

Modele perkolacji



Henryk Fuks

1. Wprowadzenie

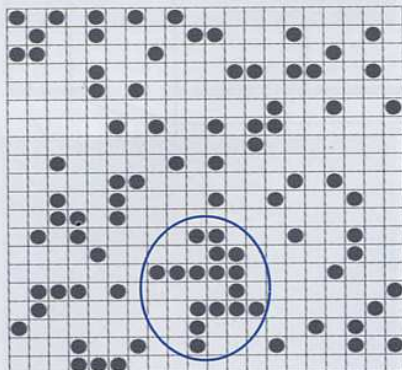
Każdy z nas jest dobrze zaznajomiony ze zjawiskiem przenikania płynów przez porowate materiały. Zjawisko to odgrywa szczególnie ważną rolę nie tylko podczas przyrządzania kawy w ekspresie, ale przede wszystkim w różnorodnych procesach geologicznych, a także w procesach wydobywania ropy i gazu. W komputerowych symulacjach przepływu płynów w skorupie ziemskiej częstokroć zachodzi potrzeba stworzenia modelu niejednorodnego medium, przez który przenika woda, ciekłe kopaliny, lub inne substancje.

Wiele z takich symulacji opiera się na tzw. modelu perkolacji, fascynującej teorii z pogranicza rachunku prawdopodobieństwa i fizyki statystycznej. Słowo „perkolacja” pochodzi od łacińskiego *percolatio*, czyli przesączanie, aczkolwiek sam model perkolacji jest abstrakcyjną konstrukcją matematyczną, która może być (i częstokroć jest) badana w całkowitym oderwaniu od wspomnianych procesów przenikania płynów.

Wyobraźmy sobie płaszczyznę z naniesioną na nią siecią kwadratową, np. w postaci papieru w kratkę. Aby ominąć problemy związane z warunkami brzegowymi, najlepiej będzie, jeżeli wyobrazimy sobie kartkę rozciągającą się we wszystkich kierunkach do nieskończoności. Taka nieskończona sieć kwadratowa oznaczana jest zwykle symbolem Z^2 . Nasza sieć w oczywisty sposób pokrywa płaszczyznę kwadratami, które nazywać będziemy komórkami sieci.

Załóżmy teraz, że każda komórka może być w dwóch możliwych stanach, „otwartym” lub „zamkniętym”. Przyjmijmy ponadto, że stan każdej komórki jest przypadkowy i niezależny od stanu pozostałych komórek, a każda komórka jest otwarta z prawdopodobieństwem p lub zamknięta z prawdopodobieństwem $1-p$. Jeżeli więc interesuje nas jakiś fragment naszej płaszczyzny na którym mamy N komórek, to dla dużych N możemy oczekiwać, iż pN spośród nich jest otwartych, a pozostałe $1-p$ zamkniętych. Rys. 1 pokazuje przykładową konfigurację sieci 50×50 z prawdopodobieństwem $p=0.25$. Komórki otwarte oznaczono czarnymi kropkami. Widzimy wyraźnie, że w niektórych miejscach utworzyły się grupy otwar-

tych komórek odizolowane od innych grup, jak np. grupa otoczona niebieską linią. Każdą z takich grup nazwiemy klastrem (od *ang. cluster*).



Rysunek 1. Klastery otwartych komórek na sieci kwadratowej.

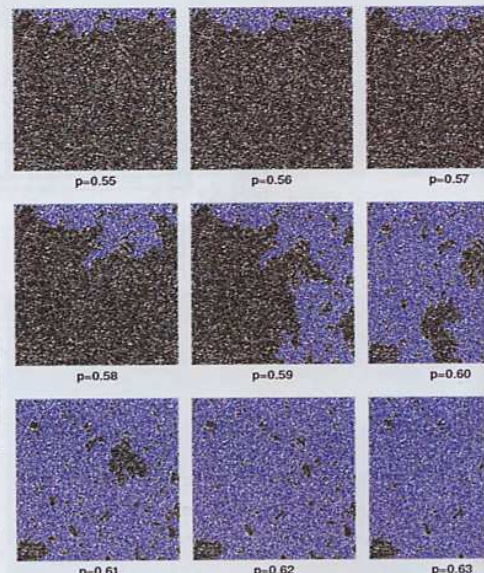
2. Matematyczne podstawy modelu perkolacji

Bardziej precyzyjna definicja klastra wymaga zdefiniowania komórek sąsiadujących, przez co będziemy rozumieli dwie komórki mające wspólny bok. Podkreślmy tutaj, że komórki mające wspólny tylko jeden narożnik nie będą uważane za sąsiadujące. Powiemy, że dwie komórki należą do tego samego klastra, jeżeli można je połączyć łańcuchem złożonym ze wzajemnie sąsiadujących komórek.

