Estudio numérico de percolación de nodos en redes cuadradas 2d

Federico Cerisola^{1,2,*}

¹Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Pabellón 1, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina. ²IFIBA CONICET, FCEyN, UBA, Ciudad Universitaria Pabellón 1, 1428 Buenos Aires, Argentina. (Dated: 2 de mayo de 2017)

Presentamos un estudio numérico del modelo de percolación de nodos en redes cuadradas 2d de tamaños de hasta 512x512 nodos. Logramos determinar tanto los puntos críticos del límite ideal de red infinita como los valores modificados debido a los efectos de red finita. Calculamos además los exponentes críticos de la transición de fase, obteniendo en general resultados en muy buen acuerdo con los valores teóricos conocidos. Estudiamos en particular cómo se ve el sistema a distintas escalas y observamos que por encima del punto crítico a escalas menores que una distancia característica recuperamos el comportamiento auto-similar que caracteriza la transición. Logramos también verificar la hipótesis de scaling de la distribución de clusters. Finalmente mostramos con unos ejemplos sencillos cómo se puede utilizar el método de renormalización de celda pequeña para estimar el punto crítico.

I. INTRODUCCIÓN

El modelo de percolación ha sido un área de amplio interés e investigación desde hace ya varias décadas. En parte, esto se debe a que percolación es uno de los modelos más sencillos donde se observan fenómenos críticos y transiciones de fase. Por lo tanto, brinda la oportunidad de esclarecer sobre fenómenos que también aparecen en sistemas mucho más complejos. Esto está aún más reforzado por el hecho que los distintos fenómenos críticos pertenecen a distintas clases de universalidad, por lo cuál, aún siendo un modelo muy sencillo puede ofrecer información sobre todos los sistemas cuyas transiciones pertenezcan a esta misma clase de universalidad. Finalmente, percolación también ha visto aplicaciones prácticas para modelar de forma sencilla ciertos fenómenos de ciencias de materiales, de resistencia o de conductancia [1].

A. El modelo

En el problema de percolación tenemos una red de d dimensiones cuyos nodos pueden estar ocupados o libres. Consideramos que todos los nodos son independientes y por lo tanto la probabilidad de un nodo de estar ocupado, p, es la misma para todos.

Llamamos cluster a todo conjunto de nodos primeros vecinos ocupados. El problema central del modelo es determinar a partir de qué probabilidad de ocupación de nodos aparece un cluster infinito. En tal caso, se dice que la red percola.

Se puede mostrar que la aparición del *cluster* percolante a partir de una probabilidad crítica p_c , está asociado a una transición de fase de segundo orden [1].

B. Simulaciones Numéricas

En el presente trabajo se describen los resultados de simulaciones numéricas realizadas para estudiar los fenómenos asociados a la transición de fase del modelo de percolación. Para ello se estudiaron redes cuadradas de distintos tamaño lineal L entre 4 y 512.

Un ingrediente fundamental para el análisis sistemático de las redes generadas es tener un procedimiento para la identificación de *clusters*. A tal fin en el presente trabajo se utilizó el algoritmo de Hoshen-Kopleman[2].

El código utilizado para las simulaciones y posterior análisis se encuentra disponible online[3]. Los datos resultantes de las simulación están disponibles a pedido al autor.

II. RESULTADOS NUMÉRICOS

A continuación se presentan los resultados obtenidos. En primer lugar, en II A se discute cómo se determinó numéricamente el punto crítico, un parámetro esencial para los posteriores análisis. Luego se calcularon los distintos exponentes críticos del sistema a partir de la dispersión en la estimación de p_c (II B), de la distribución de fragmentos (II C) y de la intensidad del cluster percolante (II D). Por otro lado, en II E se estudia el comportamiento del cluster percolante a distintas escalas y se obtiene la dimensión fractal del sistema. Finalmente en II F se verifica numéricamente la hipótesis de scaling y se miden los exponentes críticos asociados.

