

Percolación de nodos en redes cuadradas 2d

Martín Caruso* and Florencia Lazzari**

(Dated: 2 de mayo de 2017)

Realizamos simulaciones computacionales con el fin de estudiar la percolación de sitios en una red cuadrada de dimensión 2. Mediante distintos métodos se obtuvo un valor de la probabilidad crítica cercano al tabulado. Estudiamos la probabilidad acumulativa de percolación y verificamos su límite para L grandes. Verificamos aspectos de la transición de fase como la existencia de un parámetro de orden (P_∞). Calculamos la masa del cluster percolante en función del tamaño y obtuvimos un resultado satisfactorio para la dimensión fractal D . Confirmamos aspectos de la hipótesis de scaling para la distribución de clusters. Estudiamos el segundo momento de la distribución de clusters e intentamos obtener el exponente mediante $\gamma - matching$ sin éxito. Se utilizó el método del grupo de renormalización para obtener una verificación teórica de p_c .

I. INTRODUCCIÓN

Dentro de los estudios en fenómenos críticos, el fenómeno de *percolación* en 2D es un ejemplo de los sistemas más simples que exhiben una transición de fase no trivial y no resoluble analíticamente. Dicha transición se da al tomar una probabilidad de ocupación crítica p_c , a partir de la cual existe un llamado *cluster percolante*, una componente conexa de sitios ocupados que, en el caso finito, se extiende desde el borde superior al borde inferior de la red; mientras que en el caso infinito dicho cluster es sí mismo de tamaño infinito.

II. EL MODELO

A. Transición de fase, leyes de potencia y exponentes críticos

En la transición de fase del sistema percolante, quien hace las veces de *parámetro de orden* es la denominada *fuerza del cluster percolante* P_∞ , la probabilidad de que un sitio al azar pertenezca a dicho cluster. Otra magnitud de interés es la distribución de clusters $n_s(p)$, que nos indica la densidad de clusters de tamaño s por unidad de sitio. El carácter de criticalidad se manifiesta al observar que en el punto crítico, esta magnitud pierde una escala característica, siguiendo así una ley de potencias: $n_s(p_c) \sim s^{-\tau}$, siendo τ un *exponente crítico*, que depende únicamente de la dimensión de la red.

B. Efectos de red finita

El carácter de una ley de potencias para la distribución de clusters n_s en el punto crítico es en principio válido únicamente para sistemas infinitos. Al trabajar con redes de tamaño finito, debemos considerar una relación de la forma

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

En la Ec. (1), la función $f(z)$ se denomina *de scaling*, y debe ser determinada numéricamente.

C. Renormalización

En el punto crítico la libertad de escalas para las magnitudes del sistema puede ser aprovechada para obtener predicciones teóricas de valores numéricos de la transición, y relaciones entre exponentes críticos. Es así que emplearemos el método de *grupo de renormalización* para contrastar nuestros resultados numéricos con dichas predicciones.

III. SIMULACIONES NUMÉRICAS

Implementaremos simulaciones numéricas para sistemas finitos de lado $L = 4, 8, 16, 32, 64, 128$. Dada una red vacía y la probabilidad de ocupación p , se puebla la misma utilizando el generador de números aleatorios. Implementamos el *algoritmo de Hoshen Kopelman* Hoshen and Kopelman [1] para obtener una clasificación de los clusters en la red. Este algoritmo nos proporciona una etiqueta numérica para cada cluster, y a partir de las mismas podemos implementar funciones para obtener el tamaño de cada uno, y así obtener la distribución $n_s(p)$

IV. RESULTADOS

A. Determinación de la probabilidad crítica p_c

1. Bisección

El primer método utilizado para obtener un valor de la probabilidad crítica p_c fue mediante una bisección. Manteniendo fija una semilla de números aleatorios, se puebla la red utilizando $p = 1/2$ y en caso de que percole, se repuebla la red con $p = p - 1/4$ (en caso contrario, se

* martincaruso@gmail.com

** flor.lazzari@hotmail.com

repuebla con $p = p + 1/4$), y se repite el procedimiento hasta alcanzar una precisión de una parte en cien. Realizamos este algoritmo para diez semillas diferentes y promediamos los valores obtenidos para p_c .

