

Estudio del problema de percolación en redes cuadradas

Ramiro Santamaria , Santiago Scheiner

Física computacional, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Resumen

En este trabajo se simuló el fenómeno de percolación para el caso de redes cuadradas en dos dimensiones y se estudiaron diferentes procesos de relevancia para este fenómeno, tales como cambios de fase, exponentes críticos, hipótesis de *scaling* y grupo de renormalización.

Los resultados mostraron ser consistentes con el comportamiento esperado para este tipo de sistemas en cada uno de los regímenes estudiados.

1. Introducción

El fenómeno de percolación resulta de gran importancia en física debido a la universalidad que exhibe. Esto se observa particularmente en los conceptos que surgen a partir de su estudio, tales como transiciones de fase, invariancia de escala, grupos de renormalización y fenómenos críticos, entre otros.

La percolación es el fenómeno por el cuál un fluido atraviesa materiales porosos y su estudio y comprensión resulta de suma importancia en diversas áreas que van desde la epidemiología [1][2] hasta la geología [3].

Debido a la complejidad del problema, no es posible en general obtener soluciones analíticas exactas de este problema. Es precisamente por este motivo que simulaciones computacionales de este fenómeno.

En este trabajo se simuló el fenómeno de percolación para redes cuadradas bidimensionales y se analizó el proceso de transición de fase, así como también la dimensión fractal y las propiedades de los exponentes críticos del problema.

2. Marco teórico

Para el estudio del fenómeno de percolación, se modela una red a partir de una matriz cuadrada de lado L , cuyos sitios se encuentran ocupados con una probabilidad p , utilizando el algoritmo de Hoshen-Kopelman [4].

En nuestra representación, la matriz contiene «0» en los sitios desocupados y «1» en los ocupados, como se muestra en la figura 1. Establecemos que dos sitios ocupados son «primeros vecinos» si se encuentran inmediatamente juntos de forma vertical u horizontal.

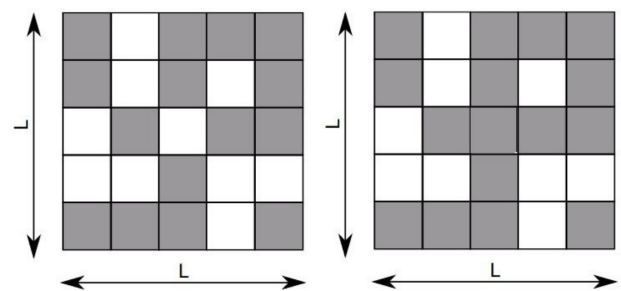


Figura 1: Redes conformadas a partir de sitios ocupados (gris) y libres (blanco).

Es posible entonces definir *clusters* como conjuntos de sitios ocupados que están vinculados entre sí como primeros vecinos. De esta manera, se tiene percolación en una red si un cluster atraviesa la red desde un extremo hasta el otro. En particular, resulta suficiente con hallar clusters que atraviesen la red desde el lado superior hasta el inferior. En los ejemplos de la figura 1, vemos que no hay percolación en la red de la izquierda, y sí lo hay en la de la derecha.

Con estos conceptos, es entonces posible definir una probabilidad crítica p_c para redes infinitas, tal que para toda probabilidad $p < p_c$ no se tiene percolación, y para toda probabilidad $p > p_c$ sí.

De este modo, es posible definir para este problema una transición de fase, ya que es posible observar dos regímenes diferentes a ambos lados de un punto crítico. Esto nos lleva entonces a la determinación del parámetro de orden del problema, que resulta ser la intensidad del cluster percolante P_∞ , que es simplemente la probabilidad de que un sitio al azar de la red pertenezca al cluster percolante. **Bien!**

Por otra parte, podemos definir la distribución de clusters $n_s(p)$ como la densidad de clusters de tamaño s por «cantidad de sitios de la red». Para redes con $L \rightarrow \infty$, en la región cercana a la transición de fase, el

resultado que se obtiene es:

$$n_s \sim s^{-\tau} \quad (1)$$

donde τ es un exponente crítico.

Para redes finitas, sin embargo, la relación que se obtiene es:

$$n_s = q_0 s^{-\tau} f(z) \quad (2)$$

donde $z = s^\sigma(p - p_c)$; $f(z)$ una función de *scaling* que debe ser determinada numéricamente y σ un exponente crítico.

