

Percolación de nodos en redes cuadradas 2d

G. Caro*

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires,
Pabellón I, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*

(Dated: 2 de mayo de 2017)

Mediante métodos computacionales se estudió el modelo de percolación de una red bidimensional finita de lado $L = 4,128$. Se analizó la transición de fase que presenta el sistema. Se calcularon los distintos exponentes críticos que caracterizan la transición de fase con diversos métodos y se compararon con los valores teóricos hallados en la literatura. Se estudiaron también efectos de red finita y se compararon los resultados con los obtenidos mediante el proceso de renormalización de celda pequeña.

I. INTRODUCCIÓN

La teoría de percolación forma un modelo que presenta una transición de fase y que no tiene solución analítica exacta. Su estudio tiene aplicación para entender otros modelos físicos. Si bien no hay una solución exacta, es posible calcular ciertos parámetros para el caso de una red bi-dimensional infinita.

El estudio desde un enfoque numérico del modelo permite entender diferencias entre la solución para red infinita con las soluciones que presentan redes finitas.

La teoría de percolación tiene importancia práctica en procesos de recuperación de petróleo, así como en otras ramas de la biología, física y geofísica.

Este modelo sirve también como un marco para estudiar los fenómenos de scaling y teoría de grupos de renormalización

II. EL MODELO

Sea una red de d dimensiones con puntos fijos, llamados nodos, unidos mediante enlaces. Los nodos pueden estar ocupados o desocupados, con probabilidad p de que lo estén. Si existe un camino que una la red de un extremo al otro siguiendo solo nodos ocupados se dice que la red percola. Esto se lo llama modelo de percolación. La red puede ser cuadrada, triangular, en forma de diamante, etc. Los nodos que se encuentran conectados entre sí forman parte de un cluster. Los clusters se caracterizan por su tamaño y por si son un cluster percolante o no, siendo este aquel que une ambos extremos de la red. El número de nodos pertenecientes a un cluster de tamaño s se escribe como N_s . Normalizando por el tamaño de la red, a una dada probabilidad p , se obtiene la densidad de clusters de tamaño s , $n_s(p)$.

A. Transición de fase

Cuando se varía la probabilidad p se observa que existe un valor en particular a partir de donde la red percola para probabilidades iguales o mayores a esta, la cual llamaremos probabilidad crítica p_c . Para una red bidimensional infinita este valor es aproximadamente $p_c = 0,5927$. Cerca del punto crítico de una transición de fase, ciertas magnitudes cumplen leyes de potencia.

Los observables de interés para este trabajo son varios. Si se define al cluster percolante como aquel que une ambos extremos de la red, puede definirse su masa M como el número de nodos que pertenecen a un dado cluster. La masa del cluster percolante cerca de la probabilidad crítica cumple la relación:

$$M \propto L^D \quad (1)$$

donde D es una magnitud conocida como dimensión fractal, y es menor a la dimensionalidad del problema.

Puede definirse también la fuerza del cluster percolante como la probabilidad de que un dado nodo pertenezca al cluster percolante. En una red finita será el número de nodos que pertenecen al cluster percolante, su masa, dividido el número total de nodos. La fuerza del cluster percolante de una red infinita cumple la siguiente relación:

$$P_\infty \propto (p - p_c)^\beta \quad (2)$$

A partir de la distribución de fragmentos $n_s(p)$ puede calcularse los momentos de la distribución. En particular, el momento de orden dos, que cumple:

$$\sum_{s=1}^{\infty} s^2 n_s(p) \propto |p - p_c|^{-\gamma} \quad (3)$$

B. Leyes de potencia y exponentes críticos

El cuadro I resume las principales leyes de potencia obtenidas en la literatura para redes percolantes bi-dimensionales, cuadradas e infinitas.

* german.layer8@gmail.com

Cuadro I. Valores teóricos hallados en la literatura.

