Percolación de nodos en redes cuadradas 2d

Lucas Longo* and Franco Tavella**

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

En el siguiente trabajo se estudia mediante simulaciones computacionales el comportamiento estadístico de una red bidimensional cuadrada de diversos tamaños entre 4 y 256. Se calculan los comportamientos críticos que caracterizan la transición de fase que atraviesa el sistema. También se estudian las características estructurales del cluster percolante en el entorno del punto crítico obteniendo una dimensión fractal característica. Se verifica la hipótesis de scaling y se relacionan las propiedades del sistema finito con su equivalente infinito.

I. INTRODUCCIÓN

De una manera intuitiva podemos pensar a la percolación como el movimiento o el proceso de filtración de un fluido a través de una superficie porosa. Desde un lugar más abstracto se pueden pensar sistemas simples que presenten un umbral de comportamiento crítico y transiciones de fase. Debido a su sencillez conceptual sus resultados son susceptibles de aplicarse en diversas ramas de la ciencia como física, epidemiología, ciencia de los materiales o en estudios de redes complejas. Algunos ejemplos prácticos van desde la propagación de incendios forestales hasta la filtración de agua en rocas permeables.

El fenómeno de percolación visto desde la visión de la física estadística se enmarca en clases de universalidad y se conecta con conceptos de la teoría de scaling, grupos de renormalización, transiciones de fase, fenómenos críticos y fractalidad. Por estas razones resulta un sistema interesante de estudio.

Típicamente se estudia el fenómeno de percolación a través de simulaciones numéricas debido a la complejidad que implica obtener resultados exactos de forma analítica. Ese camino es el que tomamos en el siguiente trabajo.

II. EL MODELO

En este trabajo estudiamos el comportamiento estadístico de un arreglo cuadrado de sitios con dos estados 'lleno' o 'vacío'. El estado de cada sitio o nodo se asigna con una probabilidad de denominaremos p. Trabajamos con arreglos finitos de tamaño L y buscamos extraer propiedades estadísticas del sistema. Resultan de interés las propiedades del sistema infinito $(L \to \infty)$ que serán estudiadas y relacionadas con aquellas que extraídas para arreglos o redes finitas. En la Figura 1 se puede observar una representación esquemática del sistema.

Una de las características que estudiaremos de las redes es la distribución de clusters. Éstos son grupos de nodos 'llenos' conectados entre sí por primeros vecinos

Figura 1. Ejemplo de red con L=16 y distintas probabilidades p. Vemos en blanco nodos 'vacíos' y en negro los 'llenos'

horizontales o verticales. Para cada red analizaremos la distribución de tamaños de clusters de tamaño s. Llamamos a esta función $n_s(p)$ y que, si es multiplicada por s, representa la probabilidad de que un sitio arbitrario sea parte de un cluster de tamaño s.

Otra propiedad de interés será la percolación. La definimos como la aparición de un cluster que conecte dos extremos de la red, en el caso finito. Para la situación infinita representa la aparición de un cluster de extensión infinita. Esto a su vez nos lleva a considerar las propiedades y estructura de este cluster particular que llamaremos percolante. Para ciertos valores de la probabilidad p el sistema no percolará y para otros si. Esto define un punto particular de probabilidad que separa estos dos comportamientos en la situación ideal del sistema infinito. A este punto particular lo llamaremos probabilidad crítica p_c . En la Sección IV A se estudia la relación de este parámetro en redes finitas con la situación infinita.

A. Transición de fase

La existencia de un parámetro crítico p_c que separa dos comportamientos del sistema indica una relación con

p=0.10 p=0.30 p=0.40

p=0.50 p=0.60 p=0.90

^{*} lucaslongo52@gmail.com

^{**} tavellafran@gmail.com

un proceso de transición de fase. En particular si observamos los distintos momentos de la distribución de $n_s(p)$ apreciamos que contamos con un parámetro de orden y una fluctuación que se comportan a la manera de una transición de fase de segundo orden.