Puede definirse también la *dimensión fractal* en la que la masa del cluster percolante se relaciona con la longitud de la red de la forma:

$$M(L) = L^{d_f} \quad (3)$$

donde d_f es la dimensión fractal.

Asimismo, se define el exponente σ a partir de la siguiente relación:

en módulo: $|p_{max} - p_c|$

$$\epsilon_s = p_{max} - p_c \sim s^{-\sigma} \quad (4)$$

donde p_{max} es la probabilidad que maximiza el número de clusters de tamaño s . El exponente σ se encuentra presente en la variable z .

Finalmente también se puede definir el momento de orden dos, que se define como:

$$m_2(p) = \sum_{s=1}^{\infty} n_s(p) s^2 \sim \epsilon^{-\gamma} \quad (5)$$

Con $\epsilon = (p - p_c)$, que nos indica el tamaño medio del cluster para determinada probabilidad.

3. Resultados

Probabilidad crítica

En primer lugar, se calculó la probabilidad crítica de las redes en función su tamaño L . El criterio adoptado para esto fue método de la mediana, que consiste en la búsqueda de la probabilidad para la cual la red percola la mitad de las veces llamado. Los resultados obtenidos se muestran en la tabla 1.

L	p_c
4	0,5681
8	0,5830
16	0,5879
32	0,5940
64	0,5921
128	0,5920

Cuadro 1: Probabilidad crítica p_c hallada para distintos tamaños L de la red.

Lo que puede observarse es que para los tamaños $L = 64$ y $L = 128$ comenzamos a obtener una probabilidad crítica que se aproxima al valor tabulado para el caso de $L \rightarrow \infty$, que resulta ser $p_c = 0,592$ [5].

Un gráfico de estos mismos resultados se muestra en la figura 2.

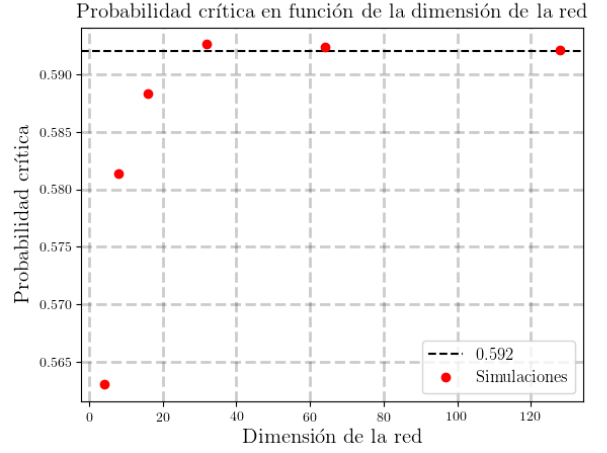


Figura 2: Convergencia de la probabilidad crítica hacia el valor esperado a medida que se aumenta la longitud de los lados de la red.

Para corroborar la consistencia de este resultado, se buscó nuevamente el valor de la probabilidad crítica tomando como base la relación dada por la ecuación (1). Según esta relación, podíamos expresar $N_s \sim s^{-\tau}$ en un entorno cercano a la transición de fase, lo que significa que es entonces posible tomar el logaritmo de las dos magnitudes para obtener una recta con pendiente $-\tau$. Sobre estos datos, se realizaron ajustes lineales para para probabilidades en un entorno cercano a p_c . El gráfico correspondiente a la red con $L = 128$ se muestra en la figura 3.

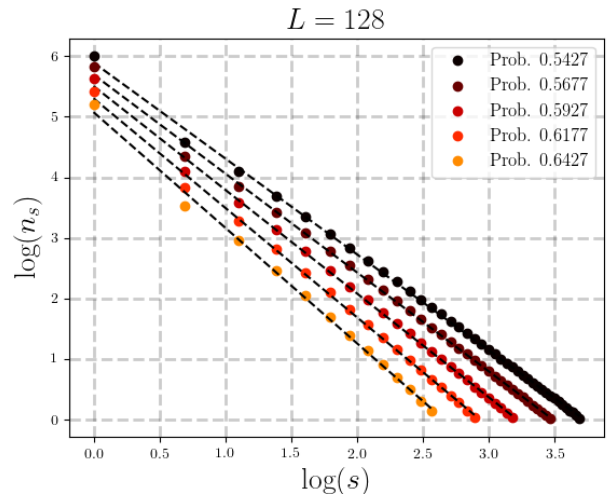


Figura 3: Distribución de fragmentos en función de sus tamaños, para el caso $L = 128$.

