

Percolación

MATIAS AGUIRRE, SOLANGE LUQUE

Física computacional, Dep. Física, UBA

Resumen

En el presente trabajo se estudió el proceso de percolación para una red cuadrada de dimensión dos. Para ello se calculó mediante simulaciones computacionales la probabilidad crítica con diversos métodos y para distintas longitudes de lado de la red. Para estudiar el fenómeno cerca de la transición de fase, se analizó la existencia de un parámetro de orden llamando intensidad del cluster percolante (P_∞). Se calculó también la masa del cluster percolante y la dimensión fractal D . Se estudió además la hipótesis de scaling para la distribución de clusters y el segundo momento correspondiente. Con esto último se calculó el exponente crítico γ .

1. Introducción

La percolación es el fenómeno por el cual un fluido atraviesa materiales porosos. El ejemplo más típico de esto es el del café pasando a través de un filtro.

Este fenómeno presenta varios conceptos estadísticos: *Scaling theory*, transición de fase, fractales y renormalización, entre otros. Debido a la complejidad del problema, no es posible en general obtener soluciones analíticas exactas salvo en casos muy simplificados. Es por este motivo que se utilizan simulaciones computacionales.

La percolación en dos dimensiones es uno de los sistemas más sencillos que presentan transición de fase no trivial y que no es posible resolver analíticamente. Es por eso que este trabajo se centra en este ejemplo.

El modelo consiste en armar una matriz cuadrada de largo L con ceros. Cada lugar de la matriz se poblará con un 1 con cierta probabilidad p . Se dice que la red percola si existe un camino de sitios ocupados que se puede recorrer para llegar del extremo superior de la red al extremo inferior (Ver figura 1).

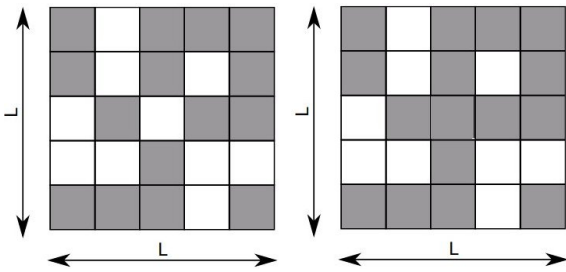


Figura 1: En gris los sitios ocupados y en blanco los vacíos. La primera red no percola, mientras que la segunda sí.

Existe la llamada *probabilidad crítica* (p_c) para la cual aparece el *cluster percolante*, es decir, un conjunto de sitios ocupados que conectan el extremo superior de la red con el inferior. En caso en el que el largo L de la red es infinito, este *cluster percolante* será infinito también.

Para que exista una transición de fase debe existir también un parámetro de orden. Este no es más que la *intensidad del cluster percolante* P_∞ , es decir, la probabilidad de que un sitio al azar de la red pertenezca al *cluster percolante*.

Otra magnitud interesante es la llamada *distribución de clusters* ($n_s(p)$). Esto no es más que la densidad de clusters de tamaño s por unidad de sitio. Para redes con $L = \infty$ cerca de la transición de fase, se encuentra que $n_s(p) \sim s^{-\tau}$ donde τ es un exponente crítico.

Para redes finitas, sin embargo, la relación es

$$n_s(p) = q_0 s^{-\tau} f(z) \quad (1)$$

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

2. Implementación Computacional

Como se mencionó en la introducción, el modelo consiste en ir poblando una red de $L \times L$. Para ello, se comenzó a recorrer la red. En cada sitio, dada una probabilidad de ocupación p , se generaba un número al azar. Si ese número era mayor a p entonces el nodo correspondiente de la red era ocupado, sino se lo dejaba vacío.

De esa forma se conseguía una red poblada de ceros y unos. Para saber si existe un *cluster percolante* o no, es útil ponerle una etiqueta a cada cluster. Para ello se utilizó el logaritmo de Hoshen Kopelman [1].

Una vez logrado esto, se pueden empezar a calcular los tamaños de los clusters y su densidad por unidad de sitio. Con esta información es posible analizar los diferentes aspectos del problema mencionados anteriormente.