Para cada tamaño de la red, se ejecutaron diez corridas para la obtención de p_c , a fin de estudiar la dispersión de estos valores en función del tamaño de la red (L). En las Figuras IV A 1 y IV A 1 a continuación podemos ver el valor promedio de p_c y su dispersión en función del tamaño de la red:

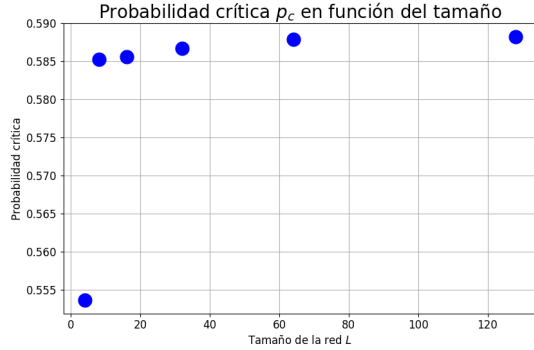


Figura 1. Gráfico de la probabilidad de percolación p_c en función del lado de la red L

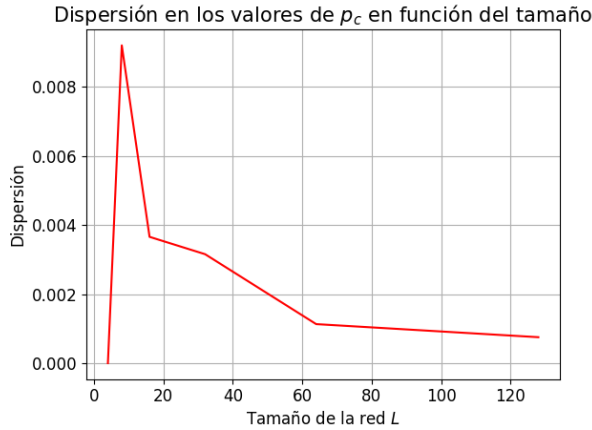


Figura 2. Gráfico de la dispersión en el valor de p_c en función del lado de la red L

Para $L = 4$ vemos que el valor de la probabilidad crítica se encuentra entre 0,55 y 0,56, y su dispersión es mínima, por debajo de la precisión impuesta. Para $L = 8$ vemos, al contrario, que la dispersión es máxima con un valor de casi el 1,4%. En cambio, para el resto de los valores de L , tenemos que la probabilidad se sitúa entre 0,58 y 0,59, y la dispersión disminuye conforme aumenta el tamaño, tomando un valor mínimo del 0,16%. Estos valores para la $p_c(L)$ se aproximan bien al valor calculado teóricamente para el caso infinito, $p_c(\infty) = 0,592$.

Utilizando los resultados anteriores para fijar un rango

de búsqueda para el p_c , se empleó el ajuste χ^2 a la distribución de fragmentos para determinar $p_c(L)$. Dado que $n_s(p_c) \sim s^{-\tau}$, al tomar \ln a ambos lados se ve que los datos deben ajustarse mediante una recta cuando $p = p_c$. A continuación se presentan los resultados.

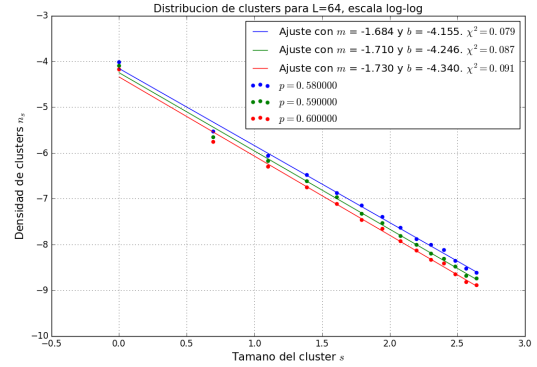


Figura 3. Gráfico del logaritmo de densidad de clusters ($\log(n_s)$) en función del tamaño del cluster s para $L = 64$. Se ajustó con una lineal con los parámetros $n_s = mx + b$.