A. Determinación de $p_c(L)$

Se emplearon distintos métodos para determinar el punto crítico del sistema. En primer legar se realizó un búsqueda por bisección de la siguiente forma:

^{*} cerisola@df.uba.ar

- Para una red de tamaño L se le asigna a cada nodo una probabilidad entre 0 y 1 de estar ocupado.
- Luego, se fija una probabilidad umbral p (la probabilidad de ocupación de la red) y los nodos con probabilidad mayor a p se ocupan mientras que los otros de dejan libres (de esta forma la red tiene una probabilidad de ocupación p).
- Si la red tiene un cluster percolante, la probabilidad de ocupación se cambia a $p 1/2^n$, si no percola a $p + 1/2^n$ (donde n es el número de iteración).
- Con la nueva probabilidad p se vuelve al segundo paso y así se itera hasta alcanzar la "precisión" en p_G deseada.

Este ciclo se repite N veces para realizaciones distintas de la red (es decir, para distintas probabilidades por nodos del primer paso). El valor medio de las probabilidades obtenidas en estas N iteraciones nos otorga una estimación de la probabilidad crítica de la red de tamaño L, $p_c(L)$.

En nuestro caso se utilizó una "precisión" en la probabilidad crítica de cada realización, p_c , de $1/2^{16}$ (n=16). El número total de realizaciones en cambio se determinó a partir de requerir una cota en el error en la determinación del valor medio de p_c . Efectivamente, si no conocemos nada sobre la distribución de probabilidad de p_c , tenemos entonces por la desigualdad de Chebyshev[4] que, en el peor de los casos, la probabilidad de que el valor medio estimado, \bar{p}_c , difiera del real, $\langle p_c \rangle$, en más de ϵ está acotada por

$$P(|\bar{p}_c - \langle p_c \rangle| \ge \epsilon) \le \frac{\sigma^2}{\epsilon^2 N},$$
 (1)

donde σ es la desviación estándar de las muestras.

En la Figura 1 se muestran la distribuciones de p_c obtenidas mediante la búsqueda por bisección para distintos tamaños, a saber L = 16, 32, 64, 128, 256, 512. En todos los casos tomamos una cantidad de muestras N=66000. Sabemos que en el límite $L \to \infty$ de red infinita la distribución debería ser una delta de Dirac, pues el punto crítico está bien definido. En cambio, en la Figura 1 vemos que probabilidad de percolación para una red finita no está completamente bien definida, en cuanto los valores de $p_c(L)$ están distribuidos con una cierta dispersión. Sin embargo, podemos notar también que al aumentar el tamaño de la red, la varianza disminuye y la distribución se acerca cada vez más al caso infinito. Por otro lado, se pude observar cualitativamente que los valores medios de las distribuciones de p_c cambia al aumentar L. Efectivamente, en la Figura 2 se muestra graficado el valor medio de $p_c(L)$ en función de L junto al valor conocido de $p_c(\infty)$. Como era esperable, se puede ver una clara tendencia de los valores medios de $p_c(L)$ a converger hacia $p_c(\infty)$ al aumentar L. Cabe destacar que utilizamos el valor de $p_c(\infty)$ hallado en la literatura simplemente para poner en evidencia la tendencia de $p_c(L)$ y más adelante veremos cómo calcular $p_c(\infty)$ directamente a partir de las simulaciones realizadas.

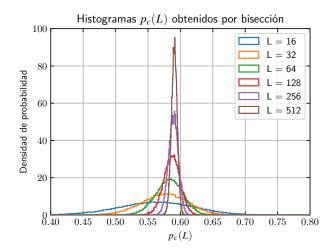


Figura 1. Distribuciones de los resultados de p_c obtenidos mediante N=66000 búsquedas por bisección para distintos tamaños de red L=16,32,64,128,256,512.

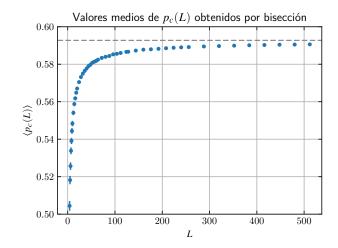


Figura 2. Valores medios de $p_c(L)$ obtenidos por bisección para distintos tamaños de red L. Las barras de error corresponden a un intervalo de confianza de 99% en la estimación del valor medio. Se muestra además con la línea punteada la probabilidad crítica para una red infinita, $p_c(\infty)$.