Los valores hallados para τ para las redes de diferentes tamaños se muestran en la tabla 2.

L	τ
32	1.61
64	1.65
128	1.71

Bien!!!

Cuadro 2: Valores de τ obtenidos a partir de los ajustes para distintos tamaños L de la red.

Intensidad de Cluster Percolante

Para el cálculo de la intensidad del cluster percolante, se realizó un barrido de probabilidades entre 0 y 1, con pasos de

En cada uno de estos pasos, se realizaron 27000 redes renovando las semillas, de manera de poder analizarlas como independientes, y se contabilizó la cantidad de sitios presentes en el cluster que percolara. Este número se dividió finalmente por el tamaño total de la red para obtener la intensidad del cluster percolante. Los resultados se muestran en la figura 4.

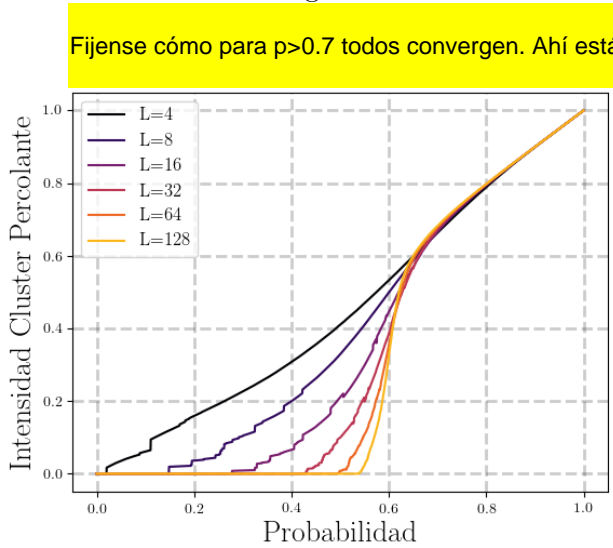


Figura 4: Intensidad del cluster percolante para los diferentes tamaños de la red.

El resultado es consistente con lo que se espera obtener.

Para probabilidad de ocupación nula, lo esperable es no tener ningún cluster percolante simplemente porque no deberían observarse sitios ocupados en la red, lo que significa que la intensidad debería ser nula también.

Por otra parte, si se analiza el otro extremo del gráfico, si la probabilidad de ocupación es uno, se espera tener una red completamente llena y por lo tanto, que el cluster percolante ocupe toda la red, lo que da como resultado una intensidad 1.

En el entorno cercano al punto crítico se vuelve interesante analizar qué ocurre con el tamaño de la red.

Lo esperable para una red de lados infinitos es una función de tipo escalón, ya que se espera que en ningún caso haya percolación antes del punto crítico y que se tenga percolación en todos los casos más allá del punto crítico. Efectivamente, lo que se observa en el gráfico es un cambio más abrupto para las redes de mayores dimensiones que en las redes más pequeñas.

Dimensión Fractal

Como se mencionó previamente para $p \sim p_c$ se tiene una relación entre la masa del cluster percolante con la dimensión fractal. A partir de la ecuación 3 vemos que se tiene una relación entre la masa M y el lado L de la red de la forma $M \sim L^2$. Esto posibilita tomar el logaritmo de los valores para estas magnitudes y ajustar linealmente los datos. La dimensión fractal corresponde entonces a la pendiente de la recta del ajuste.

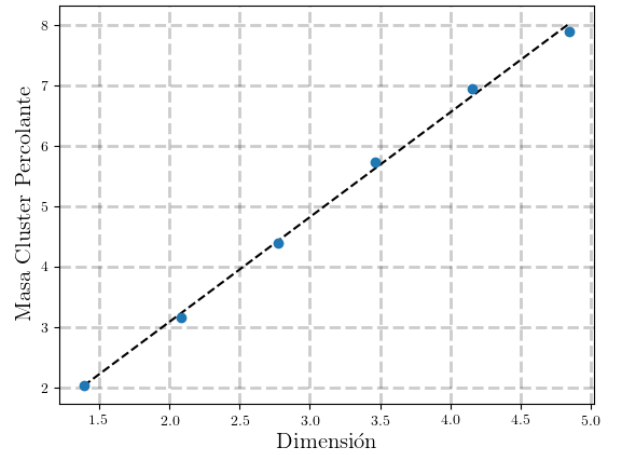


Figura 5: Ajuste lineal sobre los datos: $D_{ajuste} = 1,84$.