Se consideraron redes con $L = 4, 8, 16, 32, 64$ y 128 .

3. Resultados

3.1. Obtención de la Probabilidad Crítica

Para obtener la probabilidad crítica se utilizaron varios métodos.

Un método utilizado fue el de bisección poblando la red con $p = 1/2$. Si el sistema percolaba, se volvía a correr con $p = p - \frac{1}{4}$ siendo n el correspondiente paso. En caso contrario, se volvía a poblar con $p = p + \frac{1}{4}$. Esto se repetía de forma $p = p - \frac{1}{2^n}$ con n el número de iteración correspondiente hasta obtener la precisión deseada, en esta caso una precisión de 0.0001.

Este proceso se repitió para diez mil semillas y luego se tomó el promedio sobre éstas. De esta forma se obtuvo la probabilidad crítica para cada dimensión (Ver tabla 1)

L	p_c
4	0.563015
8	0.581335
16	0.587827
32	0.593271
64	0.592227
128	0.592789

Tabla 1: Resultados de la probabilidad crítica obtenidos con el método de bisección.

Vemos que a partir de $L = 64$ la probabilidad crítica se acerca al valor tabulado para el caso de $L = \infty$ que es $p_c = 0,592$. Era de esperarse que p_c se pareciera más al valor teórico mientras más grande fuera la red.

Otro método para calcular la probabilidad crítica es calcular la probabilidad para la cuál la red percola la mitad de las veces llamado método de la mediana. Se obtuvieron los resultados de la tabla 2.

L	p_c
4	0.567996
8	0.582996
16	0.587996
32	0.593996
64	0.591996
128	0.591996

Tabla 2: Resultados de la probabilidad crítica obtenidos con el método de la mediana.

Con ambos métodos los resultados coinciden con lo expuesto en la literatura [2].

A continuación se presentan en un gráfico los datos de la tabla 1.

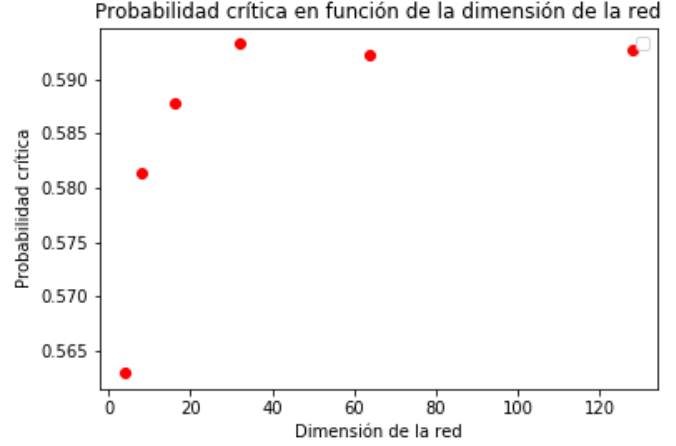


Figura 2: Probabilidad crítica en función del largo L para el método de bisección.

También para el primer método se calculó la dispersión de los valores obtenidos en función de L (Ver figura 3)

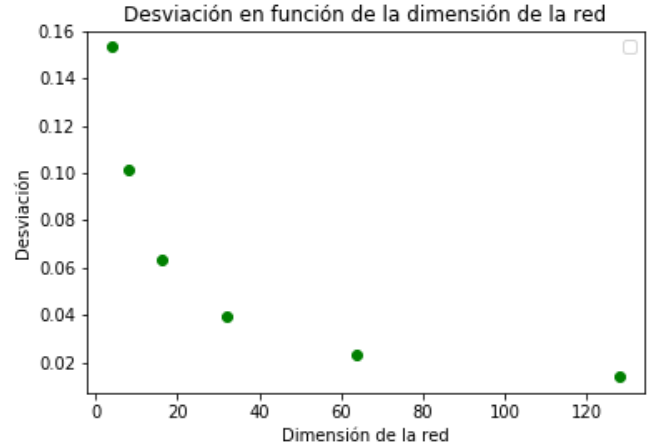


Figura 3: Dispersión en función de L .

