) & \iff p > p_c \\ p & \iff p \leq p_c \end{cases} \\
 p_{n+1} &= G(H(p_n))
 \end{aligned}
 \tag{15.7}$$



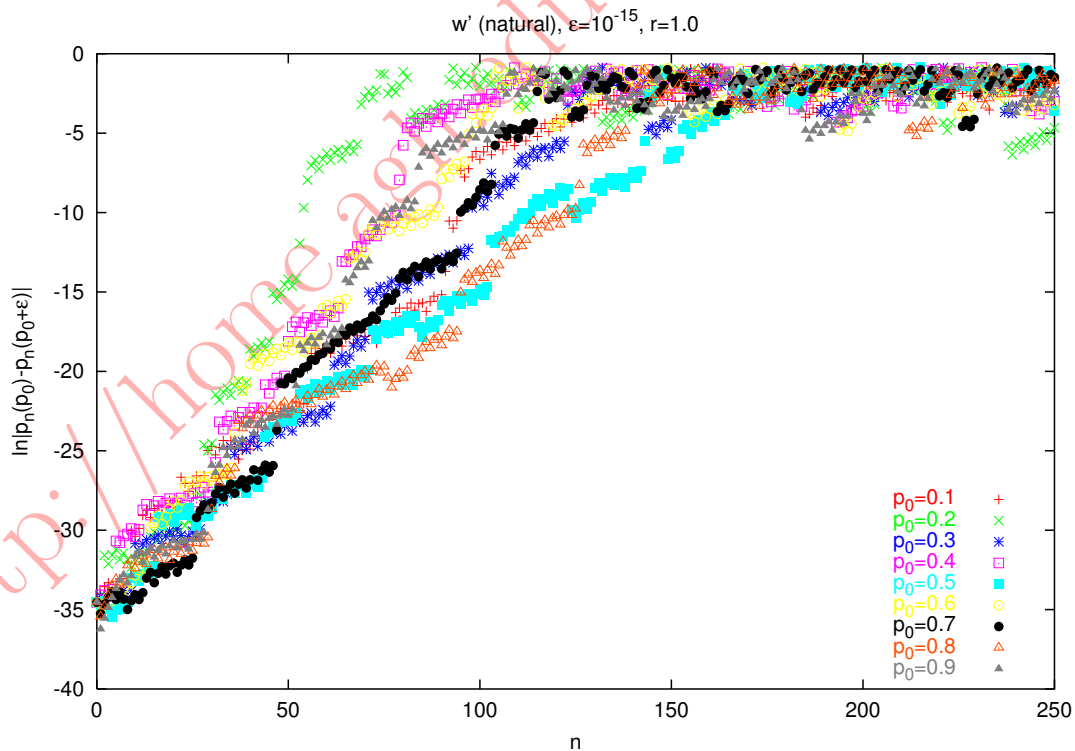
15.1.2.2.2 Diagramy bifurkacyjne

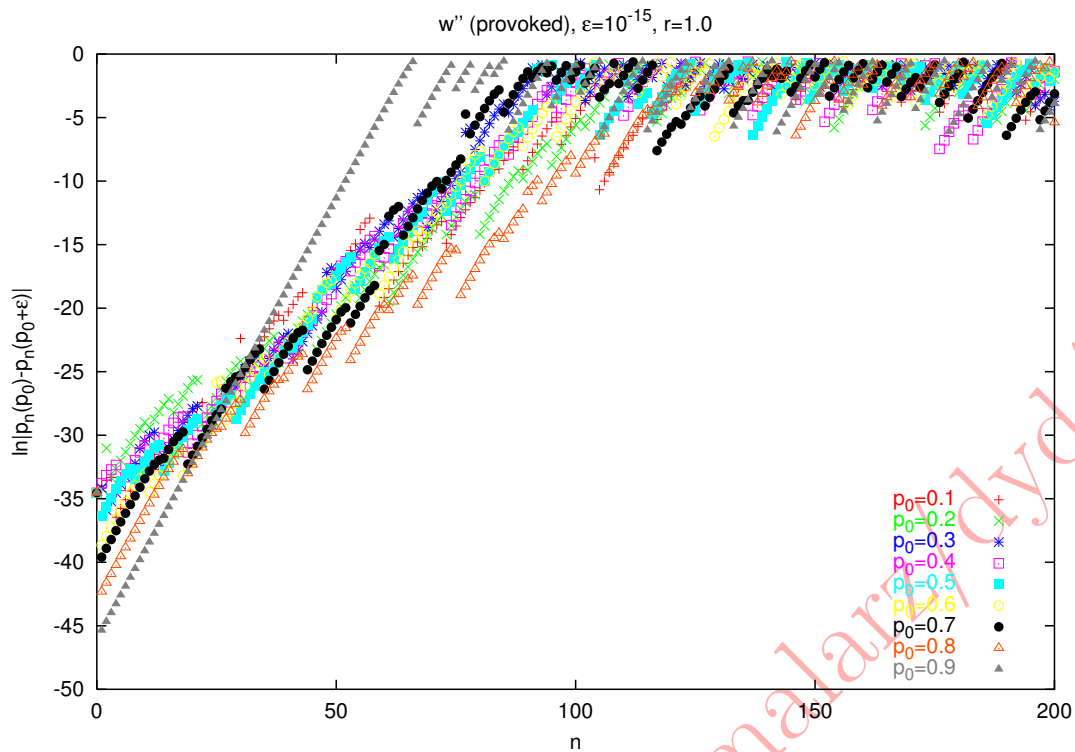


- Wyłapanie cyklu granicznego o długości trzy dowodzi — zgodnie z twierdzeniem Sharkovskiego — iż, w układzie pojawią się cykle graniczne o wszystkich możliwych długościach.

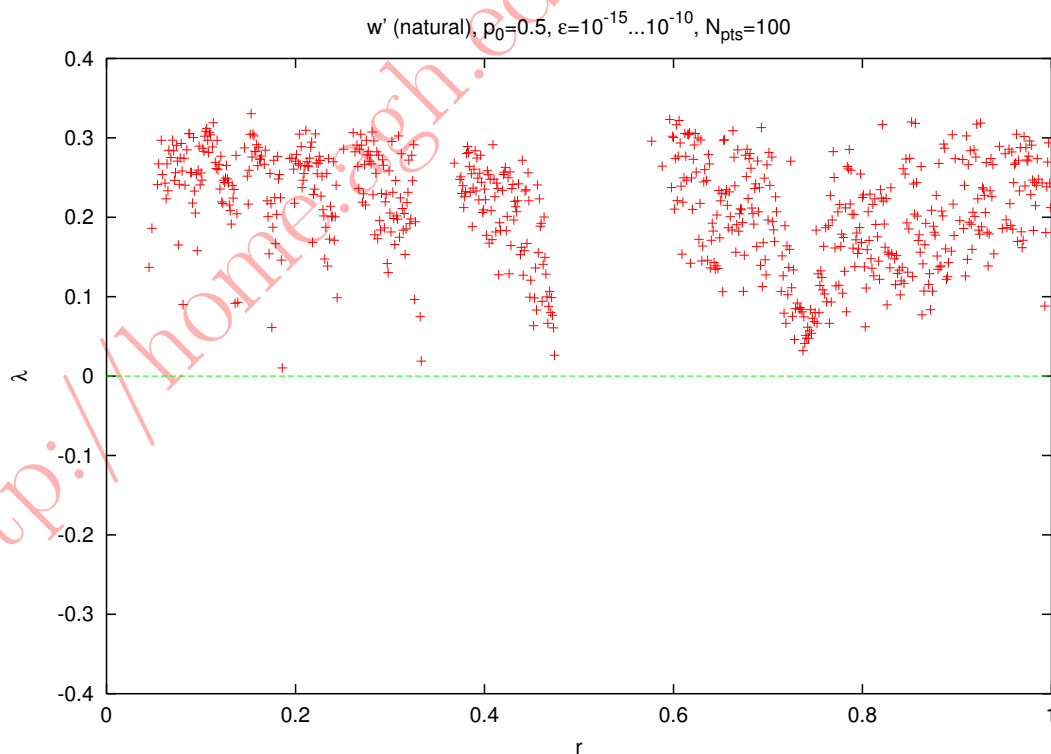


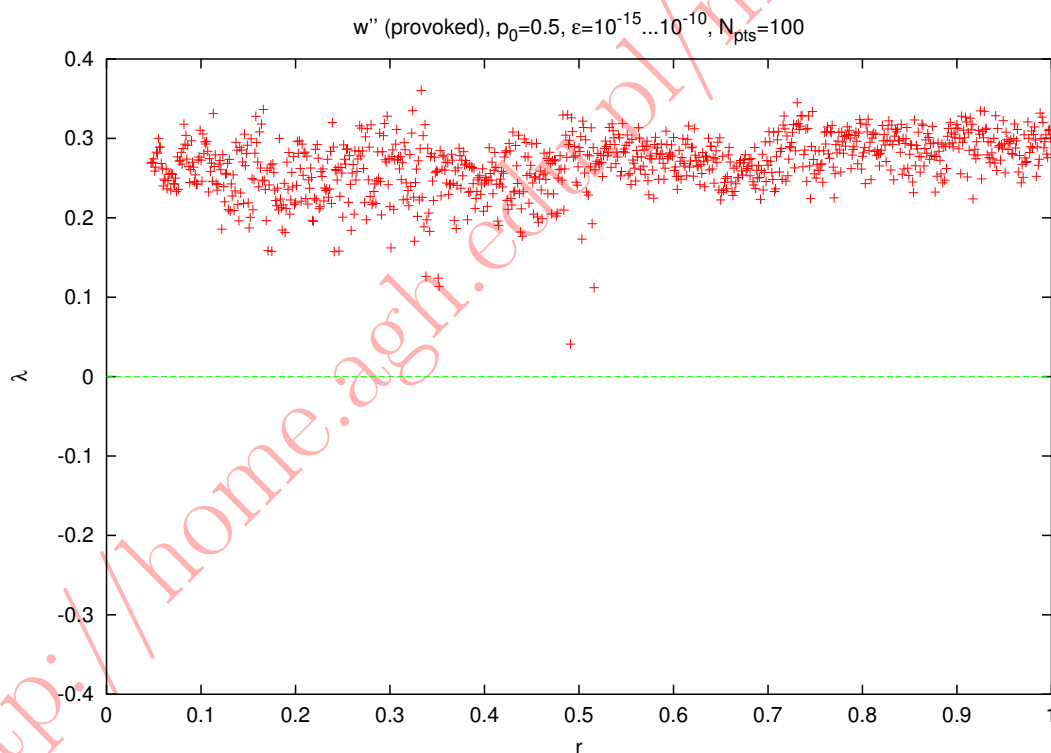
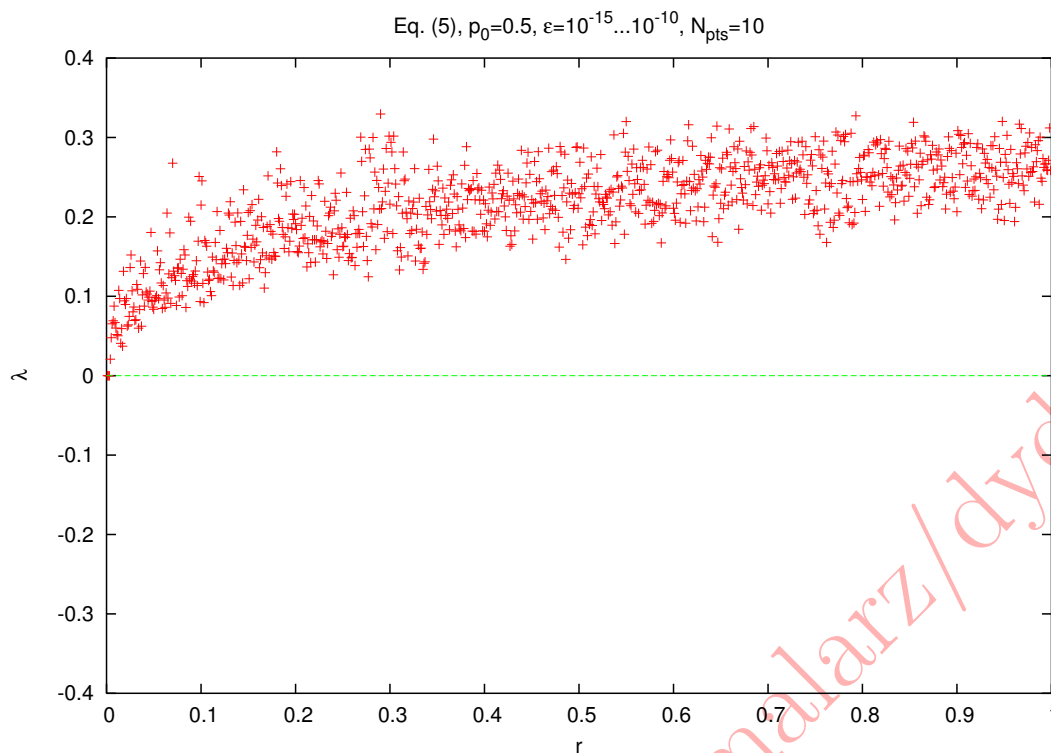
15.1.2.2.3 Wykładnik Lyapunova Ewolucja czasowa różnicy $\ln |p_n(p_0, t) - p_n(p_0 + \varepsilon, t)|$ dla dwóch trajektorii różniących się o ε w początkowej gęstości drzew p_0 .





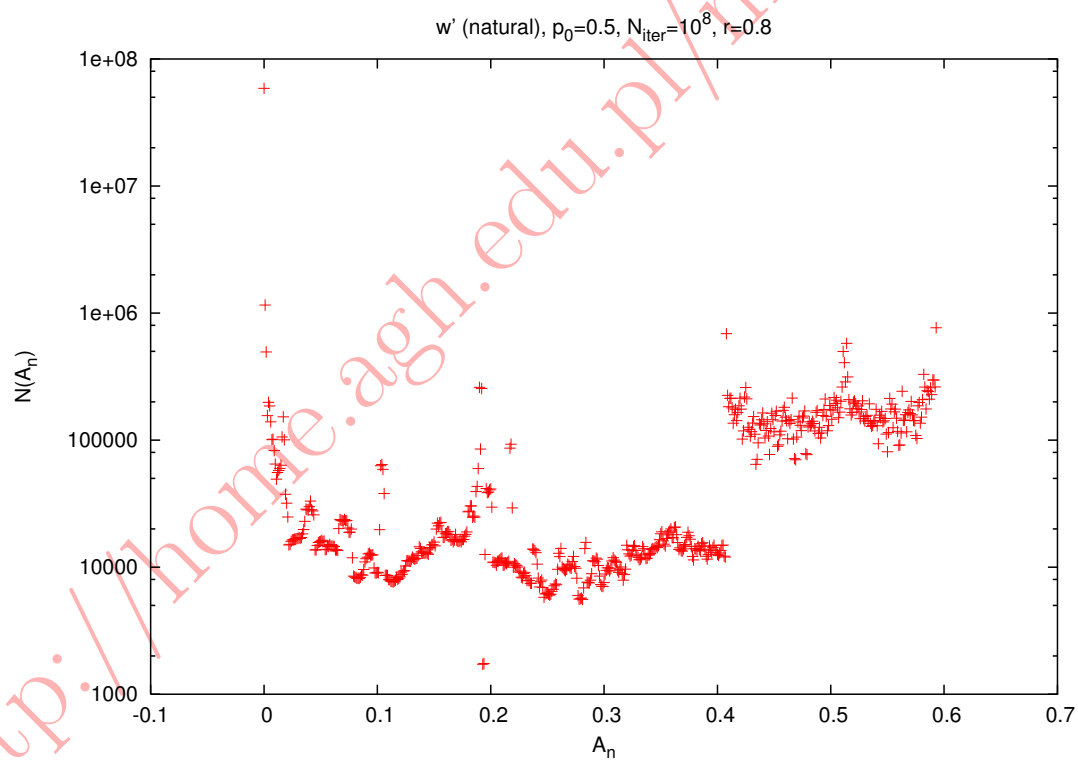
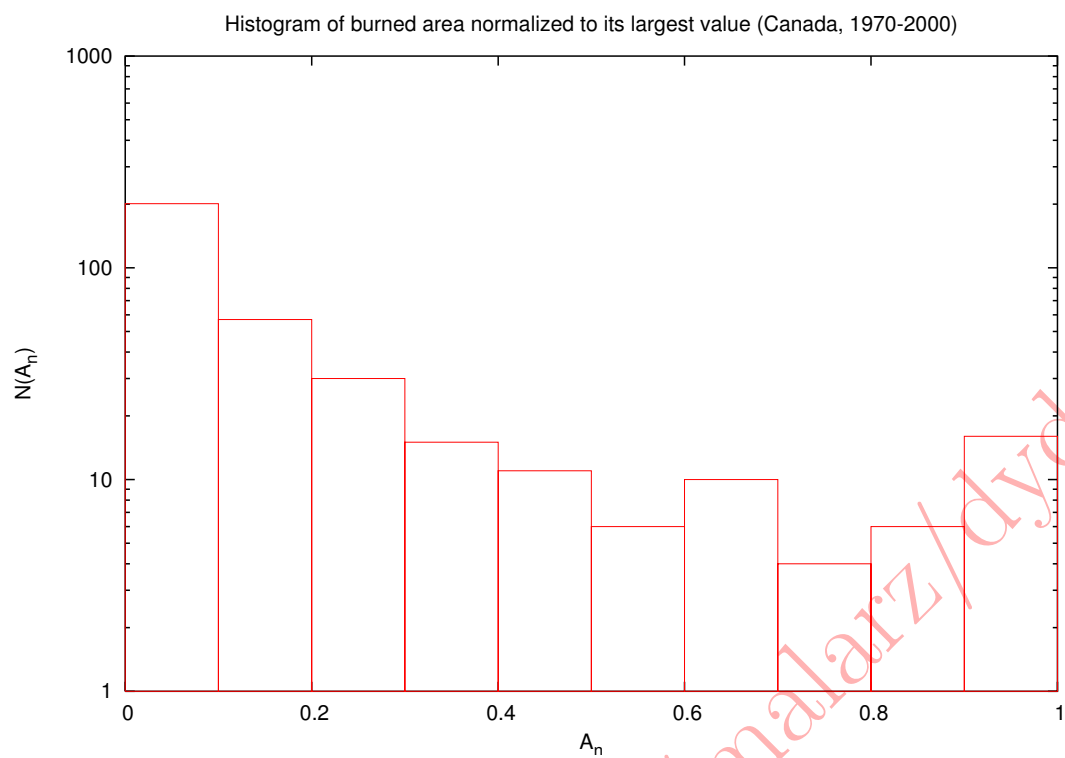
Widać, że trajektorie rozjeżdżają wykładniczo z czasem. Tempo tego uciekania od siebie trajektorii określa współczynnik Lyapunova λ . Jego dodatnie wartości określają obszary w których układ jest chaotyczny λ jego ujemne wartości zgadzają się z obszarami okien stabilności ujawnionych na diagramach bifurkacyjnych.

