УДК 519.245

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО У ЗАДАЧІ ПЕРКОЛЯЦІЇ

Фармагей С.К.

Харківський національний університет радіоелектроніки, Харків

У роботі проводиться аналіз ефективності застосування методу Монте-Карло до моделювання складних систем. У якості прикладу розглядається застосування методу до задачі перколяції.

Актуальність роботи зумовлена широкими можливостями методу Монте-Карло для дослідження складних систем і процесів, які неможливо розв'язати аналітичними або класичними чисельними методами. Він забезпечує ефективне чисельне інтегрування у багатовимірних просторах, відтворює випадкову природу багатьох явищ і відзначається універсальністю застосування у фізиці, біології, економіці та інженерії. У ряді задач саме метод Монте-Карло виступає єдиним дієвим засобом аналізу та прогнозування поведінки складних систем.

Сучасні методи Монте-Карло беруть свій початок у 1940-х роках, коли Енріко Фермі, Станіслав Улам, Джон фон Нейман, Ніколас Метрополіс та інші дослідники почали застосовувати випадкові числа для вивчення різноманітних фізичних задач із позиції стохастичного підходу. Біографічні матеріали, присвячені С. Уламу, дають захопливе уявлення про зародження і розвиток методу Монте-Карло ще до появи сучасних електронних обчислювальних машин.

Перші варіанти методу були надзвичайно простими – їх створювали як інструмент для наближеної оцінки розв'язків аналітично складних проблем. Значна частина тієї ранньої роботи не була опублікована, тому найповніше уявлення про походження методу Монте-Карло можна отримати, звернувшись до збереженого листування та історичних описів його розвитку.

Основною суттю методу є статистична оцінка результатів великої кількості випробувань.

Метод Монте-Карло можна використовувати для великої кількості різноманітних задач, наприклад: задачі перколяції, задача самоуникаючого блукання, задача радіоактивного розпаду, задача розрахунку ціни опціонів та багато інших.

Алгоритм застосування методу виглядає наступним чином:

а) формулювання задачі у стохастичній формі – переведення вихідної задачі до задачі знаходження математичного сподівання випадкової величини;

б) генерація випадкових чисел – створення незалежної послідовності рівномірно розподілених випадкових величин (за допомогою генераторів псевдовипадкових чисел);

в) побудова вибірки – перетворення рівномірно розподілених чисел у випадкові величини з потрібними законами розподілу;

г) обчислення результатів – для кожної згенерованої випадкової точки обчислюється значення функції;

д) статистична обробка – обчислення середнього значення по всій вибірці, яке й буде наближенням шуканої величини.

Як приклад застосування, розглянемо задачу перколяції.

Процеси перколяції – це явища, в яких шляхом випадкового додавання окремих елементів (частинок або зв’язків) формується суцільна структура, що пронизує всю систему.

Загалом частинки можуть бути розподілені безперервно у просторі, і їх перекриття створює зв’язані області – кластери, які поступово з’єднуються, утворюючи єдиний зв’язний кластер, що охоплює всю решітку або систему.

Розберемо, як приклад, перколяцію сайтів: ґратка складається з періодичного масиву потенційних сайтів, які можуть бути зайняті. Найменший кластер утворюється тоді, коли зайнятий лише один сайт, а жоден із його найближчих сусідів не зайнятий. У системі можна визначити дві важливі характеристики:

а) ймовірність утворення охоплюючого (нескінченного) кластера;

б) параметр порядку, який відповідає частці зайнятих сайтів, що належать до нескінченного кластера.

Ці величини визначаються шляхом числового експерименту: для кожного значення ймовірності заповнення p генерується велика кількість реалізацій решітки, і підраховується частка тих, у яких формується охоплюючий кластер. У міру збільшення розміру решітки ймовірність появи нескінченного кластера прямує до нуля для $p < p_c$ та до одиниці для $p > p_c$. Таким чином, при деякому критичному значенні $p = p_c$ відбувається перехід перколяції, інша назва якого поріг перколяції.

Ще однією важливою величиною є параметр порядку M, який відповідає частці зайнятих сайтів у гратці, що належать до нескінченного кластера. Найпростіший спосіб визначити M за допомогою моделювання, це згенерувати багато різних конфігурацій, для яких зайнята частка p сайтів, і підрахувати частку станів, для яких з'являється нескінченний кластер. Для відносно рідко зайнятих граток M буде нульовим, але зі збільшенням p ми зрештою досягаємо критичного значення $p = p_c$, яке називається порогом перколяції, для якого $M > 0$. З подальшим збільшенням p, значення параметра M також буде зростати.

Поведінка параметра порядку поблизу порогу перколяції описується співвідношенням, подібним до того, яке застосовується для критичної поведінки параметра порядку при температурних переходах. У скінченних ґратках ситуація дещо складніша: острівний кластер може утворитися навіть за невеликого p, коли система ще не досягла критичного стану. Отже, навіть при малих значеннях p ймовірність перколяції може бути ненульовою.

При випадковому розміщенні вузлів на решітці утворюються кластери різних розмірів, і перколяційні кластери, якщо вони виникають, мають фрактальну структуру. Характерна поведінка ймовірності перколяції при збільшенні p показує поступове зростання від нуля до одиниці, а для великих розмірів ґратки перехід стає різкішим.

Для кількісного опису системи використовується розподіл за розмірами кластерів – $n(s)$, який показує, скільки кластерів має розмір s. На порозі перколяції цей розподіл підкоряється степеневому закону:

$$n(s) \sim s^{\tau}$$

де τ – критичний показник. Також визначається аналог «сприйнятливості» системи:

$$\chi = \sum_s s^2 n(s),$$

яка розходиться при $p = p_c$.

Для реалізації методу Монте-Карло в задачі перколяції застосовується наступна процедура: починають із порожньої решітки, випадковим чином заповнюють її сайти з імовірністю p, після чого знаходять усі зв'язані кластери. Якщо цікавий діапазон p знаходиться поблизу критичного значення, необхідно перевіряти, щоб одна і та сама точка не вибиралася двічі, інакше метод стає неефективним. Після досягнення бажаного заповнення p визначаються властивості системи: ймовірність перколяції, розмір найбільшого кластера, середній розмір кластера тощо.

Література:

1. D. P. Landau and K. Binder, Monte Carlo Simulations in Statistical Physics: study guide Cambridge. New York: Cambridge University Press, 2000.
2. W. Krauth, Statistical Mechanics: Algorithms and Computations. Oxford: Oxford University Press, 2006.
3. І. Є. Байда, Метод Монте-Карло. Харків, Україна: ХПІ, 2024.
4. І. А. Прокопишин, Розрахунок ціни опціонів методом Монте-Карло. Львів, Україна: ЛНУ ім. Ів. Франка, 2022.