Como se puede ver la dispersión disminuye a medida que se aumenta la dimensión.

Otra forma de encontrar la probabilidad crítica es recordar, como se mencionó en la introducción, que $n_s(p_c) \sim s^{-\tau}$ y por lo tanto, si se calcula $n_s(p)$ y se lo grafica en función de s , al tomar logaritmo en ambos ejes debemos obtener una recta con pendiente τ en p cerca de p_c .

Para realizar esto, ya teniendo un valor estimativo de p_c , nos movimos en un rango pequeño alrededor de este y realizamos los gráficos correspondientes. Se realizó un ajuste lineal para cada gráfico (Ver figuras 4,5 y 6).

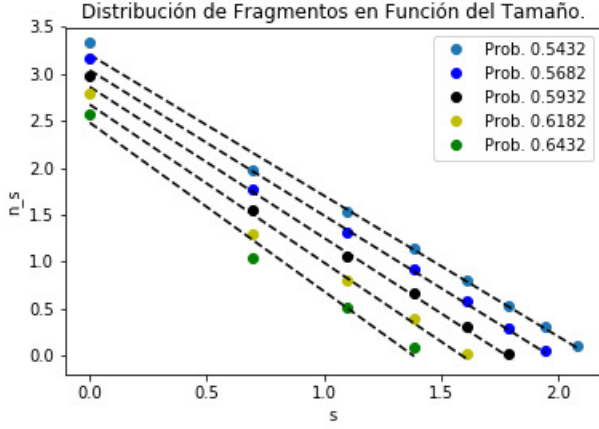


Figura 4: Distribución de clusters en función de su tamaño en escala logarítmica para $L=32$.

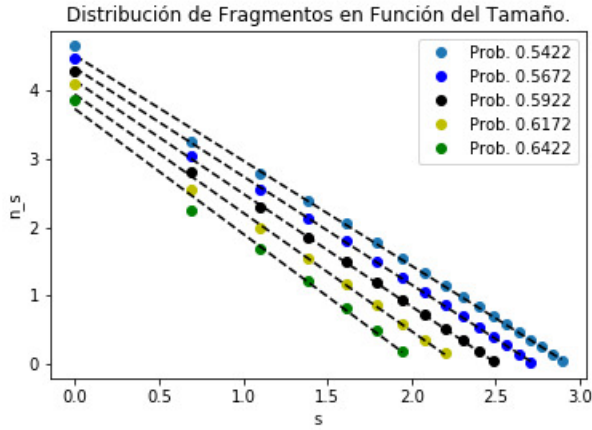


Figura 5: Distribución de clusters en función de su tamaño en escala logarítmica para $L=64$.

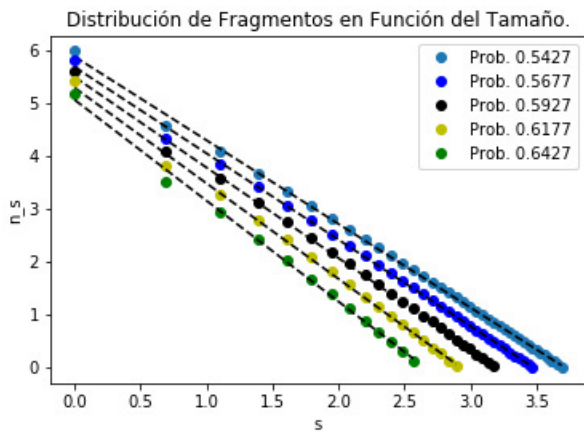


Figura 6: Distribución de clusters en función de su tamaño en escala logarítmica para $L=128$.

Para $L = 32$ y $L = 64$, la pendiente encontrada en el ajuste correspondiente al gráfico con $p = p_c$ toma el valor $\tau = 1,6$. Para $L = 128$ la pendiente hallada es de $\tau = 1,7$.

En ninguno de los casos el τ hallado coincide con el valor teórico.