Powróćmy teraz do wspomnianego zjawiska przesączania. Wyobraźmy sobie, że nasza płaszczyzna pokryta siecią kwadratową jest modelem niejednorodnej skały, gdzie „zajęte” komórki reprezentują ziarna o dużej przenikalności, a komórki „wolne” – ziarna o małej przenikalności. Czytelnik mógłby w tym miejscu zaprotestować i zarzucić takiemu modelowi nadmierne uproszczenie rzeczywistości: tak naprawdę skały nie są przecież dwuwymiarowe, a ziarna minerałów nie mają kształtu kwadratów. Jest to zarzut jak najbardziej słuszny, jednak okazuje się, że badanie nawet tak bardzo uproszczonego modelu pozwala uzyskać wgląd w wiele niezmiernie interesujących aspektów teorii perkolacji.

Przyglądając się raz jeszcze Rys. 1, zadamy teraz następujące pytanie: czy ciecz może przesączyć się np. z górnego rzędu komórek do rzędu dolnego? Będzie to oczywiście możliwe tylko wtedy, gdy będzie istniał klastery łączący te dwa rzędy komórek. Jest jasne, że istnienie takiego klastra jest mało prawdopodobne dla małych p , ale w miarę zbliżania się wartości p do jedynki, będzie to coraz bardziej prawdopodobne. Tak przynajmniej zdaje się mówić nasza intuicja.

Rysunek 2 przedstawia wynik symulacji komputerowej perkolacji na sieci 250×250 dla dziewięciu różnych wartości parametru p . Komórki otwarte oznaczono kolorem czarnym, a zamknięte białym. Górny rząd komórek pozostaje w kontakcie z cieczą, która przepływa do sąsiadujących



Rysunek 2. Przesączanie cieczy przez sieć kwadratową dla różnych wartości prawdopodobieństwa p .

komórek penetrując we wszystkich możliwych kierunkach tak daleko, jak to możliwe. Komórki otwarte, do których dotarła ciecz, oznaczono na niebiesko. Widzimy wyraźnie, że w pierwszych czterech przypadkach ciecz nie dotarła do dolnego rzędu komórek, a w pozostałych pięciu przypadkach miało to miejsce. Gdyby powtórzyć ten eksperyment bardzo wiele razy i na bardzo dużej sieci, okazałoby się, że klastery łączący górny i dolny rząd istnieją dla $p > 0.59275$, ale nie istnieją dla $p < 0.59275$! Liczbę $p_c \approx 0.59275$ nazywamy wartością krytyczną prawdopodobieństwa p .

Matematycznie precyzyjną definicję p_c uzyskamy rozważając sieć nieskończoną. Zasadniczą wielkością badaną w matematycznej teorii perkolacji jest prawdopodobieństwo perkolacji $\theta(p)$, określone jako prawdopodobieństwo, że dana komórka należy do nieskończonego klastra otwartych komórek. Ponieważ żadna komórka nie jest wyróżniona, możemy wybrać środek układu współrzędnych jako punkt odniesienia i zdefiniować $\theta(p)$ jako prawdopodobieństwo, że środek układu współrzędnych należy do nieskończonego klastra otwartych komórek. Kluczowym zagadnieniem teorii perkolacji jest istnienie wartości krytycznej p_c prawdopodobieństwa p takiego, że

$$\theta(p) \begin{cases} = 0 & \text{dla } p < p_c, \\ > 0 & \text{dla } p > p_c. \end{cases}$$

Istnienie krytycznego prawdopodobieństwa oraz fakt, że $0 < p_c < 1$, zostało udowodnione

w latach pięćdziesiątych XX w. Wykazano wówczas również następujący fakt.