Símbolo	Ley	Valor
d	—	$d = 2$
D	$M \sim L^D$	$D = 91/48$
ν	$\xi \sim p - p_c ^{-\nu}$	$\nu = 4/3$
τ	$n(p_c) \sim s^{-\tau}$	$\tau = 1 + d/D$
σ	$z = s^\sigma(p - p_c)$	$\sigma = (\nu D)^{-1}$
α	$m_0(p) \sim p - p_c ^{2-\alpha}$	$\alpha = 2 - (\tau - 1)/\sigma$
β	$m_1(p) \sim (p - p_c)^\beta$	$\beta = \nu(d - D)$
γ	$m_2(p) \sim p - p_c ^{-\gamma}$	$\gamma = (3 - \tau)/\sigma$

Observamos que los valores obtenidos en la Ref. [1] dependen solo de la dimensión del problema y de dos exponentes críticos. Esto es un resultado general de la teoría de percolación. Si bien D y ν dependen de la topología de la red, una vez conocidos estos dos es posible calcular todos los demás con las mismas relaciones presentadas en el cuadro I.

C. Efectos de red finita

La escala relevante en una red es la longitud de correlación ξ . La función de correlación es la probabilidad de que un nodo a distancia r de un sitio ocupado pertenezca al mismo cluster. La longitud de correlación es el valor en que la función de correlación decae en e^{-1} . Si el lado L de la red cumple $L \gg \xi$ entonces la red se comporta como si fuese una red infinita, ya que ξ será la única magnitud relevante. Sin embargo, en el caso de que $L \ll \xi$ entonces la longitud L será la que caracterice el sistema. Las siguientes relaciones se cumplen.

$$P(L, \xi) = \xi^{-\frac{\sigma}{\nu}} f\left(\frac{L}{\xi}\right) \quad (4)$$

donde $f(z)$ se denomina función de scaling. Es posible estudiar esta función conociendo que en una red finita la distribución de fragmentos de tamaño s en función de la probabilidad cumple la siguiente relación:

$$n_s(p) = q_0 s^{-\tau} f(z) \quad , \quad z = s^\sigma(p - p_c) \quad (5)$$

En la Ec. (5) se observa un término q_0 . Este término depende en principio del exponente crítico τ , pero es posible deshacerse de esta dependencia sabiendo que $n_s(p_c) = q_0 s^{-\tau}$.

D. Renormalización

Es posible explotar aún más el hecho de que cerca de la transición de fase el sistema se muestra libre de escalas. Si se *re-escala* el sistema, deben seguir siendo válidas las leyes de potencia anteriores. Utilizando esto se pueden tomar subredes de lado b y reemplazar los nodos que lo

forman por uno solo, llamado super-nodo. Este super-nodo estará ocupado o desocupado según el criterio que se elija. La probabilidad p' de que el super-nodo esté ocupado será en general una función de la probabilidad de ocupación de la red original.

Si se cambia la escala en un factor b , entonces la relación entre la longitud de correlación en la red original y la reescalaeda sería:

$$|p' - p_c|^{-\nu} = \frac{|p - p_c|^{-\nu}}{b} \quad (6)$$

de donde haciendo Taylor en un entorno de p_c puede despejarse una relación para ν .

$$\frac{1}{\nu} = \log_b\left(\frac{dp'}{dp}\right) \quad (7)$$

Además, en el punto crítico, la probabilidad de ocupación no debe cambiar al reescalar la red. Si un cluster percolante es débil, deberá seguir siéndolo luego de cambiar la escala. Eso nos lleva a proponer $p' = p$ en el punto crítico p_c .

III. SIMULACIONES NUMÉRICAS

Mediante el algoritmo de Hoshen-Kopelman [2] se estudiaron redes finitas de lado $L = 4, 8, 16, 32, 64, 128$ con el objetivo de extraer de ellas información de redes bidimensionales cuadradas infinitas. Para ello se realizó estadística con 27000 repeticiones por cada corrida por tamaño de la red. Se consideraron para el análisis que estás redes de lado L son ventanas de redes infinitas. Se pobló la red con probabilidad p y mediante [2] se categorizaron los clusters, encontrando la función $n_s(p)$. También se encontró la probabilidad crítica variando p y estudiando si la red finita percola o no. Todo el código fue desarrollado en C por cuestiones de rendimiento y el análisis de datos se realizó en Python, mediante numpy y matplotlib.

IV. RESULTADOS

A. Determinación de $p_c(\infty)$ y ν , y τ

Se usaron distintos métodos para la determinación numérica del punto crítico. Se tomaron redes de tamaño $L=4,16,32,64,128$. Dado L se pobló la red con probabilidad $p = 1/2$. Si la red percoló se restó a $1/4$ a p , y si no lo hizo se sumó esta misma cantidad. Se repitió el proceso con $1/8, 1/16$, etc, hasta alcanzar la precisión deseada en el punto crítico. Se repitió este mismo procedimiento en 27000 repeticiones y se promediaron los resultados. Se obtuvo así, como función de L , los siguientes datos. Se calculó también la dispersión σ de la probabilidad crítica p_c en las repeticiones.