Resulta en general natural asociar el valor medio de la distribución de la Figura 1 de probabilidades de percolación, $\langle p_c(L) \rangle$, a la probabilidad crítica para una red finita de tamaño L. Sin embargo, alternativamente se podría utilizar algún otro parámetro característico de la distribución como, por ejemplo, la mediana, es decir la probabilidad para la cuál la red percola exactamente la mitad de las veces. Para determinar la mediana resulta útil graficar como se muestra en la Figura 3 la distribución cumulativa de $p_c(L)$, $F(p_c(L))$.

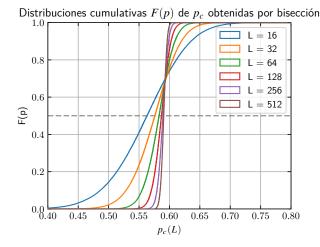


Figura 3. Distribuciones cumulativas de los resultados de p_c obtenidos mediante N=66000 búsquedas por bisección para L entre 16 y 512. Se grafica además con línea punteada la recta correspondiente a F(p)=0.5, utilizada para determinar la mediana de la distribución.

De forma análoga a lo discutido para la densidad de probabilidad, en este caso esperamos que para $L = \infty$ la distribución cumulativa sea una distribución θ de Heaviside centrada en $p_c(\infty)$. Vemos que nuevamente las distribuciones medidas para redes finitas se acercan a la forma esperada al aumentar L. La mediana se puede entonces estimar simplemente trazando una recta correspondiente a F(p) = 0.5 como se muestra en la Figura 3. En la tabla I se muestran los valores medios y medianas para algunos valores seleccionados de L. Notamos que los valores difieren en menos de 2% del valor medio y también se acercan a $p_c(\infty)$ al aumentar L. Para estimar el error en la mediana podemos utilizar el test de Kolmogorov-Smirnov [5]. En efecto, si $F_N(p)$ es la distribución cumulativa medida resultante de N mediciones y F(p) es la distribución exacta, entonces se tiene que

$$\lim_{N \to \infty} \operatorname{Prob} \left[\sup \left| F(p) - F_N(p) \right| \ge \frac{Z}{N} \right] \le L(Z), \quad (2)$$

donde L(Z) es una función analítica conocida cuyos valores se pueden encontrar tabulados [5]. En la tabla I vemos que para redes pequeñas la estimación de la mediana tiene menor error respecto al valor medio, mientras que para redes grandes se tiene la situación opuesta, debido a que al aumentar L la varianza de $p_c(L)$ disminuye considerablemente y por lo tanto la cota de (1) es más fácil de satisfacer para una misma precisión.

Si los que nos interesa es determinar directamente la distribución cumulativa F(p), entonces tenemos otra forma de medir más directa. Efectivamente en nuestro caso podemos fijar el parámetro p (la probabilidad de ocupación) en cualquier valor y luego determinar la probabilidad que la red percole a esa probabilidad fija. Notemos que a p fijo, la probabilidad de que la red percole o

Cuadro I. Valores medios y medianas de $p_c(L)$ para algunos tamaños de redes seleccionados.

L	$\langle p \rangle$	p mediana
16	0.562 ± 0.002	0.563 ± 0.001
32	0.575 ± 0.002	0.563 ± 0.001
64	0.582 ± 0.001	0.583 ± 0.001
128	0.5867 ± 0.0008	0.587 ± 0.001
256	0.5891 ± 0.0006	0.5893 ± 0.0009
512	0.5906 ± 0.0004	0.5907 ± 0.0009

no es una variable aleatoria que puede tomar dos valores: percola o no-percola con probabilidades $p_{\text{percolación}}$ y $1-p_{\text{percolación}}$, respectivamente. Por lo tanto, podemos tratar la estimación de $p_{\text{percolación}}$ como el problema de estimar la probabilidad de "suceso" de una distribución binomial. Luego, a una probabilidad de ocupación p fija podemos estimar la probabilidad de percolar $p_{\text{percolación}}$ con un intervalo de confianza dado por