El ajuste arroja un valor de $D_{ajuste} = 1,84$, que es del orden de lo que se espera para redes de estas características que es un valor de $D_{ajuste} = 1,89$.

Hipótesis de *scaling*

Como se explicó en la introducción, la distribución de clusters depende de s y la función de scaling $f(z)$ según la relación que brinda la ecuación 2.

Lo que se hizo en esta etapa del trabajo fue entonces estimar cualitativamente la función $f(z)$ a partir de esa relación, utilizando para esto:

$$f(z) = \frac{n_s(p)}{n_s(p_c)}$$

Se calculó entonces la distribución de fragmentos para $L = 64$ y se la graficó en función de la probabilidad de ocupación. Se muestra este resultado en la figura 6.

El sistema quedó algo "des-sintonizado".Lo soluc

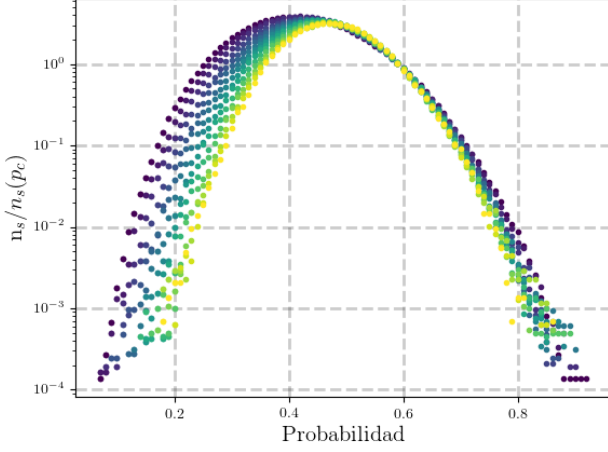


Figura 6: Función de *scaling* en función de la probabilidad de ocupación para $s = 20$ (violeta) hasta $s = 32$ (amarillo).

Lo que puede observarse es que para probabilidades cercanas a la crítica, $f(z) \sim 1$, como es de esperarse.

Para probabilidades mayores a la crítica, comienza a hacerse visible el efecto de la aparición de un cluster percolante y por lo tanto, una menor probabilidad de formación de clusters de menor tamaño. De la misma manera, para probabilidades más bajas, no llegan a formarse clusters de los tamaños analizados.

En contraste con estos dos casos, en la región cercana a la probabilidad crítica, se observan cantidades apreciables de clusters de los tamaños seleccionados y que no llegan a ser absorbidos por el cluster percolante.

Se puede apreciar, si se mira con atención y se tiene en cuenta la escala utilizada, que el máximo de la campana disminuye levemente con el aumento de s . Esto resulta razonable si se considera que al trabajar con redes de dimensiones finitas, la probabilidad de hallar más repeticiones de clusters de un tamaño dado es menor a medida que se aumenta el tamaño buscado.

Exponente σ

Para el análisis completo de este proceso resulta de utilidad conocer el valor del exponente crítico σ .

Para eso, se utiliza la ley de potencias dada por la ecuación (4), que establece que $\epsilon_s = p_{max} - p_c \sim s^{-\sigma}$ donde p_{max} es la probabilidad que maximiza el número de clusters de tamaño s . El exponente σ se encuentra presente en la variable z .

En escala logarítmica podemos entonces ajustar con una función lineal para obtener el valor del exponente crítico σ . El resultado de este ajuste para el caso $L = 32$ se muestra en la figura 7.

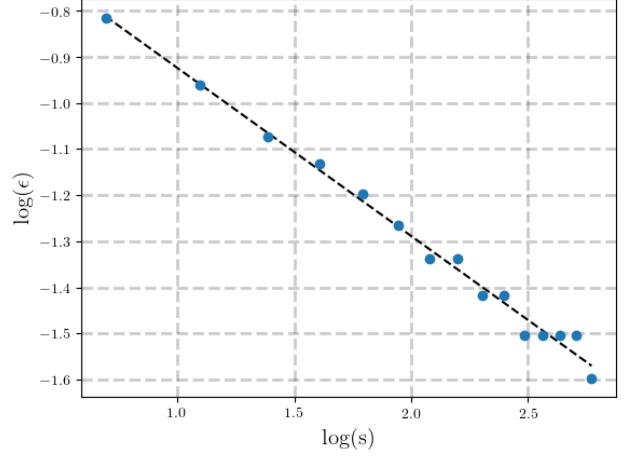


Figura 7: $\log(\epsilon_s)$ en función del logaritmo del tamaño del cluster s para el caso $L = 32$.