Cuadro II. p_c y σ como función del lado de la red

Tamaño	p_c	σ
4	0.749952	0.011352
16	0.585365	0.044085
32	0.58881	0.025323
64	0.593047	0.01598
128	0.592909	0.009282
256	0.592566	0.006255

Se puede demostrar que la dispersión sigue la siguiente forma funcional.

$$\sigma(L) \propto L^{-1/\nu} \quad (8)$$

Entonces, ajustando una recta a los datos de la dispersión en escala logarítmica en función de la longitud del lado de la red puede despejarse el exponente crítico ν . Se encontró haciendo esto $\nu = 1,41196$. El ajuste puede verse en la figura siguiente.

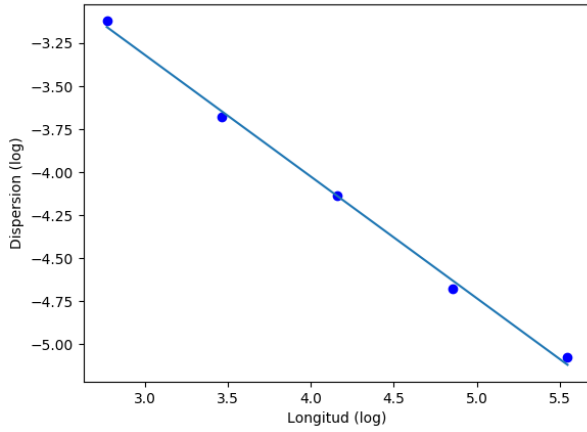
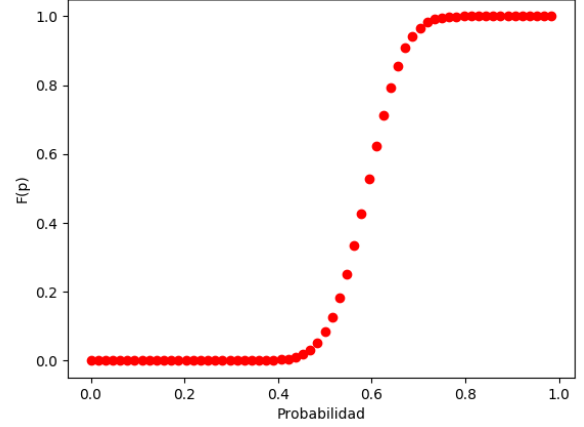
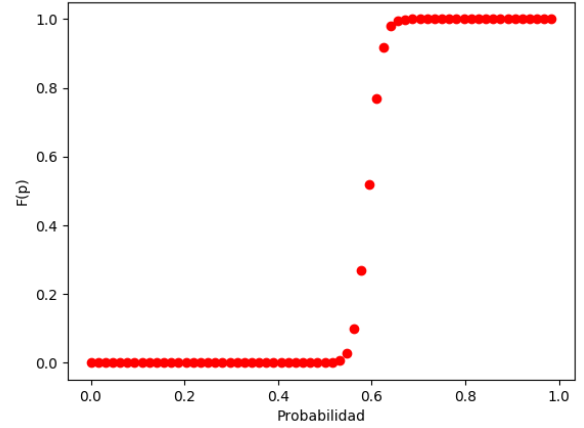
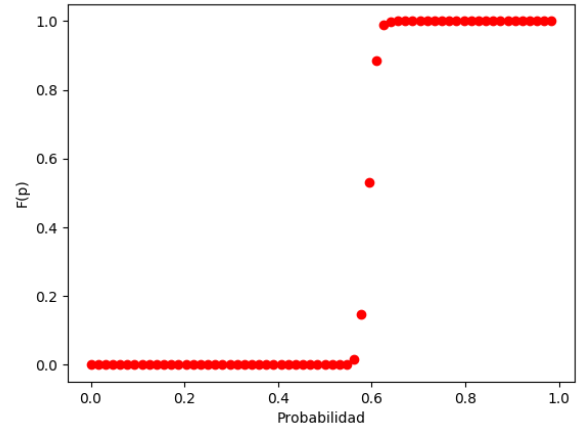


Figura 1. Dispersión en función del ancho de la red

Es interesante estudiar también cual es la probabilidad de que el sistema percole en función de la probabilidad de ocupación. Esta función será $F(P)$. En el caso discreto podemos estudiar $F(P)dp$. Esta función es igual a cero debajo de p_c y tiende a 1 por encima de este valor. Un criterio posible para determinar a partir de esta figura el valor de la probabilidad crítica es tomar la mediana de la distribución, el valor de $F(P)$ donde el sistema percole al menos la mitad de las veces. A continuación se tabulan las probabilidades críticas encontradas con este método así como la figura de $F(P)$ para una redes de diversos tamaños. Se observa que al aumentar el área de la red, la función se parece más a una función escalón.