Twierdzenie 1 *Prawdopodobieństwo istnienia nieskończonego otwartego klastra $\Psi(p)$ jest dane przez*

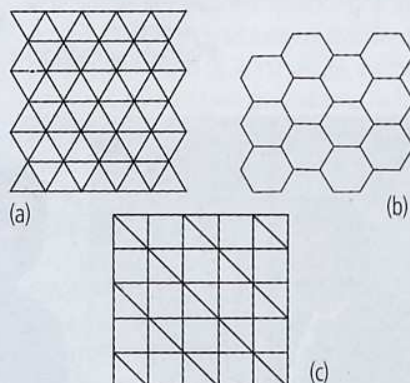
$$\Psi(p) = \begin{cases} 0 & \text{dla } p < p_c, \\ 1 & \text{dla } p > p_c. \end{cases}$$

Oznacza to, że nieskończony klastrow pojawia się nagle, gdy prawdopodobieństwo p przekroczy wartość krytyczną! Dowód tego zaskakującego faktu można znaleźć w monografii [1].

3. Inne rodzaje perkolacji

Opisane powyżej zjawisko perkolacji nazywane jest perkolacją węzłów (ang. *site percolation*). Częściej rozważany jest jednak inny typ perkolacji, zwany perkolacją wiązków (ang. *bond percolation*), który polega na tym, że zamiast otwartych i zamkniętych komórek mamy otwarte lub zamknięte połączenia między punktami sieci. Podobnie jak i wcześniej, każde połączenie między punktami jest otwarte lub zamknięte niezależnie od pozostałych połączeń, a prawdopodobieństwo, że dane połączenie jest otwarte, ma wartość p . Również i w tym przypadku nieskończony klastrow otwarty pojawia się, gdy p osiągnie pewną krytyczną wartość p_c , aczkolwiek jest ona inna niż w przypadku perkolacji węzłów. Krytyczne prawdopodobieństwo dla perkolacji wiązków na sieci kwadratowej wynosi dokładnie 1/2, i jest znany formalny dowód tego faktu. Dla perkolacji węzłów wiemy jedynie, iż $p_c \approx 0.59275$, ale wyznaczenie jej dokładnej wartości pozostaje otwartym (i trudnym) problemem matematycznym.

Oprócz perkolacji na sieci kwadratowej bada się również sieci o innej topologii połączeń, np. sieć trójkątną, heksagonalną, lub typu „bow-tie” (Rys. 3).



Rysunek 3. Sieć trójkątna (a), heksagonalna (b), i typu „bow-tie” (c).

Sieci w przestrzeniach o wymiarze większym niż 2 są również rozpatrywane. Niezależnie od typu sieci, prawdopodobieństwo krytyczne dla perkolacji wiązków nie przekracza nigdy prawdo-

podobieństwa krytycznego dla perkolacji węzłów. Mówi o tym następujące twierdzenie, którego dowód również można znaleźć w [1].

Twierdzenie 2 *Niech G będzie dowolną nieskończoną siecią o własności takiej, że maksymalna ilość wiązków wychodzących z węzła jest skończona i wynosi Δ . Prawdopodobieństwa krytyczne dla perkolacji wiązków $p_c^{bond,c}$ i perkolacji węzłów p_c^{site} na sieci G spełniają wówczas zależność*

$$\frac{1}{\Delta-1} \leq p_c^{bond} \leq p_c^{site} \leq 1 - (1 - p_c^{site})^\Delta.$$

Dla większości sieci spotykanych w praktyce można wykazać nawet mocniejszą nierówność $p_c^{bond} < p_c^{site}$.

Dokładna wartość krytycznego prawdopodobieństwa jest znana tylko dla pięciu przypadków podanych poniżej [2].

sieć	p_c
kwadratowa, perkolacja wiązków	1/2
trójkątna, perkolacja węzłów	1/2
trójkątna, perkolacja wiązków	$2\sin(\pi/18)$
heksagonalna, perkolacja wiązków	$1-2\sin(\pi/18)$
„bow-tie”, perkolacja wiązków	

$$1 - p_c - 6p_c^2 + 6p_c^3 - p_c^5 = 0$$

$$p_c \in (0,1),$$

Nie jest zresztą pewne, czy w innych wypadkach wyrażenia definiujące p_c z użyciem funkcji elementarnych w ogóle istnieją. Oczywiście dla dowolnej sieci można uzyskać przybliżoną numeryczną wartość p_c na drodze symulacji komputerowych, co wymaga jednak dość ostrożnej ekstrapolacji wyników uzyskanych dla sieci skończonych na przypadek sieci nieskończonej.