El parámetro de orden P_{∞} es llamado 'fuerza del cluster percolante'. Representa el porcentaje de nodos pertenecientes al cluster percolante respecto a todos aquellos de la red. Debajo de la probabilidad crítica es 0 en una situación infinita. Cuando $p=p_c$ comienza a diferenciarse de 0 aumentando hacia el valor 1 cuando p=1.

El tamaño medio de clusters S presenta en cambio un comportamiento divergente en p_c . En este valor medio nunca consideramos la contribución del cluster percolante que posee una extensión infinita en el caso ideal.

Resulta de particular interés estudiar estas propiedades en entornos del punto crítico así como la estructura que posee el cluster percolante.

B. Leyes de potencia y exponentes críticos

En un entorno de p_c tendremos comportamientos de las variables que se caraterizan por leyes de potencia. Para las dos nombradas anteriormente tenemos

$$P_{\infty} \sim |p - p_c|^{\beta} \tag{1}$$

$$S \sim |p - p_c|^{-\gamma}. (2)$$

Además exactamente en el punto crítico la distribución de clusters se supone libre de escalas con lo cual definiendo un exponente crítico τ de Fisher tenemos que

$$n_s(p_c) \sim s^{-\tau} \tag{3}$$

y de manera general se realiza una hipótesis de scaling que nos habla del comportamiento de la distribución de clusters en función de p

$$\frac{n_s(p)}{n_s(p_c)} = f(s^{\sigma}(p - p_c)) = f(z).$$
 (4)

Por otro lado podemos estudiar la estructura del cluster percolante. Primero resulta adecuado definir una función (g(r)) y distancia de correlación (ξ) característica que nos habla de la probabilidad de que un sitio a distancia r pertenezca al mismo cluster

$$g(r) = exp(\frac{-r}{\xi}). \tag{5}$$

Excluyendo al cluster percolante tenemos que esta longitud de correlación diverge en la cercanía de p_c y por lo tanto sigue una ley de potencias

$$\xi \sim |p - p_c|^{-\nu}.\tag{6}$$

Esta longitud diferencia los tamaños de redes finitas para los cuales observaremos comportamientos asociados al sistema finito o infinito

$$M(L) = L^{D} m \left(\frac{L}{\xi}\right) \sim \begin{cases} L^{D} & \text{si } L < \xi \\ L^{d} & \text{si } L \gg \xi \end{cases}$$
 (7)

con D como dimensión fractal y d=2 la dimensión de nuestro arreglo de nodos.

La Tabla I resume las principales leyes de potencia obtenidas en la literatura para redes percolantes

Cuadro I. Valores teóricos hallados en la literatura.

| Símbolo | Ley | Valor |
|----------------|--------------------------------------|----------------------------------|
| \overline{d} | — | d=2 |
| D | $M \sim L^D$ | D = 91/48 |
| ν | $\xi \sim p - p_c ^{- u}$ | $\nu = 4/3$ |
| au | $n(p_c) \sim s^{-\tau}$ | $\tau = 1 + d/D$ |
| 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 | $m_1(p) \sim (p-p_c)^{eta}$ | $\beta = \nu(d - D)$ |
| γ | $m_2(p) \sim p - p_c ^{-\gamma}$ | $\gamma = (3 - \tau)/\sigma$ |