Figura 2. $F(p)dp$ para una red de 16x16Figura 3. $F(p)dp$ para una red de 64x64Figura 4. $F(p)dp$ para una red de 128x128

Cuadro III. p_c como función del lado de la red a partir de $F(p)dp$

Tamaño	p_c
4	0.578125
16	0.59375
32	0.59375
64	0.59375
128	0.59375

Otra forma de estimar el p_c es recordando que en la probabilidad crítica, la forma funcional para el número de fragmentos de tamaño s es $n_s(p_c) \propto s^{-\tau}$. Si se calcula el tamaño de los clusters y se realiza un histograma, se puede tomar logaritmo y ajustar una lineal para cada valor de p . La probabilidad crítica quedará localizada en el valor de p que hace χ^2 lo más cercano a 1. Se muestra a continuación un gráfico para χ^2 de un ajuste lineal en un entorno del valor conocido de p_c para una red de $L = 64$.

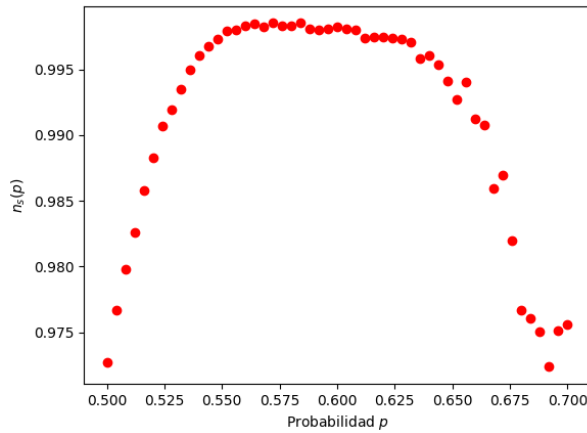


Figura 5. χ^2 para un ajuste de la forma $s^{-\tau}$ a n_s en un entorno de p_c

Se observa en los datos que dentro de dos decimales de precisión, el máximo del χ^2 puede estar localizado en un rango amplio. Debería estudiarse esto mismo con redes más grandes para ver si se observa el mismo fenómeno y ver si se debe descartar este método o si es lo suficientemente preciso como para encontrar el p_c . Lo que si puede hacerse es calcular el exponente crítico τ . Esto se hace ajustando una curva en p_c utilizando que la forma funcional de n_s cumple:

$$n_s(p_c) \propto s^{-\tau} \quad (9)$$

Para esto se tomo una red de lado $L = 128$ y se graficó en escala logarítmica $n_s(p_c)$, y se ajusto una recta. La pendiente es entonces el valor de τ . Se obtuvo la siguiente figura:

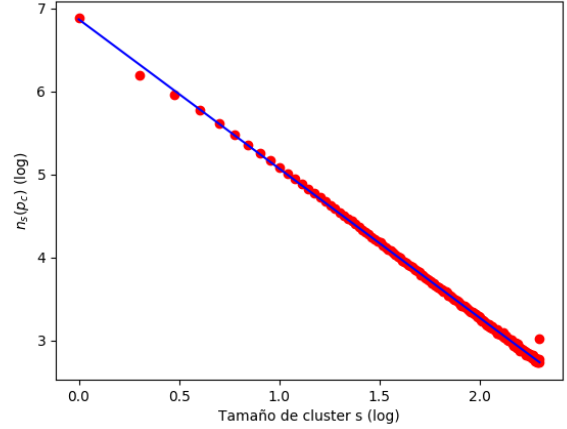


Figura 6. Ajuste lineal en escala logarítmica de $n_s(p_c)$ para una red de lado 128. El valor de τ obtenido es 1.79459

B. Determinación de la dimensión fractal D

En la probabilidad crítica la masa del cluster percolante cumple con la relación 1. Se calculó la masa del mismo para varios valores del lado de la red L y se calculo a partir de aquí la dimensión fractal D .