La figura IV A 1 muestra una muy buena correlación lineal para los distintos valores de p analizados. Esta evidencia se corrobora mediante la prueba de χ^2 , cuyo valor va desde 0,091 para $p = 0,6$, hasta 0,079 para $p = 0,58$ en el caso de la red de $L = 64$.

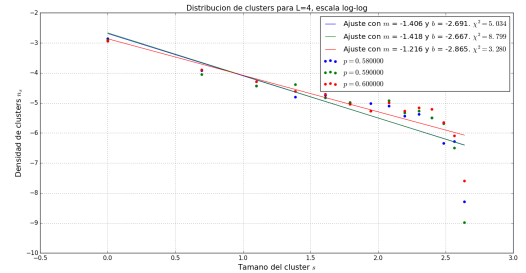


Figura 4. Gráfico del logaritmo de densidad de clusters ($\log(n_s)$) en función del tamaño del cluster s para $L = 4$. Se ajustó con una lineal con los parámetros $n_s = mx + b$.

En contraste, la figura IV A 1 muestra una mala correlación lineal para diferentes valores de p . En este caso, la prueba de χ^2 expone valores que van desde 3,280 hasta 8,799 en el caso de la red de $L = 4$.

Por lo cual concluimos que la ventana en la que estudiamos el sistema es una buena representación del caso infinito para valores de L a partir de $L = 8$.

2. Probabilidad acumulativa

Estudiamos también la probabilidad de aparición del cluster percolante en función de la probabilidad de lle-

nado $F(p)$. Obtuvimos este valor de la siguiente forma: para cada valor de p , realizamos diez poblaciones y registramos la fracción de intentos que exhiben la percolación. Promediamos dicho valor sobre varias realizaciones de la red, y para cada tamaño.

A continuación exhibimos los resultados obtenidos en la Figura IV A 2

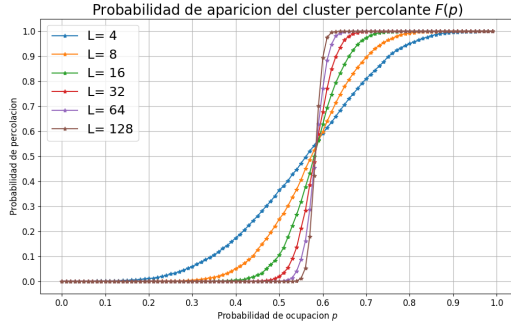


Figura 5. Gráfico de la probabilidad de aparición del cluster percolante en función de la probabilidad de ocupación $F(p)$, para varios valores de L . Podemos ver que conforme aumenta el tamaño, la distribución cumulativa tiende a la forma de escalón.

En la figura podemos ver que las distribuciones cumulativas, conforme aumenta el tamaño, exhiben un crecimiento más abrupto. Por otro lado, utilizando el criterio de la mediana, a partir del cual la probabilidad crítica se determina como el valor de p en el que la probabilidad de percolación es 0,5, obtuvimos los siguientes resultados. Para redes de lado $L = 4$ la p_c obtenida de la interpolación fue $p_c = 0,561$. Conforme se aumentó el tamaño de la red los valores de probabilidad crítica también aumentaron, en particular los resultados obtenidos fueron: $p_c(L = 8) = 0,573$, $p_c(L = 16) = 0,573$, $p_c(L = 32) = 0,580$, $p_c(L = 64) = 0,582$ y $p_c(L = 128) = 0,583$. A partir de estos datos concluimos que la probabilidad crítica tiende a $p_c(\infty) = 0,592$ a medida que el lado L crece.

B. Obtención de la intensidad P_∞

En la transición de fase correspondiente a la percolación, el parámetro de orden es la denominada *fuerza del cluster percolante* $P(p)$. Obtenemos este valor para cada probabilidad de ocupación registrando el tamaño del (eventual) cluster percolante y dividiéndolo por la cantidad total de sitios. Este valor es también promediado en 100 realizaciones de la red, y obtenido para cada tamaño.

A continuación en la Figura IV B disponemos los resultados.