El error en el método fue ignorar el hecho de que la ordenada al origen de los gráficos también depende de τ , lo cuál dificulta el ajuste.

La forma correcta de hacerlo habría sido moverse en un rango alrededor de p_c , pero sin dejar el τ libre. Luego, se propondría una pendiente cercana al valor teórico de τ y se lo iría variando levemente hasta encontrar la pendiente que minimice el χ^2 del ajuste lineal. De esta forma, se encontrarían al p_c y a τ como la combinación de probabilidad y pendiente que minimizan el χ^2 .

3.2. Intensidad de Cluster Percolante

Se procedió a calcular la intensidad del cluster percolante. Para ello, se recorrieron todas las probabilidades posibles entre $[0, 1]$ y se calculó para cada una el tamaño del cluster percolante. Luego, se lo dividió por el tamaño total de la red. Este cálculo se realizó promediando sobre 27000 semillas.

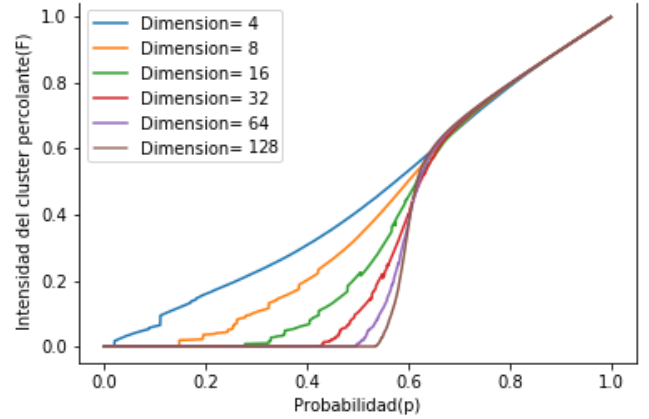


Figura 7: Intensidad del cluster percolante en función de la probabilidad de ocupación p .

Como podemos ver en la figura 7, la intensidad del cluster percolante se comporta como es esperado: Para $p = 1$, todos los nodos pertenecen al cluster percolante, por lo tanto la intensidad del mismo es igual a uno.

Para $p = p_c$, vemos que a menor L , menos abrupto es el cambio de concavidad de la curva. Esto, nuevamente, es esperado. Para la red infinita se espera una discontinuidad en la derivada para $p = p_c$. Al trabajar con dimensiones finitas, esto no lo observamos, pero sí vemos que mientras más grande es el L , y por lo tanto, más "cercano" a los resultados de $L = \infty$, más brusco es el cambio en la función.

3.3. Dimensión Fractal

A continuación se buscó la dimensión fractal D . Se sabe que para $p \approx p_c$, hay una relación entre la masa del cluster percolante con la dimensión fractal. Esta es de la forma $M(L) \sim L^D$. Por lo tanto, si graficamos la masa del cluster percolante en función de L , podemos tomar escala logarítmica y encontrar a la dimensión fractal como la pendiente del ajuste lineal correspondiente.

En la figura 8 se presentan los datos obtenidos.

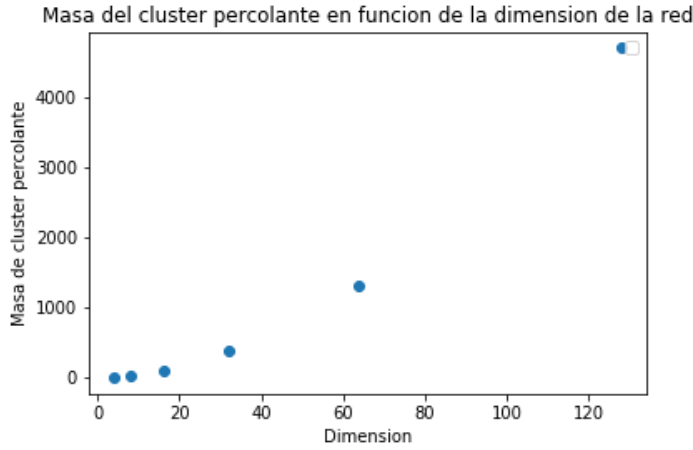


Figura 8: Masa del cluster percolante en función de L .