$$\bar{p}_{\text{percolación}} \pm z \sqrt{\frac{\bar{p}_{\text{percolación}} (1 - \bar{p}_{\text{percolación}})}{N}},$$
 (3)

donde $\bar{p}_{\text{percolación}}$ es la probabilidad de percolación estimada, N es el número de muestras y z es el cuantil del intervalo de confianza deseado de la distribución normal. Cabe destacar que esta aproximación es válida para N grandes y probabilidades que no sean muy cercanas a 0 o 1.

Entonces, para medir F(p) directamente se dividió el intervalo de probabilidades de ocupación entre 0 y 1 en 500 puntos, con una separación que aumenta exponencialmente de forma simétrica respecto de un valor central, tomado en base a los análisis anteriores como p = 0.59. Para cada valor de p se estimó la probabilidad de percolación $p_{\rm percolación}$ tomando N_p muestras de forma tal de tener un error de ±0.005 con un intervalo de confianza de 99%, de acuerdo a la ecuación (3). En la Figura 4 se muestran las distribuciones cumulativas obtenidas de esta forma para algunos tamaños de red. Vemos que los resultados son consistentes con los obtenidos en los análisis anteriores para la búsqueda por bisección. De forma análoga podemos calcular la mediana, obteniendo resultados idénticos. Podemos también calcular el valor medio y varianza de la probabilidad de percolación usando que para una variable aleatoria positiva cualquiera x con distribución cumulativa F(x) vale que [4]

$$\langle x \rangle = \int_0^\infty (1 - F(x)) \, \mathrm{d}x \tag{4}$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^\infty x \left(1 - F(x) \right) dx \tag{5}$$

Nuevamente, como es de esperar obtenemos resultados consistentes con los obtenidos mediante la búsqueda por bisección. Una ventaja de este método es que nos permite obtener fácilmente, con la precisión deseada, el compor-

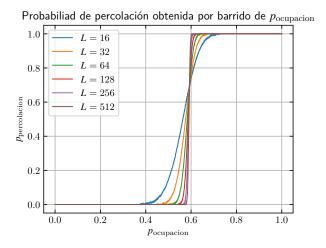


Figura 4. Distribuciones cumulativas de la probabilidad de percolación obtenidas mediante un barrido de la probabilidad de ocupación. Los puntos fueron estimados con un error de ± 0.005 (99% CI). Como era de esperar re-obtenemos los resultados de la Figura 3.

tamiento también para valores de p donde la probabilidad cumulativa de percolación es aproximadamente 0 o 1, mientras que por el método de bisección alcanzar estos puntos extremos es muy poco probable.

B. Determinación de $p_c(\infty)$ y ν

Como discutimos en la sección anterior al presentar las Figuras 3 y 4, la distribución cumulativa para redes finitas se acerca a la θ de Heaviside esperada para el caso infinito al aumentar L. Por lo tanto, podemos pensar que aumentar L corresponde a un cambio de escala que estrecha la pendiente de las curvas de F(p) de forma tal que se acerca al escalón ideal. Por este motivo, y un análisis más riguroso que se puede consultar en [1], tiene sentido proponer la siguiente dependencia para F(p) con L cerca del punto crítico

$$F(p) = \varphi \left[(p - p_c(\infty)) L^{1/\nu} \right]$$
 (6)

donde φ es una función desconocida y ν es un exponente crítico. Usando la ecuación (6) para calcular el valor medio $\langle p \rangle$ se tiene que [1]

$$\langle p \rangle = L^{1/\nu} A + p_c(\infty) \tag{7}$$

y por lo tanto

$$\log (\langle p \rangle - p_c(\infty)) = -\frac{1}{\nu} \log L + \log A, \qquad (8)$$

donde A es, en principio, una constante. Notemos que la ecuación (7) nos muestra que tenemos un corrimiento en