Los ajustes obtenidos en los casos analizados se muestran en la tabla 3.

L	σ
32	0.364
64	0,382
128	0,378

Cuadro 3

Se observa que los valores son consistentes entre sí, así como también lo son con el valor esperado de $\sigma = 0,39$ [6].

γ -matching

Otro exponente crítico importante es el γ , que está relacionado con el momento de orden dos del sistema. Este se define como:

$$m_2(p) = \sum_{s=1}^{\infty} n_s(p) s^2 \sim \epsilon^{-\gamma}$$

con $\epsilon = (p - p_c)$, que nos indica el tamaño medio del cluster para determinada probabilidad.

Con el fin de calcular este exponente se tomaron dos ventanas de tamaños $L=8$ y $L=128$, para los cuales se calcularon los momentos de ordenados para elementos de clusters que van desde 1-16 y 20-170 respectivamente.

La decisión de tomar estos valores se tomó en base a que nos interesa saber cómo se comporta el sistema cerca del punto crítico, en el cual vale la ley de potencias. Si se tomaran clusters más grandes, se podría estar considerando fragmentos mayores a la del tamaño de la ventana.

La estrategia para el cálculo de este exponente crítico es ubicar el máximo de la distribución para luego

detectar la probabilidad crítica del sistema. Una vez hecho esto calculamos los posibles gammas asociados para probabilidades en las cercanías de la probabilidad crítica, tanto para valores mayores como para menores. Graficamos las pendientes obtenidas y cuando las curvas se intersequen significa que el gamma por encima de la probabilidad crítica es igual a la de por debajo.

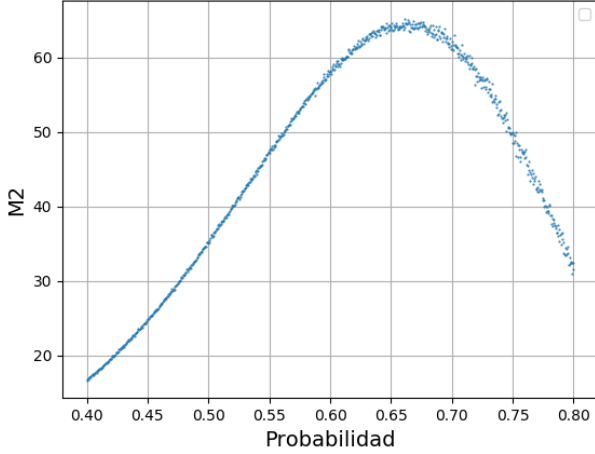


Figura 8: Momento de orden dos para matriz con $L=8$

Para la ventana de $L=8$ no se obtuvieron resultados favorables, como se observa en la figura 8. Esto ocurre debido a que el momento de orden dos tiene un ancho muy grande en comparación al tamaño de la ventana, y es por este motivo queda muy acotado el rango de exploración para calcular para el valor de gamma.

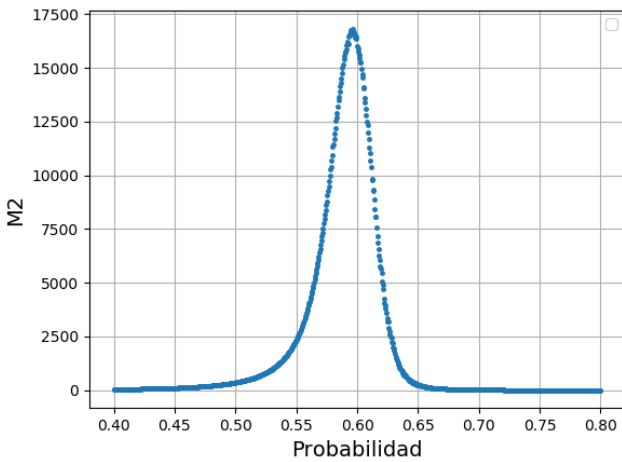


Figura 9: Momento de orden dos para matriz con $L=128$

Para $L = 128$ se observa un resultado más acorde a lo que se esperaba, en comparación al caso en el que $L \rightarrow \infty$, como se aprecia en la figura 9. Otro punto importante es el resultado de la probabilidad crítica arroja un resultado similar a la teórica, siendo $p_c = 0,5976$ la

probabilidad obtenida.

