M. Andrecut

2025年2月16日

无限分析公司 加拿大阿尔伯塔省卡尔加里 mircea.andrecut@gmail.com

Abstract

代理人群体通常表现出由简单局部互动产生的令人惊讶的集体行为。普遍的看法是,为了产生 这样的集体行为,这些代理必须具备一定的认知能力。然而,与这种假设相反,也众所周知,即使是 没有认知能力的代理也能展示出非平凡的行为。在这里,我们考虑一种中间情况,其中代理们从两 个极端中各借用了一点。我们假设一群代理在一个有界环境中的方形格子上执行随机行走。这些代 理可以感知它们直接相邻区域的情况,并会尝试移动到一个随机选择的空位,以避免碰撞。此外, 当代理与至少另外两个代理接触时,它们将暂时停止移动。我们展示了一个令人惊讶的事实:这种 简单的代理人群体会经历一个渗流相变,并自组织成一种类似大分子结构的形式,这是由于它们受 限价键和局部空间排列产生的吸引力熵力的结果。

关键词:自组织系统,相变,渗流 PACS: 05.65.+b, 05.10.-a, 64.60.ah

1 介绍

群体中简单智能体集体行为的出现是自我组织的一个显著例子,这种自我组织源于简单的局部 互动。普遍的看法认为,出现的集体行为是智能体认知能力达到一定水平的结果,使得这些智能体 能够根据某种最优标准预测未来事件。例如,最近有人建议因果路径熵最大化与智能行为之间存在 这样的联系 [1]。因果路径熵 (S_c)是衡量智能体可用的未来选择多样性的一种指标,其最大化有助 于使智能体摆脱各种约束 [2],[3]。在此背景下,时间范围为 τ 时的因果路径熵最大化,在温度T下, 导致了一个因果熵力 F_c [4],[5],引导代理趋向于具有更大因果熵的宏观状态 X。

$$\boldsymbol{F}_{c}(\boldsymbol{X}_{0},\tau) = T\nabla_{\boldsymbol{X}S_{c}(\boldsymbol{X},\tau).(1)}$$

宏观状态 X 的因果路径熵定义为路径积分:

$$S_c(\boldsymbol{X},\tau) = -k_B \int_{\boldsymbol{x}(t)} \Pr(\boldsymbol{x}(t) \mid \boldsymbol{x}(0)) \ln \Pr(\boldsymbol{x}(t) \mid \boldsymbol{x}(0)) \mathrm{D}\boldsymbol{x}(t)$$
(2)

其中 k_B 是玻尔兹曼常数, $\Pr(\boldsymbol{x}(t) \mid \boldsymbol{x}(0))$ 是从 \boldsymbol{x}_0 开始的路径 $\boldsymbol{x}(t)$ 出现的条件概率:

$$\Pr(\boldsymbol{x}(t) \mid \boldsymbol{x}(0)) = \int_{\xi_{\tau}} \Pr(\boldsymbol{x}(t), \xi_{\tau} \mid \boldsymbol{x}(0)) \mathrm{D}\xi_{\tau}$$
(3)

该概率由系统 ξ_τ 在时间间隔 τ 内所有可能的演化决定。因此,这样的认知代理可以通过估计当前位 置的因果路径熵 S_c 来构建环境的认知地图,并且可以通过简单地跟随 S_c 的梯度来进行导航。采用 这种方法已经表明,在最大化其因果路径熵 [1] 的认知代理群体中,自组织的空间模式会浮现。