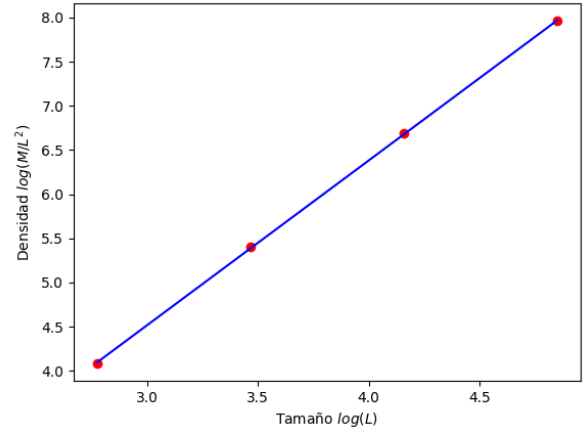


Figura 7. Masa del cluster percolante en función de L para $P = p_c$ en escala logarítmica y ajuste lineal.

El valor para el exponente crítico D puede obtenerse como la pendiente del ajuste en escala logarítmica, y es igual a $D = 1.86408$. Los tamaños de red que se usaron son 16,32,64,128.

C. Obtención de β a partir de la intensidad P_∞

A partir del gráfico de P_∞ es posible calcular β utilizando la ecuación 2. Se calculó P_∞ en un entorno de p_c .

Luego se pasó a escala logarítmica y se ajustó una lineal. Con el ajuste se obtuvo $\beta = 0,4205$ para una red de lado $L = 128$. La función $P_\infty(p)$ se muestra a continuación.

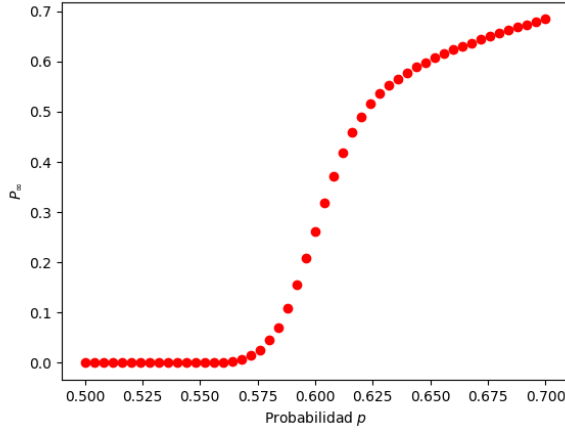


Figura 8. Fuerza del cluster percolante en función de la probabilidad p en un entorno de p_c

D. Espectro de fragmentos y verificación de la hipótesis de *scaling*

La hipótesis de *scaling* se presenta en la Ec. 5 en donde se observa que para distintos valores de s y $p - p_c$, el espectro de fragmentos debe colapsar en una única curva $f(z) = n_s(p)/n_s(p_c)$, donde $z = s^\sigma(p - p_c)$.

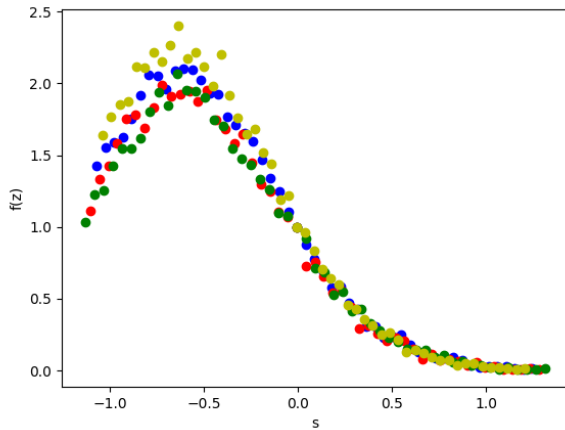


Figura 9. Función $f(z)$ para varios valores de s representativos.

Se observa que para los distintos valores de s se tiene la misma curva, aunque se observa cierta dispersión en el máximo de la función.

Es posible determinar numéricamente el valor de σ buscando para un dado s cuál es el valor de p_{max} que maximiza el número de clusters de este tamaño. Si se hace

esto y se usa que $p_{max} - p_c = s^\sigma$ puede realizar un gráfico en escala logarítmica y ajustar una recta a los resultados. Se muestran a continuación los gráficos de $P_{max}(s)$ en escala logarítmica, y un gráfico representativo de $n_s(p)$. El valor de σ hallado es $\sigma = 0,65678$.