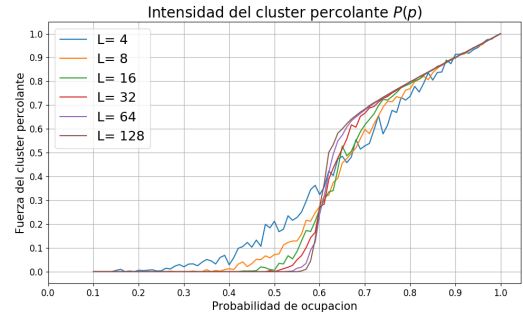


Figura 6. Gráfico de la fuerza del cluster percolante en función de la probabilidad de ocupación $P(p)$, para varios valores de L .

Al estudiar la figura observamos que la fuerza del cluster percolante crece con la probabilidad de ocupación hasta llegar a una fuerza igual a uno para el caso en que la probabilidad de ocupación es uno y la red está completamente poblada. En el caso de la red con $L = 128$ podemos notar que la pendiente del gráfico aumenta de forma importante al acercarse a la probabilidad crítica. En contraste, al reducir el tamaño de la red no se evidencia tal salto en la fuerza, dicho parámetro crece de forma menos abrupta. Tales resultados están en concordancia con la teoría, según la cual en el estudio de la red infinita esperabamos obtener una discontinuidad de la derivada en la probabilidad de crítica.

C. Determinación de la dimensión fractal D

Es de nuestro interés estudiar la estructura fractal del cluster percolante, y obtener un valor de la posible *dimensión fractal* asociada. Con este fin, registramos para cada valor de L desde 4 hasta 255, la cantidad neta de sitios en el cluster percolante (la *masa M*), tomando $p = p_c = 0,58$. Estos valores fueron promediados sobre 100 realizaciones de cada red.

A continuación en la Figura exhibimos los resultados:

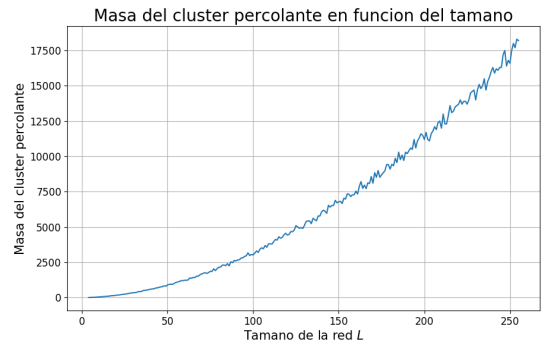


Figura 7. Gráfico de la masa del cluster percolante en función del tamaño de la red $M(L)$, tomando $p = p_c$.

Con el fin de obtener la dimensión fractal D , teniendo en cuenta que para $p = p_c$ vale la relación $M(L) \sim L^D$, disponemos el gráfico en escala doble logarítmica, y realizamos ajustes de la forma $\log(M) = D \log(L) + b$, según se observa en la figura IV C

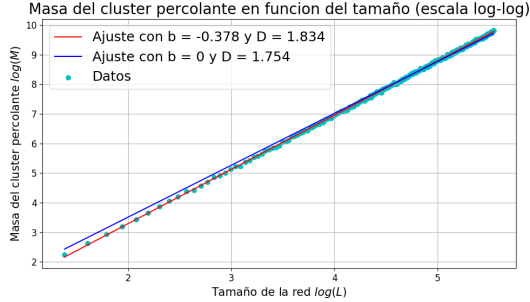


Figura 8. Gráfico de la masa del cluster percolante en función del tamaño de la red $M(L)$, tomando $p = p_c$, en escala logarítmica. La disposición rectilínea de los datos sugiere una ley de potencias, y la pendiente del ajuste lineal corresponde al exponente.

Se ajustaron los datos con dos rectas: una con ordenada al origen fija y nula y la otra con ordenada al origen como parámetro a ajustar. Al ajustar mediante la primera recta se obtuvo $D = 1,754$ mientras que al utilizar la segunda, el valor devuelto fue $D = 1,834$. El segundo resultado se aproxima mejor al teórico, $D = 1,89$. Además, al comparar los gráficos es evidente que el segundo método ajusta ligeramente mejor los datos.