与认知要求证明相反,简单的非认知的集体行为涌现示例由硬球结晶 [6] 和细长硬粒子中的向列 有序 [7] 提供。其他示例是具有斑点的胶体,其特征是没有显式的键合力,它们可以通过利用熵相互 作用 [8] 自组装成有趣的结构。一个有趣的情况是有有限价态的胶体,它们能够选择性地与受控数量 的邻居结合,形成更大的结构 [9]。在所有这些情况下,熵最大化导致了一个带有方向性的吸引力出 现,这种吸引力的方向取决于粒子形状和拥挤程度,有利于它们自组装成有序结构 [10]。这些具有方 向性的熵力并非内在于粒子本身,而是从它们的集体行为中涌现出来的。一个简化的解释可以这样 制定:假设自组装过程是由系统自由能的变化驱动的,该系统并非孤立,而是可以与其周围环境交 换能量:

$$F = E - TS, (4)$$

这里, *E* 是内能, *T* 是温度, *S* 是熵。假定温度恒定,在有序相变过程中,系统可以通过增加熵或减 少内能 [11] 来降低其自由能。因此,熵的增加在自组装过程中可以起到显著作用,这与传统认为熵 增加立即导致更高混乱度的观点相矛盾。

受上述示例启发,在本文中我们展示了代理人的自组织集体行为也可以在局部相互作用的马尔 可夫过程 [12] 的背景下进行考虑。这些代理人对应于一组相同的随机行走粒子,其下一个配置状态 仅取决于当前的状态。在这种情况下,粒子的局部动态仅依赖于它们邻居的占据状态,并且必须遵 守排除规则 [13],使得最多只允许一个粒子占据晶格上的每个位置。在此过程中,粒子的初始密度保 持不变,我们对它们空间分布的渐近扩散和传输特性感兴趣。

更具体地说,该模型由在一个有界环境中执行随机行走的代理群体组成,在一个方格晶格上。我 们假设这些代理可以感知其直接邻域,并且每个代理都将尝试移动到一个随机选择的未被占用的相 邻位置,以避免碰撞。我们还对动态施加了一个约束条件,即当某个代理与至少两个其他代理接触 时,它将暂时停止移动。我们表明,令人惊讶的是,这样一个简单的代理群体经历了渗透相变并自组 织成类似大聚合物的结构,这是由于其受限价键和局部空间排列产生的吸引力熵力所导致的结果。

2 随机模型

我们的随机模型受到排他过程的启发,这是研究最多的相互作用粒子系统之一 [12], [13]。排他模型由一个 d- 维格子组成,在时间 t 时每个点 i 可以处于两种状态:如果该点被占据,则为 $x_i(t) = 1$;如果该点为空(自由),则为 $x_i(t) = 0$ 。在每个时间点 t,随机选择一个位置 i,如果该位置 i 被占据,则再次随机选择另一个位置 j,位于位置 i的粒子尝试跳到位置 j。如果位置 j是空的,则粒子跳跃,否则粒子停留在位置 i(因此称为"排他过程"),使得粒子的初始密度得以保持。通常在排他过程的背景下描述两种类型的系统,并且它们通常在长时间渐近时间内进行研究,这被称为流体力学极限。这些系统在文献中已被广泛研究,表明这种局部相互作用也具有全局效应。例如,根据跳跃的对称性,排他过程与扩散(热)方程(对称跳跃),或 Burgers 方程(非对称跳跃)[14]相关。

与一般的排除过程不同,其中跳跃可以具有任意大小,在这里我们关注一个更为严格的模型,其 中晶格是二维的,并且跳跃仅限于在代理局部邻域内的空位进行随机移动。因此,这种极限情况对 应于在 2d 晶格上的随机行走代理群体。另外,为了引入局部交互作用,假设当代理与至少两个其他 代理接触时不能移动。最后,我们感兴趣的是代理的平稳分布作为其密度的函数。

在一个更为正式的描述中,我们考虑一个大小为 $L \times L$ 的二维方形晶格x。初始时,代理随机分 布在晶格上,分布的概率是 $p \in (0,1)$ 。代理执行异步避免随机游走,并且在每轮开始时通过随机打 乱代理列表来建立执行顺序。因此,一个模拟回合包含N次异步移动,其中 $N = pL^2$ 是代理的数 量。如引言中所述,代理可以感知其直接邻域,并在每个模拟回合的步骤中,列表中的下一个代理 尝试移动到随机选择的一个未被占用的相邻位置,以避免碰撞。然而,当一个代理至少与其他两个 代理接触时,它将暂时停止移动。为了建模有限区域,我们在晶格上使用反射边界条件。此外,需要 异步动力学来避免可能的竞态条件,即当多个代理试图在同一时间移动到同一个位置时。模拟算法 如下所示:

(1) 建立空格子(数组) x:

$$x_{ij} \leftarrow 0, \quad 0 \le i, j \le L - 1. \tag{5}$$

(2) 计算每个站点 (i, j) 的邻域 $\mathcal{N}_{ij} = \{f(i, j) \mid 0 \le i, j \le L - 1\}$:

$$f(i,j) \leftarrow \begin{cases} (i+1,j) & \text{if } i < L-1, \ 0 \le j \le L-1 \\ (i-1,j) & \text{if } i > 0, \ 0 \le j \le L-1 \\ (i,j+1) & \text{if } j < L-1, \ 0 \le i \le L-1 \\ (i,j-1) & \text{if } j > 0, \ 0 \le i \le L-1 \end{cases}$$
(6)

(3) 以概率 p 将格点填充为代理,将一个站点设置为 1:

$$x_{ij} \leftarrow \begin{cases} 1 & \text{if } r \le p \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad 0 \le i, j \le L - 1, \tag{7}$$

其中 $r \in (0,1)$ 是随机生成的。

确定初始的被占据站点列表:

$$\mathcal{L} \leftarrow [(i,j) \mid x_{ij} = 1, 0 \le i, j \le L - 1].$$

$$\tag{8}$$

(5) 随机打乱代理列表 L,并将移动检测变量 M 设置为 False:

$$\mathcal{L} \leftarrow \text{random_shuffle}(\mathcal{L}) \tag{9}$$

$$\mathcal{M} \leftarrow \text{False}$$
 (10)

(6) 对于每个被占据的站点 $(i, j) \in \mathcal{L}$, 找到其空闲邻近站点的集合:

$$\mathcal{V}_{ij} \leftarrow \{(n,m) \mid (n,m) \in \mathcal{N}_{ij}, x_{nm} = 0, x_{ij} = 1\}.$$
(11)

如果 $|\mathcal{V}_{ij}| > 2$,则尝试将代理移动到随机选择的一个空闲邻近站点,如果成功,则将运动检测变量

设置为 True:

$$\text{if } |\mathcal{V}_{ij}| > 2: \tag{12}$$

$$(n,m) \leftarrow \text{random_choice}(\mathcal{V}_{ij})$$
 (13)

$$x_{n,m} \leftarrow 1 \tag{14}$$

$$x_{i,j} \leftarrow 0 \tag{15}$$

$$\mathcal{M} \leftarrow \text{True}$$
 (16)

(7) 如果 $\mathcal{M} = \text{True}$,则转至 (5)。 返回 x。

3 站点渗流

让我们首先考虑有限 L×L 格子的静态随机点占据情况。因此,我们假设代理在被随机放置到 格子上之后就被冻结了。这就是在一个有限正方形格子上的标准点渗流问题的情况,在这个问题中, 每个点以概率 p 被一个代理占据,或者以概率 1 – p [15] 保持为空。从物理学的角度来看,这个模型 类似于一个随机多孔介质,其中每个点被填充的概率为 p。众所周知,占据的点形成聚类。在这里, 我们所说的聚类是指一组最近邻的占据点。如果存在一个跨越整个格子的聚类,并且它在一个给定 的方向上连接了它的边界,则可以说有限格子已经发生了渗流。这里我们考虑的是从左到右的渗流 方向,而从上到下的选择应该是等价的,因为我们假设该格子是方形的。

因此,主要问题是: 渗流发生的最小概率 p_c 是多少? 概率 p_c 也被称为渗流阈值。示例如图 1 所示,可以看到当 $p \simeq 0.6$ 时存在一个跨越簇(黄色)(图 1(b))。

因此,感兴趣的量是最小概率 $\Pi(p,L)$,使得随着点占据率 p 和格子大小 L 的函数会出现一个跨 越簇。对于标准的点渗流问题, $\Pi(p,L)$ 对点占据概率和格子大小 L 的依赖性如图 2 所示。可以看出, Π 对于 $p \to p_c \simeq 0.593$ 展现了一个尖锐的相变,而对于更大的 L 值,这个转变接近一个 Heaviside 函数:

$$\lim_{p \to p_c} \Pi(p, L) = H(p, p_c) = \begin{cases} 1 & \text{if } p > p_c \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}.$$
(17)