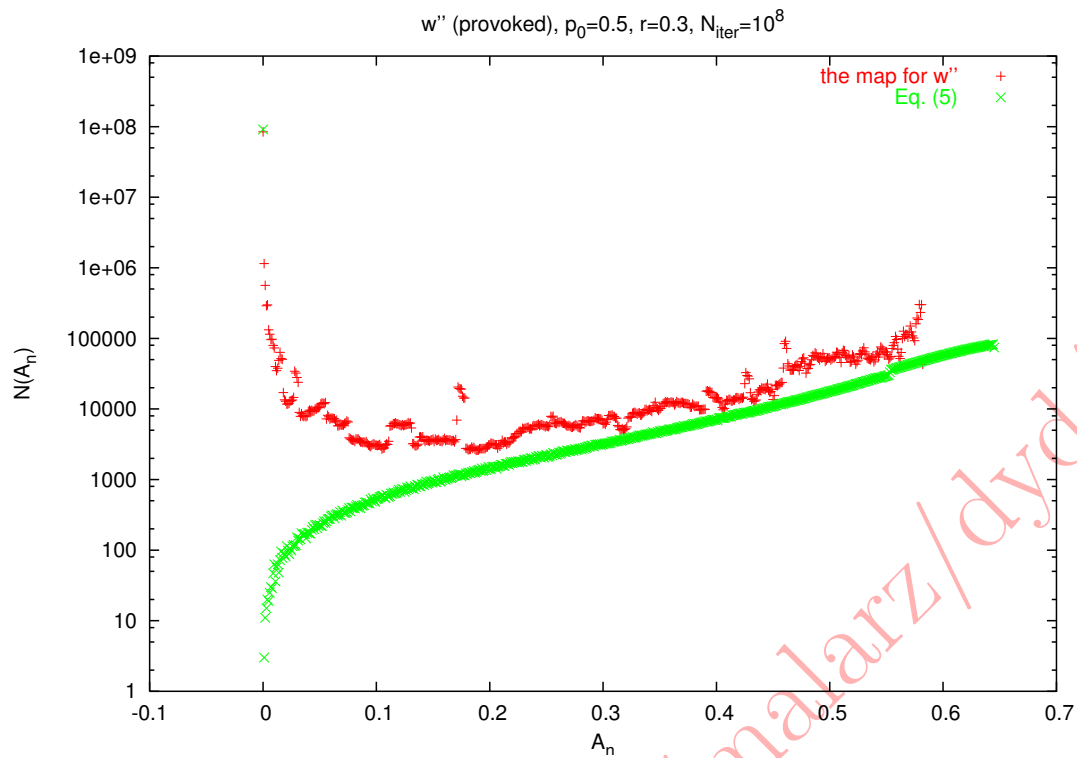




15.1.2.2.4 Rozkłady rozmiarów pożarów

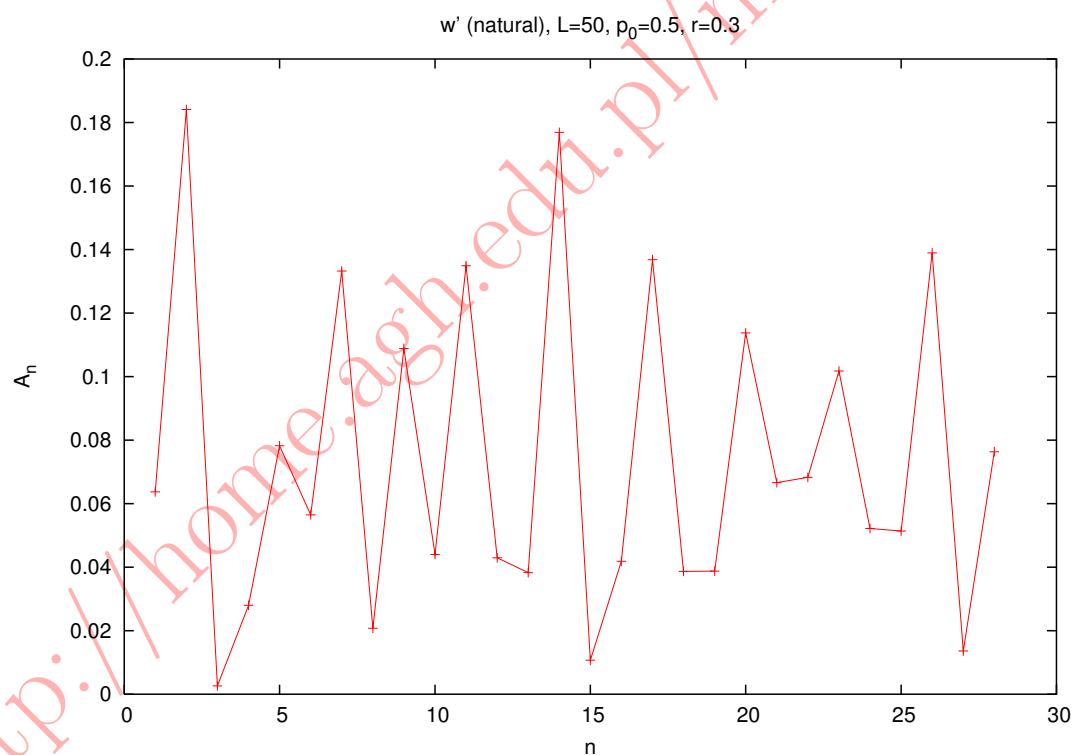
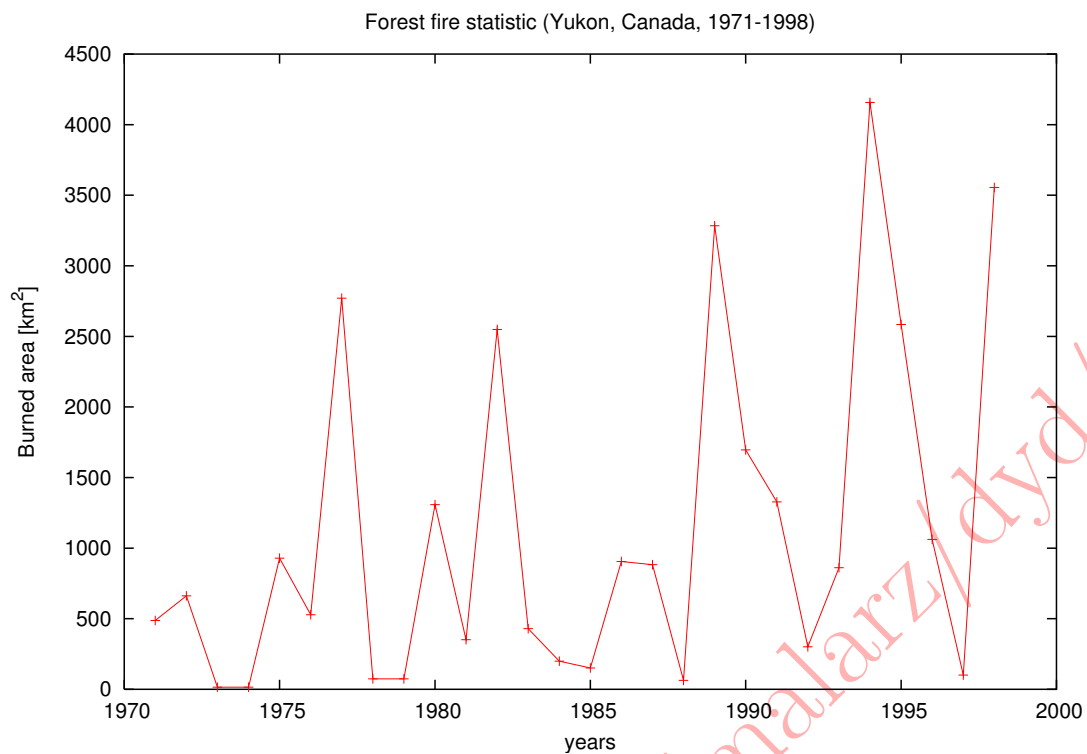
- Dla pożarów o dużych rozmiarach histogram $\mathcal{N}(S_n)$ daje się dopasować zależnością wykładniczą.
- Małe ale skończone pożary są ignorowane w przybliżeniu analitycznym (15.7).
- Dla danych „eksperymentalnych” (Kanada, 1970–2000), histogramy zostały przeskalowane do wartości największego pożaru zaobserwowanego na danym obszarze.

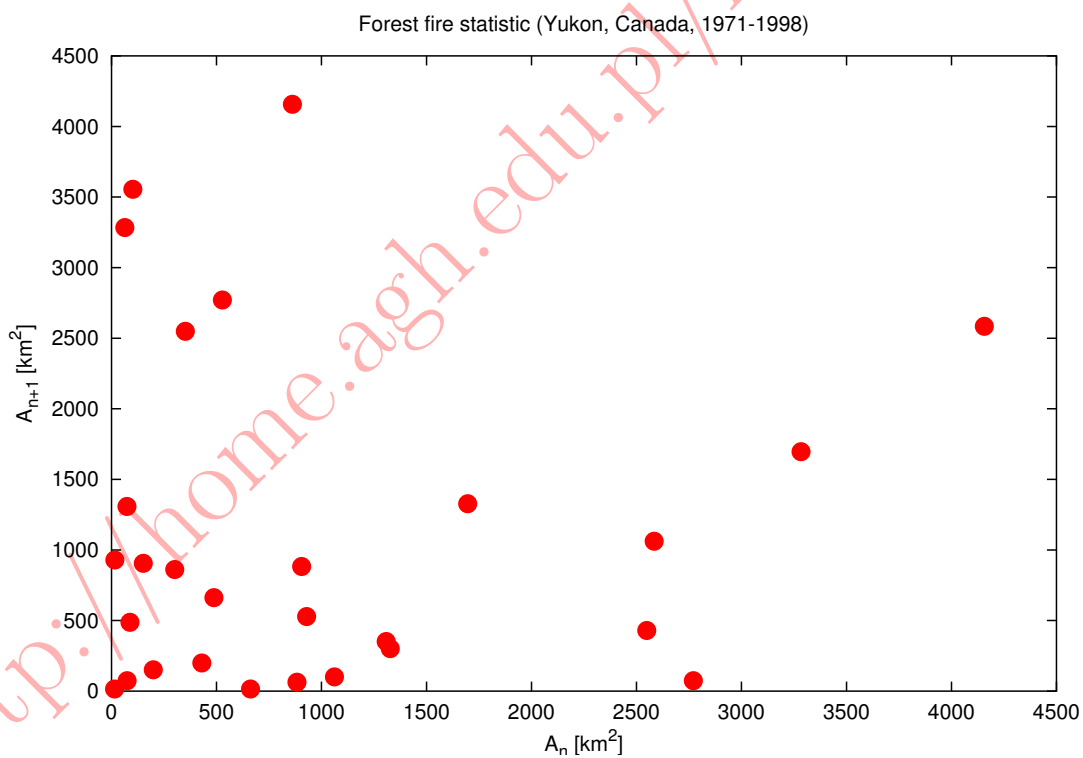
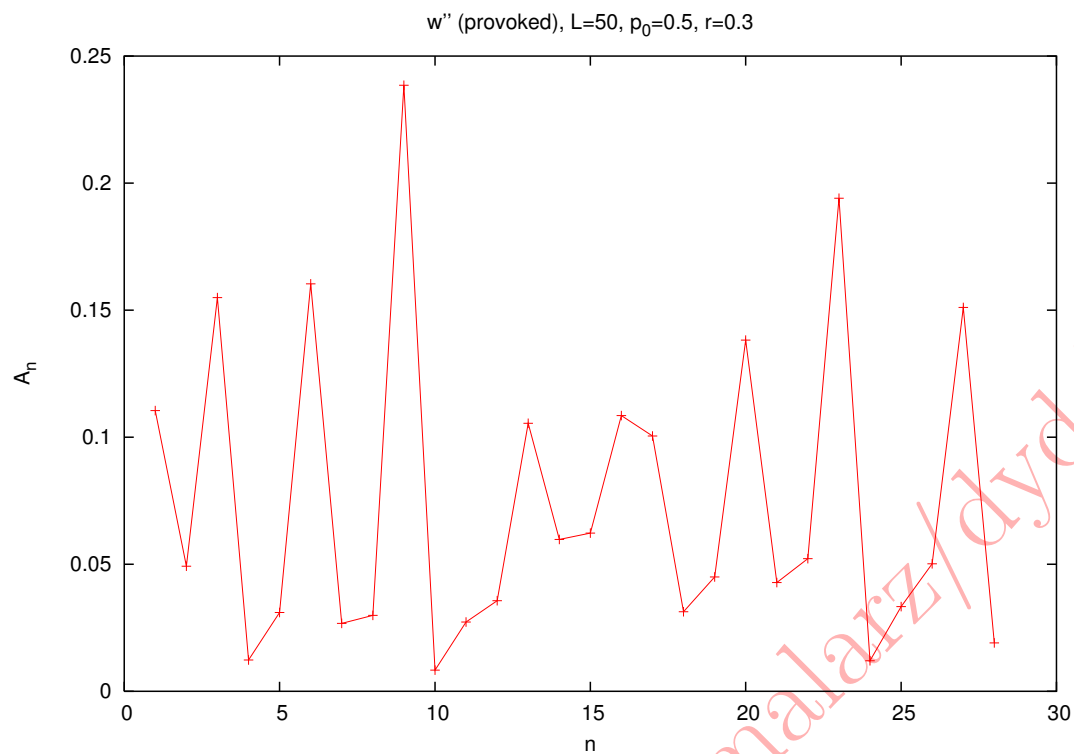


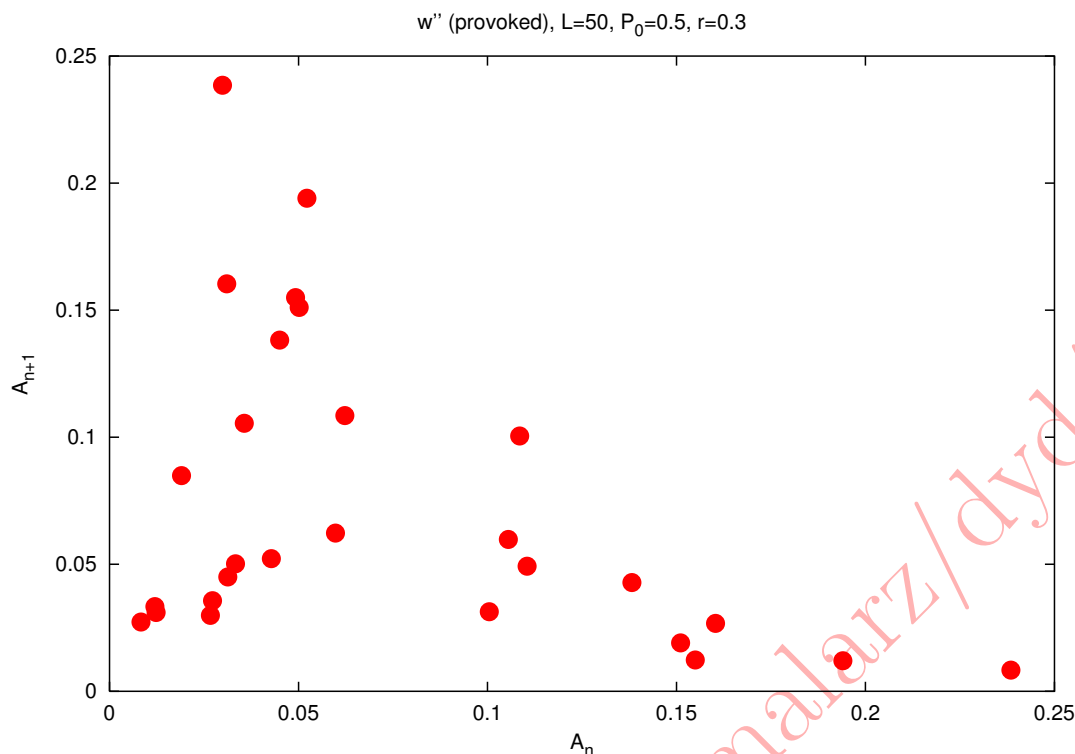


15.1.2.2.5 Porównanie z danymi „eksperymentalnymi”

- Kilka czynników (jak wilgotność, ukształtowanie terenu, etc.) nie mają swoich bezpośrednich odpowiedników w podejściu średniopółowym.
- Można oczekiwać, że czynniki te dodają rodzaj „szumu” nieobecnego w deterministycznych odwzorowaniach $p_n \rightarrow p_{n+1}$.
- „Szum” ten możemy próbować odtworzyć zmniejszając rozmiar modelowanego lasu ($L = 10^3 \rightarrow L = 50$).







15.1.2.2.6 Wnioski

- Jeśli deterministyczne podejście średniopolewe w granicy termodynamicznej wskazuje na zachowanie na chaotyczne zachowanie układu to trudno sobie wyobrazić jakąkolwiek inną technikę która dawałaby kontrolowane rozwiązanie.
- Udało się (co prawda tylko jakościowo) odtworzyć „eksperymentalne” statystyki pożarów.
- Zarówno diagramy bifurkacyjne jak i wykładniki Lyapuova wskazują na chaotyczność ewolucji czasowej pożarów lasów.
- Znaczy to, że ich przewidywanie w długiej skali czasu jest niemożliwe.
- Koronnym (ewolucyjnym) dowodem na chaotyczność pożarów jest przypadek sekwoi.

x K. Malarz, S. Kaczanowska i K. Kułakowski. „Chaotic dynamics of forest fires”. *Frontiers on Nonlinear Dynamics* **3** (2004), 334–343. Times Cited: 1, K. Malarz, S. Kaczanowska i K. Kułakowski. „Are forest fires predictable?” *Int. J. Mod. Phys. C* **13.8** (2002), 1017–1031.