C. Efectos de red finita

Simular sistemas infinitos con representaciones finitas genera que los valores teóricos de los valores críticos sufran corrimientos. Para la probabilidad crítica tenemos la siguiente relación entre el p_c promediado de las simulaciones y el valor de $p_c(\infty)$

$$\langle p_c \rangle = p_c(L) = L^{-1/\nu} A + p_c(\infty)$$
 (8)

con A una constante que no depende de L. También la dispersión de este valor medio sigue la relación

$$\sigma^2 = (B - A^2)L^{-2/\nu}. (9)$$

Así obtenemos una manera de conocer el valor de $p_c(\infty)$ mediante el valor medio y la dispersión de $p_c(L)$ como una ordenada al origen

$$p_c(L) = m\sigma + p_c(\infty). \tag{10}$$

III. SIMULACIONES NUMÉRICAS

Se estudiaron redes cuadradas de tamaño L=4,16,32,64,128,256. Se realizó un conteo y etiquetado de los clusters por medio del algoritmo de Hoshen-Kopelman [1] implementado en el lenguaje de programación C. Las simulaciones fueron llevadas a cabo en computadoras de escritorio y los datos procesados con herramientas de Python. El código fuente utilizado puede encontrarse en https://github.com/Tatotavella/Percolacion.

IV. RESULTADOS

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

Se utilizaron distintos métodos para la determinación del punto crítico de cada red de largo L y la extrapolación al valor de una red infinita $p_c(\infty)$.

El primer método consistió en simular redes de tamaño 4, 8, 16, 32, 64 y 128. Para cada tamaño poblamos los sitios con una probabilidad de 0.5 y a partir de allí analizamos la percolación de la red. Cuando la red percola disminuimos la probabilidad de ocupación menores mientras que al no percolar la aumentamos. El aumento o disminución se realiza cada vez con valores más pequeños de desplazamiento. Este proceso se repite hasta alcanzar un valor de p_c con una deseada precisión. Se realizaron 27000 iteraciones y en cada una de ellas se obtuvo una probabilidad critica. Con esos valores obtuvimos un valor promedio y una desviación estandar. Los resultados se observan en la Figura 2.

A continuación se utilizó esta información de probabi-

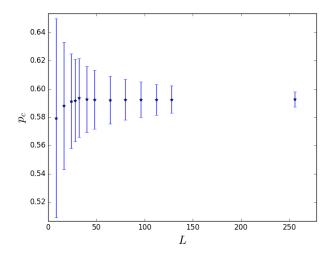


Figura 2. Determinación de p_c promedio para distintos tamaños de red. Se observa una disminución de la dispersión a medida que aumentamos el tamaño de la red.

lidades críticas promedio y dispersiones para realizar un gráfico que nos permita determinar un valor de probabilidad crítica de la red infinita como se muestra en la Ecuación 10. La Figura 3 muestra los resultados obtenidos. Se obtuvo así un valor de $p_c(\infty)=0.5927\pm0.0001$. Además observando la Ecuación 8 se aprecia que es posible estimar un valor del exponente crítico ν . Esto fue realizado y se observa en la Figura 4. El valor obtenido del ajuste es $\nu=1.2\pm0.2$.

El segundo método consistió en la determinación de $p_c(L)$ a partir de la obtención de la función acumulada de probabilidad o probabilidad de aparición del cluster percolante F(p). Para cada tamaño de red, se utilizaron 100 probabilidades entre 0 y 1. En cada probabilidad se realizaron 27000 iteraciones y se contaron la cantidad de veces que el cluster percoló. De esta manera se obtuvieron puntos de la curva F(p). EL método calcula p_c como la mediana en el gráfico F(p) obteniéndose como el valor de probabilidad que hace que el cluster percole mas de la mitad de las veces. Para el cálculo fue realizado un barrido más fino entre probabilidades 0.5 y 0.7.

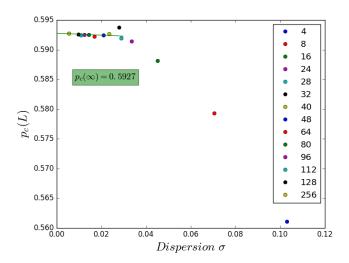


Figura 3. Determinación de $p_c(\infty)$ mediante ordenada al origen utilizando tamaños de red desde 4 a 256.