W symulacjach komputerowych używa się zwykle eleganckiego i efektywnego algorytmu liczenia klastrow znanego jako algorytm Hoshena-Kopelmana, opracowanego w połowie lat 70-tych XX w. Aby zilustrować zastosowanie tego algorytmu w przypadku perkolacji wiązków na sieci kwadratowej, na Rys. 4a,b pokazano sieci 50x50, w których pozostawiono odpowiednio 48% i 52% otwartych wiązków. Ponieważ dla perkolacji wiązków na sieci kwadratowej $p_c = 0.5$, przedstawione konfiguracje odpowiadają wartościom prawdopodobieństwa p nieco poniżej (Rys. 4a) i nieco powyżej punktu krytycznego (Rys. 4b), co jednak trudno stwierdzić, porównując te konfiguracje wizualnie. Stosując algorytm Hoshena-Kopelmana, możemy jednak łatwo wyodrębnić największy klastrow w danej konfiguracji, a następnie oznaczyć go innym kolorem. Rezultat tej procedury pokazano na Rys. 4c i 4d, gdzie największy klastrow pokolorowano na czerwono. Możemy teraz łatwo się przekonać, że największy klastrow dla $p = 0.48$ (Rys.

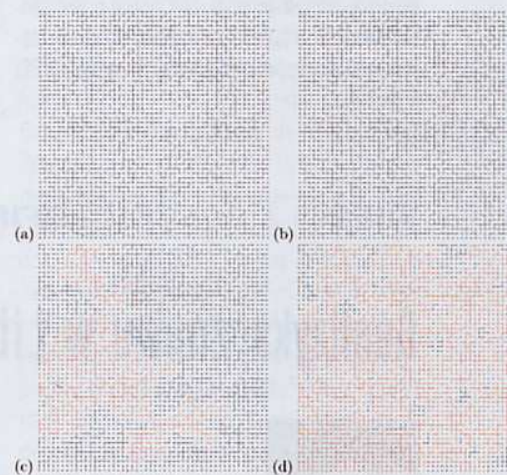
4c) nie łączy ani górnego rzędu z dolnym, ani też prawego z lewym. Inaczej jest w przypadku $p = 0.52$ (Rys. 4d), gdzie czerwony (największy) klastrow zajmuje większą część sieci.

Niezmiernie interesującym zagadnieniem jest także zachowanie się sieci w punkcie krytycznym $p = p_c$. Przeglądając się Twierdzeniu 1, zauważymy, że nieskończony klastrow pojawia się, gdy $p > p_c$, a znika gdy $p < p_c$. Czy jednak nieskończony klastrow istnieje, gdy $p = p_c$? Okazuje się, że odpowiedź na to pytanie jest negatywna dla sieci dwuwymiarowych, a także gdy wymiar sieci przekracza 18. Dla sieci w przestrzeni o wymiarze d takim, że $2 < d < 18$ odpowiedź nie jest znana. Większość badaczy tego problemu wierzy jednak, że odpowiedź jest negatywna w dowolnym wymiarze większym niż 1.

Co zatem dzieje się, gdy $p = p_c$? Niech $P(|C| > n)$ oznacza prawdopodobieństwo, że środek układu współrzędnych należy do klastra o rozmiarze n lub większym. Istnieją mocne przesłanki, aby spodziewać się, że

$$P(|C| > n) \geq n^{-1/\delta} \text{ dla } n \rightarrow \infty$$

gdzie δ jest liczbą zależną od wymiaru sieci, zwaną *wykładnikiem krytycznym*. Wartość tego wykładnika jest przedmiotem wielu hipotez i spekulacji, często budzących spore kontrowersje.



Rysunek 4. Perkolacja wiązków na sieci kwadratowej dla $p = 0.48$ (a) i $p = 0.52$ (b). Poniżej te same dwie konfiguracje z największym klastrem oznaczonym kolorem czerwonym.

Wielu fizyków statystycznych uważa na przykład, że dla perkolacji wiązków na dwuwymiarowej sieci kwadratowej $\delta = 91/5$, co jednak na razie nie znalazło potwierdzenia w postaci formalnego dowodu matematycznego. Istnieje ponadto szereg innych wykładników krytycznych, opisujących zachowanie różnych wielkości w okolicach punktu krytycznego, i podobnie jak w przypadku, postulowane są dla nich konkretne wartości, zwykle w formie liczb wymiernych. Chociaż rygorystyczne wyprowadzenie tych wartości jest obecnie nie-

możliwe, trzeba dodać, że znaczący postęp w tym zakresie osiągnięto w przypadku przestrzeni o wymiarach większych od 18.