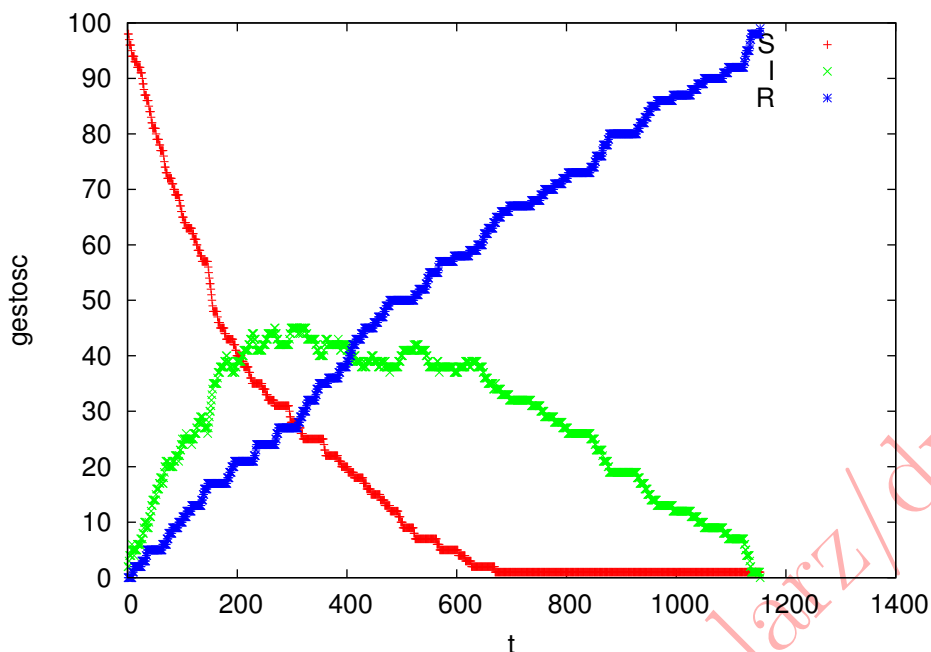
15.2 Modele epidemii

15.2.1 SIR = Susceptible, Infected, Recovered (Removed)

Probabilistyczny automat asynchroniczny:

1. Wybierz losową komórkę. Jeśli jest w stanie I to wylosuj liczbę przypadkową $x \in (0, 1)$.
2. Jeśli $x < \alpha$ wówczas zmień stan komórki z I na R.
3. W przeciwnym wypadku wybierz losowo najbliższego sąsiad. Jeśli jest on w stanie S to zaraż go z prawdopodobieństwem β ($S \rightarrow I$).
4. Punkty 1–3 powtarzaj dopóki są komórki w stanie S.

Prawdopodobieństwo wyzdrowienia $\alpha = 0.2$, prawdopodobieństwo zarażenia $\beta = 1$



automat	sieć	z	$\alpha_C (\beta = 1)$
asynchroniczny	trójkątna	6	0.20
asynchroniczny	kawdratowa	4	0.18
asynchroniczny	heksagonalna	3	0.14
synchroniczny	kwadratowa	4	0.22

W wersji synchronicznej stany komórek są aktualizowane jednocześnie.

15.2.1.1 Podejście analityczne

Zakładając średnią ilość kontaktów $\langle k \rangle$ średnia ilość nowozarażonych wyniesie

$$\langle k \rangle \beta \frac{S}{N}$$

i możemy zapisać równanie iteracyjne na ilość zarażonych w kolejnym kroku czasowym:

$$I_{n+1} = I_n + \langle k \rangle \beta \frac{S}{N} I_n \Delta t - \alpha I_n \Delta t,$$

gdzie $N = S + I + R$ jest liczebnością populacji.

$$\begin{cases} \frac{dI}{dt} = \langle k \rangle \beta \frac{S}{N} I - \alpha I \\ \frac{dS}{dt} = -\langle k \rangle \beta \frac{S}{N} I \\ \frac{dR}{dt} = \alpha I \end{cases} \quad (15.8)$$

W. O. Kermack i A. G. McKendrick. „A Contribution to the Mathematical Theory of Epidemics”. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **115**.772 (1927), 700–721.

Pytamy się, czy przy zadanych wartościach α , β i $\langle k \rangle$ oraz przyjętych wartościach początkowych S_0 , I_0 , R_0 epidemia będzie się rozprzestrzeniać czy nie?

$$\frac{dI}{dt} > 0$$

Przyjmując, że na początku epidemii $S(t \rightarrow 0) = S_0$ mamy:

$$\left(\langle k \rangle \beta \frac{S_0}{N} - \alpha \right) I > 0$$

i

$$\frac{\langle k \rangle \beta S_0}{\alpha N} > 1.$$

Ponieważ ilość początkowo zarażonych jest mała ($R_0 \rightarrow 0$) to $S_0 \approx N$ i infekcja rozprzestrzenia się jeśli

$$r \equiv \frac{\langle k \rangle \beta}{\alpha} > 1. \tag{15.9}$$

Ilość podatnych na początku symulacji nie musi być porównywalna z liczebnością całej populacji. Część populacji możemy zaszczepić ($R_0 = \nu$). Wówczas $S_0 \approx (1 - \nu)N$ i z warunku propagacji infekcji (15.9) dostajemy

$$\nu = 1 - \frac{1}{r}$$

co oznacza, że wystarczy szczepić tylko część populacji.

15.2.2 SIS = Susceptible, Infected, Susceptible

W przypadku zwykłego przeziębienia czy grypy po ich przejściu nie nabywamy na nie odporności.

- $I \rightarrow S$.
- $S \rightarrow I$ z częstością $\lambda n_I / \langle k \rangle$, gdzie n_I jest ilością najbliższych sąsiadów w stanie I , a $\langle k \rangle$ jest liczbą najbliższych sąsiadów (innymi słowy, komórka w stanie I próbuje zarazić jednego ze swoich sąsiadów z częstością λ).

Probabilistyczny, asynchroniczny automat:

1. Wybierz losową komórkę. Jeśli jest w stanie I , wówczas wylosuj $x \in (0, 1)$.
2. Jeśli $x < c = 1/(1 + \lambda)$, wówczas $I \rightarrow S$.
3. W przeciwnym wypadku, wybierz losowo jednego z najbliższych sąsiadów. Jeśli jest on w stanie S to zmień ten stan na I .
4. Idź do 1.

15.2.2.1 Podejście analityczne

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = -\beta \frac{SI}{N} + \alpha I \\ \frac{dI}{dt} = \beta \frac{SI}{N} - \alpha I \end{cases} \tag{15.10}$$

Dodając te równanie stronami znów widzimy, że $S(t) + I(t) = N = const$.

$$\frac{dI}{dt} = (\beta N - \alpha) I - \beta I^2$$

co przypomina równanie logistyczne i $\forall I_0 > 0$:

$$r \equiv \frac{\beta N}{\alpha} \leq 1 \Rightarrow \lim_{t \rightarrow +\infty} I(t) = 0$$

$$r > 1 \Rightarrow \lim_{t \rightarrow +\infty} I(t) = \frac{\beta N - \alpha}{\beta}$$

Przy odrobieniu samozaparcie, nie tylko asymptotyka zależności $I(t)$ i $S(t)$ jest do uzyskania ale i pełny kształt tych funkcji.

15.3 Fraktale

Fraktalem nazywamy coś złożonego z mniejszych części w jakiś sposób podobnych do całości.

Taka definicja ma znaczną przewagę nad bardziej sformalizowaną, każącą definiować fraktal jako zbiór którego wymiar Hausdorffa–Besicovitcha przewyższa wymiar topologiczny (cokolwiek by to nie miało oznaczać).

15.3.1 Wymiar fraktalny

- Zaczniemy od przykładu fraktalu niestochastycznego (choć w fizyce spotykamy zazwyczaj fraktale przypadkowe) — trójkąta Sierpińskiego.
- Wynik agregacji prostego przepisu iteracyjnego: z trzech trójkątów równobocznych utwórz większy o dwukrotnie większym boku. Z tak powstałego “dziurawego” trójkąta utwórz znowu większy i dziurawy o dwukrotnie większym boku. Z tak powstałego...



- Kolejne trójkąty są coraz rzadsze:

$$\rho(L) = M(L)/L^2, \quad L = 2^n, \quad M = 3^n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

- $\rho(L)$ maleje więc wraz z L jak pewna potęga L :

$$\rho(L) = aL^\alpha, \quad \alpha = \log 3 / \log 2 - 2$$

- Masa $M(L) = bL^{d_f}$ i $d_f = \log 3 / \log 2 \approx 1.58$.
- Analogicznie można sobie wyobrazić konstrukcję 3D wymiarowej „piramidy Sierpińskiego” z czworościanów foremnych ($d_f = 2$).
- Generacja fraktali na płaszczyźnie Gaussa. Np. zbiory Julii konstruuje się na płaszczyźnie zespolonej w wyniku przekształceń iteracyjnych wielomianu stopnia drugiego o postaci:

$$Z_{n+1} = Z_n^2 + C,$$

gdzie Z przebiega po liczbach zespolonych zaś C jest zespolonym parametrem określającym wygląd zbioru.

15.3.2 Skalowanie i podobieństwo

- Linia przechodząca przez \mathbf{x}_0 w kierunku \mathbf{a} dana jest równaniem

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + t\mathbf{a}, \quad t \in \mathbb{R}$$

- Zmiana skali długości o czynnik r : $x' = rx = r(x_0 + ta)$ po przesunięciu o wektor $(1-r)x_0$ daje ten sam zbiór punktów.
- Mówimy, że zbiór S jest *samopodobny w skali r* jeśli $S' = rS$.

- Dla krzywej Kocha skala wynosi $r = (1/3)^n$ i $n = 0, 1, 2, \dots$

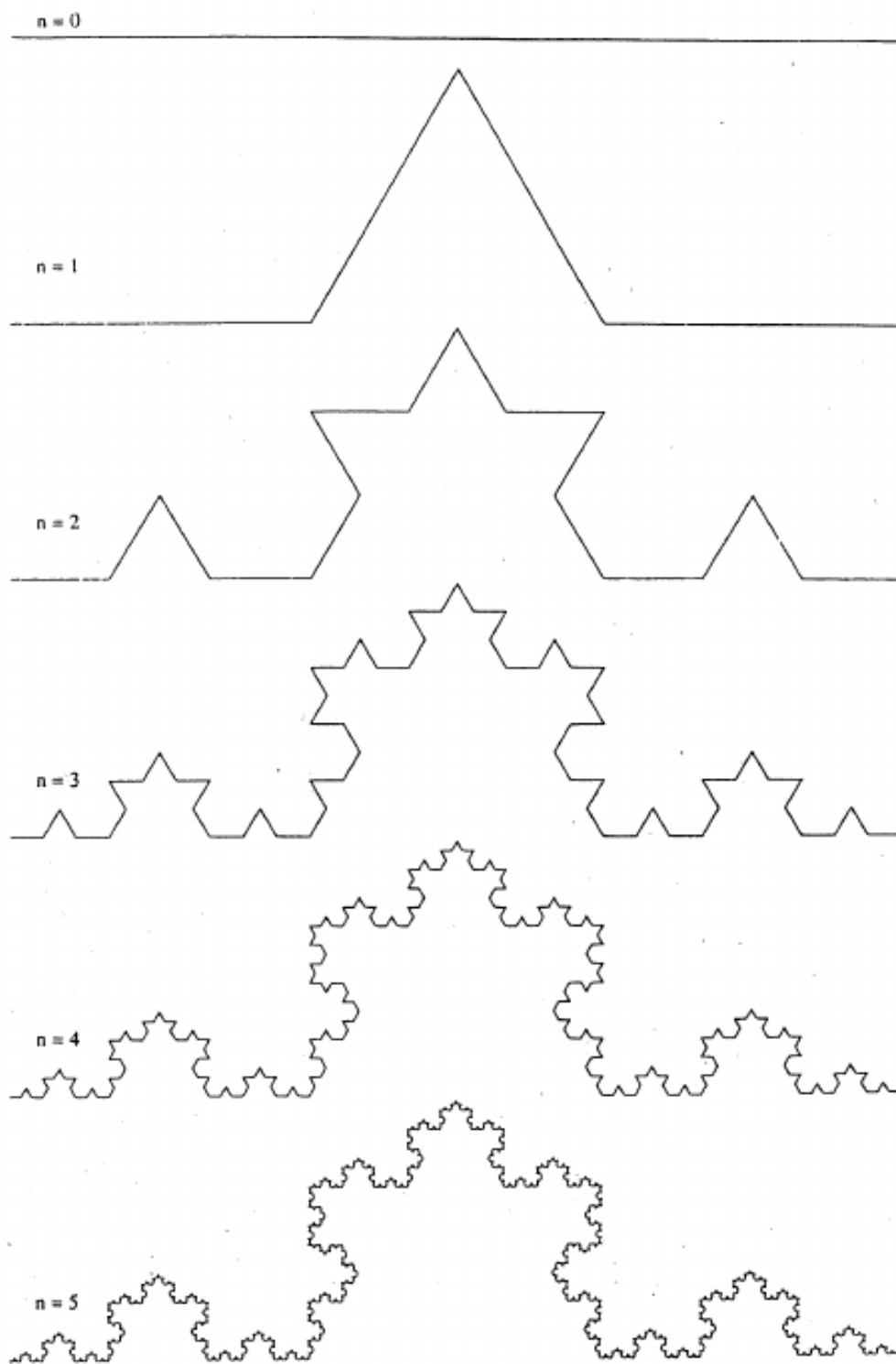


FIGURE 2.8: Construction of the triadic Koch curve.

- Podobne właściwości wykazuje bardzo wiele obiektów w przyrodzie (choćby morskie (ale i lądowe) granice państw): liczba kwadratów o boków δ potrzebnych do pokrycia linii wybrzeża $N(\delta) = a\delta^{-d_f}$ (np.: dla wybrzeża Norwegii $d_f = 1.52$).

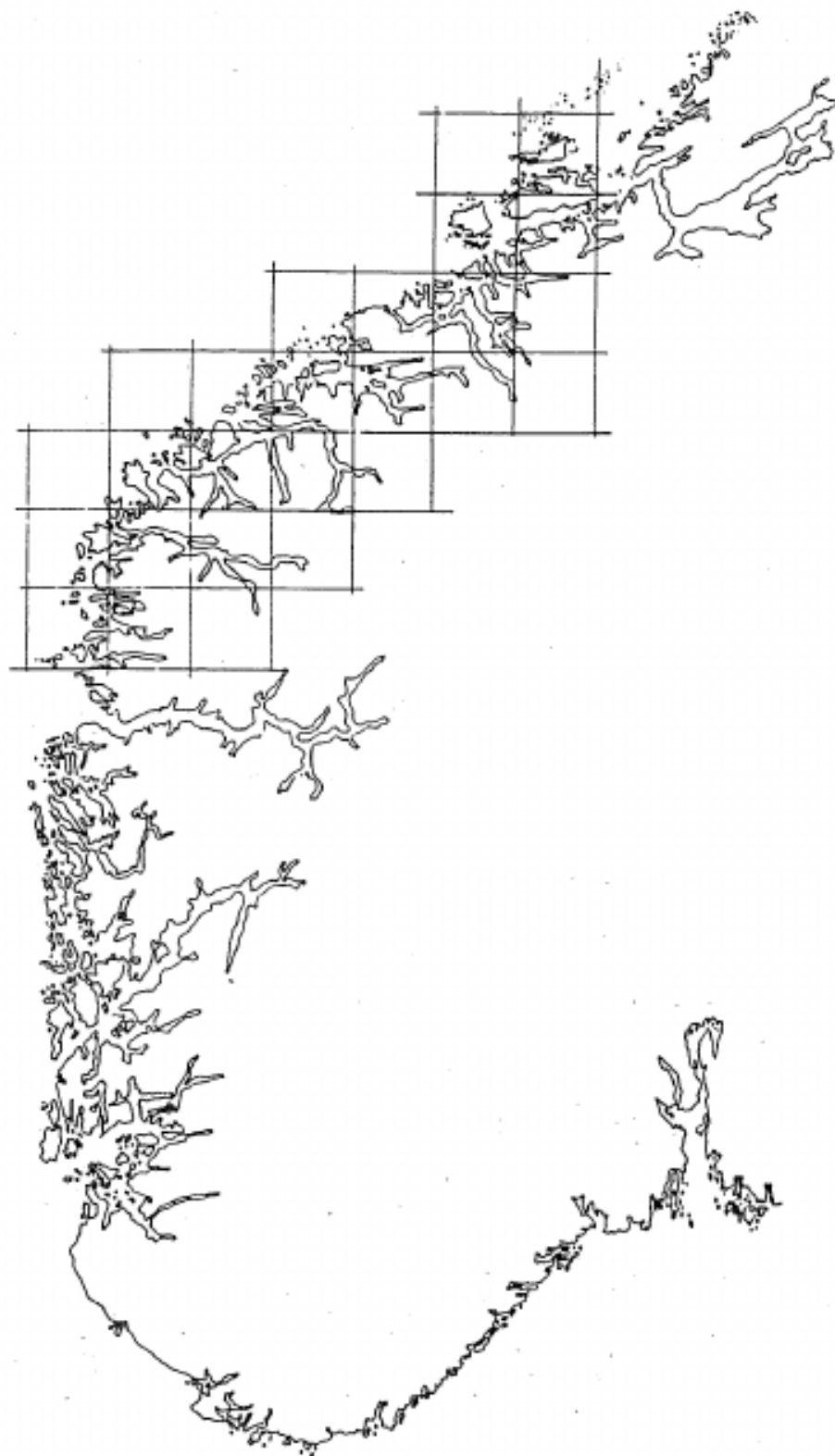


FIGURE 2.1: The coast of the southern part of Norway. The outline was traced from an atlas and digitized at about 1800×1200 pixels. The square grid indicated has a spacing of $\delta \sim 50$ km.

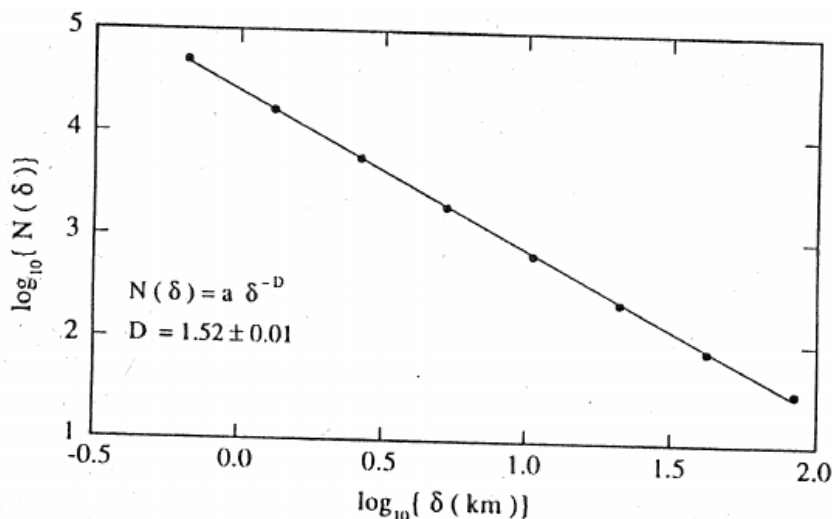


FIGURE 2.7: The number of 'boxes' of size δ needed to cover the coastline in figure 2.1 as a function of δ . The straight line in the log-log plot is a fit of $N(\delta) = a\delta^{-D}$ to the observations. The fractal dimension $D \approx 1.52$.