Como se mencionó, se tomó escala logarítmica y se realizó el ajuste lineal correspondiente. Esto se puede apreciar en la figura 9.

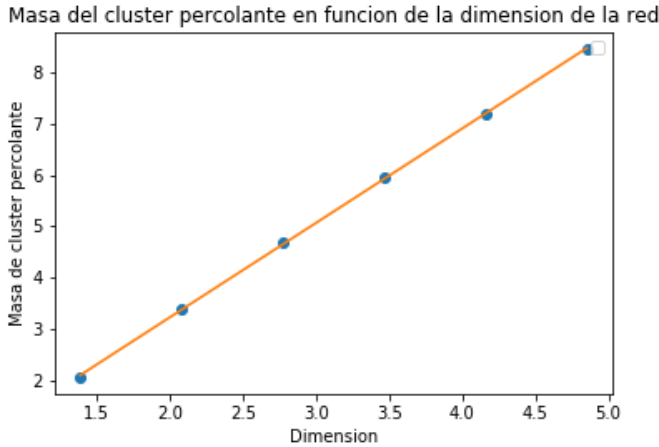


Figura 9: Masa del cluster percolante en función de L en escala logarítmica con ajuste lineal.

Del ajuste se encontró una pendiente de valor 1.8397 y una ordenada al origen de -0.4534. El valor de la pendiente es similar al valor teórico esperado para la dimensión fractal que es de $D = 1.89$.

3.4. Hipótesis de Scaling

Como se mencionó en la introducción, la distribución de clusters depende de s y la función de scaling $f(z)$.

Se buscó obtener la forma cualitativa de la función $f(z)$. Para ello se usó que $\frac{n_s(p)}{n_s(p_c)} = f(z)$. Calculamos entonces la distribución de fragmentos para $L = 64$ y realizamos el gráfico en función de la probabilidad de ocupación como se puede observar en la figura 10.

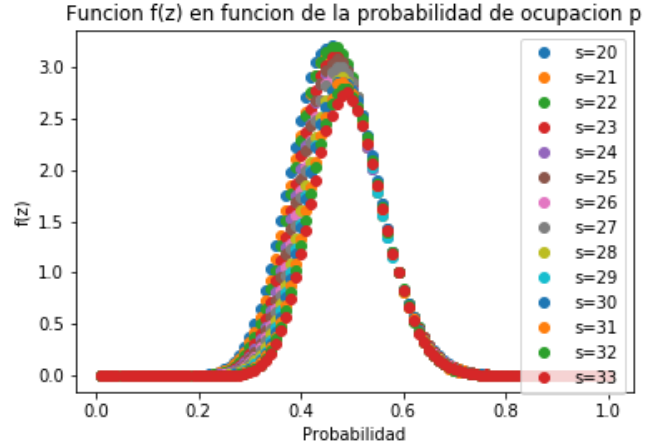


Figura 10: Función de scaling en función de la probabilidad de ocupación.

Se observa, como era de esperarse, que para $p \approx p_c$, $f(z) \approx 1$.

Para probabilidades mayores a la crítica, la campana se plancha. Esto es razonable dado que por encima de p_c el cluster percolante empieza a dominar y los clusters de tamaños más pequeños son cada vez menos probables.

Lo mismo sucede para p chico: Los clusters de los tamaños elegidos no se llegan a poblar.

Cerca de p_c , en cambio, la probabilidad es suficiente para que los clusters se pueblen y no ser *comidos* por el cluster percolante. Allí es donde se observa el pico de la campana.

Sin embargo, el pico de la campana está un poco por debajo del p_c calculado. Esto puede deberse a que estamos lidiando con redes finitas.

De todas formas, todas las campanas tiene el pico para valores de p cercanos sin importar el valor de s .

Se puede apreciar que mientras más grande es s menos alta es la campana lo cual es razonable: A dimensión finita, mientras más grande el cluster, hay menos posibilidades de que se repita y por lo tanto su densidad es más baja comparada con la densidad de clusters más pequeños.