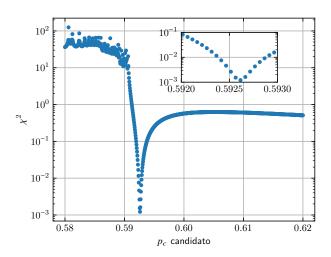


Figura 5. Gráfico de la suma de los residuos cuadráticos, χ^2 , resultantes del ajuste según la ley de potencias (8) para distintos valores de prueba de p_c . Se observa un mínimo bien definido dónde χ^2 disminuye en más de tres órdenes de magnitud. Este punto corresponde a $p_c(\infty)$.

redes finitas del valor medio $\langle p \rangle$ respecto de la probabilidad crítica de la red infinita $p_c(\infty)$ en $L^{1/\nu}A$. Esto es consistente con lo observado en la sección anterior.

En principio parece que podríamos utilizar la ecuación (8) para calcular el exponente crítico ν solamente si conociésemos el punto crítico de la red infinita $p_c(\infty)$. Sin embargo, podemos utilizar la ecuación (8) no sólo para calcular ν , sino que también para determinar $p_c(\infty)$. Efectivamente, la relación propuesta en (6) es solamente válida de forma exacta en el punto crítico. Por lo tanto, podemos hacer un barrido de distintas probabilidades candidatas y hacer un ajuste lineal según (8) para cada una de ellas. En cada caso calculamos la suma de errores cuadráticos χ^2 del ajuste y esperamos que el verdadero $p_c(\infty)$ corresponda al mínimo.

En la Figura 5 se muestra el resultado de este análisis. Observamos que χ^2 tiene un mínimo muy bien definido para

$$p_c(\infty) = 0.59262 \pm 0.00008,\tag{9}$$

en excelente acuerdo con el valor que se encuentra en la literatura de 0.59267. El ajuste por la ley de potencias (8) para el valor de $p_c(\infty)$ encontrado se muestra en la Figura 6 y se obtiene

$$v = 1.335 \pm 0.007 \tag{10}$$

nuevamente en acuerdo con el valor esperado de 4/3. En la misma Figura 6 se muestran las curvas correspondientes a otros dos valores candidatos de p_c que difieren en 0.01 del valor óptimo. Se puede ver cómo efectivamente un pequeño cambio en p_c produce un comportamiento completamente diferente a la ley de potencias esperada. Efectivamente cabe destacar la importancia del argumento empleado para identificar $p_c(\infty)$. El valor elegido no es

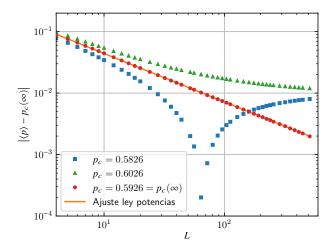


Figura 6. Gráfico de $|\langle p \rangle - p_c(\infty)|$ en función de L para tres valores de $p_c(\infty)$: el valor óptimo encontrado en la Figura 5 y uno un poco mayor y menor. Observamos como sólo para el valor óptimo se tiene un comportamiento de ley de potencias. Se muestra además el ajuste según (8) para el caso óptimo.

simplemente el que mejor ajusta la ley de potencias (8). Es más, el hecho que ajuste bien una ley de potencias significa que el comportamiento del sistema en este punto está libre de escalas y ésta es justamente la característica fundamental del punto crítico.

Por otro lado, hubiésemos podido determinar $p_c(\infty)$ y ν independientemente de otra forma. Efectivamente, de forma análoga a cómo se llega a la ecuación (7), se puede mostrar que la varianza de p cumple

$$\sigma^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle = (B - A^2) L^{-2/\nu}, \tag{11}$$

donde B es una nueva constante (en principio) que depende de los detalles del sistema. En la Figura 7 vemos un ajuste según la ecuación (11), de donde se obtiene $\nu=1.335\pm0.006$, en acuerdo con lo encontrado anteriormente.