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

1. Forma de la función de scaling

El siguiente objetivo fue obtener la función de scaling $f(z)$, la cual encontramos en la expresión de $n_s(p) = q_0 s^{-\tau} f(z)$ con $z = s^\sigma$. Para ello utilizamos una red de $L = 64$, se barrió en un rango de valores de p entre 0,01 y 1 con un paso de 0,01 y se calculó el n_s para tamaños de cluster s entre 1 y 15. Nuevamente se promedió para 100 realizaciones de cada red. A partir de esos datos se calculó $f(z)$ como el cociente $n_s/n_s(p_c)$. Esta forma de calcular $f(z)$ se obtiene de utilizar la relación $n_s(p_c) \sim s^{-\tau}$. A continuación se presentan los resultados obtenidos en la figura IV D 1.

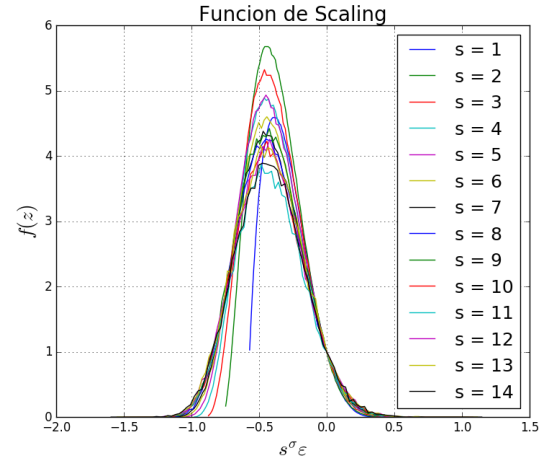


Figura 9. Gráfico de la función de scaling en función de $z = s\varepsilon$ para distintos tamaños de cluster s .

Al analizar el gráfico encontramos que la forma acampanada de la función de scaling es independiente de s y para todos los valores estudiados, excluyendo el $s = 1$, el máximo se encuentra para aproximadamente el mismo z . Sin embargo, se aprecia que $f(z)$ toma valores más altos para s más pequeños (nuevamente excluyendo el caso $s = 1$). El estudio se comporta según lo esperado exceptuando en $s = 1$ para lo cual no encontramos explicación.

2. Obtención del exponente crítico σ

Conociendo la forma cualitativa de $f(z)$, se buscó estimar el valor del exponente crítico σ . Para ello, se estudió, con los mismos datos obtenidos anteriormente, cuál es el valor de εs para el cual la producción de fragmentos de tamaño s se maximiza. En la siguiente Figura IV D 2 disponemos los gráficos de n_s en función de p para cada valor de s , tomando $1 \leq s \leq 15$, para $L = 128$

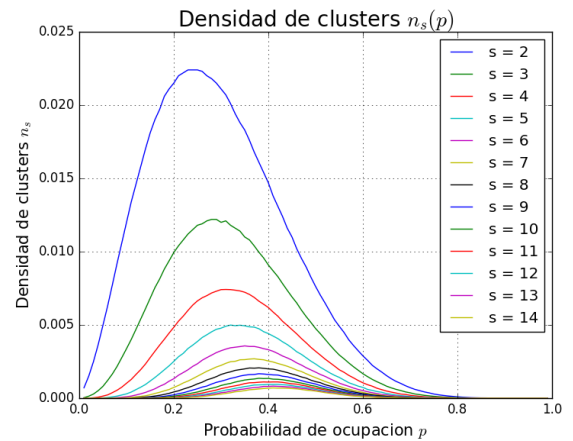


Figura 10. Gráfico de la densidad de clusters $n_s(p)$ en función de p para distintos tamaños de cluster s .