3.5. Exponente σ

Es útil también conocer el exponente crítico σ mencionado en la introducción.

Para eso nos vamos a valer de la ley de potencias que dice 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 .

Por lo tanto, tomando escala logarítmica y ajustando por una función lineal pudimos obtener el valor del exponente crítico σ .

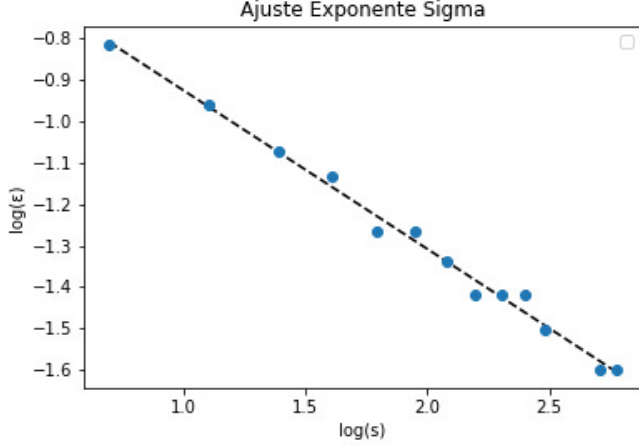


Figura 11: ϵ en función del tamaño del cluster s en escala logarítmica para $L=64$.

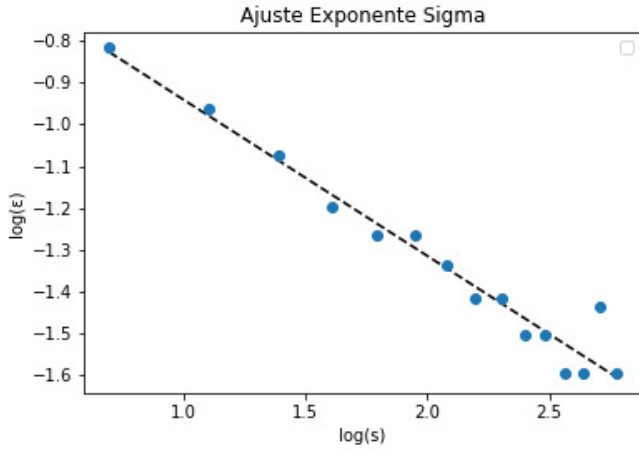


Figura 12: ϵ en función del tamaño del cluster s en escala logarítmica para $L=128$.

Para el ajuste en la figura y 11 con $L = 64$, se encontró una pendiente de $-0,38$ y para el ajuste en la figura y 12 con $L = 128$ una pendiente de $-0,37$. Ambos valores son similares al teórico que es de $0,39$.

3.6. γ - matching

También se buscó estimar el exponente crítico γ . Para ello se calculó el segundo momento de la distribución de clusters.

Este se puede calcular como $m_2(p) = \sum_{s=1}^{\infty} n_s(p) s^2 \sim \epsilon^{-\gamma}$.

Este análisis lo hicimos tanto para $L = 8$ como $L = 128$ apreciables en las figuras 13 y 14 respectivamente.

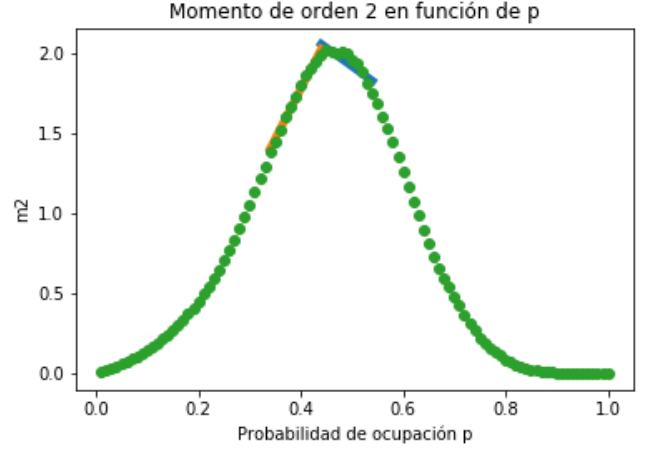


Figura 13: Momento de orden 2 en función de la probabilidad de ocupación para $L=8$.