Finalmente, notemos que combinando las ecuaciones (8) y (11) podemos sacarnos de encima la dependencia del exponente crítico y obtener la siguiente relación lineal entre el valor medio y la desviación estándar de p

$$\langle p \rangle = \beta \sigma + p_c(\infty) \tag{12}$$

donde β es alguna constante que depende de las constantes anteriores A y B. En la Figura 8 se muestra el gráfico de $\langle p \rangle$ en función de σ . Del intercepto del ajuste lineal obtenemos la estimación del punto crítico $p_c(\infty) = 0.59277 \pm 0.00004$, también consistente con el valor antes encontrado.

C. Determinación de τ y $p_c(L)$ a partir de $n_s(p)$

Finalmente, presentamos otra forma de encontrar el punto crítico de una red finita que en principio también

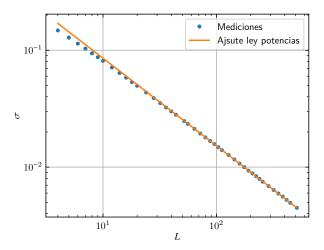


Figura 7. Gráfico de la desviación estándar σ de p en función del tamaño de la red L. Vemos que, salvo para redes muy pequeñas, se cumple el comportamiento de ley de potencias de la ecuación (12).

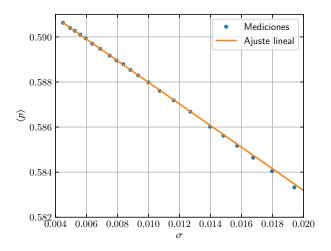


Figura 8. Gráfico del valor medio $\langle p \rangle$ en función de la desviación estándar. Vemos que salvo para desviaciones grandes (es decir, redes pequeñas), se cumple la relación lineal de la ecuación (12).

sirve para encontrar el exponente crítico τ .

Sabemos que en el punto crítico la distribución de clusters de tamaño s cumple la ley de potencias

$$n_s(p_c) = q_0 s^{-\tau}, \tag{13}$$

donde $n_s(p_c)$ es el número de clusters de tamaño s por nodo de la red y q_0 es, en principio, una constante. Por lo tanto, podemos hacer un análisis, análogo al utilizado para encontrar el exponente crítico ν y $p_c(\infty)$ en la sección anterior, variando p y buscando dónde se minimiza el χ^2 del ajuste dado ahora por (13). En la Figura 9 se muestra el resultado de este análisis para una red de tamaño L=256, obteniéndose resultados análogos para

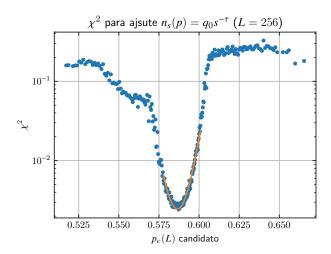


Figura 9. Gráfico de la suma de los residuos cuadráticos, χ^2 , resultantes del ajuste según la ley de potencias (13) para distintos valores de prueba de $p_c(L=256)$. Se observa un mínimo dónde χ^2 disminuye en más de un orden de magnitud. Se muestra además un ajuste cuadrático (en escala logarítmica) que se utilizó para determinar la posición del mínimo.

otros tamaño (salvo por corrimiento de la posición del mínimo). Observamos que χ^2 tiene un mínimo aunque no está tan bien definido como en el caso anterior. Por tal motivo se realizó un ajuste cuadrático (en escala logarítmica) cerca del mínimo para determinar la posición central. De esta forma se obtuvo

$$p_c(L=256) = 0.587 \pm 0.002$$
. (14)

Por otro lado, en la Figura 10 se muestra el ajuste según la ley de potencias (13) para la distribución de clusters $n_s(p_c(L))$ en el punto crítico. Como se puede ver, para clusters muy pequeños y muy grandes la relación no se cumple correctamente. Esto se debe a que, en general la expresiones utilizados son solamente válidas para s grande, mientras que para clusters muy pequeños dominan las fluctuaciones. Sin embargo, los clusters tampoco pueden ser demasiado grandes porque sino comienzan a afectar significativamente los efectos de red finita. Por este motivo, para el ajuste se tuvieron en cuanta solamente fragmentos con tamaño $0.02 < s/L^2 < 0.22$. Del ajuste de la Figura 10 se obtiene

$$\tau(L = 256) = 1.892 \pm 0.004$$
. (15)

Cabe destacar que, aunque en teoría el exponente crítico no debería depender de L, al repetir este procedimiento para los distintos tamaños se observó una dependencia llegando a tener valores del orden de $\tau=1.75$ para redes muy pequeñas.