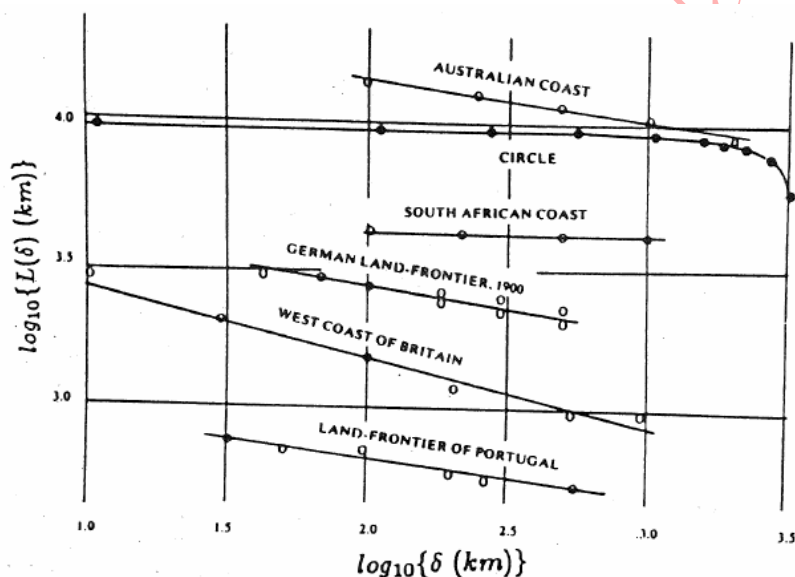


FIGURE 2.3: The length of coastlines as a function of yardstick length (Mandelbrot, 1982).

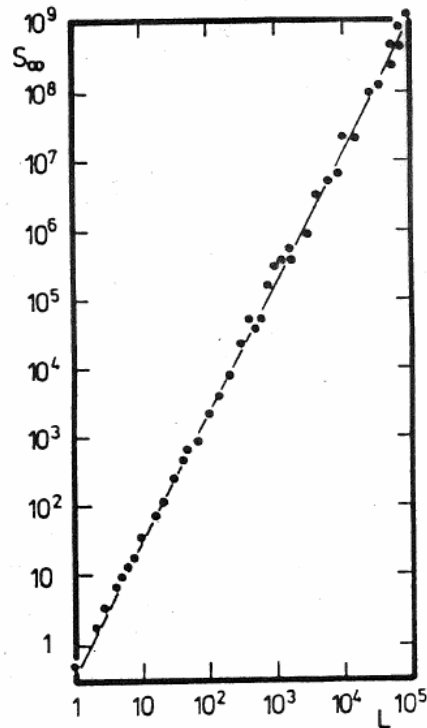


FIGURE 7.5: The size of the percolation cluster at the percolation threshold $p_c = 1/2$ of the triangular lattice as a function of the linear dimension L of the lattice. The slope of this log-log plot for large L gives the fractal dimension $D = 91/48$ (Stauffer, 1985).

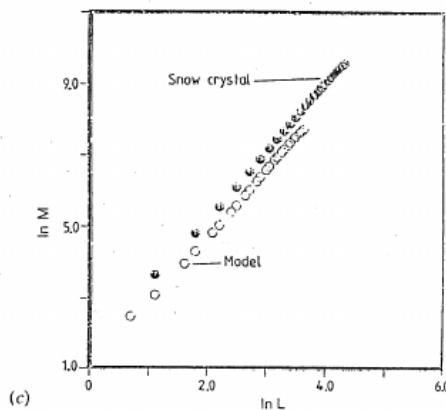
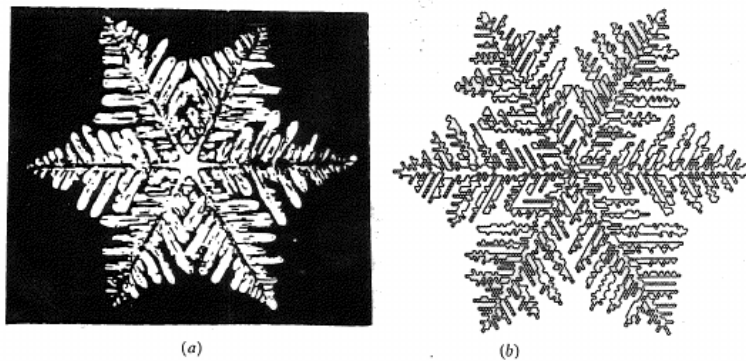


Fig. 1.5. (a) A typical snow crystal. (b) A DLA simulation. (c) Comparison between the fractal dimensions of (a) and (b) obtained by plotting the number of pixels inside an $L \times L$ sandbox logarithmically against L . The same slope, $d_f = 1.85 \pm 0.06$, is found for both. The experimental data extend to larger values of L , since the digitizer used to analyze the experimental photograph has 20,000 pixels while the cluster has only 4000 sites. After [1, 25]

- Samoafiniczność — kiedy potrzeba **różnych** czynników skalujących dla różnych wielkości (długości) charakteryzujących zbiór (mówiliśmy o tym przy okazji modelowania wzrostu warstw).

A. Bunde i S. Havlin, red. *Fractals and disordered systems*. Berlin: Springer, 1996

<http://home.agh.edu.pl/malarz/dyd/ak/>

Opowieść 16

AK w chemii: modelowanie reakcji katalitycznych

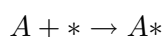
Praktyczne zastosowanie AK można podzielić na dwie kategorie:

- jak na podstawie reguł AK przewidzieć charakter ewolucji układu jako całości?
- jak na podstawie obserwacji układu przygotować reguły AK odtwarzające obserwacje?

Modelowanie układów fizykochemicznych zawiera się w drugiej kategorii.

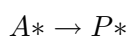
16.1 Reakcja katalityczna

- Badanie kinetyki reakcji katalizy heterogenicznej może pozwolić na:
 - ustalenie schematu reakcji,
 - zaproponowanie sekwencji etapów elementarnych,
 - określenie przebiegu aktu elementarnego.
- Reakcja katalityczna:
 1. Transport substratów z wnętrza fazy gazowej do zewnętrznej powierzchni katalizatora,
 2. Adsorpcja co najmniej jednego z substratów na powierzchni katalizatora



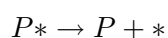
ze stałą szybkości k_A^{ads} ,

3. Reakcja na powierzchni katalizatora z udziałem zaadsorbowanych substratów



ze stałą szybkości k ,

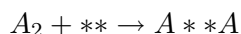
4. Desorpcja produktów z powierzchni katalizatora



ze stałą szybkości k_P^{des} ,

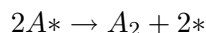
5. Transport produktów reakcji od powierzchni katalizatora do wnętrza fazy gazowej.

- Procesowi adsorpcji często towarzyszy dysocjacja adsorbującej cząsteczki (*adsorpcja dysocjacyjna*):



gdzie ** to *sąsiadujące* ze sobą nie obsadzone centra adsorpcyjne.

- Analogicznie dla *desorpcji asocjacyjnej* mamy:



- Szybkość procesu desorpcji zależy od częstości zrywania wiązań cząsteczek adsorbentu z powierzchnią ω_1 i energii aktywacji procesu zrywania wiązań:

$$k^{\text{des}} = \omega_1 \exp(-E_1/RT)$$

- Niejednorodność powierzchni katalizatora zasadniczo wpływa na szybkości poszczególnych procesów.
- Dyfuzja powierzchniowa — ruchy zaadsorbowanych cząstek wzdłuż powierzchni adsorbenta:

- energia potencjalna układu powierzchnia–zaadsorbowana cząsteczka osiąga lokalne minima dla pewnych położenia cząstek.
- Pokonywanie barier związanych z tymi minimami — energia aktywacji na dyfuzję powierzchniową.
- Bariery te są na ogół znacznie niższe od barier aktywacji innych procesów powierzchniowych (np. desorpcji, reakcji).
- Część procesów mikroskopowych może zachodzić *tylko* w określonych miejscach — dynamika procesu dyfuzji powierzchniowej musi być więc uwzględniona przy badaniu kinetyki reakcji.
- Szybkość dyfuzji powierzchniowej znów dana jest równaniem Arrheniusa...

$$k^{\text{dyf}} = \omega_2 \exp(-E_2/RT)$$

- Zasadniczą trudność opisu kinetyki procesów powierzchniowych jest silna zależność współczynników przedeksponencjalnych ω_i i energii aktywacji dla różnych procesów E_i od najbliższego otoczenia cząsteczek na powierzchni katalizatora.

16.2 Symulacja kinetyki procesu desorpcji termicznej z powierzchni ciała stałego

- Modelowanie dyfuzji powierzchniowej — między modelem błędzenia przypadkowego (pijana mrówka + moneta) a przybliżeniem gazu siatkowego (model F–H–P).
- Modelowanie desorpcji:

- każda cząstka może przejść do fazy gazowej z prawdopodobieństwem P^{des} ,
- wprowadzenie aktywacji cząstek w wyniku zderzeń na powierzchni między sobą ($A + A \rightarrow A^*$) i dopiero aktywne mogą desorbować do fazy gazowej,
- desorpcja izotermiczna — p-stwo desorpcji

$$P \propto \exp(-1/T).$$

- desorpcja termoprogramowana

$$T(t) = T_0 + \beta t.$$

- dodatkowe rozszerzenie o chropowatość powierzchni.

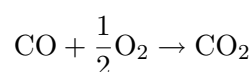
16.2.1 Wyniki symulacji dla powierzchni $\text{SiO}_2/\text{Si}(110)$ z zaadsorbowanym potasem

- Badanie wpływu mechanizmu reakcji, stopnia pokrycia oraz morfologii powierzchni na proces termodesorpcji.
- Badanie procesów izotermicznych oraz temperaturowo programowalnych.
- Jakościowe odtworzenie doświadczalnych zaników potasu zaadsorbowanego na powierzchni $\text{SiO}_2/\text{Si}(110)$ dla różnych wartości temperatury.

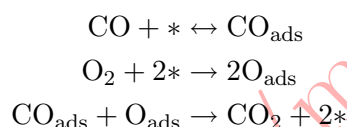
[B.Jagoda, *M.Sc. thesis*, WCh UJ, Kraków 2001]

16.3 Symulacja reakcji katalitycznego utleniania tlenku węgla

- Reakcja katalitycznego utleniania tlenku węgla



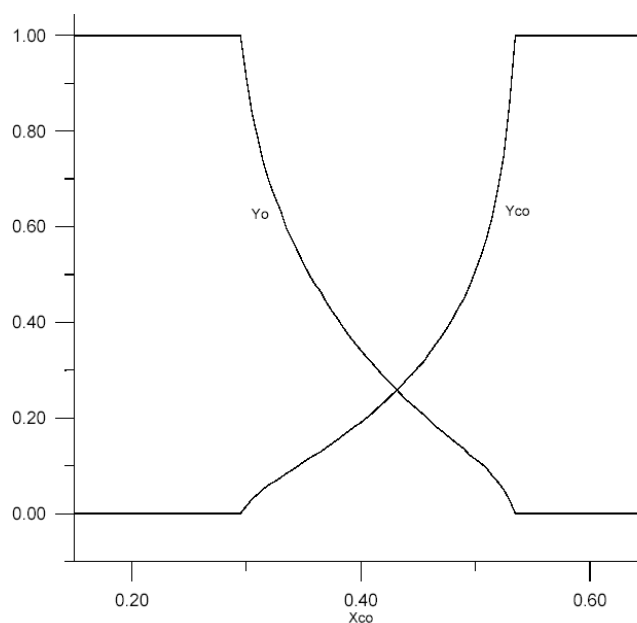
na powierzchni metali z grupy platynowców przebiega według mechanizmu:



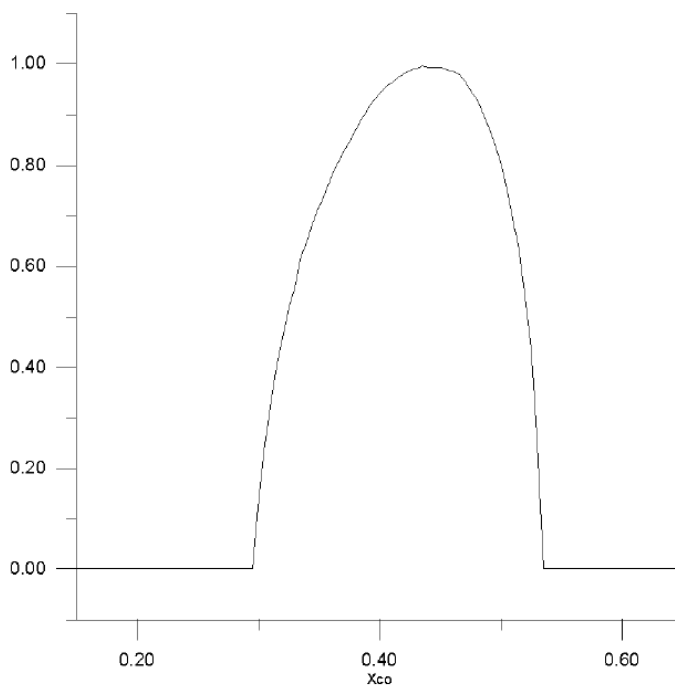
gdzie * oznacza puste centrum aktywne na powierzchni katalizatora.

- Model (synchroniczny):
 - nad powierzchnią katalizatora znajduje się mieszanina gazowa CO i O_2 , której skład określony jest przez ułamki molowe X_{CO} i $X_{\text{O}} = 1 - X_{\text{CO}}$,
 - adsorpcja tlenu na powierzchni katalizatora zachodzi jedynie gdy pusta jest jednocześnie wybrana komórka i jedna z komórek do niej przylegających,
 - jeśli dwie przylegające komórki zawierają cząstki różnego typu, zachodzi reakcja między nimi, a produkt reakcji ulega desorpcji,
 - desorpcja produktów reakcji nie wpływa na skład mieszaniny gazowej nad powierzchnią katalizatora.
- Stany komórki $|\psi\rangle$:
 - $|0\rangle$ — pusta komórka,
 - $|A\rangle$ — komórka zajęta przez cząsteczkę tlenku węgla,
 - $|B\rangle$ — komórka zajęta przez atom tlenu.
 - $|C\rangle$ — bez fizycznej reprezentacji: może warunkowo zostać zajęta przez atom tlenu ($C \rightarrow 0$ lub $C \rightarrow B$ w zależności od tego czy któraś z przylegających komórek jest w stanie 0 i może przyjąć drugi atom tlenu pochodzący z dysocjacji cząsteczki O_2).
- Reguły:
 1. Jeśli w $|\psi(t)\rangle = |0\rangle$, to
 - $|\psi(t+1)\rangle = |A\rangle$ z p-stwem X_{CO} ,
 - bądź $|\psi(t+1)\rangle = |C\rangle$ z p-stwem X_{O} .
 2. Jeśli w $|\psi(t)\rangle = |A\rangle$, to

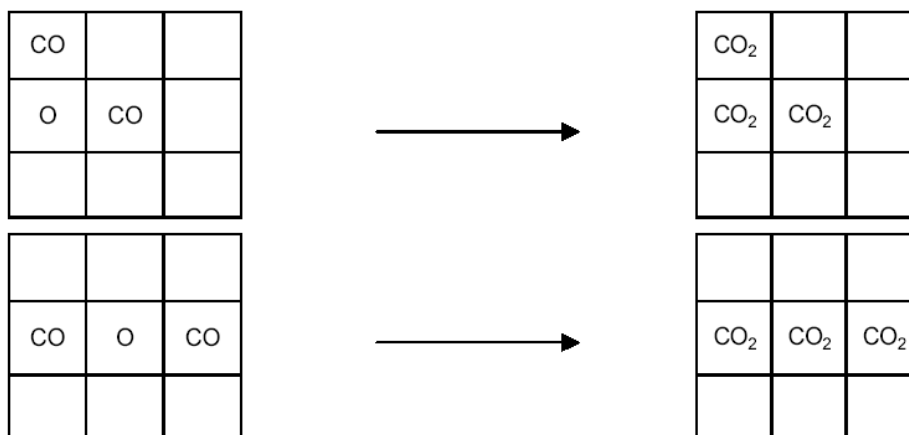
- $|\psi(t+1)\rangle = |0\rangle$ jeżeli przynajmniej jedna z sąsiednich komórek jest w stanie $|B\rangle$,
 - bądź $|\psi(t+1)\rangle = |C\rangle$ w pozostałych przypadkach.
 - 3. Jeśli w $|\psi(t)\rangle = |B\rangle$, to
 - $|\psi(t+1)\rangle = |0\rangle$ jeżeli przynajmniej jedna z sąsiednich komórek jest w stanie $|A\rangle$,
 - bądź $|\psi(t+1)\rangle = |B\rangle$ w pozostałych przypadkach.
 - 4. Jeśli w $|\psi(t)\rangle = |C\rangle$, to
 - $|\psi(t+1)\rangle = |B\rangle$ jeżeli przynajmniej jedna z sąsiednich komórek jest w stanie $|C\rangle$,
 - bądź $|\psi(t+1)\rangle = |0\rangle$ w pozostałych przypadkach.
- Początkowo wszystkie komórki są puste ($|\psi(t=0)\rangle = |0\rangle$).
 - Symulacja trwa do osiągnięcia stałego w czasie średniego pokrycia powierzchni katalizatora cząsteczkami tlenku węgla i atomami tlenu.
 - Przykładowe wyniki: pokrycie powierzchni katalizatora



i szybkość reakcji w funkcji ułamka molowego CO



- Problem synchroniczności AK: niezachowanie stechiometrii reakcji.



- Rezygnacja z synchroniczności oznacza *sekwencyjność* aktów reakcyjnych: by ustrzec się przed niezamierzonym wprowadzeniem korelacji przestrzennych przy prowadzeniu ich w kolejnych komórkach naturalnym rozwiązaniem wydaje się prowadzenie reakcji w komórkach sieci wybieranych w sposób losowy.