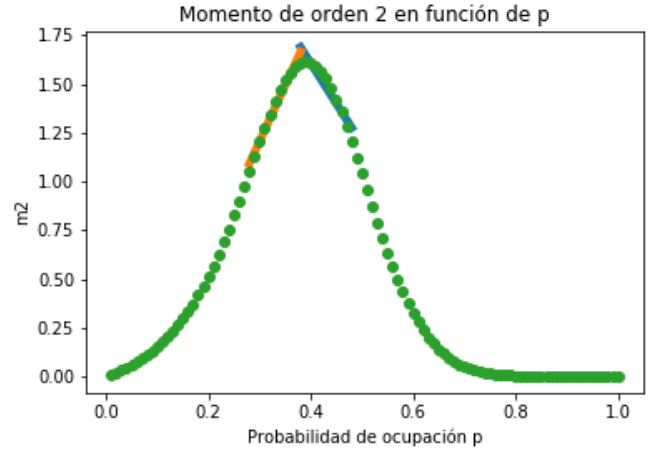


Figura 14: Momento de orden 2 en función de la probabilidad de ocupación para $L=128$.

En ambos casos se observa que el pico de la figura no está centrado en $p = p_c$. Esto es esperable dado que estamos trabajando con redes finitas. Sin embargo, para el caso de $L = 8$ el corrimiento es mucho menor que para el caso de $L = 128$. Esto se puede explicar observando los fragmentos s elegidos.

Para ambos casos usamos fragmentos con tamaños entre uno y quince. Para el caso de $L = 128$ todavía existen fragmentos mucho más grandes que no fueron considerados, y por lo tanto el corrimiento es mayor.

Para la red infinita, se espera que para $p = p_c$, m_2 diverga. Para redes finitas esto no sucede, sin embargo, se puede calcular el valor de γ ajustando con dos funciones lineales alrededor del pico de la

curva. El valor donde estas dos curvas se cruzan corresponderá a γ . Estos ajustes se pueden observar en las figuras 13 y 14.

Para $L = 8$ las dos rectas del ajuste se tocan en 2.2. Este valor es bastante cercano al valor teórico que es de 2.3.

Para $L = 128$, las dos rectas del ajuste no llegan a tocarse. Sin embargo, el punto de mayor acercamiento entre ellas toma el valor de 1.97. Esto difiere del valor teórico.

Esta diferencia, nuevamente, puede deberse al hecho de que no tomamos todos los tamaños posibles para los clusters. Si bien para ambos casos existen muchos clusters no considerados, para el caso de $L = 128$ esto es particularmente malo. Estos clusters ignorados podrían sumar al m_2 y por lo tanto elevar el valor máximo de la campana y así obtener un ajuste para γ más cercano al teórico.

3.7. Grupo de Renormalización

Para obtener de manera teórica otra estimación del valor de la probabilidad crítica con el cual comparar nuestros resultados, implementamos el método de Grupo de Renormalización. Este método consiste en realizar una transformación de escala sobre la red original, que la divida 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, más precisamente el criterio que se adopte para definir la ocupación del nuevo sitio.

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

Tomamos $b=2$ y definimos 2 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 15 se presentan las seis combinaciones posibles.

En ese caso, la probabilidad de percolación en el caso con dos sitios libres y dos ocupados es $2(1-p)^2p^2$. Para el caso con tres sitios ocupados y uno libre es $4(1-p)p^3$ y en el caso en el que estén todos ocupados es p^4 . En total, entonces, $p' = 2(1-p)^2p^2 + 4(1-p)p^3 + p^4 = 2p^2 - p^4$.

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

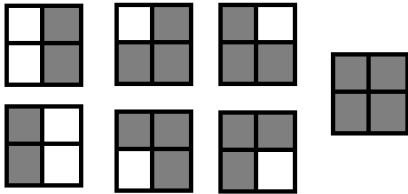


Figura 15: Celdas para criterio "Percolación Vertical".