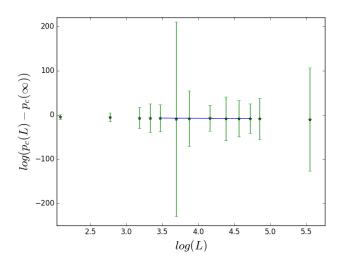


Figura 4. Determinación del exponente crítico ν mediante un ajuste lineal en la escala log-log siguiendo la Ecuación 8.

En la Figura 5 se observa las curvas de F(p) para distintos tamaños de red. Podemos apreciar que a medida que el tamaño de la red aumenta la función se asemeja más a la función escalón correspondiente a una red infinita.

El tercer método consistió en estudiar la distribución de fragmentos n_s y utilizar el comportamiento en el punto crítico como describe la Ecuación 3. Se graficó n_s en escala log-log para distintas probabilidades cercanas por encima y por debajo a p_c . Se realizaron ajustes para tamaños de fragmentos en el rango $0.01 < s/s_0 < 100$ con $s_0 = L^2$ como se observa en la Figura 6. Para estos ajustes se realizó un estudio de la bondad utilizando el estimador χ^2 . La Figura IV B muestra el resultado de estos ajustes. Se encontró que existe una valor de probabilidad don-

Cuadro II. Probabilidad p_c a partir de mediana de F(p).

| Red | Mediana p_c |
|-----|---------------|
| 4 | 0.5706 |
| 8 | 0.5863 |
| 16 | 0.5902 |
| 32 | 0.5933 |
| 64 | 0.5929 |
| 128 | 0.5926 |

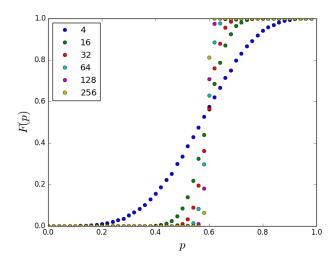


Figura 5. Probabilidad de percolar F(p) en función de la probabilidad de ocupación p.

de se logra minimizar el χ^2 . Esto quiere decir que allí la hipótesis power-law resulta óptima. Así se pudo estimar el valor del exponente $\tau=1,61\pm0,01$ encontrándose en desacuerdo con un valor teórico de $\tau_T=187/91\sim2,055$. Esto puede deberse a la restricción de la forma funcional de la distribución de clusters en el punto crítico.

B. Determinación de la dimensión fractal D

Para estudiar las características del cluster percolante se simularon distintos tamaños de red con $p=p_c(L)$ y $p=p_c(L)+0.02$. En cada caso se calculó la masa del cluster percolante M(L). Buscamos capturar el comportamiento descripto por la Ecuación 7. La Figura 8 muestra que existe un comportamiento inusual del cluster ya que la pendiente del ajuste se halla por debajo del valor de la dimensión del sistema d=2. Ésta es la dimensión fractal del cluster percolante y en nuestra simulación resultó ser de $D=1.853\pm0.001$. También observamos que al aumentar la probabilidad ligeramente obtenemos una pendiente de $d=2.014\pm0.001$ que se corresponde a la dimensión de nuestra red y mostrando que el cluster percolante pierde sus características típicas del punto crítico y se comporta como un objeto geométrico convencional.

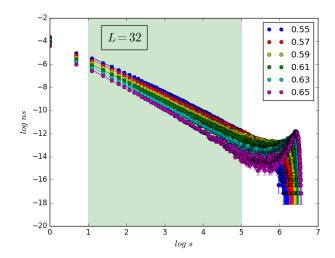


Figura 6. Distribución de fragmentos n_s . Ajustes lineales en la zona $0.01 < s/s_0 < 100$ para 6 valores de probabilidad con $s_0 = L^2$.

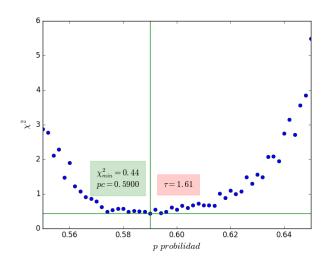


Figura 7. Estimador χ^2 para distintos valores de probabilidad alrededor de p_c .