Se procedió a calcular los distintos valores de los gammas para entornos al rededor de $|p - p_c|$, como se observa en la figura 10.

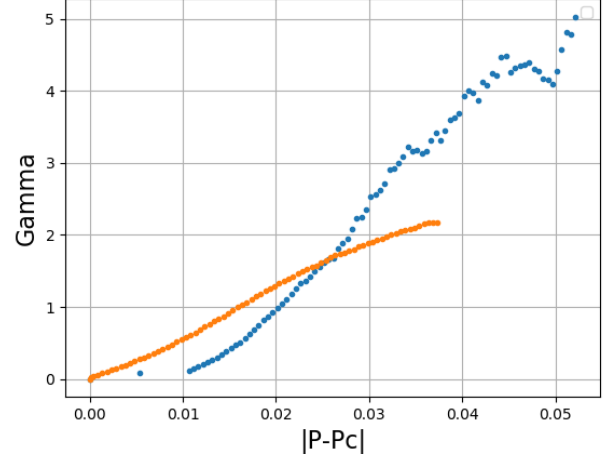


Figura 10: Diferentes valores de gamma calculados para probabilidades mayores a p_c , en azul, y menores, en naranja

El valor de gamma que se obtuvo fue de 1.7, que difiere del valor teórico para el caso de $L \rightarrow \infty$ que es de 2.4. Una posible razón de ésta diferencia es que no estamos considerando suficientes tamaños de clusters para el calculo del gamma, por lo que se obtiene un valor menor.

Grupo de Renormalización

Como última etapa del trabajo, retomamos la búsqueda de la probabilidad crítica de manera teórica. El método que se empleó para esto es el de *grupo de renormalización*.

Este método consiste en realizar una transformación de escala sobre la red original, de manera tal que la esta quede dividida en subredes de lado b , y a cada una le corresponda un único sitio.

La probabilidad de ocupación de este sitio estará dada por la transformación usada. En particular, estara determinada por el criterio que adoptado para definir la ocupación del nuevo sitio.

Consideramos en una ventana un cluster percolante de tamaño característico ϵ y lo reescalamos a un tamaño menor, $\epsilon' = \epsilon/b$, donde b era la longitud de la ventana antes del reescalamiento.

Tomamos $b = 2$ y definimos dos criterios para la ocupación de la nueva red: el criterio de *percolación vertical* y de *mayoría simple*. El criterio de percolación vertical consiste en considerar ocupada la celda si la subred anterior presentaba ya un cluster percolante. En la figura

11 se observan las siete combinaciones que cumplen con este criterio.

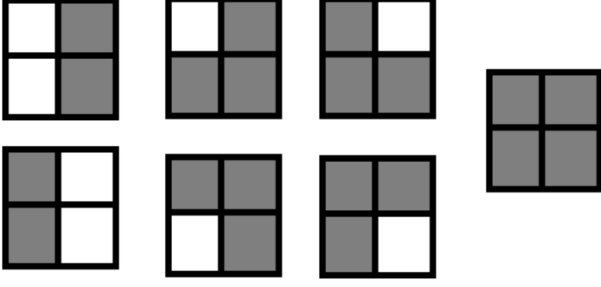


Figura 11

La probabilidad de percolación para el caso correspondiente a dos sitios libres y dos ocupados es:

$$Pr[perc] = 2(1 - p)^2 p^2$$

Para el caso de un sitio libre y tres ocupados es:

$$Pr[perc] = 4(1 - p)p^3$$

Finalmente, para el caso en que los cuatro se encuentran ocupados, la probabilidad de percolación es simplemente:

$$Pr[perc] = p^4$$

En total, obtenemos entonces una nueva probabilidad de percolación:

$$p' = 2p^2 - p^4$$

Como la probabilidad crítica es la misma sin importar el reescalamiento, al evaluar en dicha probabilidad se llega a $p_c = 2p_c^2 - p_c^4$, lo que significa que es posible el valor por su condición de punto fijo.

Por otra parte, el criterio de *mayoría simple* consiste en considerar ocupada la celda si al menos tres sitios de la subred anterior están ocupados. En la figura 12 se presentan las cinco combinaciones posibles.