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 16 se presentan las cinco combinaciones posibles.

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 llega a la expresión $p_c = 4p_c^3 - 3p_c^4$.

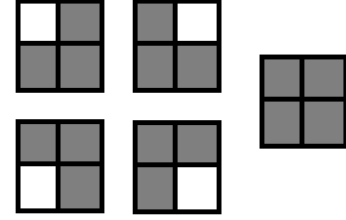


Figura 16: Celdas para criterio "Mayoría Simple".

El valor encontrado para el primer criterio es $p_c = 0,618$ y para el segundo $p_c = 0,768$ siendo el valor del primero más cercano al valor $p_c = 0,59$ obtenido por simulaciones.

Esto puede deberse a que el segundo criterio es mucho más estricto para definir que sitio está percolando. Por lo tanto, para el primer caso percolan más sitios que para el segundo, haciendo que la probabilidad crítica de éste último sea mayor.

Mediante la técnica de renormalización, también se puede conseguir el exponente crítico involucrado en la *distancia de correlación*. Se sabe que $\zeta \sim |p - p_c|^{-\nu}$.

Este exponente crítico se puede calcular como [3]:

$$\nu = \frac{\ln(b)}{\ln\left(\frac{dp'}{dp}\right)|_{p_c}} \quad (2)$$

Utilizando los resultados de p_c obtenidos con cada criterio, se encontraron los valores $\nu = 1,64$ y $\nu = 1,4$ respectivamente.

Ambos valores son similares, aunque no coinciden, con el valor teórico $\nu = 1,33$.

4. Conclusiones

Se logró calcular la probabilidad crítica mediante diversos métodos.

Tanto con el método de bisección como el de la mediana los resultados fueron similares y en ambos casos a medida que se aumentaba el largo de la red más similar era el resultado al teórico para la red infinita. Además, la desviación de estos resultados disminuía a medida que el largo de la red aumentaba. Esto es coherente y esperado.

Otro método utilizado fue el de ajustar la distribución de clusters en función del tamaño de los mismos. En este caso se cometió

un error al realizar los ajustes y no se pudo extraer ni el valor de la probabilidad crítica ni el del exponente τ como se deseaba. El método correcto sería ir *tuneando* los valores de p_c y τ hasta encontrar los valores que minimice el χ^2 del ajuste lineal.

Finalmente se obtuvo el valor de p_c por el método de renormalización. Con el criterio de *percolación vertical* se obtuvieron mejores resultados que con el criterio de *mayoría simple*. Esto se debe a que con el segundo criterio estamos dejando de lado casos en los cuáles la red percolaría en caso de no haber re escalado. Por lo tanto, la p_c con este criterio se corre para arriba.

Se analizó el comportamiento del parámetro de orden del problema, que es la intensidad del cluster percolante. Este se comporta tal como era esperado. Si bien no se observa una discontinuidad en el mismo en $p = p_c$ esto se debe a que se trabajó con redes finitas. Sin embargo, en $p = p_c$ si se observa un cambio de concavidad brusco en la figura que es más suave para L más chico.

Se pudo calcular la dimensión fractal del problema, el exponente crítico σ y se consiguió la forma cualitativa de la función de scaling $f(z)$.

Se calculó el exponente crítico γ . Si bien se obtuvieron resultados cercanos al resultado teórico, el análisis se puede mejorar utilizando más tamaños de clusters s . Para esto, hay que tener en cuenta que no hay que considerar al cluster percolante, ya que este haría que el momento de segundo orden divergiera para $p = 1$ en vez de tender a cero.

Mediante la técnica de renormalización, fue posible calcular el exponente crítico ν . Sin embargo, para ninguno de los criterios utilizados el valor obtenido coincide con el teórico.

Referencias

- [1] J. Hoshen and R. Kopelman, Physical Review B 14, 3438 (1976).
- [2] Levinshtein, Shklovskii, Shur y Efros., *The relation between critical exponents of percolation theory*
- [3] Christensen, *Percolation theory*