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

Se realizó un estudio de la Fuerza del cluster percolante P_{∞} para la determinación del valor de exponente crítico β y a partir de él el valor de exponente crítico τ . En la Figura 9 se muestra el comportamiento de P_{∞} para distintos tamaños de red. Se aprecia un comportamiento más suave en el cambio de la fuerza desde 0 para redes más pequeñas y un comportamiento más bruscos para redes más grandes. Esto se acerca a la forma del cluster infinito aunque con una pendiente no nula a medida que la fuerza se aproxima a la unidad para probabilidades grandes.

A partir de la información en el gráfico de $P_{\infty}(p)$ pode-

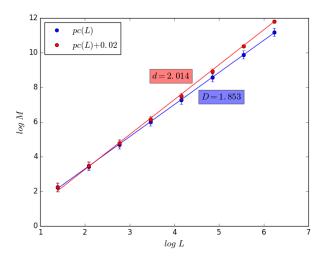


Figura 8. Masa del cluster percolante en función del tamaño del sistema. Se observa un comportamiento crítico en $p = p_c$ dado por la existencia de una dimensión fractal D < d = 2.

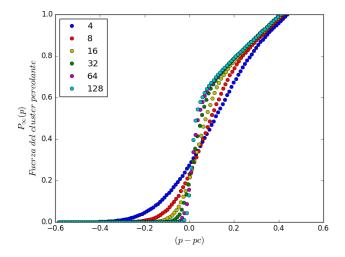


Figura 9. Fuerza del cluster percolante para distintos tamaños de red.

mos hallar β . Para ello se realizaron ajutes log-log en la zona cercana a la probabilidad crítica, $p_c-0.4$ y $p_c+0.05$. La Figura 10 muestra los ajustes realizados para distintos tamaños de red alrededor de $p_c(L)$.

Los valores de beta y de tau obtenidos se muestran en la Tabla III. Para valores ascendentes de red observamos una convergencia de los resultados.

D. Espectro de fragmentos y verficación de la hipótesis de scaling

La hipótesis de *scaling* se presenta en la Ec. 4 en donde se observa que para distintos valores de s y $p - p_c$, el

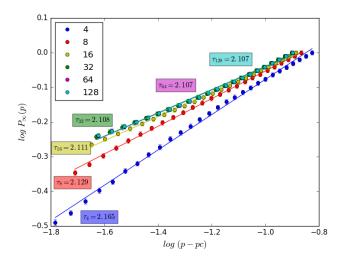


Figura 10. Fuerza del cluster percolante para distintos tamaños de red alrededor de $p=p_c(L)$ para determinación del exponente β .

Cuadro III. Exponentes β y τ

| Red | β | $d\beta$ | τ | $d\tau$ |
|-----|--------|----------|--------|---------|
| 4 | 0.5087 | 0.0055 | 2.1643 | 0.0018 |
| 8 | 0.3987 | 0.0026 | 2.1287 | 0.0009 |
| 16 | 0.3473 | 0.0031 | 2.1121 | 0.0010 |
| 32 | 0.3348 | 0.0040 | 2.1081 | 0.0013 |
| 64 | 0.3343 | 0.0043 | 2.1079 | 0.0014 |
| 128 | 0.3332 | 0.0044 | 2.1076 | 0.0014 |

espectro de fragmentos debe colapsar en una única curva $f(z) = n_s(p)/n_s(p_c)$, donde $z = s^{\sigma}(p-p_c)$. Para poder comprobar esta hipótesis se procedió a realizar una simulación sobre una red de tamaño L=64. Luego se procedió a poblar la red para 50 probabilidades entre 0.2 y 0.8. Para cada probabilidad se obtiene pares de valores s vs n_s . Luego se realizó un análisis de los datos para valores de 1 < s < 16. Los resultados se encuentran en la Figura 11. Se observa que los datos colapsan a una curva que es la función f(z), la cual toma el valor f(z)=1 para z=0 como es de esperar.