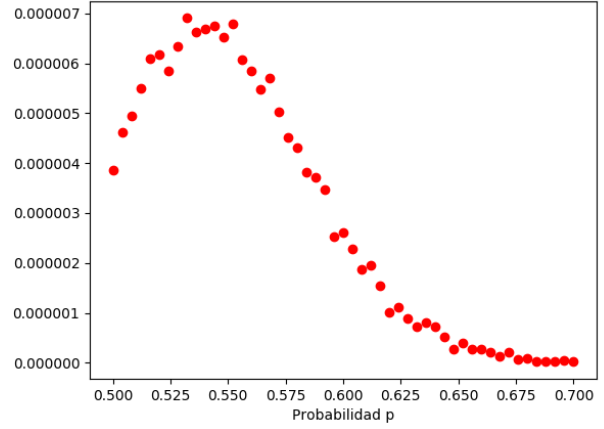


Figura 10. $n_s(p)$ para $s = 140$.

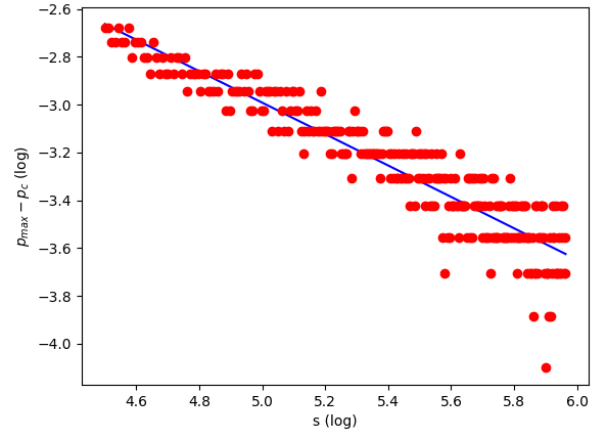


Figura 11. $p_{max} - p_c$ vs s en escala logarítmica. La pendiente que corresponde con σ es 0.65678

La forma escalonada de los datos se debe a la que el paso utilizado en p es de 0,004, que no es lo suficientemente fino para distinguir el valor de p_{max} entre valores de s cercanos. Se propone para un trabajo posterior realizar este mismo análisis, utilizando el mismo código, pero con un paso de 0,0005 para obtener un mejor ajuste.

V. OBTENCIÓN DE D Y β SEGÚN MÉTODO ALTERNATIVO

El trabajo [3] propone estudiar la longitud de correlación. Para ello toma redes cuadradas de lado 187. Las redes son pobladas con probabilidad p igual a $p - p_c = 0,035$ y $p - p_c = 0,022$. Luego de pobladas la red se verifica que la diferencia entre la probabilidad de ocupación real y la usada difiera en no más de 0,05 %. En estas redes se identifica el cluster más grande. Se toma dentro de la red subredes de lado $L < 187$ y se calcula la masa $M(L)$ del cluster más grande. Se repite esto para un gran número de redes y se calcula la densidad promedio $\rho(L) = M/L^2$. Se muestra a continuación figuras para $p - p_c = 0,035$ en rojo y $p - p_c = 0,022$ en azul en escala log-log.

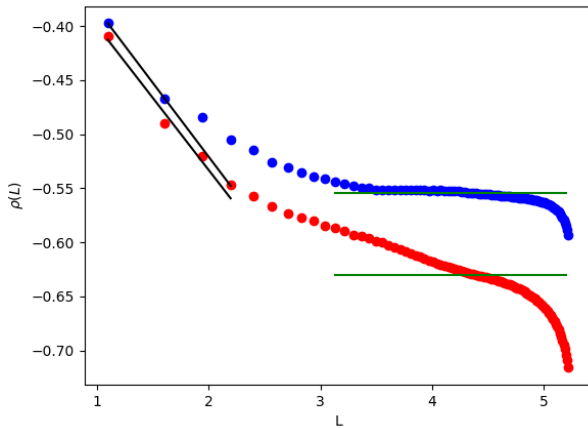


Figura 12. Densidad del cluster más grande en función del tamaño de la subred

Debajo de la longitud de correlación, la densidad de ocupación media debe seguir la forma funcional:

$$\rho(L) \propto L^{2-D} \quad (10)$$

y por encima de la longitud de correlación pero debajo del extremo de la red, donde se ven los efectos de red finita, la densidad media debe ir a $P_\infty(p)$. Si se usa que esta función cumple la relación:

$$P_\infty \propto (p - p_c)^\beta \quad (11)$$

pueden calcularse los siguientes coeficientes realizando ajustes a cada parte. Para $p - p_c = 0,035$

$$D = 1,90398 \quad \beta = 0,1676 \quad (12)$$

Y para $p - p_c = 0,022$

$$D = 1,87583 \quad \beta = 0,1614 \quad (13)$$

VI. OBTENCIÓN DE γ

A partir de la distribución de fragmentos $n_s(p)$ se calculó el momento de orden dos de la distribución.

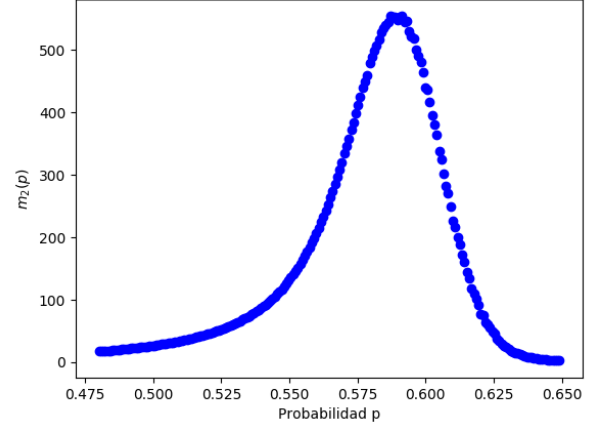


Figura 13. Momento de orden dos m_2 en función de la probabilidad de ocupación p

Se sabe a partir de la ecuación 3 el comportamiento del momento de orden dos en un entorno de p_c . Es entonces posible realizar un procedimiento llamado γ -matching. Se toma el punto crítico efectivo de la red, p_{ef} como un punto cercano al máximo de m_2 . Se corta la distribución en este punto, se pasa a escala logarítmica y se van ajustando rectas. Estas rectas, por la ecuación 3 deberán tener pendiente γ . Se llama a las pendientes del lado izquierdo y derecho γ_+ y γ_- respectivamente. Se grafica estas pendientes en función de la distancia a p_{ef} y el punto de cruce corresponderá al exponente γ de la red. Se encontró $\gamma = 1,09$ para una red de tamaño $L = 128$, tomando $p_{ef} = 0,58$, mientras que el máximo de la distribución está en $p = 0,59$. Se consideró moverse del máximo ya que el momento en una red infinita presenta una divergencia en este punto, por lo que no es representativo del problema. Variando el máximo para valores más bajos en p no varía el valor hallado para γ .

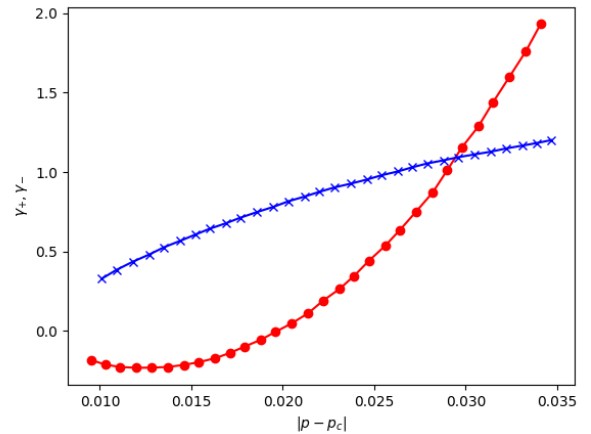


Figura 14. γ_+ y γ_- en función de la distancia del máximo de m_2 , que corresponde a p_c

El valor de γ encontrado difiere significativamente del valor teórico. No se encontró la fuente de error, o si solo se trata de un efecto de utilizar una red pequeña. Se propone repetir con el mismo código el análisis para redes más grande y verificar el valor hallado.

VII. VERIFICACIÓN DE RESULTADOS POR RENORMALIZACIÓN

Podemos verificar, al menos de manera aproximada, los resultados de las secciones realizando un proceso de renormalización de *celda pequeña*. Consideramos una porción de red de lado $b = 2$ y la llamamos un *super-nodo*. El super-nodo estará ocupado o no dependiendo de cierto criterio. Se pueden analizar dos en particular que son mayoría simple y percolación vertical

A. Mayoría simple

Se considera subredes de lado igual a 2. Las siguientes configuraciones se consideraran como super-nodos ocupados.