En la Figura IV D 2 podemos apreciar la existencia de un único valor de p para el cual la densidad de clusters n_s sea máxima para cada s . Obtenemos dicho $p_{max}(s)$, y graficamos su diferencia $\varepsilon_s = |p_{max} - p_c|$ en función de s , en escala doble logarítmica, como se exhibe en la Figura IV D 2

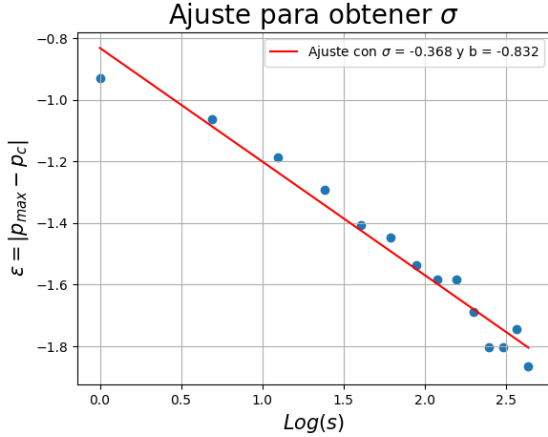


Figura 11. Gráfico de $|p_{max} - p_c|$ en función de s , en escala doble logarítmica. Ajustamos linealmente para obtener el exponente crítico σ

Observando que los datos se distribuyen linealmente al ser dispuestos en escala logarítmica, podemos concluir que siguen una distribución de potencias en $\varepsilon_s \sim s^\sigma$, y la pendiente de un ajuste lineal nos proporcionará el exponente. Realizamos dicho ajuste y obtenemos $\sigma = 0,36$, un valor cercano al teórico, 0,39.

3. γ -matching

Finalmente, se buscó estimar el exponente crítico γ a partir del método de γ -matching. Para ello se calculó el segundo momento de la distribución de cluster (n_s) $m_2(p) = \sum_{s=1}^{s_\infty} n_s s^2 \sim c_{+,-} |\varepsilon|^{-\gamma}$.

A continuación, en las figuras IV D 3 y IV D 3 se representaron los segundos momentos en función de la probabilidad para $L = 6$ y 128 respectivamente. Observamos que efectivamente estos gráficos tienen un máximo pero presentan una suavidad en el pico, en contraste con el crecimiento divergente propuesto por el estudio teórico de redes infinitas. Creemos que los efectos de red finita hacen que el máximo no coincida con p_c .

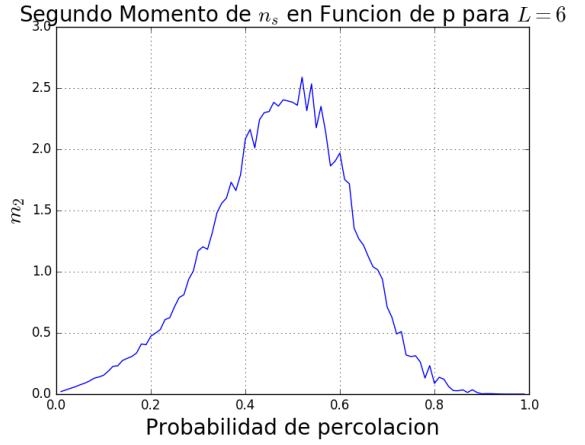


Figura 12. Segundo momento m_2 en función de p para $L = 6$.

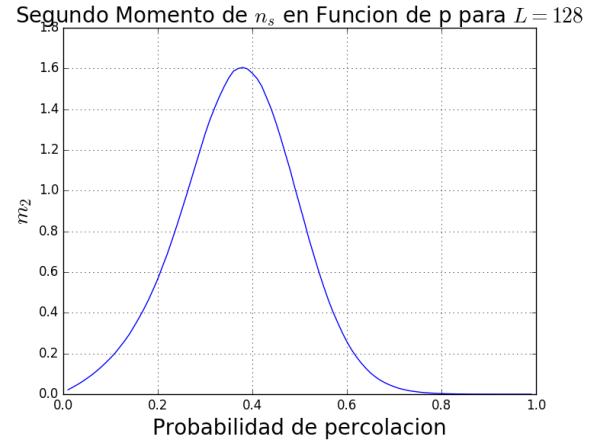


Figura 13. Segundo momento m_2 en función de p para $L = 128$.

A partir de los datos obtenidos podemos calcular las derivadas (mediante diferencias finitas) a cada lado del máximo con el fin de obtener el exponente crítico γ registrando en qué valor coinciden ambos gráficos. La figura IV D 3 no se comporta según lo esperado, podemos notar que hay una exagerada dispersión en los valores lo cual no nos permite extraer conclusiones.