- Model asynchroniczny:

1. typ cząsteczki określany jest na podstawie mieszaniny gazowej,
2. jeżeli to cząsteczka CO, to:
 - losowo wybierana jest komórka na powierzchni,
 - jeżeli komórka ta jest zajęta — krok się kończy,
 - jeżeli komórka jest pusta — cząsteczka CO ulega adsorpcji,
 - w losowej kolejności sprawdzane są sąsiednie komórki; jeżeli któraś z nich zawiera zaadsorbowany atom tlenu, zachodzi reakcja i produkt desorbuje — obie komórki stają się puste.

3. jeżeli to cząsteczka O_2 , to:

- losowo wybierane są dwie sąsiednie komórki,
- jeżeli którakolwiek z nich jest zajęta, krok się kończy,
- jeżeli obie są puste, cząsteczka O_2 ulega adsorpcji,
- w losowej kolejności sprawdzane są sąsiednie komórki obydwu komórek zajętych przez atomy O; jeżeli któraś z nich zawiera zaadsorbowaną cząsteczkę CO, zachodzi reakcja i produkt desorbuje — komórka zajęta przez atom tlenu oraz komórka zajęta przez cząsteczkę CO stają się puste.

16.4 Podsumowanie

- Ostatnie wyniki, szanse na dokładne rozwiązanie problemu. [P.Bialic, *M.Sc. thesis*, WCh UJ, Kraków 2001]

Opowieść 17

AK w fizyce medycznej: elektroforeza żelowa

17.1 DNA

Podstawowe właściwości łańcucha DNA z perspektywy modelowania elektroforezy żelowej ograniczamy przez dwa założenia:

- stosunek długości łańcucha do średnicy jego przekroju poprzecznego jest na tyle duży, że łańcuch DNA można przedstawić jako jednowymiarową nić,
- to, że DNA jest podwójną spiralą powoduje, że łańcuch ma odpowiednią do modelowania sztywność (w zbyt sztywnym łańcuchu nie byłyby możliwe ruchy fragmentów, polegające na pełzaniu od jednej wolnej komórki w sieci żelu do drugiej — sąsiedniej, natomiast zbyt wiotki łańcuch mógłby wykonywać nieprzewidziane przez model ruchy poprzeczne) i można o nim założyć, że składa się on z szeregu krótkich, sztywnych fragmentów połączonych wiotką nicią (elektroforeza RNA zbudowanego z pojedynczej nici nie mogłaby być modelowana w przedstawiany sposób).

17.2 Elektroforeza

- **Elektroforeza** — eksperymentalna technika rozseparowywania zbioru długich łańcuchów polimerów na zbiory łańcuchów o jednakowej długości.
- Prędkość dryfu naładowanego łańcucha polimerowego, w ośrodku porowatym, poruszającego się pod wpływem stałego pola elektrycznego, zależy od długości tego łańcucha.
- Elektroforeza DNA w żelu agarozowym — doświadczenie:
 - * żel agarozowy,
 - * dryf naładowanych molekuł DNA pod wpływem pola elektrycznego,
 - * analiza wyników,
 - * elektroforeza z użyciem próbki DNA o wzorcowych długościach łańcuchów.
- Sens modelowania zjawiska elektroforezy.
- Poszukiwanie matematycznej zależności prędkości dryfu molekuly DNA, w danym polu elektrycznym, w zależności od długości tego łańcucha.

17.3 Model reptonowy

- Adaptacja opisu mechanizmu ruchu polimeru przez żel, wprowadzonego przez de Gennesa (1971) — jedynym możliwym sposobem poruszania się łańcucha jest pełzanie (*reptation*) fragmentu łańcucha wzdłuż własnego konturu — od jednej przestrzeni w żelu do drugiej.
- Reprezentacja żelu: kwadratowa, periodyczna tablica (puste przestrzenie tablicy odpowiadają szczelonom żelu).
- Reprezentacja DNA — ciąg ogniw łańcucha (reptonów), połączonych giętkimi wiązaniami.
- Sąsiednie reptony w łańcuchu muszą znajdować się w tej samej komórce bądź w dwóch sąsiadujących komórkach w tablicy.
- Reguły ruchu w modelu reptonowym Rubinsteina (dla $E = 0$):
 1. Repton we wnętrzu łańcucha może przeskoczyć do sąsiedniej komórki tylko wtedy, gdy jeden z jego sąsiadów już w niej jest, a drugi pozostaje w komórce którą ten opuszcza.
 2. Dwa reptony znajdujące się na końcach łańcucha mogą poruszać się w dowolnym kierunku, ale w konsekwencji tego ruchu nie mogą znaleźć się dalej, niż w odległości jednej komórki od swoich sąsiadów.
- Reguły nie uwzględniają
 - * skończonej objętości reptonów,
 - * konsekwencji poplątania łańcucha,
 - * niejednorodności żelu.
- Definicja skali czasowej: jednostka czasu wybierana jest tak, aby każdy repton wykonał w niej, średnio, obydwie możliwe ruchy (dla łańcucha N -reptonowego — $2N$ ruchów).

17.3.1 Zastosowanie modelu do opisu elektroforezy

- Reguły ruchu dla przypadku z polem: Aby model reptonowy mógł opisywać elektroforezę przypisujemy każdemu reptonowi jednakowy, ujemny ładunek.
- Wpływ pola elektrycznego uwzględniamy przez przypisanie prawdopodobieństwa dla ruchu reptonu
 - * zgodnie z kierunkiem pola — $\exp(-E/2)$
 - * i przeciwnie do tego kierunku — $\exp(E/2)$,gdzie E jest bezwymiarowym parametrem proporcjonalnym do pola elektrostatycznego.

- Wartości parametrów w modelu reptonowym

1. Jednostka długości łańcucha dobierana jest tak, aby odzwierciedlała sztywność łańcucha. W przypadku DNA jednostka ta wynosi ok. 150 par zasad (ok. 400 Å).

$$N = \frac{\text{całkowita długość łańcucha}}{\text{jednostka długości}}$$

(Ograniczenia modelu ze względu na dopasowanie wyżej zdefiniowanej jednostki długości i przeciętnego rozmiaru szczeliny w żelu).

2. Bezwymiarowy parametr E : Wielkość $\exp(E)$ jest stosunkiem prawdopodobieństw, że repton przesunie się o jeden krok w kierunku przeciwnym do kierunku pola i w kierunku zgodnym z kierunkiem pola. Powinna być więc równa stosunkowi czynników Boltzmanna dla tych ruchów. Oznacza to, że:

$$E = \frac{\sqrt{2}aqE_f}{k_B T},$$

gdzie:

E_f — natężenie przyłożonego pola elektrycznego,

a — paramer tablicy reprezentujący wielkość szczelin w żelu,

q — ładunek na jeden repton,

Ładunek elektryczny dla jednej pary zasad wynosi e (ładunek elektronu), więc

$$q = 150 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}.$$

17.3.2 Obliczenia analityczne (dla $E = 0$)

- Dla łańcuchów o skończonej długości można ponumerować wszystkie stany w jakich łańcuch może się znaleźć — jest ich 3^{N-1} .
- Definiujemy macierz przejścia $\mathbf{T}(E)$ — element macierzowy T jest prawdopodobieństwem, że łańcuch przejdzie ze stanu i do stanu j . Pozadiagonalne elementy $\mathbf{T}(E)$ przyjmują wartości proporcjonalne do $\exp(E/2)$, jeżeli stany różnią się o jeden dozwolony ruch reptonu, i zero w innym przypadku. Elementy diagonalne dobierane są z warunku normalizacji.
- Prawdopodobieństwo p_i , że w stanie stacjonarnym wystąpi stan i dane jest przez i -ty element wektora własnego macierzy $\mathbf{T}(E)$ związanego z największą wartością własną. Widom pokazał, że p_i są związane z prędkością dyfuzji związkiem:

$$v = \frac{1}{N} \sum_i (e^{E/2} r_i - e^{-E/2} s_i) p_i,$$

gdzie r_i i s_i są ilością ruchów odpowiednio w górę i w dół dozwolonych dla łańcucha w stanie i .

- Współczynnik dyfuzji D związany jest z prędkością dyfuzji relacją Nernsta–Einsteina:

$$D = \lim_{E \rightarrow 0} \frac{v}{NE}.$$

- Rozumowanie Widoma:

- * w przypadku $E = 0$ wszystkie stany są równie prawdopodobne; $p_i = 3^{-(N-1)}$ — małe pole wprowadza zaburzenie które uwzględniamy rozwijając p w szereg perturbacyjny wokół rozwiązania dla $E = 0$:

$$p_i = \frac{1}{3^{N-1} (1 - a_i E/2 + O(E^2))}.$$

- * Widom pokazał, że współczynniki a_i dane są układem równań liniowych:

$$\sum_{i \leftrightarrow j} (a_i - a_j) = -2(s_i - r_i)$$

z uwzględnieniem warunku:

$$\sum_i a_i = 0,$$

gdzie $i \leftrightarrow j$ oznacza, że stan i -ty może być osiągnięty ze stanu j -tego przez jeden dozwolony ruch reptonu.

- * Mając dane współczynniki a_i obliczamy D .
- * Problem: rozwiązanie powyższego układu równań — do 1998 r. — znane jedynie dla $N < 20$.

17.3.3 Symulacja komputerowa — zastosowanie metod Monte Carlo

17.3.3.1 Przypadek bez pola

- W każdym kroku symulacji losujemy jeden z N reptonów i jeden z dwóch kierunków (góra–dół).
- Wylosowany ruch jest akceptowany, jeżeli tylko nie łamie reguł modelu.
- W jednostce czasu — $2N$ kroków, więc prawdopodobieństwo wylosowania określonego ruchu wynosi $1/2N$. Uwzględniamy to licząc czas w sposób następujący: $t \rightarrow t + \Delta t = t + 1/2N$.

17.3.3.2 Przypadek z polem

- Prawdopodobieństwo ruchu w górę i ruchu w dół nie są już sobie równe (ruch w górę o $\exp(E/2)$ bardziej prawdopodobny niż dla przypadku bez pola, ruch w dół o $\exp(-E/2)$ mniej prawdopodobny).
- Stosunek prawdopodobieństw przejść w górę i w dół będzie uwzględniony właściwie, jeżeli ruch w górę będzie akceptowany zawsze, natomiast ruch w dół będzie akceptowany z prawdopodobieństwem $\exp(-E)$.
- Aby również same prawdopodobieństwa były prawidłowe, krok czasowy definiujemy w następujący sposób: $t \rightarrow t + \Delta t = t + \exp(-E/2)/(2N)$.

17.3.3.3 Ulepszanie algorytmu

- W poprzednim algorytmie $(1 - \exp(-E))$ ruchów w dół jest odrzucanych.
- Zamiast odrzucać te ruchy możemy alternatywnie zapisać algorytm tak, aby ruchy w górę i w dół były losowane z odpowiednimi prawdopodobieństwami (ozn. odpowiednio $1 - \alpha$ i α), dobierając je tak aby ich stosunek był równy $\exp(E)$

$$\alpha = \frac{1}{1 + \exp(E)}.$$

- Aby prawdopodobieństwa ruchów w górę i w dół były odpowiednie, definiujemy

$$\Delta t = \frac{1}{2N \cosh(E/2)}.$$

- Algorytm w porównaniu z tym opisanym w poprzednim punkcie jest więc $2/(1 + \exp(-E))$ razy szybszy...

17.3.3.4 Dalsze poprawki

- Przed każdym krokiem tworzymy listy ruchów dozwolonych przebiegając łańcuch repton po reptonie — osobno lista dla ruchów dozwolonych w górę i lista dla ruchów dozwolonych w dół.
- Następnie wybieramy z odpowiednim prawdop. jedną z list, a z niej dany repton.

- Oznaczmy:
 - β — prawdopodobieństwo wyboru listy z ruchami w dół,
 - $1 - \beta$ — prawdopodobieństwo wyboru listy z ruchami w górę,
 - n_u — ilość dozwolonych ruchów w górę,
 - n_d — ilość dozwolonych ruchów w dół.

więc:

$$\beta = \frac{n_u}{n_d + n_u \exp(E)}.$$

- Prawdopodobieństwo danego ruchu w dół β/n_d powinno być równe $\exp(-E/2)$, więc:

$$\Delta t = \frac{1}{n_u \exp(E/2) + n_d \exp(-E/2)}.$$

- Jeżeli w danym kroku poruszymy i -ty repton, musimy przed rozpoczęciem obliczeń dla kroku następnego sprawdzić nowe możliwości ruchu dla reptonów: $i - 1, i, i + 1$ i na tej podstawie aktualizować listy z możliwymi ruchami — dodatkowe zużycie czasu pracy procesora.
- Z rozważań statystycznych wynika, że Δt jest 4.5 razy mniejsze od Δt dla algorytmu opisanego w poprzednim punkcie...
- *Multispin coding*.

17.3.4 Wyniki

17.3.4.1 Symulacja dla $E = 0$

- Prahofer i Spohn postulowali (1996), że powinna być spełniona zależność

$$DN^2 = 1/3.$$

- Na podstawie ścisłych obliczeń Newmana i Barkema (1997) wiadomo jednak, że dla $N > 20$

$$DN^2 - 1/3 \leq 1/3.$$

- Najlepsze dopasowanie do krzywej otrzymujemy dla

$$DN^2 - 1/3 = 5N^{-2/3}/3.$$

17.3.4.2 Symulacja dla $E \neq 0$

- Dla małej przyłożonej siły F spełniona jest relacja Nernsta–Einsteina

$$v = FD.$$

- Jeżeli przyjmiemy, że u nas $D \propto N^{-2}$ mamy

$$v = NED \propto \frac{E}{N}.$$

- Z eksperymentu wiadomo, że dla dużych N prędkość nie zależy od N .

- Dwa powyższe fakty sugerują zależność

$$v = c_1 \frac{E}{N} + c_3 E^3.$$

- Okazało się jednak, że znacznie lepsze dopasowanie otrzymuje się dla

$$v^2 = c_2^2 \frac{E^2}{N^2} + c_4^2 E^4,$$

gdzie: c_1, c_2, c_3, c_4 — stałe.

17.3.4.3 Różne koncentracje żelu

Przy próbie porównania wyników symulacji/obliczeń z eksperymentem napotykamy na dodatkowy problem jakim jest obecność w eksperymencie dodatkowego parametru jakim jest koncentracja żelu p :

$$v^2 = c_2^2 \frac{E^2}{p^3 N^2} + c_4^2 \frac{E^4}{p}.$$

17.3.5 Model reptonowy jako model cząstkowy

- Każde połączenie w “standardowym” modelu, może być zastąpione dwoma rodzajami cząstek (“A” i “B”) na jednowymiarowej sieci — odpowiednio do “nachylenia” tego połączenia. Część komórek sieci może pozostać pusta.
 - Reguły modelu reptonowego przenoszą się na cząstki “A” i “B”:
 - * wewnątrz sieci liczba cząstek jest zachowana — cząstki mogą się poruszać ale nie mogą być tworzone ani znikać,
 - * cząstki mogą przeskakiwać (o jedną komórkę sieci) tylko do komórek aktualnie niezajętych,
 - * cząstki w skrajnych komórkach sieci mogą zniknąć,
 - * jeśli komórki na końcach sieci są wolne — mogą się w nich pojawić cząstki obu typów.
 - Pod nieobecność pola ($E = 0$) każda cząstka wykonuje średnio po jednym skoku w lewo lub w prawo na jednostkę czasu.
 - Przy niezerowym polu ($E \neq 0$) “A” skaczą w lewo z “prawdopodobieństwem” $\exp(E/2)$ oraz w prawo z “prawdopodobieństwem” $\exp(-E/2)$ (znów na jednostkę czasu symulacji). Cząstki “B” zaś skaczą z częstotliwością proporcjonalną do $\exp(-E/2)$ i $\exp(E/2)$ odpowiednio w lewo i prawo. Dlatego generalnie przy przyłożonym polu cząstki “A” dryfują w lewo zaś “B” w prawo.
- Możliwości zastosowania modelu reptonowego do innych zagadnień.

Opowieść 18

Sieć sprzężonych odwzorowań

Babcia Weatherwax czytała z pewną niechęcią, ale liczyła bezbłędnie. Zakładała, że wszystko, co napisano, prawdopodobnie jest kłamstwem, i odnosiło się to również do liczb. Liczb używają tylko ludzie, którzy próbują wykręcić jakiś numer.

[Terry Pratchett, *Maskarada*, Prószyński i S-ka (Warszawa 2003)]

- Zastępujemy dyskretne stany komórki liczbami rzeczywistymi x_i gdzie i numeruje komórki sieci.
- Regułę opisującą stan komórki w zależności od jej sąsiedztwa zastępujemy więc zbiorem równań iteracyjnych:

$$x_i(t+1) = F_i(\{x_j(t)\}), \text{ gdzie } i, j = 1, \dots, N$$

i $x_i(t)$ zmienia się zgodnie z przepisem F_i .

- Jeśli argumentami F_i są
 - wszystkie zmienne x_i to sprzężenie między zmiennymi jest *globalne*,
 - tylko niektóre spośród x_i to sprzężenie między nimi jest *lokalne*.
- Te określenie *nie* muszą być ściśle — wcale nie musi być zdefiniowana odległość między zmiennymi x_i — jednak w wielu zastosowaniach F_i jest określona na otoczeniu x_i , tak jak to było w AK.
- Porównanie współczesnych technik obliczeniowych:

Formalizm	przestrzeń	czas	stan
AK	dyskretna	dyskretny	dyskretny
SSO	dyskretna	dyskretny	ciągły
cząstkowe RR	ciągła	ciągły	ciągły

- Poszerzenie dostępnych stanów komórki przestrzeni w technice SSO ma też swoją cenę — AK uwalniały nas od błędów zaokrągleń...

18.1 Jak zostać bankrutem...

- Sytuacja fizyków jest w pewnym stopniu bardzo komfortowa — źródło utrzymanie — problemy do rozwiązania — zdają się tworzyć zbiór nieskończony.