4. Perkolacja ciągła i jej zastosowania

Jak mieliśmy okazję się przekonać, model perkolacji jest kopalnią interesujących i dotychczas nierozwiązanych problemów natury matematycznej. Powróćmy jednak teraz do zastosowań tego modelu w geologii i zagadnieniach związanych z wydobyciem ropy i gazu. Jak już wspomnieliśmy, sieć kwadratowa nie jest bardzo realistyczną reprezentacją np. porowatych skał, dlatego nieco bardziej skomplikowane modele perkolacji muszą być zastosowane w celu uzyskania zadowalających i realistycznych symulacji procesów przenikania płynów przez skały. Podobnie jest w wypadku modeli, w których niejednorodności występują na makroskopowych odległościach. W praktyce możemy np. mieć do czynienia z podłożem, które z dobrym przybliżeniem składa się z materiałów nieprzepuszczalnych dla interesującego nas płynu, jak również z materiałów przepuszczalnych.

Materiałem przepuszczalnym mogą być np. warstwy piasku (piaskowców) różnoziarnistych o zmiennym wysortowaniu, rozmieszczone w słabo przepuszczalnym podłożu. Chociaż przestrzena dystrybucja takich warstw jest wynikiem różnorodnych procesów geologicznych, często można

w pierwszym przybliżeniu zaniedbać długozasięgowe korelacje i uznać to rozmieszczenie za losowe. W takim przypadku rolę parametru p odgrywa iloraz objętości pokładów piasku do całkowitej objętości rozważanego obszaru. Mamy wtedy do czynienia z tzw. perkolacją ciągłą, gdyż rejony przepuszczalne (piasek) mogą być ułożone w dowolnym punkcie, a nie tylko w węzłach sieci jakiegoś wybranego typu, jak to miało miejsce w przypadku perkolacji na sieciach.

W pracy opublikowanej w „Petroleum Geoscience” w roku 2001 [3], autorzy zastosowali tego rodzaju model ciągłej perkolacji do oszacowania czasu potrzebnego na uzyskanie ciśnienia produkcyjnego w odwiertach w częściowo wyeksploatowanym polu naftowym, do którego wpompowano płyn zwiększający ciśnienie. Co interesujące, w obliczeniach zostały użyte tzw. relacje skalowania podobne do wspomnianego powyżej równania opisującego $P(|C| > n)$. Pozwoliło to na znaczne skrócenie czasu obliczeń w porównaniu z konwencjonalnymi modelami geologicznymi, przy zachowaniu zgodności z tymi modelami.

Na zakończenie warto zaznaczyć, że teoria perkolacji znalazła zastosowanie w modelowaniu wielu innych zjawisk, do których należą np. przejścia fazowe typu przewodnik-izolator w materiałach kompozytowych, żelowanie polimerów, pożary lasów, epidemie chorób zakaźnych, i wiele innych. Zainteresowany czytelnik znajdzie więcej informacji na ten temat w pozycjach [2,

4]. Matematyczne aspekty omawia obszernie monografia [1], jak również interesująco się zapowiadające nowoczesne ujęcie [5], które ukaże się w drugiej połowie tego roku.

References

- [1] G. Grimmett, Percolation. Springer, Berlin, 1999.
- [2] D. Stauffer and A. Aharony, Introduction to Percolation Theory. Taylor and Francis, London, 1994.
- [3] P. R. King, S. V. Buldyrev, N. V. Dokholyan, S. Havlin, Y. Lee, G. Paul, H. E. Stanley, and N. Vandesteeg, "Predicting oil recovery using percolation theory," *Petroleum Geoscience* 7 (2001) S105-S107.
- [4] M. Sahimi, Applications Of Percolation Theory. Taylor and Francis, London, 1994.
- [5] B. Bollobás and O. Riordan, Percolation. Cambridge University Press, Cambridge, 2006.

prof. dr Henryk Fuks
jest zatrudniony na wydziale
matematyki na Brock
University w St. Catharines
w Kanadzie.
Zajmuje się teorią układów
dynamicznych,
fizyką statystyczną i modelami
matematycznymi.
Jest autorem ponad trzydziestu prac
w tych dziedzinach.