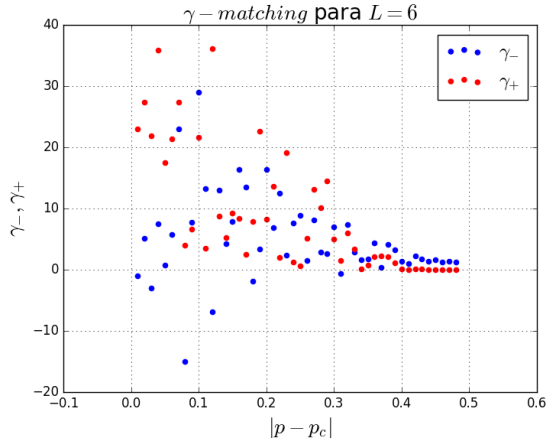


Figura 14. γ - matching para $L = 6$.

Por otro lado, la figura IVD3 no presenta la misma dispersión que la figura anterior, pero no obstante las curvas se solapan de tal forma que no podemos establecer un único punto de intersección. Sin embargo, si decidimos adoptar el mayor punto de intersección, el valor de γ obtenido es de 4,5, que difiere apreciablemente del valor tabulado 2,3.

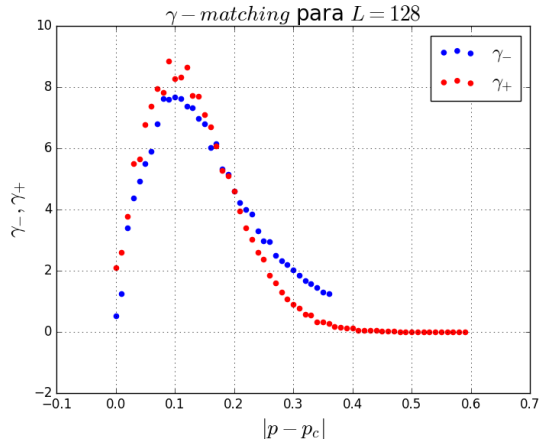


Figura 15. γ - matching para $L = 128$.

V. ESTIMACIÓN DE RESULTADOS POR RENORMALIZACIÓN

En aras de obtener de manera teórica otra estimación para el valor de p_c 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 los detalles de la transformación particular, más

precisamente el criterio que se adopte para definir la ocupación del nuevo sitio.

Tomaremos $b = 2$, y definiremos dos criterios para la ocupación de la nueva red. El primer criterio consiste en considerar un nuevo sitio ocupado si la subred anterior presenta ya un cluster percolante. Las posibles configuraciones que resulten en un nuevo sitio ocupado son las siguientes: Los cuatro elementos de la subred llenos (sólo una configuración), tres elementos llenos y uno vacío (hay cuatro configuraciones) y por último dos elementos llenos que formen un cluster percolante y dos vacíos (hay dos configuraciones, en las cuales los sitios ocupados forman una "columna" vertical, a izquierda o derecha). La probabilidad de encontrar un nuevo sitio ocupado será entonces la suma de las probabilidades de cada uno de estas configuraciones de *percolación interna*:

$$\mathcal{R}(p) = p^4 + 4p^3(1-p) + 2p^2(1-p)^2 = -p^4 + p^2 \quad (2)$$

Sabemos que en el punto crítico el sistema presenta invariancia de escalas, por lo tanto la probabilidad crítica p_c se debe corresponder con su propia transformada. Lo que diferencia a p_c de los casos triviales $p = 0$ y $p = 1$, es su condición de *punto fijo inestable*. El punto fijo que cumple con estas condiciones es $p^* = 0,61$, y vemos que se aproxima bastante a los valores obtenidos numéricamente en las simulaciones, de $p_c = 0,58$.