- Polityk już nie ma tak dobrze — po przekonaniu do swoich racji 38 milionów osób traci motywację do dalszych działań.
- Na ogół jednak jednostka we współczesnym społeczeństwie *nie* jest samowystarczalna i musi korzystać z rezultatów działalności innych jednostek danej społeczności.
- Zwiększenie liczby dóbr (sił jednostki, jej bogactwa czy tempa ich gromadzenia) może następować tylko poprzez pobieranie ich od innych osobników.
- Każdy osobnik i ma M sąsiadów $\{j(i)\}$ od których doznaje dobrodziejstwa.
- Ograniczenie “dóbr” w systemie/społeczeństwie dane jest przez globalny nieliniowy wyraz Verhulsta.
- Wreszcie jednostka jest w stanie zorientować który z sąsiadów przy jego zasobach i chęci ich transferu jest w stanie zapewnić jej największy dochód — i do niego zwraca się z prośbą o dodatkową pomoc.
- Problem należy do licznej klasy problemów współzawodnictwa o dobra.
- Zazwyczaj badania dotyczą jednak dynamicznej równowagi w układzie (układy takie mają tendencję do samoorganizacji)

18.1.1 Model

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = \lambda_1 \cdot \sum_{j=1}^M J_{ij} P_j(t) r_j(t) - \lambda_2 \cdot \left[\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N P_j(t) r_j(t) \right]^2 + \lambda_3 \cdot \max_{1 \leq j \leq M} [d_{ij} P_j(t) r_j(t)]$$

- J_{ij} — tempo dostarczania dóbr $j \rightarrow i$.
- d_{ij} — podobnie, ale od najbardziej obiecującego.
- λ_1, λ_2 i λ_3 — opisują intensywność trzech uwzględnionych w modelu procesów.
- $r_i = 1$ dla aktywnej jednostki i $r_i = 0$ w przeciwnym wypadku.
- Symulacje zaczynamy z samymi aktywnymi jednostkami, ale jeśli w kolejnych krokach czasowych jej moc P_i spadnie poniżej zera jest ona eliminowana z gry $r_i = 0$.
- P_i wyznaczamy numerycznie.
- Dwa rodzaje sąsiedztw:
 - M sąsiadów jest losowanych (są przypadkowi),
 - sąsiadami są najbliżsi geometrycznie osobnicy ($M/2$ z lewej i $M/2$ z prawej) — wówczas na społeczność można patrzeć jak na jednowymiarowy łańcuch z periodycznymi warunkami brzegowymi.

18.1.2 Wyniki symulacji

- Początkowo średnia ilość dóbr w społeczeństwie powiększa się — dopóki zasoby nie zostaną przekroczone/wykorzystane.
- Wówczas moc/bogactwo niektórych z jednostek zaczyna gwałtownie spadać, również poniżej zera i są oni eliminowani z gry, to zmniejsza dopływ dóbr do kolejnych jednostek i pociąga za sobą kolejne “bankructwa”.
- W efekcie tylko mały ułamek z początkowej liczby osobników pozostaje w grze.
- W przypadku sąsiedztwa przypadkowego — zazwyczaj fale kryzysu przeżywa *tylko jeden* osobnik, tracący z czasem moc jak $1/t$:

$$\frac{dP_{\text{ult}}(t)}{dt} = -\lambda_2 \cdot P_{\text{ult}}^2(t)$$

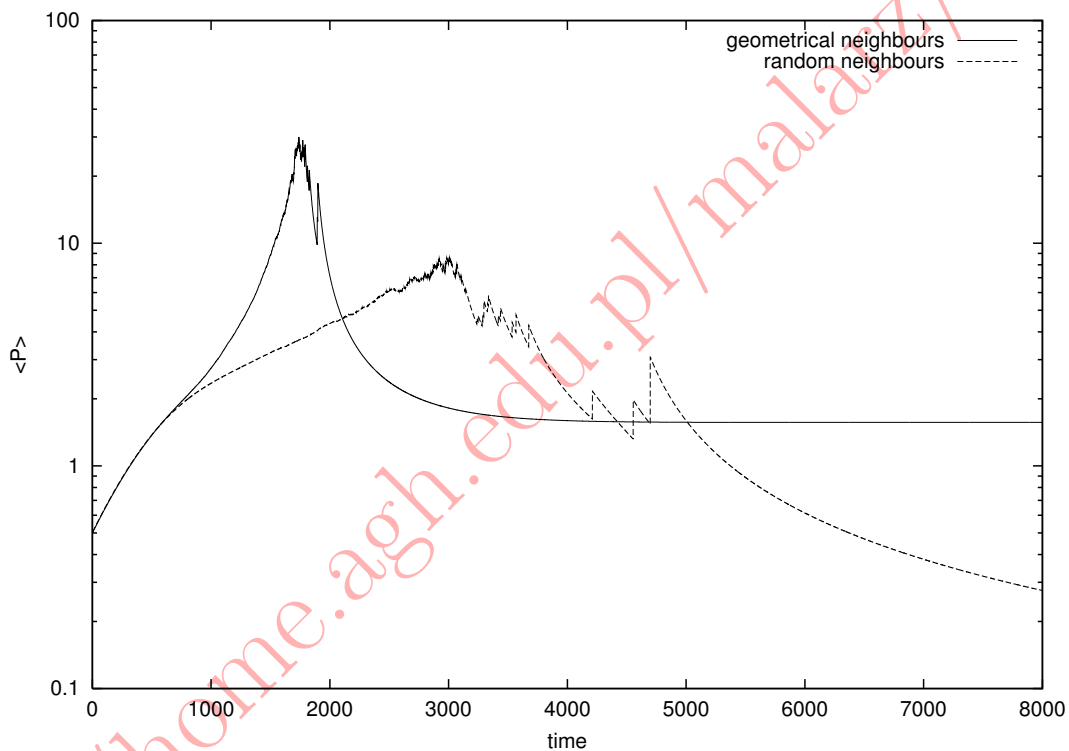
- Jeśli pozostanie ich dwóch lub więcej można analitycznie rozwiązać uproszczony przypadek dla $J_{ij} = J$ i $d_{ij} = d$: średnia moc dąży do dodatniego i stabilnego punktu stałego.
- Sprawdza to starą dobrą rzymską zasadę *do ut des* — lepiej pomagać “przyjacielom” którzy (być może) nam się zrewanżują niż osobom losowo wyciągniętym na siłę z tramwaju.
- Zatrzymajmy się jeszcze na chwilę przy społeczeństwie z geometrycznym sąsiedztwem.
- Zdefiniujmy jako sukces społeczeństwa sytuację w której po kryzysie pozostaje więcej niż jeden osobnik.
- Procent “sukcesów” społeczeństwa z geometrycznym sąsiedztwem dla różnych wartości (λ_1, λ_3) . $M = 4$, $\lambda_2 = 1$, $N_0 = 10^4$, $N_{\text{iter}} = 10^4$, $N_{\text{run}} = 1000$.

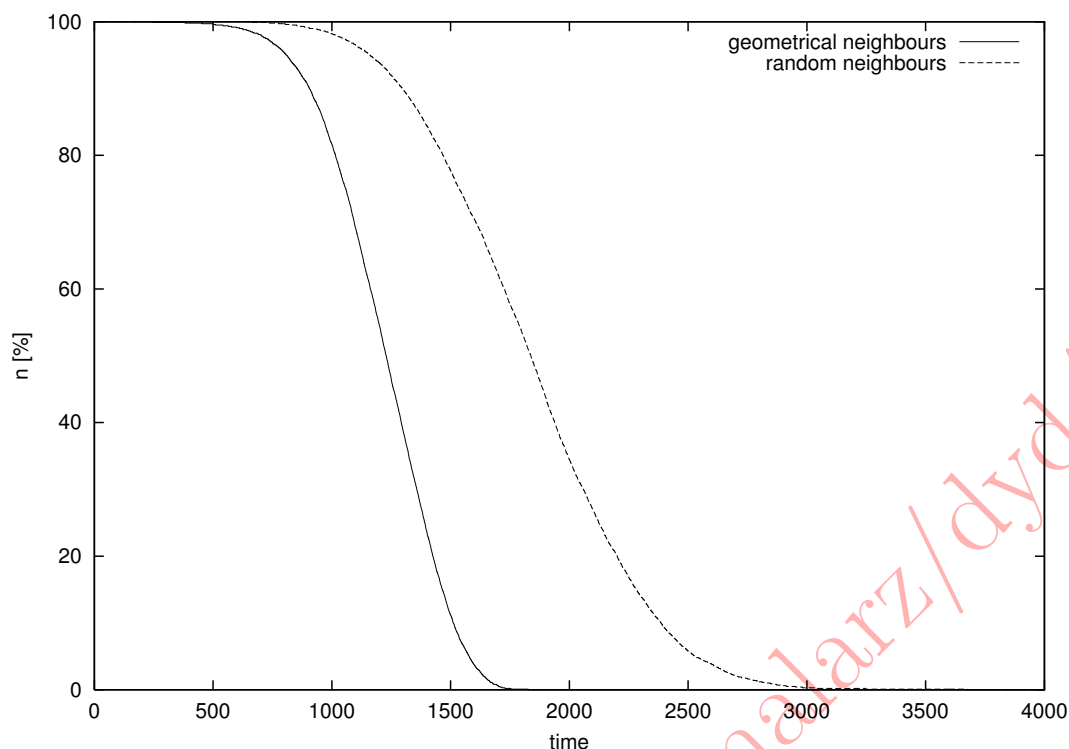
λ_1	λ_3	0.5	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4	4.5	5
0.5		78	63	61	59	58	55	48	52	49	48
1		93	77	71	65	60	60	58	54	54	52
1.5		96	84	76	73	67	65	62	59	57	44
2		96	91	85	78	71	70	65	63	60	37
2.5		97	94	89	82	75	72	70	65	64	59
3		97	95	92	86	81	76	74	69	67	66
3.5		97	96	92	90	86	79	76	73	70	68
4		97	97	95	91	87	89	78	75	71	72
4.5		97	96	95	92	89	86	81	78	78	75
5		97	96	96	93	92	88	83	81	80	73

- Zastanawiająca jest tak różna rola parametrów λ_1, λ_3 .
- Można się spodziewać, że zwiększanie *obu* z nich powinno prowadzić do zwiększenia liczby sukcesów.
- Jedyną różnicą jest odpowiadanie wyrazu z λ_3 za pewien rodzaj lokalnej optymalizacji zaś pierwszy jest automatyczny.
- Średnia moc po odpowiednio długich czasach nie wykazuje tej przypadłości.
- Rezultaty “kręcenie” parametrem λ_1 mogą być łatwo kompensowane poprzez zmianę λ_3 .

- Średnia moc $\langle P \rangle$ (w jednostkach umownych) po $N_{\text{iter}} = 10^4$ krokach czasowych uśredniona po $N_{\text{run}} = 100$ niezależnych symulacjach dla geometrycznego sąsiedztwa i różnych (λ_1, λ_3) . $M = 4$, $\lambda_2 = 1$, $N_0 = 10^4$.

$\lambda_1 \lambda_3$	0.5	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4	4.5	5
0.5	0.73	0.87	1.23	1.58	1.73	1.71	2.24	2.43	2.92	3.06
1	1.30	1.50	1.56	1.97	2.15	1.99	2.84	2.92	3.56	3.71
1.5	1.84	2.13	2.26	2.17	2.72	2.17	3.01	3.55	4.25	3.22
2	2.43	2.54	2.70	2.97	2.74	3.31	3.22	4.07	4.29	4.92
2.5	2.96	3.30	3.29	3.66	3.73	4.20	4.05	3.61	3.63	4.05
3	3.47	3.63	4.11	3.76	4.42	4.09	4.06	4.06	4.34	4.54
3.5	4.09	4.21	4.41	4.73	4.72	4.85	4.80	4.62	5.00	5.65
4	4.63	4.68	5.02	5.10	5.77	4.91	5.52	5.26	5.88	5.89
4.5	4.87	5.15	5.45	5.89	5.88	5.81	5.97	7.06	5.88	6.28
5	5.43	5.68	5.87	6.19	6.48	6.20	6.96	6.58	6.53	6.76





[K.Malarz, K.Kulakowski, cond-mat/0104487]

18.2 ...albo chociaż małżonkiem

18.2.1 Model

- Grupa społeczna jest reprezentowana przez digraf w pełni połączony.
- Dla $t = 0$ losowa wartość $p(i)$ “dóbr” jest wiązana z każdym węzłem i .
- Każdy link $r(i, j)$ jest również inicjalizowany losowo i oznacza procent “dóbr” oferowanych przez i dla j .
- Dynamika zmian “dóbr”

$$\frac{dp(i)}{dt} = N^2 - \left[\sum_{j=1}^N p(j) \right]^2 + \sum_{j=1}^N [r(j, i)p(j) - r(i, j)p(i)],$$

pierwsze dwa wyrazy prawej strony równania wprowadzono dla utrzymania sumy $p(i)$ kończącej (pewne podobieństwo do składnika Verhulsta). Trzeci wyraża wymianę “dóbr” między aktorami/agentami i i j .

Wysumowanie po j daje całkowity strumień “dóbr” wpływających do i wypływających od i -tego agenta/aktora z wagami $r(i, j)$.

- $i \rightarrow j$ przekazuje $p(i) \cdot r(i, j)$
- Dynamika reorientacji kierunku przekazu “dóbr” odzwierciedla zasadę, by więcej dostawał ten od kogo dostajemy więcej:

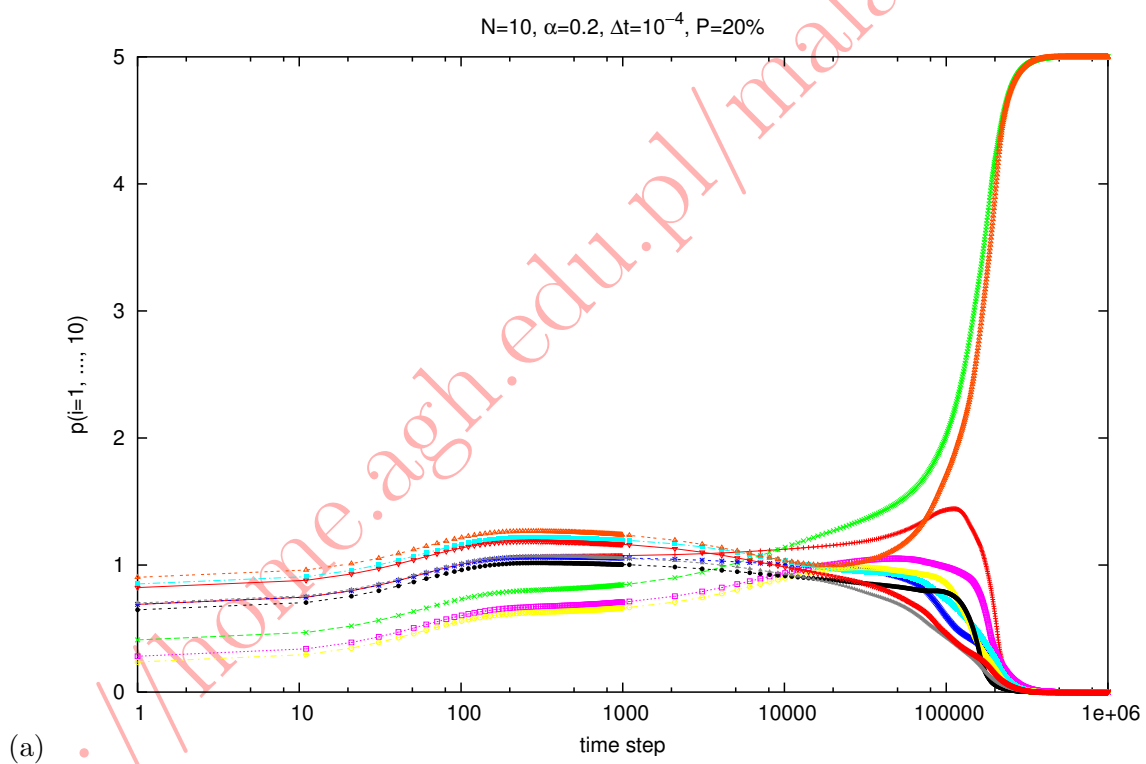
$$\frac{dr(i, j)}{dt} = \alpha \left(r(j, i)p(j) - \frac{\sum_k r(k, i)p(k)}{N - 1} \right).$$

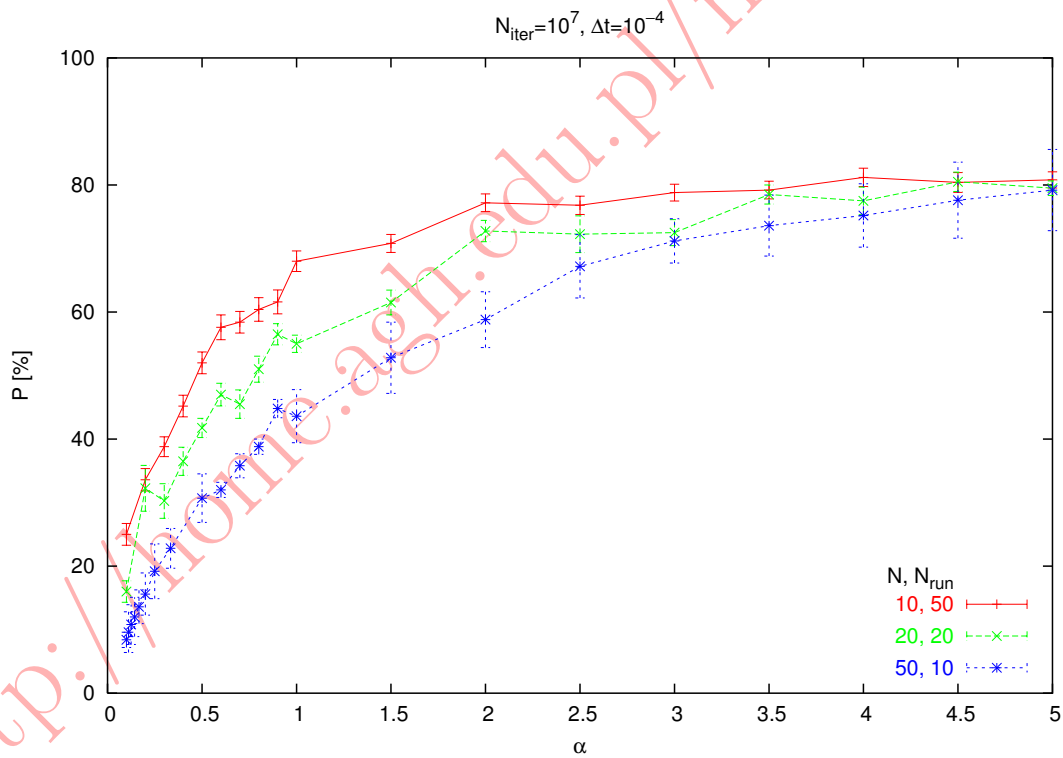
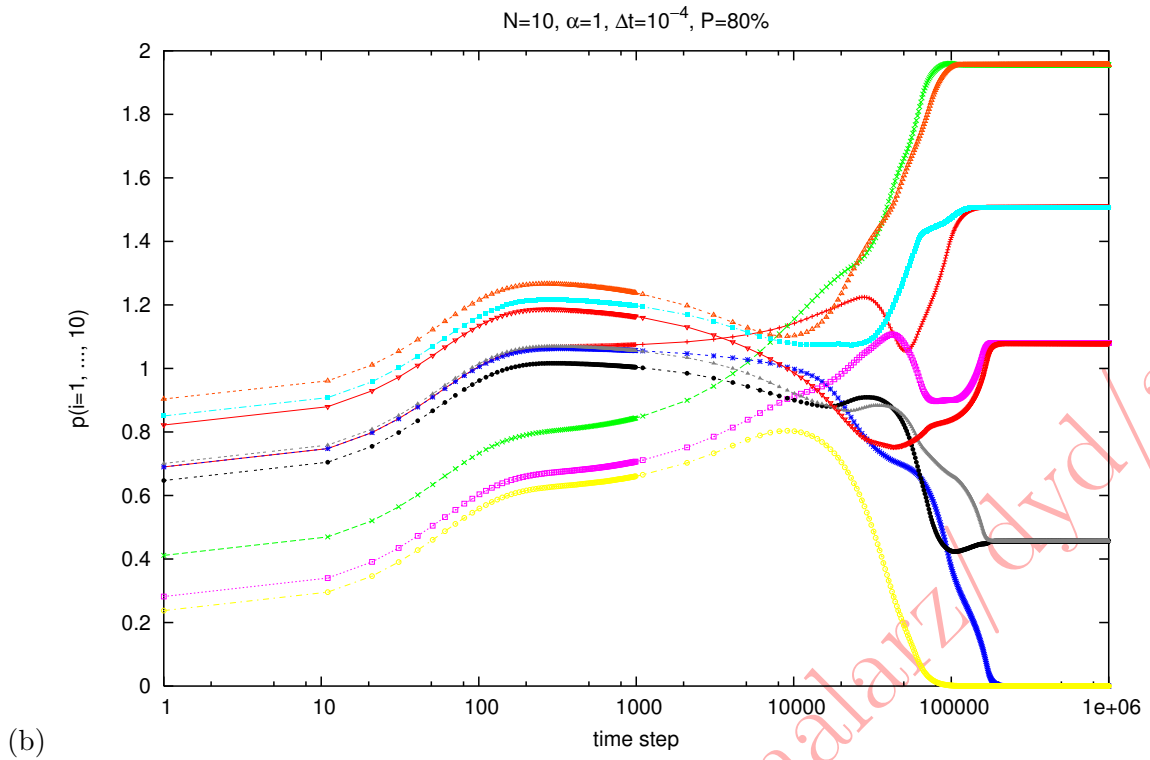
- współczynnik α jest wspólną dla wszystkich szybkością reorientacji (zmiany $r(i, j)$), przy założeniu jednostkowej intensywności zmian $p(i)$.
- $p(i) < 0 \rightarrow p(i) = 0$
- W każdym kroku symulacji