因此, 当 $p \rightarrow p_c$ 时, $\Pi(p, L)$ 的导数接近 Dirac delta 分布:

$$\lim_{p \to p_c} \frac{d}{dp} \Pi(p, L) = \delta(p_c), \tag{18}$$

这可以用来数值估计临界点 $p_c \simeq 0.593$ 。

现在我们允许代理根据前一节描述的模型执行避免随机游走。示例如图3所示。第一行是代理的 初始随机分布,第二行是同一站点占据概率下的最终代理分布。我们可以看到在这种情况下,代理聚 集在一起形成类似长链聚合物的状态,并且渗透发生在更低的站点占据概率下。跨域簇的概率 $\Pi(p,L)$ 与站点占据概率和晶格大小L的依赖关系如图4所示。在这种情况下,渗透转变发生在 $p_c \simeq 0.46$ 。

我们注意到,在临界占据概率 $p = p_c$ 时,跨越簇具有分形结构 [15], [16]。假设 $M_s(L)$ 表示跨越 簇的质量,则 $M_s(L) \propto L^D$,其中 D 是分形维数。对于二维格子,欧几里得维度是 d = 2,而分形维



Figure 1: 标准方格晶格上的渗流,以 L = 128 作为占用概率的函数: (a)p = 0.35; (b)p = 0.593 (渗 流簇); (d)p = 0.65。顶部行显示了在占用概率 p 下的粒子分布,底部行则显示了相应的簇分布。



Figure 2:标准渗流: (a) 跨越簇概率 $\Pi(p,L)$ 作为 p 和 L 的函数; (b) $p \to p_c$ 的相变。

度预计会更小 D < d, 当 $p \simeq p_c$ 时。然而,对于 $p > p_c$,分形维度 D 预计将等于欧几里得维度。可以通过测量跨越团的质 $M_s(L)$ 作为 L 的函数来估算分形维度。

在图 5 中,我们以双对数图展示了结果, $\log_2 M(L) \propto D \log_2 L$,从中我们估计了随机游走代理 渗流的 $D \simeq 1.81$,这个值比标准 d = 2 渗流情况下得到的 $D^* = 91/48 \simeq 1.89$ 略小。

临界跨越簇的传输特性可以通过考虑不可压缩流体流动的问题来估计,或者等效地通过随机多



Figure 3: 随机行走代理在以 L = 128 为函数的方形晶格中的渗流: (a)p = 0.35; (b)p = 0.46 (渗流 簇); (d)p = 0.5。顶部行显示了占据概率为 p 的粒子最终分布,底部行则显示了相应的簇分布。



Figure 4: 渗流的随机行走代理: (a) $\Pi(p,L)$ 作为 p 和 L 的函数; (b) $p \to p_c$ 的相变。

孔介质中的电流流动问题来估计 [17], [18], [19]。 不可压缩流体流动由达西定律描述:

$$\phi = \frac{kA}{\eta} \frac{\Delta p}{L},\tag{19}$$



Figure 5: 跨越聚类质量作为晶格尺寸的函数: $\log_2 M(L) \propto D \log_2 L$ 。

其中 ϕ 是黏度为 η 的流体体积,通过渗透率为 k 的样本的横截面积 A, 而 Δp 是沿样本长度 L 的压力降。如果样本是 d- 维,则 $A \simeq L^{d-1}$,因此我们有:

$$\phi = L^{d-2} \frac{k}{\eta} \Delta p, \tag{20}$$

在电流传导的情况下,我们注意到具有导电率 σ 的 L^d 均匀材料样品的导体率 γ 为:

$$\gamma = L^{d-2}\sigma,\tag{21}$$

因此,在二维情况下 (d = 2),导体率和导电率具有相同的值。导体率是描述电流如何容易地通过材料的外在属性,而导电率则是内在属性,描述了材料固有的传导电力的能力。这里我们采用电流传导方法,因为我们能够避免需要材料常数 k 和 η 。