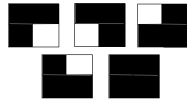


Figura 15. Super-nodos ocupados con criterio de mayoría simple

Y se considerará los siguientes como super-nodos vacíos:

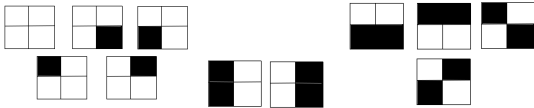


Figura 16. Super-nodos vacíos con criterio de mayoría simple.

La probabilidad de que un super-nodo esté lleno con este criterio será:

$$p' = 4p^3(1 - p) + p^4 \quad (14)$$

La longitud de correlación cerca del punto crítico sigue la forma:

$$\Xi \propto |p - p_c|^{-\nu} \quad (15)$$

Con esta propuesta puede despejarse los valores de p_c y ν mediante la ecuación 7 y usando $p = p'$ en el punto crítico. Los resultados serán:

$$p_c = 0,76759 \quad \nu = 1,39563 \quad (16)$$

B. Percolación vertical

Es posible tomar otro criterio para la elección de super-nodos. Este es el de percolación vertical. Se consideran los siguientes super-nodos como ocupados o no ocupados.

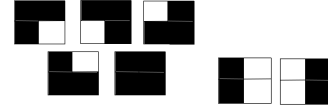


Figura 17. Super-nodos ocupados con criterio de percolación vertical

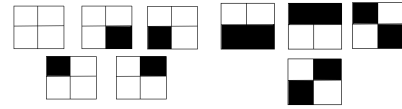


Figura 18. Super-nodos vacíos con criterio de percolación vertical.

Con esta selección puede encontrar la probabilidad de que un super-nodo esté ocupado como:

$$p' = 4p^3(1 - p) + p^4 + 2p^2(1 - p^2) \quad (17)$$

A partir de esta ecuación, con el mismo método que en mayoría simple, se obtiene:

$$p_c = 0,61803 \quad \nu = 1,63527 \quad (18)$$

VIII. CONCLUSIONES

El cuadro IV resume todos los exponentes críticos hallados a lo largo de este trabajo, algunos de los cuáles fueron calculados con varios métodos.

Cuadro IV. Exponentes críticos teóricos y los hallados en este trabajo.

Símbolo	Valor teórico	Valor hallado
d	$d=2$	$d = 2$
D	91/48	1,86408
D según [3]	91/48	1,90398
ν	4/3	1,41196
ν por renormalización	4/3	1,39563
τ	187/91	1,79459
σ mediante ajuste	36/91	0,65678
σ mediante ν y D	36/91	0,37994
β mediante ajuste	5/36	0,4205
β según [3]	5/36	0,1676
β mediante ν y D	5/36	0,1919136
γ mediante ajuste	43/18	1,09
γ mediante τ y σ	43/18	1,8353
α mediante τ y σ	-2/3	-0,7324

La variación de los exponentes críticos respecto a su valor teórico está fuertemente ligado al tamaño de red utilizado. Repetir estos mismos calculos con redes más grandes permitiría mejorar la precisión de los valores hallados.

En el caso de renormalización con celda pequeña se ve que los valores hallados, principalmente para la probabilidad crítica p_c difiere mucho tanto del valor teórico como de los valores numéricos hallados. Este método podría mejorarse calculando numéricamente la ecuación $p'(p)$.

Se observa que los valores de β y D obtenidos mediante el método del trabajo [3] son cercanos a los valores teóricos. Este método tiene la particularidad que simula

la idea de que las redes de lado L consideradas son ventanas de una red infinita mayor. Esto permite, siempre y cuando se esté debajo de la longitud de correlación de la red mayor, obtener un buen análisis de redes infinitas a partir de redes finitas.

AGRADECIMIENTOS

G. Caro agradece a Guillermo Frank por todas sus explicaciones en como afrontar cada parte de este trabajo, y a José por todas las charlas invertidas en discutir y mejorar cada resultado.

-
- [1] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to percolation theory* (Taylor & Francis Inc, 2003) pp. 57–87.
 [2] J. Hoshen and R. Kopelman, Physical Review B **14**, 3438

- (1976).
 [3] A. K. et al, Physical Review A **16**, 269 (1983).