$$\forall i : \sum_j r(i, j) = 1$$

18.2.2 Wyniki symulacji

- Po pewnym czasie pozostają tylko pewne pary (m, n) partnerów o niezerowych $p(m)$ i $p(n)$, każda z $r(m, n) = r(n, m) \neq 0$.
- Pozostałe $r(m, i \neq n)$ zerują się.
- Niesparowane nody mają $p(i) = 0$
- Procent $p(i) > 0$ rośnie z α i nieco maleje z N .
- Czyżby model społeczeństwa monogamistów???



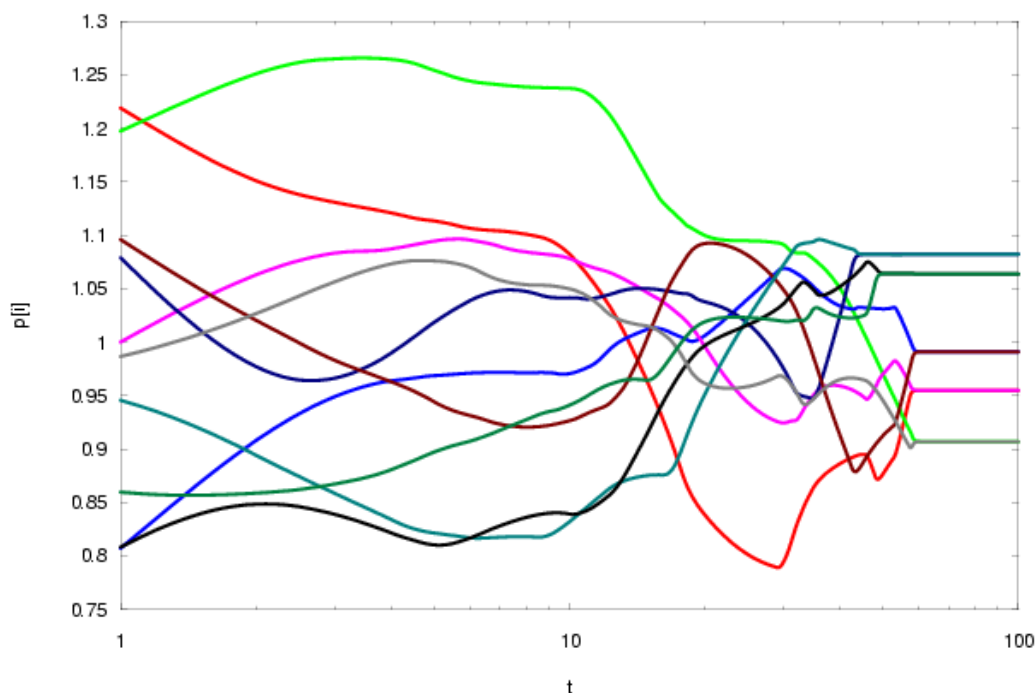


[J.Karpińska, K.Malarz, K.Kułakowski, Int. J. Mod. Phys. **C15** (2004) 1227, cond-mat/0405216]

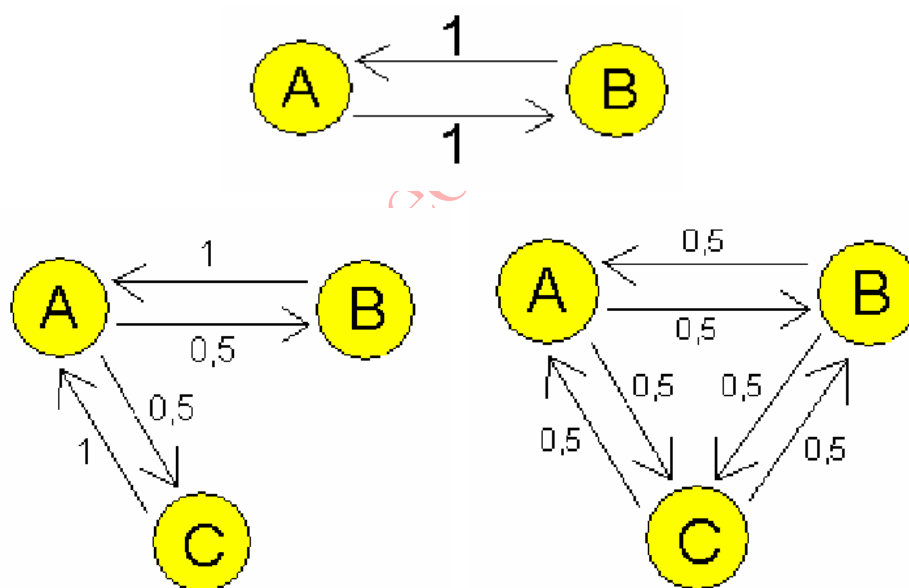
Ewolucja $r(i, j)$ bez uwzględnienia p :

$$\frac{dr(i, j)}{dt} = \alpha \left(r(j, i) - \frac{\sum_k r(k, i)}{N-1} \right) \quad (18.1)$$

The amount of resources as dependent on time for $N = 10$ and $\alpha = 0.2$.



The scheme of a pair and two kinds of triads.



[M.Waśko, K.Kułakowski, Acta Phys. Pol. **B38** (2006) ???, physics/0605070]

18.3 Książę i żebrak, czyli modelowanie hierarchii społecznych

- In the Bonabeau model, N agents walk randomly on a given area and fight when they met. Initially, the outcome of fights is random.
- However, agents are able to remember for some time their past results and this memory influences their subsequent fights.
- Then, there are two competitive mechanisms.

- First, each fight influences the agents' power: winner is stronger and loser is weaker, what alters the probabilities of winning of their future fights.
- Second, the information of these alterations is gradually erased.
- As a consequence, a phase transition can be observed: for a given velocity of forgetting, frequent fights produce a hierarchy of permanent winners and permanent losers. This hierarchy is maintained in time.
- However, if fights are rare, the hierarchy is being forgotten quicker, than it is reproduced.
- The frequency of fights depends on the number of fighters on a given area. The order parameter is the dispersion of power of the agents, or the dispersion of probabilities of winning/losing of pairs of agents.

18.3.1 Model

- Two fighters i and j are selected randomly from a population of N agents.
- The probability that i -th agent wins over j -th is

$$P(i, j, t) = \frac{1}{1 + \exp\{\sigma(t)[h_j(t) - h_i(t)]\}} \quad (18.2)$$

where h_i is the power of i -th agent at time t and

$$\sigma^2(t) = \langle h_i^2(t) \rangle - \langle h_i(t) \rangle^2, \quad (18.3)$$

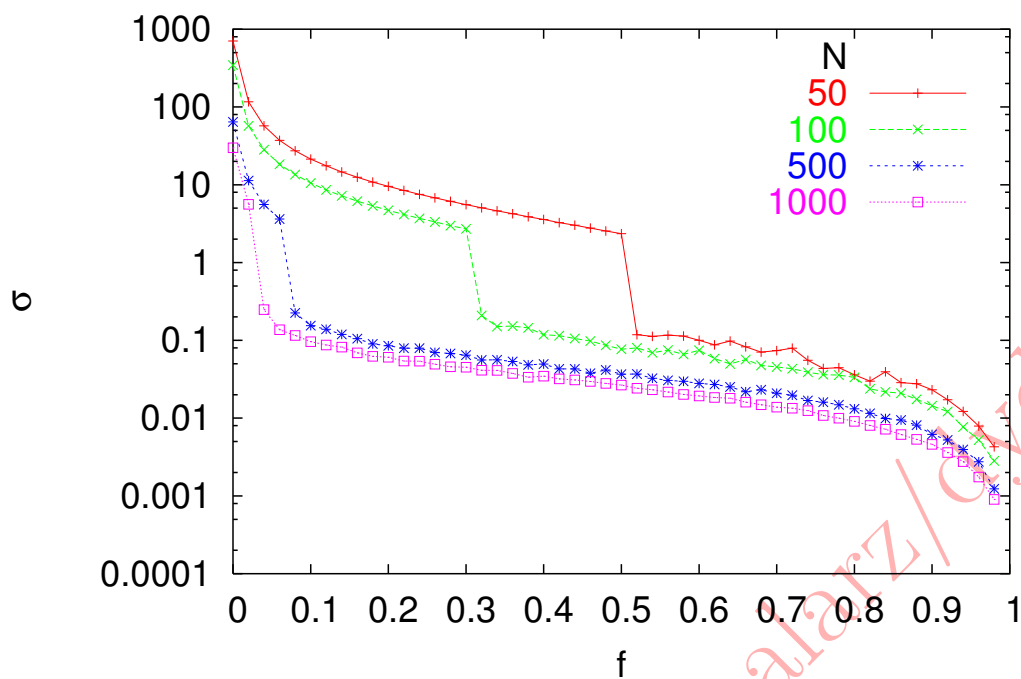
where $\langle \dots \rangle$ is the average over N agents. As an output of the fight, the power h_i of the winner increases by ε and the one of the loser decreases by ε .

- Every N_f steps (i.e. fights), the powers h_i of all agents are multiplied by the factor $(1 - f)$, where $f \in (0, 1)$. This is the step of 'forgetting'.
- As often as forgetting procedure takes place the current value of dispersion σ is evaluated which is then fixed during next N_f fights. The number of such updates of σ is N_{iter} . Then, the total number of fights during one simulation is $N_f N_{iter}$.

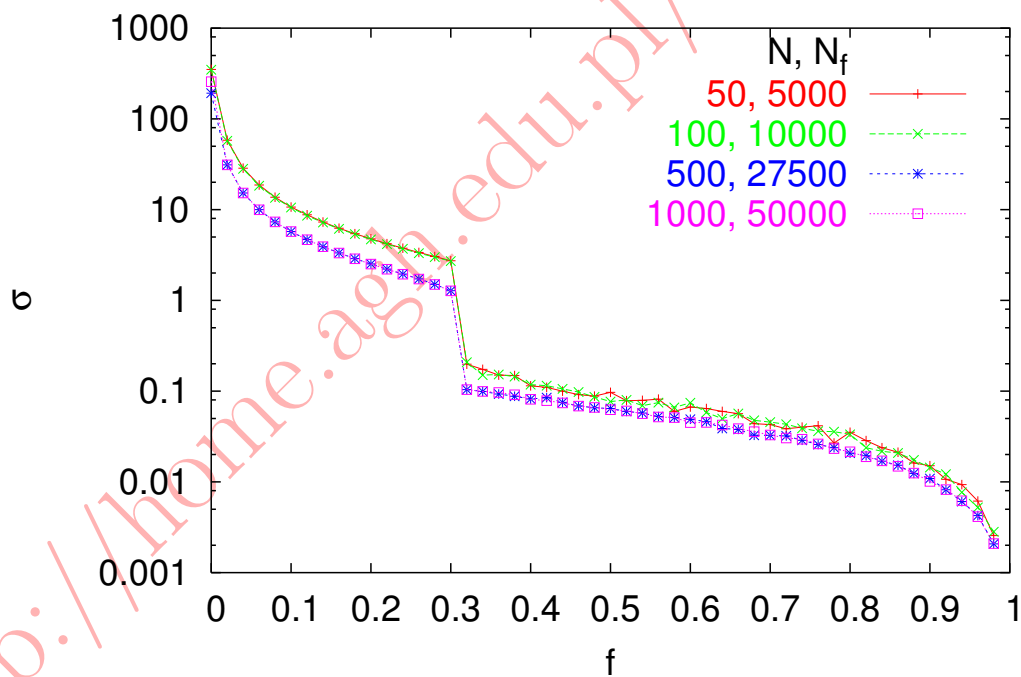
18.3.2 Wyniki symulacji

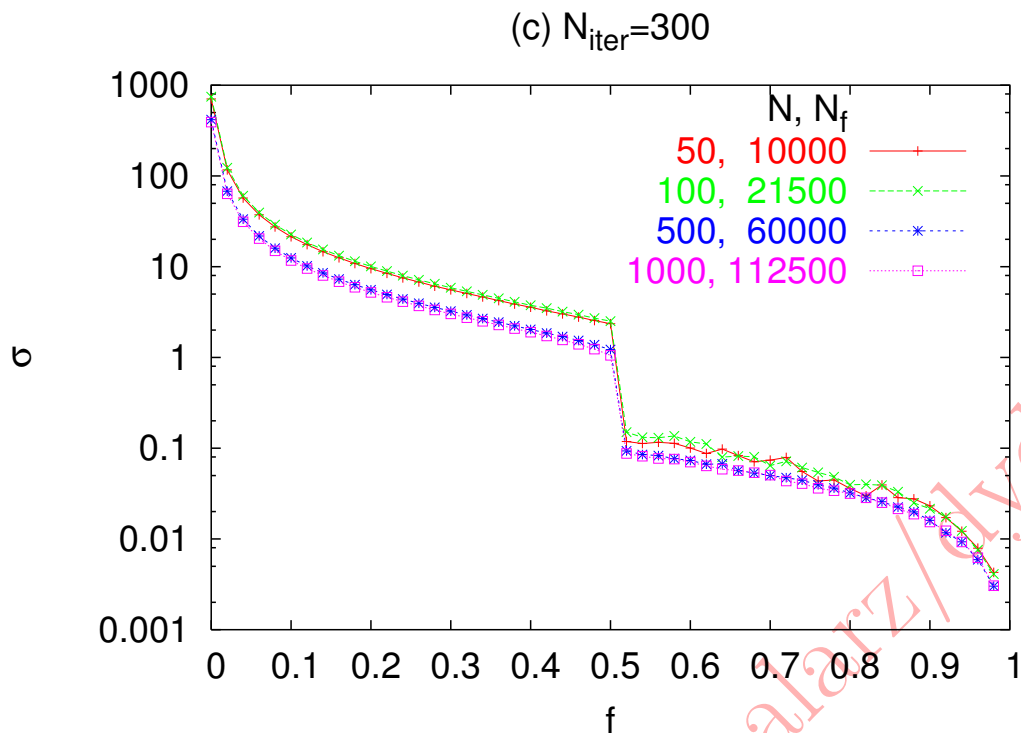
Dependence of $\sigma(f)$ for (a) fixed $N_f = 10^4$ and different values of N and with tuned values of N_f for N -independent values of f_C : (b) $f_C = 0.3$, (c) $f_C = 0.5$.