如果我们对临界簇施加电压V,则可以通过样本计算电流流动:

$$I = \sigma V, \tag{22}$$

其中 σ 是该簇的电导率。由于样本中的所有站点都相同,因此两个相邻站点 $a \equiv (i, j)$ 和 $b \equiv (n, m)$ 之间的电导率(用 $b \in \mathcal{N}_a$ (或 $(n, m) \in \mathcal{N}_{ij}$)表示)可以简单定义如下:

$$\sigma_{a,b} = \begin{cases} 1 & \text{if } x_a = x_b = 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}.$$
 (23)

基尔霍夫电流定律要求从节点 a 流入其所有邻近节点 $b \in N_a$ 的电流之和必须为零:

$$\sum_{b} I_{ab} = 0, \quad \sum_{b} \sigma_{ab} (V_a - V_b) = 0.$$
(24)



Figure 6: 连通簇属性: (a) 初始条件; (b) 渗流; (c) 连通簇; (d) 电位值; (e) 电流; (f) 主骨架和悬挂端。

此外,我们还有边界条件:

$$V_a = \begin{cases} V & \text{if } a = (0, j), j = 0, 1, ..., L - 1\\ 0 & \text{if } a = (L - 1, j), j = 0, 1, ..., L - 1 \end{cases}$$
 (25)

因此,我们得到了一个线性方程组,从中可以找到每个节点*Va*的电势(这里我们也假设*V*=1)。使用计算出的电势和导电率,我们可以找到相邻节点之间的电流:

$$I_{ab} = \sigma_{ab}(V_a - V_b), \tag{26}$$

随后,我们可以计算"主干",即有效传输电流的关键跨域簇的部分。集群的其余部分对应于"悬垂 末端",原则上可以去除,因为只有"主干"对导电性有贡献。因此,骨架分形的标度指数应小于跨 域团簇的标度指数 D。在这种情况下,对骨架标度指数的数值估计在计算上要困难得多,因为首先 需要随机行走过程结束,这可能需要相对较长的时间。图 6 给出了由随机行走代理形成的跨域团簇 的此类计算示例。

4 讨论

看到这些代理自我组织成如此长的聚合物链状结构,而其间没有任何明确的长程吸引力作用,这 是相当出乎意料的。另一个有趣且违反直觉的现象是,尽管它们表现出排斥性的(避免接触的)随 机行走,并且与它们的密度无关,所有代理人都会被"吸引"并因此被"吸收"到正在增长的簇中, 自我组织成一种渗透晶格的复杂结构,在临界浓度下。因此,主要的问题是:作用于这些代理人的 这种"吸引力"的来源是什么?

通常,由于长程吸引力克服了不断增加的熵,许多体系统中会出现有序。在我们的案例中,在没 有任何长程吸引相互作用的情况下,自组织过程的主要驱动力必须来自于熵梯度。

随机变量的熵是该变量潜在结果平均不确定性的度量。假设随机变量 X 在集合 X 中取离散值, 并且它遵循概率分布 $p: X \to [0,1], 则 X$ 的熵为 [20]:

$$S(X) = -\frac{1}{\log_2 |\mathcal{X}|} \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \log_2 p(x) \in [0, 1].$$
(27)

因此, 熵总是正的, 并且在结果均匀分布时达到最大值。不幸的是, 作为复杂性度量的熵未能 捕捉到二维模式的复杂性。例如, 在我们的案例中, 每个站点可以取二进制值 {0,1}, 概率为 1 – p, 相应地 p。如果我们考虑的随机变量是站点占据, 并且由于粒子数量守恒, 我们总是有:

$$S = -\sum_{x \in \{0,1\}} p(x) \log_2 p(x) = -p \log_2 p - (1-p) \log_2 (1-p) \in [0,1].$$
(28)