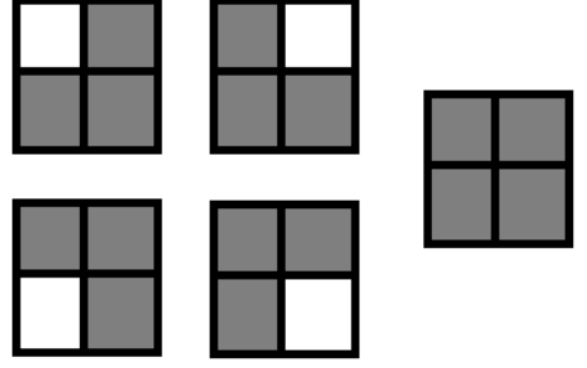


Figura 12

En ese caso, la probabilidad de percolación es $4(1 - p)p^3$ para el caso con tres sitios ocupados y uno vacío, y p^4 para el caso con los cuatro sitios ocupados. Nuevamente, como la probabilidad crítica es invariante de escala, debe ser un punto fijo del polinomio. Entonces, se obtiene la expresión:

$$p_c = 4p_c^3 - 3p_c^4$$

El resultado encontrado para el criterio de percolación vertical es $p_c = 0,618$, mientras que para el segundo $p_c = 0,768$, lo que significa que el primero de ellos arroja el valor más cercano al valor obtenido por simulaciones, que resultaba ser $p_c = 0,59$.

4. Conclusiones

En este trabajo se simuló con éxito el proceso de percolación en redes bidimensionales y fue posible el estudio de transiciones de fase, así como también de las propiedades de los exponentes críticos del problema.

Los resultados obtenidos en las diferentes etapas del problema resultaron ser consistentes con lo que esperaba, con diferencias esperables para los casos de redes finitas, como era el caso de las redes estudiadas.

En particular, los resultados para la probabilidad crítica mostraron converger consistentemente hacia los valores esperados de antemano a medida que se iba aumentando el tamaño de la red y por lo tanto, aproximando mejor el modelo de red infinita.

Lo mismo ocurrió para el análisis de la intensidad del cluster percolante. En el entorno cercano al punto crítico se encontró un comportamiento cada vez más similar al esperado al de redes infinitas a medida que se aumentaba el tamaño de las redes analizadas.

En el estudio de la dimensión fractal, el valor hallado fue completamente compatible con el esperado teniendo en cuenta el modelo teórico.

De igual manera, en el estudio de la hipótesis de scaling, los resultados mostraron un comportamiento esperado si se tienen en cuenta las consecuencias de la aparición de un cluster percolante en la probabilidad crítica, tal como se detalló en la sección anterior.

Para el caso del la estimación del exponente γ el resultado que se obtuvo, 1.7, difiere del valor teórico, 2.4. Una posible razón de ésta diferencia es que no estemos considerando suficientes tamaños de clusters para el calculo del exponente γ , por lo que se obtiene un valor menor.

Finalmente, se obtuvo el valor de la probabilidad crítica p_c por el método de renormalización y se vio que con el criterio de percolación vertical se obtuvieron mejores resultados que con el criterio de mayoría simple. Esto se adjudica a que con el segundo criterio se eliminan los casos en los que la red percolaría sin haber realizado el nuevo escaleado, lo que provoca que la probabilidad crítica aumente su valor.

Nop, me parece por lo que veo del gráfico de la $f(z)$.

Referencias

- [1] Parshani, R., Carmi, S., & Havlin, S. (2010). Epidemic threshold for the susceptible-infectious-susceptible model on random networks. *Physical review letters*, 104(25), 258701.
- [2] Grassberger, P. (1983). On the critical behavior of the general epidemic process and dynamical percolation. *Mathematical Biosciences*, 63(2), 157-172.
- [3] Cousin, I., Nicoullaud, B., & Coutadeur, C. (2003). Influence of rock fragments on the water retention and water percolation in a calcareous soil. *Catena*, 53(2), 97-114.
- [4] Hoshen, J., & Kopelman, R. (1976). Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. *Physical Review B*, 14(8), 3438.
- [5] Levinshtein, M. E., Shklovskii, B. I., Shur, M. S., & Efros, A. L. (1976). The relation between the critical exponents of percolation theory. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 42, 197.
- [6] Herrmann, H. J., Hong, D. C., & Stanley, H. E. (1984). Backbone and elastic backbone of percolation clusters obtained by the new method of 'burning'. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 17(5), L261.