Mediante la técnica de renormalización podemos también obtener el exponente crítico ν , que le corresponde a la *longitud de correlación* ξ : $\xi \sim |p - p_c|^{-\nu}$ (Christensen [2]).

$$\nu = \frac{\log(b)}{\log \left[\frac{d\mathcal{R}}{dp} \right]} \quad (3)$$

dicha expresión evaluada en $p = p^*$. En este caso obtenemos $\nu = 1,62$, un valor cercano al teórico 1,33.

El segundo criterio para *percolación interna* que adoptaremos será el de mayoría estricta: un nuevo sitio se considerará ocupado si al menos tres sitios de la subred anterior están llenos. Vemos que las configuraciones posibles para este criterio son las mismas que en el anterior, exceptuando a las que contaban con sólo dos sitios ocupados. La transformación no incluirá ahora dichos términos:

$$\mathcal{R}(p) = p^4 + 4p^3(1-p) = -3p^4 + 4p^3 \quad (4)$$

El punto fijo correspondiente a esta transformación es $p^* = 0,76$, un valor más alejado al medido que el del anterior criterio. Esta discrepancia puede deberse a la elección de un criterio menos representativo de la percolación de la red. No obstante, al obtener el valor del exponente crítico correspondiente, $\nu = 1,36$, un valor notablemente cercano al teórico, 1,33.

VI. CONCLUSIONES

Al comparar los valores de p_c obtenidos a partir de los métodos de la bisección y la mediana de la probabilidad acumulativa concluimos que mientras que a partir del primer método se obtuvo un valor de p_c mas cercano al tabulado, con el segundo método se consiguió más consistencia en el valor de p_c para los distintos tamaños de red. Por otro lado observamos que la forma funcional para la probabilidad acumulativa conforme se aumenta el tamaño se aproxima correctamente a lo esperado para el caso de la red infinita. De manera consistente con esto último, para $L = 4$ se observa el resultado más alejado a lo esperado. Por lo cual concluimos que la ventana en la que estudiamos el sistema es una buena representación del caso infinito para valores de L a partir de $L = 8$.

Estudiamos la distribución de clusters cerca del punto crítico y confirmamos la ley de potencias $n_s(p_c) \sim s^{-\tau}$ obteniendo un valor de τ entre 1,5 y 1,7 que difiere del teórico.

Pudimos comprobar el caracter de transición de fase al estudiar la fuerza del cluster percolante. Vimos que, evidenciado mejor para los tamaños mayores de la red, la misma es no nula a partir de un valor particular de p . Conforme aumenta el valor de L , el crecimiento de la fuerza a partir de p_c es más pronunciado, lo que nos

permite confirmar su estatus como parámetro de orden.

Estudiamos también la estructura fractal del cluster percolante para $p = p_c$. Obtuvimos la masa de dicho cluster en función de L para un rango amplio de valores y confirmamos la validez de la ley de potencias $M \sim L^D$. Al realizar un ajuste lineal obtuvimos un valor para la dimensión fractal D cercano al tabulado.

Pudimos verificar la hipótesis de scaling para distribución de clusters y obtuvimos dicha función de scaling $f(z)$. Vimos que, en la mayoría del rango de s tomado, las distribuciones n_s presentan la misma forma acampanada y la misma ubicación del pico. Habiendo graficado la forma cualitativa de $f(z)$, registramos la probabilidad en la cual se maximiza la fracción de clusters para cada s . A partir de estos datos pudimos confirmar la ley de potencias s^σ en el argumento de $f(z)$ y obtener un valor para el exponente σ , muy cercano al tabulado.

Con respecto al estudio del segundo momento y la obtención del exponente crítico γ , no pudimos obtener conclusiones satisfactorias, principalmente por la dispersión en los datos para $L = 4$ y el solapamiento de las curvas para 128.

Finalmente, utilizando el método de grupo de renormalización, obtuvimos valores estimados para p_c y el exponente ν , explotando distintos criterios para la transformación de escalas. Los valores obtenidos para ν son cercanos al tabulado, mientras que para p_c se evidencia la aptitud de un criterio sobre el otro.

[1] J. Hoshen and R. Kopelman, Physical Review B **14**, 3438 (1976).

[2] K. Christensen, *Percolation Theory* (Blackett Laboratory, Imperial College London, 2002).