此熵在 p = 1/2 时达到最大值 $S_{max} = 1$,并且它无法揭示代理复杂动态的任何信息。

一个更好的选择是考虑聚类的熵。假设对于站点占用概率 p,我们有 K_p 个具有面积(粒子数量) $\{A_k\}_{k=0,...,K_p-1}$ 的聚类,那么我们可以定义聚类大小的概率分布:

$$q_j(p) = \frac{\mathcal{A}_j}{\sum_{k=0}^{K_p - 1} \mathcal{A}_k} \in [0, 1], \quad j = 0, ..., K_p - 1,$$
(29)

使得:

$$\sum_{j=0}^{K_p - 1} q_j(p) = 1, \tag{30}$$

因此,可以将聚类分布的熵定义如下:

$$S_c(p) = -\frac{1}{\log_2 K_p} \sum_{k=0}^{K_p - 1} q_k(p) \log_2 q_k(p) \in [0, 1].$$
(31)

我们可以对每个值 $p \in [0,1]$ 和晶格尺寸 L 进行多次运行以平均这个熵 $\langle S_c(p,L) \rangle$ 。结果如图 7 所示, 我们可以看到在相同的 p_c 值处获得了临界转变。在图 7(a) 中我们有标准渗流问题的临界转变,而在 图 7(b) 中我们有随机行走代理人的临界转变(计算每个 p 在动力学停止后且所有代理人被吸收进集 群后的数值)。我们可以看到,在 p 的低值时熵值较高,对应着许多小集群的存在,而在 p 的高值时 熵减少,因为集群的数量减少了,并且当所有的代理人都被吸收到一个巨大的跨域集群中时达到零。

显然,这些熵度量都无法解释代理之间出现的明显的"吸引力",也无法克服排斥性的随机行走



Figure 7: 簇分布的熵 $\langle S_c(p,L) \rangle$ 作为位点占据概率的函数: (a) 标准位点渗流模型; (b) 随机行走体 渗流模型。

动态。第一个熵度量(28)定义在可能的最小尺度(单个站点),因此它无法捕捉到任何集体行为。 与此相反,第二个熵度量(31)能够捕捉全局范围内的集体行为和集群组织,不幸的是它太过粗糙, 无法捕捉中间尺度上的自组织过程细节。因此,我们需要一个可以在邻域层面定义的熵度量,因为 这就是代理"吸收"过程发生的地点。



Figure 8: 一个站点邻域的可能配置: (a) 中心站点为空; (b) 中心站点被占用。

我们注意到,在这里考虑的方形晶格情况下,存在 32 个邻域配置,其中 16 个具有空的中心位 点,而另外 16 个具有被占据的中心位点,如图 8 所示。我们特别关注前 16 种配置(图. 8(a)),因为 这些是能够接受一个代理移动到空的中心位置的情况。在这些配置中,只有最后五个是临时"吸收" 的,通过允许至少有两个邻居的未占据中心的移动。

我们还注意到,如果排除中心位置,这些邻域配置中的占据位置数量可以是 $s \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ 。因此,由于熵是一个可加的量,它可以分解为两个组成部分:

$$S(p) = S_0(p) + S_1(p), (32)$$

其中 S₀(p) 是中心位置未被占据的邻域的熵:

$$S_0(p) = -\frac{1}{\log_2 10} \sum_{s=0}^4 p(s|x_{ij}=0) \log_2 p(s|x_{ij}=0) \in [0,1],$$
(33)

相应地, S₁(p) 是中心位置被占据的邻域的熵:

$$S_1(p) = -\frac{1}{\log_2 10} \sum_{s=0}^4 p(s|x_{ij}=1) \log_2 p(s|x_{ij}=1) \in [0,1].$$
(34)

这里, $p(s|x_{ij} = k), k \in \{0,1\}$ 是在给定中心位置是 $x_{ij} \in \{0,1\}$ 的条件下, 邻域内被占据的位置数为 $s \in \{0,1,2,3,4\}$ 的条件概率。我们对这些熵的分量 $\langle S_0(p,L) \rangle$ 和 $\langle S_1(p,L) \rangle$ 在每个值 $p \in [0,1]$ 和晶 格大小 L 上进行多次运行的平均,结果如图 9 所示。