(a) $N_f=10000, N_{iter}=300$

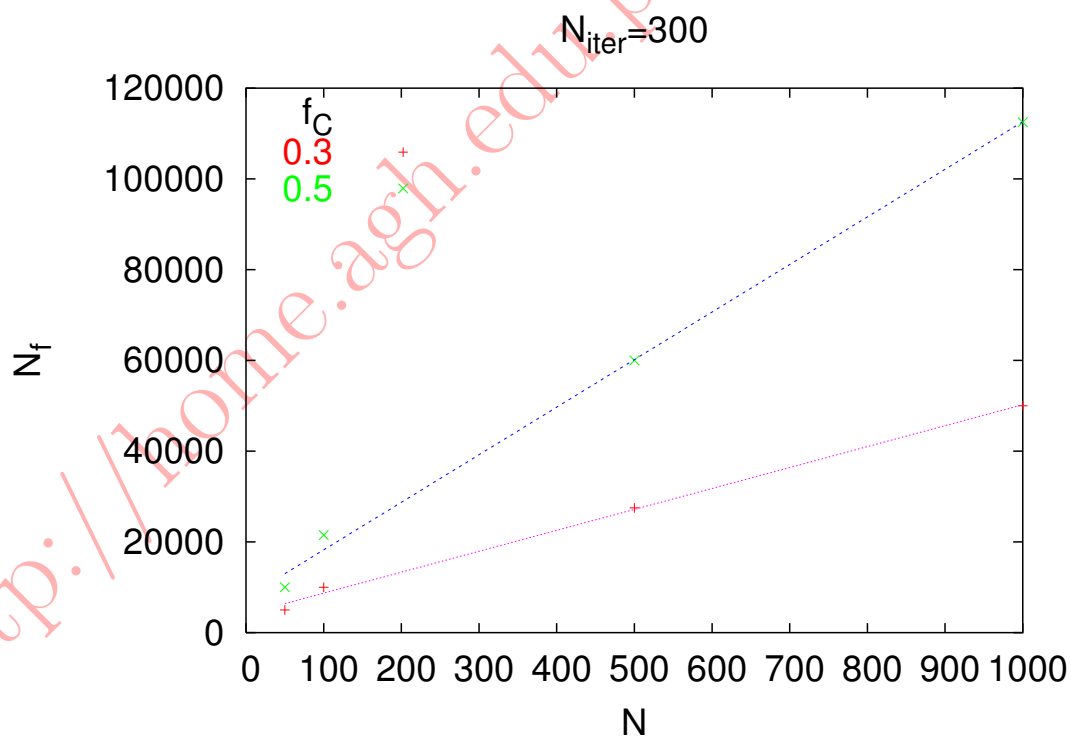


(b) $N_{iter}=300$



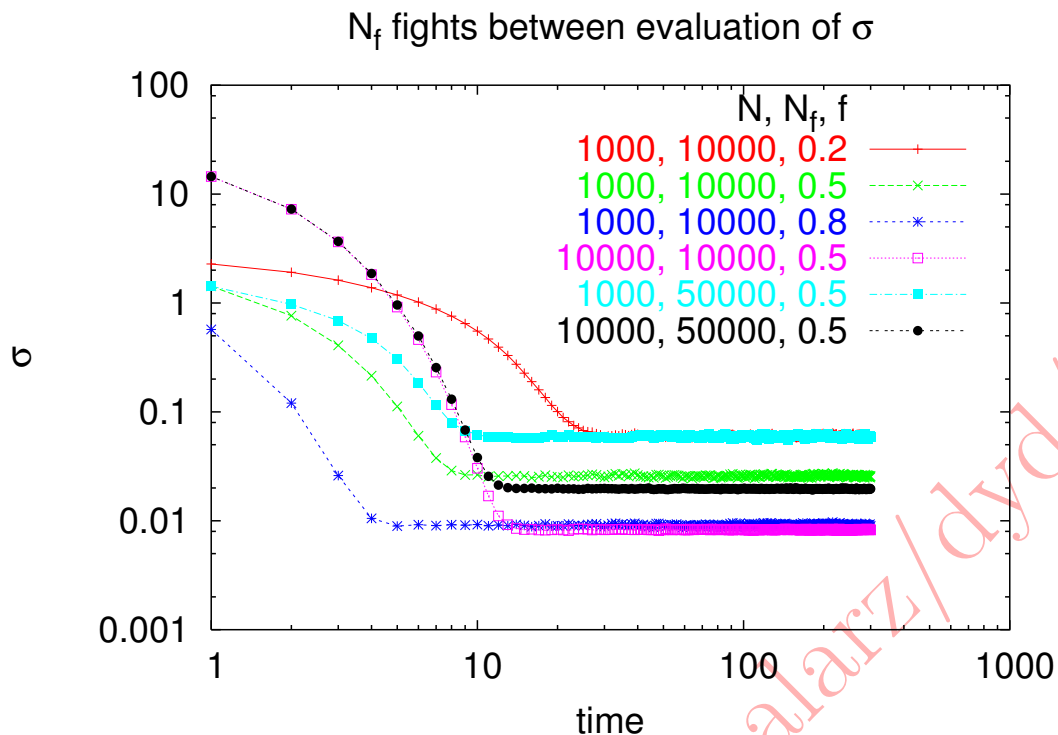


Dependence of $N_f(N)$ for different values of f_C . Linear fits are $N_f = 105N + 7756$ ($f_C = 0.5$) and $N_f = 46N + 4095$ ($f_C = 0.3$).

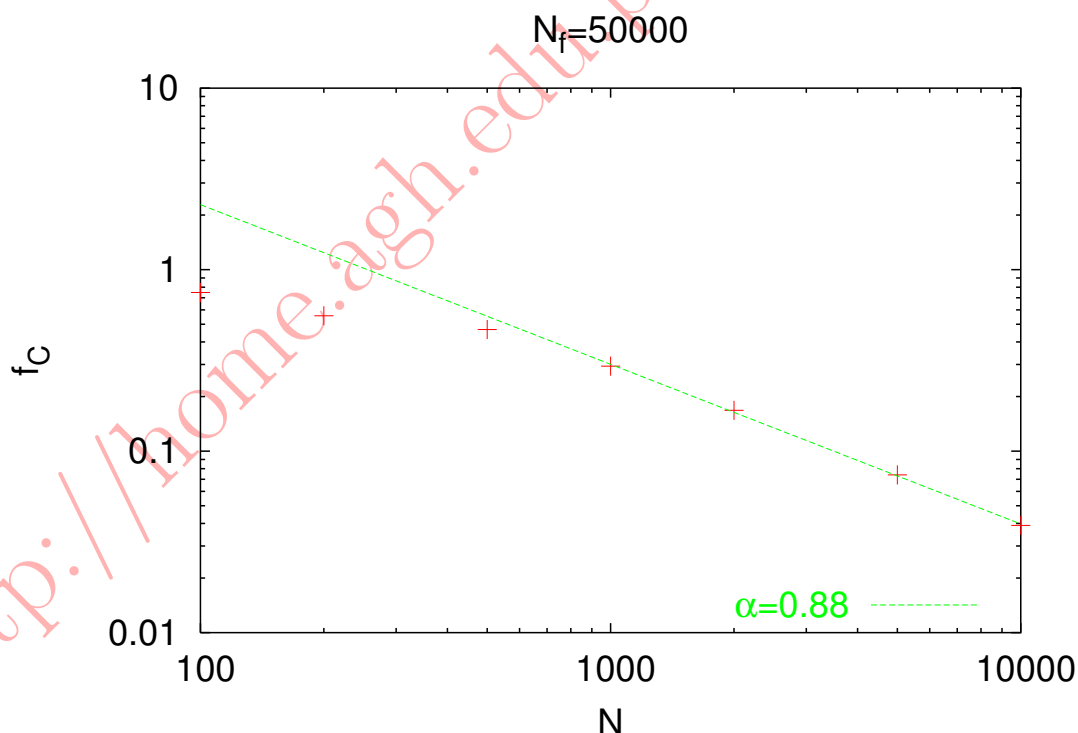


We note that the obtained values of σ are stable vs time, because the distribution of the agent's power h_i stabilize after some transient time.

Time evolution of σ . Between subsequent σ evaluations N_f fights take place.

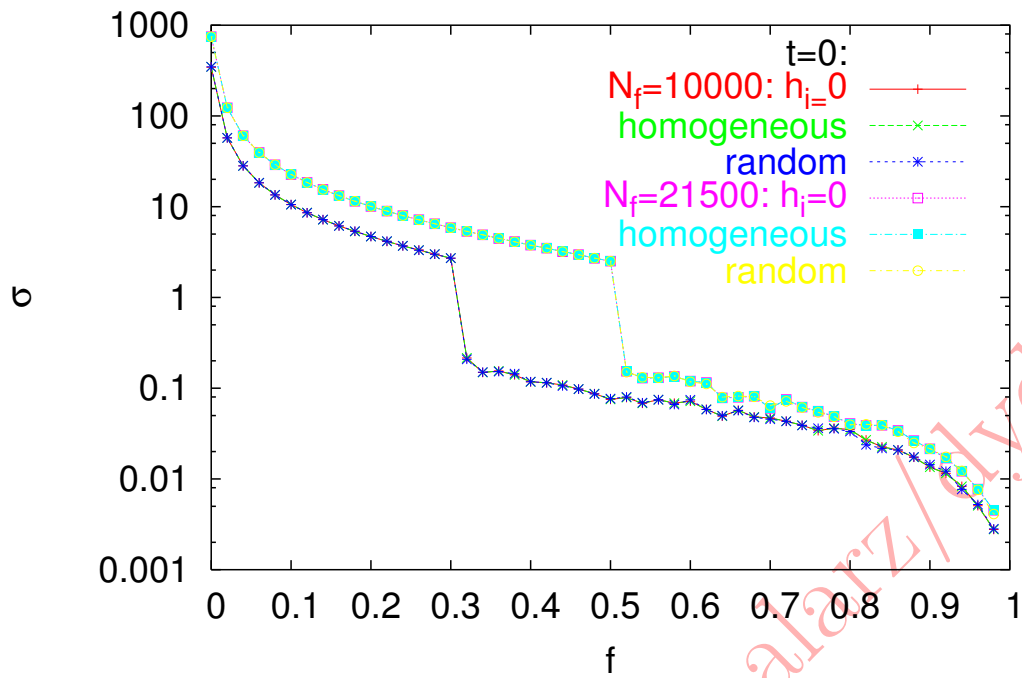


Dependence of the critical value of the forgetting parameter f_C on the system size N for $N_f = 50000$. The least-square fit $f_C(N) \propto N^{-0.88}$ to the last decade is included.

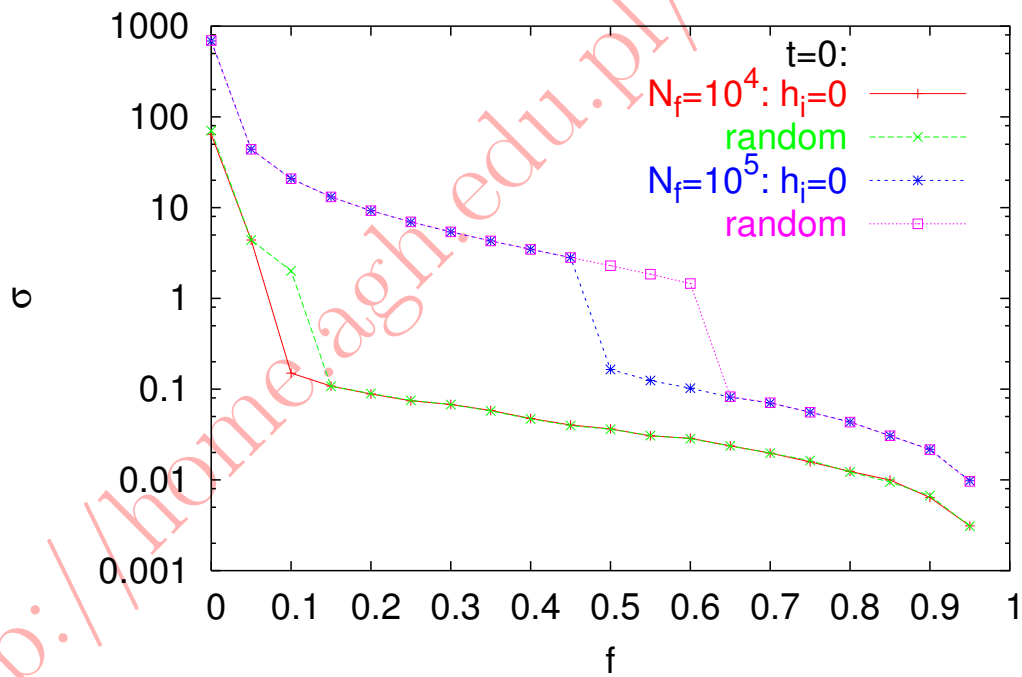


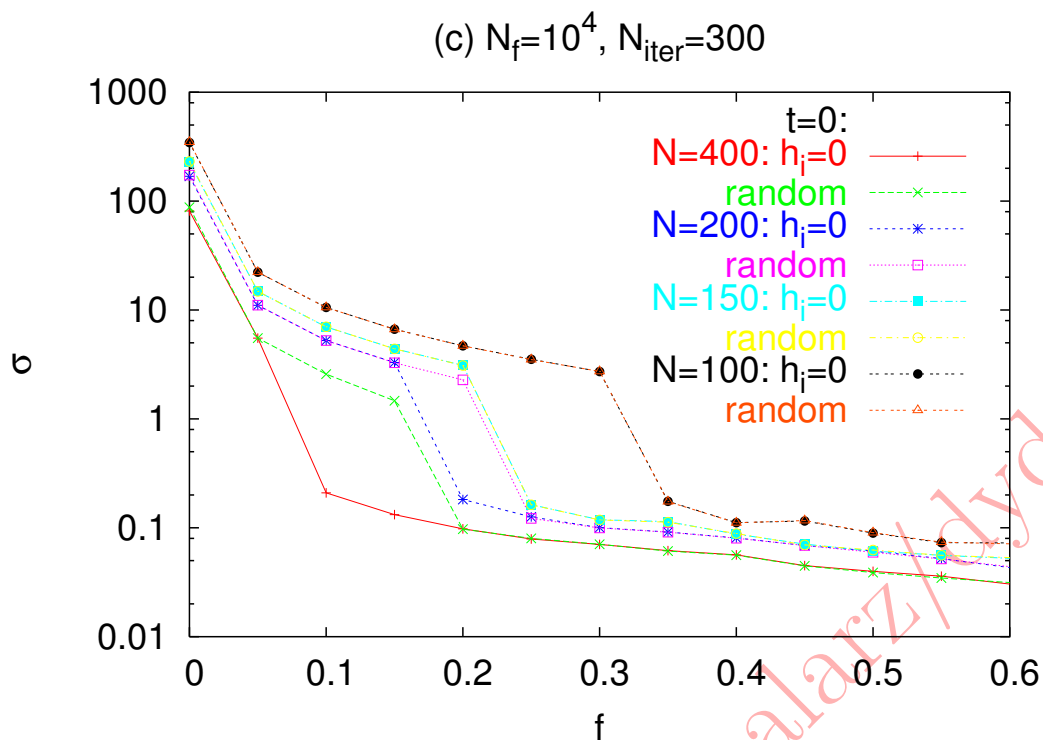
(a) Final values of σ in small societies ($N = 100$) do not depend on an initial distribution of h_i . Different values of N_f do not alter this result but shift the critical value f_C . (b) When system is large enough ($N = 500$), the critical point f_C for given number of fights N_f depends on the initial conditions. (c) The initial inequality influences the critical point for $N \geq 175$.

(a) $N=100, N_{iter}=300$



(b) $N=500, N_{iter}=300$





[E. Bonabeau, G. Theraulaz, J.-L. Deneubourg, Physica **A217** (1995) 373], [K.Malarz, D.Stauffer, K.Kułakowski, Eur. Phys. J. **B50** (2006) 195, physics/0502118], [D. Stauffer, AIP Conf. Proc. **779** (2005) 75 physics/0503128]

Opowieść 19

Podsumowanie

Rincewind wyczuł znajomą atmosferę. Oddychał już taką, choć działo się to na drugim końcu świata. Wypełniał ją odór zimnego potu wydzielanego wskutek nagłej świadomości, że chyba już za późno na powtórkę materiału, którą człowiek stale odkładał. Rincewind przeżył wiele straszliwych momentów, jednakże żaden nie zajmował tak poczesnego miejsca w leksykonie grozy, jak te kilka sekund po tym, gdy ktoś powie: "Odwróćcie teraz kartki i przeczytajcie pytania".

[...]

Rincewind sięgnął po zapasową kartę.

Nagłówek brzmiał: Egzamin na stanowisko Asystenta Czyściciela Łatryn w dystrykcie W'ung.

[...]

Kandydaci nie przerywali egzaminu. Jeden z odważniejszych podwinął jednak nogawkę spodni i skopiował poemat o mgle, który z wielkim wysiłkiem ułożył jakiś czas temu. Po kilku próbach człowiek zaczyna się domyślać, jakie pytania zadadzą egzaminatorzy.

[Terry Pratchett, *Ciekawe czasy*, Prószyński i S-ka (Warszawa 2003)]

-
- Symulacja komputerowa może być użyteczna wszędzie tam, gdzie ze względu na swoją złożoność, problemy nie mogą być rozwiązane analitycznie (np. dla układów o dużej liczbie stopni swobody).
 - Wyniki symulacji mogą nieść zarówno informacje typu "doświadczalnego" jak i być użyteczne przy konstruowaniu i weryfikacji modeli teoretycznych.
 - Dynamika molekularne = numeryczne całkowanie równań ruchu układów wielocząsteczkowych.
 - Metody Monte Carlo = statystyczne metody symulacyjne wykorzystujące liczby pseudolosowe.
 - Automaty komórkowe = dyskretyzacja czasu i przestrzeni, wykazywanie złożonych zachowań i długozasięgowych korelacji na bazie prostych i lokalnych oddziaływań.
 - W wielu przypadkach AK pozwalają prawidłowo opisać statystykę lokalnych konfiguracji — i to decyduje o zgodności wyników symulacji z doświadczeniem.
 - Wprowadzone przy tym uproszczenia opisu układu okazują się nieistotne.
 - Przydatność AK do badania chaosu metodą rozprzestrzeniania się uszkodzeń — przy dyskretnych stanach komórek sieci bardzo łatwo wprowadzić "małe" zaburzenie stanu początkowego.

[K.Kułakowski, *Automaty komórkowe*, OEN AGH, Kraków 2000]

Bibliografia

- [1] I. V. Torin. „New algorithm to test percolation conditions within the Newman–Ziff algorithm”. *Int. J. Mod. Phys. C* **25.11** (2014), 1450064.
- [2] K. Malarz, S. Kaczanowska i K. Kułakowski. „Chaotic dynamics of forest fires”. *Frontiers on Nonlinear Dynamics* **3** (2004), 334–343. Times Cited: 1.
- [3] K. Malarz, S. Kaczanowska i K. Kułakowski. „Are forest fires predictable?” *Int. J. Mod. Phys. C* **13.8** (2002), 1017–1031.
- [4] M. E. J. Newman i R. M. Ziff. „Fast Monte Carlo algorithm for site or bond percolation”. *Phys. Rev. E* **64.1, 2** (2001), 016706.
- [5] A. Bunde i S. Havlin, red. *Fractals and disordered systems*. Berlin: Springer, 1996.
- [6] D. Stauffer i A. Aharony. *Introduction to Percolation Theory*. 2 wyd. London: Taylor i Francis, 1994.
- [7] B. Drossel i F. Schwabl. „Self-organized critical forest-fire model”. *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992), 1629–1632.
- [8] J. Hoshen i R. Kopelman. „Percolation and cluster distribution. 1. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm”. *Phys. Rev. B* **14.8** (1976), 3438–3445.
- [9] P. L. Leath. „Cluster Shape and Critical Exponents near Percolation Threshold”. *Phys. Rev. Lett.* **36** (16 1976), 921–924.
- [10] W. O. Kermack i A. G. McKendrick. „A Contribution to the Mathematical Theory of Epidemics”. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **115.772** (1927), 700–721.