Con estos datos luego se tuvieron en cuenta fragmentos con 1 < s < 15 y se buscó el valor de p_{max} , la proba para la que se maximiza n_s . Se obtuvo la curva de $E_{max} = z_{max} s^{-\sigma}$ donde $E_{max} = (p_{max} - p_c(L)/(p_c(L))$ con p_{max} la probabilidad donde se maximiza el tamaño de cluster s.

Se realizo un ajuste no lineal mediante la función $f(s) = As^{-\sigma}$. El parámetro sigma resultó $\sigma = 0.34 \pm 0.01$.

Con este valor y haciendo uso del ν teórico de 4/3 se calculo un valor de $\tau=2.45\pm0.01$.

De esta manera verificamos la hipótesis de scaling y obtuvimos estimaciones de los parámetros críticos asociados.

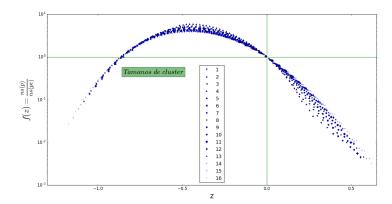


Figura 11. Colapso de datos a una única curva dada por la función f(z)

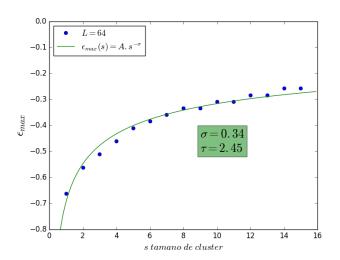


Figura 12. Determinación del exponente crítico σ a partir de las probabilidades p_{max} donde se maximiza la producción de fragmentos de tamaño s.

E. Momento de Segundo Orden y determinación de exponente γ

Se procedió a calcular el momento de segaundo orden M_2 para dos tamaños de red, L=6 y L=128. Para ello se realizo un barrido en probabilidades p y para cada una de ellas se obtuvieron valores de s vs n_s . Con estos datos se procedió a calcular para cada probabilidad el valor del segundo momento de la distribución del tamaño de clusters y así obtener las curvas $M_2(p)$ que representan el tamaño medio de clusters representado en la Ecuación 2. Éstas se muestran en las Figuras 13 y 14.

Para cada tamaño de red, se graficaron M_2 y $p-p_c$ en escala log-log. A continuación se procedió a realizar el método de gamma-matching.

Se recorrieron ambas curvas realizando el siguiente procedimiento: Nos paramos en un punto y consideramos los

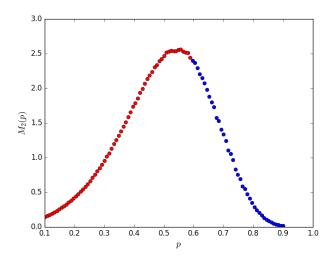


Figura 13. Momento de segundo orden de la distribución de fragmentos para una red de tamaño L=128.

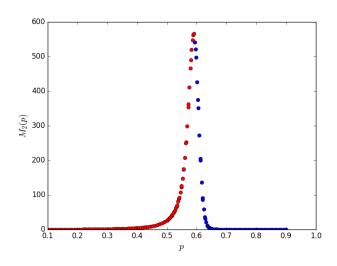


Figura 14. Momento de segundo orden de la distribución de fragmentos para una red de tamaño L=128.