Figure 9: 随机游走模型中邻域配置的熵: (a) 中心位置为空 $\langle S_0(p,L) \rangle$; (b) 中心位置被占据 $\langle S_1(p,L) \rangle$ 。

我们可以看到,邻域熵度量 $\langle S(p,L) \rangle$ 的组件 $\langle S_0(p,L) \rangle$ 在相同的临界渗流值 $p_c \simeq 0.46$ 处达到最大。对于 $p < p_c$,代理的动力学创建了越来越多的"吸收"站点,而对于 $p > p_c$,这个数量开始减少因为"吸收"站点变得被占据。另外,值得注意的是,在 $\langle S_1(p,L) \rangle$ 的情况下,临界点 $p_c \simeq 0.46$ 看起来变成一个波动点,这是曲线上一个曲率消失但不改变符号的点。 $\langle S_1(p,L) \rangle$ 组件在 $p \simeq 0.76$ 之前一直在增加,当分布向完全占据配置倾斜时,它开始急剧减少。因此,我们假设 $\langle S_0(p,L) \rangle$ 是负责自组织过程"吸引力"的熵贡献的假设似乎得到了证实。

5 结论

大多数多体系统通过长程吸引力相互作用,克服熵的无序效应。与此假设相矛盾的是,斑点粒 子和胶体颗粒能够自组织成大型结构,而不依赖于长程吸引力相互作用。这些颗粒利用从其几何特 征或限制性价态中产生的方向性熵力,促进局部密集堆积。因此,随着系统变得拥挤,它们在有序 结构中的自组装预计会变得更加重要。在这篇论文中,我们考虑了一个不依赖任何长程吸引力相互 作用的自组织代理的例子。该模型由一个简单的代理群体组成,这些代理在一个有界环境中持续进 行随机行走,在正方形晶格上移动。代理可以感知其直接邻域,并且每个代理都会试图进入一个随机选择的空位点,以避免碰撞。代理具有有限价态的特点,当它与至少两个其他代理接触时会暂时停止移动。我们展示了出乎意料的是,代理群体经历了一个渗透相变,并自组织成类似大型聚合物链的结构,这是由于它们有限价态和局部空间排列产生的吸引力熵力的结果。此外,我们还数值确定了渗透阈值和临界跨越团簇的分形维数。模拟的细节和参数在附录中提供,同时还提供了一个用于模拟所提出模型的 Python 程序。

附录

计算是在 Python 中进行的,每对 $p \in [0,1]$ 进行了 $T = 10^2$ 次模拟,使用了一个步长 $\Delta p = 10^{-2}$ 。 由于完整代码的长度相当大,下面仅给出随机游走代理动画部分以及它们最终配置聚类 (https://github.com/mandrecut/entropically_driven_agents) 的最小实现。

```
import numpy as np
from scipy.ndimage import label
from scipy.ndimage import sum_labels
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.animation as animation
def neighbors(L):
    v = [(-1,0), (1,0), (0,-1), (0,1)]
    w = np.zeros((L,L),dtype="object")
    for n in range(L):
        for m in range(L):
            w[n,m] = [x \text{ for } x \text{ in } v \text{ if } n+x[0]>=0 \text{ and } n+x[0]<L \text{ and } m+x[1]>=0 \text{ and } m+x[1]<L]
    return w
if __name__ == "__main__":
    p = 0.465 # occupation probability
    L = 128 # lattice size
    T = 1000 # max number of time steps
    a = (np.random.rand(L,L)<p).astype("int") # initial populated lattice</pre>
    g = neighbors(L) #list of neighbors for each site
    # animation, adjust interval for increasing the speed
    fig, ax = plt.subplots(figsize=(5,5))
    ax.axis('off')
    ims,im = [],ax.imshow(a,animated=True)
    ims.append([im])
    x = np.array([i for i in range(L)])
    y = np.array([j for j in range(L)])
    for t in range(T):
        np.random.shuffle(x)
        np.random.shuffle(y)
        flag = True
```

```
for n in range(L):
        for m in range(L):
            if a[x[n],y[m]] == 1:
                 w = [a[x[n]+c[0],y[m]+c[1]] \text{ for } c \text{ in } g[x[n],y[m]]]
                 if np.sum(w) < 2:
                     u = [g[x[n],y[m]][i] for i in range(len(w)) if w[i] == 0]
                     if len(u) > 0:
                         (q,r) = u[np.random.randint(len(u))]
                         a[x[n]+q,y[m]+r] = a[x[n],y[m]]
                         a[x[n], y[m]] = 0
                         flag = False
    im = ax.imshow(a,animated=True)
    ims.append([im])
    if flag:
        break
ani = animation.ArtistAnimation(fig,ims,interval=100,blit=True,repeat=False)
plt.show()
# find and display clusters
fig = plt.figure(figsize=(5,5))
w,n = label(a)
area = sum_labels(a,w,index=np.arange(n+1)).astype("int")
plt.imshow(np.sqrt(area[w]), origin='lower', interpolation='nearest')
plt.axis("off")
plt.tight_layout()
plt.show()
```

References

- H. Hornischer, S. Herminghaus, M. G. Mazza, Structural transition in the collective behavior of cognitive agents, Scientific Reports, 9(1), 12477 (2019).
- [2] E. Canessa, Possible Force-Entropy Correlation Physica A, 341(1), 165 (2004).
- [3] A. D. Wissner-Gross, C. E. Freer, *Causal entropic forces*, Physical Review Letters, 110, 168702 (2013).
- [4] E. Verlinde, On the Origin of Gravity and the Laws of Newton, Journal of High Energy Physics, 29 (2011).
- [5] N. Roos, Entropic forces in Brownian motion, American Journal of Physics 82, 1161 (2014).
- [6] B. Alder, T.J. Wainwright, *Phase Transition for a Hard Sphere System*, Journal of Chemical Physics, 27, 1208 (1957).
- [7] Onsager L., Ann. New York Acad. Sci., The Effects of Shape on the Interaction of Colloidal Particles, 51, 627 (1949).

- [8] E. Bianchi, Patchy colloids: A theoretical and numerical perspective on functionalized units for self-assembly, Frontiers of Nanoscience, Vol. 13, 37 (2019).
- [9] G. van Anders, N.K. Ahmed, R. Smith, M. Engel, S.C. Glotzer, Entropically Patchy Particles: Engineering Valence through Shape Entropy, ACS Nano, 8(1), 931 (2014).
- [10] F. Sciortino, *Entropy in self-assembly*, Rivista del Nuovo Cimento, 42(11), 511 (2019).
- [11] D. Frenkel, Entropy-driven phase transitions, Physica A, 263(1-4), 26 (1999).
- [12] F. Spitzer, Interaction of Markov processes. Advances in Mathematics, 5, 246-290 (1970).
- [13] T. M. Liggett, Stochastic Interacting Systems: Contact, Voter, and Exclusion Processes, Springer (1999).
- [14] P. A. Ferrari, *Mathematical models: stochastic models*, in N. J. Smelser and Paul B. Baltes (Eds, International Encyclopedia of the Social & Behavioral Sciences. Pergamon, Oxford (2001).
- [15] D. Stauffer, A. Aharony, Introduction to Percolation Theory, 2nd ed., Taylor & Francis (2003).
- [16] S. Havlin, D. Ben-Avraham, Diffusion in disordered media, Advances in Physics, Vol. 51, No. 1, 187-292 (2002).
- [17] S. Kirkpatrick, Percolation and conduction, Rev. Mod. Phys. 45(4), 574-588 (1973).
- [18] B. Derrida, J.G. Zabolitzky, J. Vannimenus, D. Stauffer, A Transfer Matrix Program to Calculate the Conductivity of Random Resistor Networks, Journal of Statistical Physics, Vol. 36, Nos. 1/2 (1984).
- [19] A. Malthe-Sørenssen, Percolation Theory Using Python, Lecture Notes in Physics, 1029 (2024).
- [20] C. E. Shannon, A mathematical theory of communication, Bell System Tech. J. 27, 379 (1948).