 $4~\rm puntos$ siguientes. Realizamos un ajuste lineal. Nos movemos al siguiente punto de la curva. Una vez que terminamos de recorrer ambas curvas vamos a tener una lista de pendientes de los ajustes. Se procede entonces a buscar aquellas que coinciden con un margen de 0.001. Las Figuras $15~\rm y$ $16~\rm ilustran$ el procedimiento mencionado:

Se obtuvieron los siguientes valores de γ :

$$\begin{array}{ll} {\rm Para} \ L = 6 & \gamma = 2{,}84 \pm 0{,}01 \\ {\rm Para} \ L = 128 & \gamma = 2{,}64 \pm 0{,}01 \\ \end{array}$$

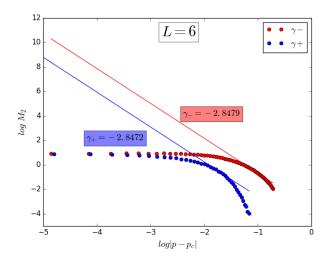


Figura 15. Método de gamma-matching para encontrar pendientes paralelas en una red de tamaño L=6.

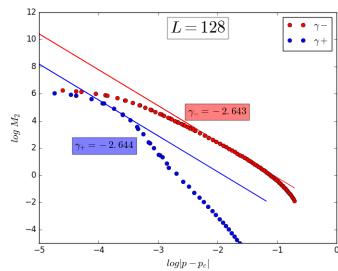


Figura 16. Método de gamma-matching para encontrar pendientes paralelas en una red de tamaño L=128.

V. RENORMALIZACIÓN

Podemos verificar, al menos de manera aproximada, los resulados del las secciones realizando un proceso de renormalzación de $celda\ peque\~na$. Consideramos un porción de red de lado b=2 y la llamamos un super-nodo.

Se utilizaron dos criterios los cuales dieron lugar a dos ecuaciones para la probabilidad p'. EL primer criterio fue considerando que únicamente aquellas redes con 3 o 4 nodos ocupados, dan origen a un supernodo. siguiendo

este criterio se obtuvo:

$$p'(p) = 4p3 * (1-p) + p^4$$

Sin embargo este criterio tiene como problema que considera clusters no percolantes a aquellos donde dos celdas están pobladas en orientación vertical y que entonces si son percolantes. Esto provoca que la probabilidad crítica de u valor teórico alto al realizar un método de punto fijo. Este criterio dio como resultado una $p_c=0.767$.

El otro criterio es aquel que considera también como formadores de supernodos a aquellas redes con 2 celdas ocupadas cuando estas estan en orientación vertical. Entonces la probabilidad p' queda:

$$p'(p) = 4p3 * (1-p) + p^4 + 2p^2$$

Este otro criterio mejora el valor de probabilidad crítica a $p_c=0.618\,$

VI. CONCLUSIONES

En el siguiente trabajo estudiamos el comportamiento de un sistema percolante bidimensional con dos estados de nodo. Obtuvimos los comportamientos de las variables que caracterizan las transiciones del sistema P_{∞} y S o segundo momento de la distribución y para cada una de ellas observamos su comportamiento en un entorno del punto crítico. También estudiamos la estructura del cluster percolante en el punto crítico obteniendo una dimensión fractal D y observamos que su comportamiento cambia aumentando la probabilidad de llenado p presentando una dimensión d igual a la de la red. Por otro lado también testeamos y verificamos la hipótesis de scaling mediante un colapso de datos y obteniendo la forma de la función f(z). Podemos concluir que algunos exponentes críticos resulta conveniente calcularlos a partir de otros como es el caso particular de τ . En la siguiente tabla resumimos los principales resultados obtenidos.

| Símbolo | Valor |
|----------------|---------------------|
| \overline{d} | $2,014 \pm 0,001$ |
| D | $1,853 \pm 0,001$ |
| ν | $1,2 \pm 0,2$ |
| $p_c(\infty)$ | 0.5927 ± 0.0001 |
| $	au_{n_s}$ | $1,\!61\pm0,\!01$ |
| $	au_{\sigma}$ | $2,45 \pm 0,01$ |
| σ | 0.34 ± 0.01 |
| β_{128} | 0.333 ± 0.004 |
| γ_{128} | $2,\!64 \pm 0,\!01$ |

[1] J. Hoshen and R. Kopelman, Physical Review B ${\bf 14},\,3438$ (1976).