Notamos que el resultado de τ en (15) difiere significativamente del valor teórico de $\tau=2.055$. Es más, como veremos más adelante, el hecho que el valor de τ obtenido sea menor a 2 es particularmente problemático, en cuanto no es consistente con el resto de la teoría. En al

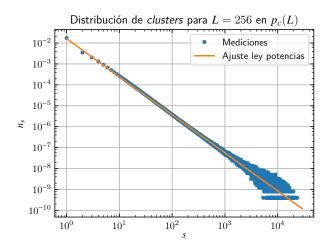


Figura 10. Gráfico de la densidad de clusters en el punto crítico encontrado en la Figura 9, $n_s(p_c)$, en función del tamaño de cluster, s para una red de tamaño L=246. Se muestra además un ajuste por ley de potencias según la ecuación (13) utilizada para encontrar el exponente crítico τ .

sección IIF veremos como podemos corregir este problema usando la hipótesis de *scaling*.

D. Intensidad del cluster percolante P_{∞} y determinación de β

A la hora de estudiar cualquier fenómeno de transición de fase, resulta esencial identificar un parámetro de orden, es decir, alguna propiedad del sistema que es nula de una lado de la transición y repentinamente toma un valor no nulo al pasar la transición. Para percolación un buen parámetro de orden es la intensidad del cluster percolante, P_{∞} , definido como la fracción de nodos pertenecientes al cluster percolante respecto del número total de nodos

$$P_{\infty} = \frac{\# \text{nodos cluster percolante}}{L^2} \,. \tag{16}$$

En la Figura 11 se muestra el gráfico de P_{∞} para distintos tamaños de red. En el límite de red infinita esperamos que P_{∞} sea cero para $p \leq p_c$ y luego crezca continuamente, puesto que percolación presenta una transición de fase se segundo orden. En el caso de redes finitas los detalles de este comportamiento se pierden debido al hecho de no tener un probabilidad crítica bien definida. Sin embargo podemos notar que el comportamiento tiende al esperado al aumentar L.

Reescribiendo P_{∞} en función de $n_s(p)$ se puede mostrar que P_{∞} también cumple una ley de potencias por encima del punto crítico, dada por [1]

$$P_{\infty} \propto |p - p_c|^{\beta} \,, \tag{17}$$

donde β es un nuevo exponente crítico. Naturalmente, se probó a ajustar P_{∞} cerca de p_c para encontrar el exponente β . Sin embargo los resultados obtenidos dependen

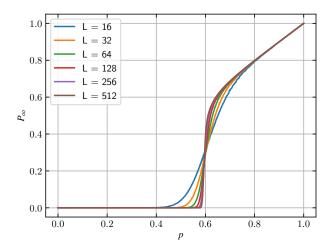


Figura 11. Intensidad del cluster percolante en función de la probabilidad de ocupación p para distintos tamaños de red.

muy fuertemente del tamaño de la red, variando desde 0.012 hasta 0.063 al aumentar el tamaño de la red. Además, estos resultados difieren significativamente del valor teórico de $\beta=0.139$. Para entender porqué se tiene tanta diferencia, en la Figura 12 se muestra nuevamente le gráfico de P_{∞} pero cerca del punto crítico y con el agregado de la curva correspondiente a $L=\infty$. Observamos que efectivamente, debido a los efectos de red finita, la pendiente de P_{∞} cerca de p_c depende fuertemente del tamaño L y aún para la red más grande estudiada (L=512) es mucho más pequeña de la del límite infinito. Sin embargo se puede observar cualitativamente que las curvas presentan la tendencia deseada en acercarse al valor correcto.

Como camino alternativo para determinar el exponente β se podrían utilizar las relaciones que existen entre distintos exponentes para calcularlo en función a otros ya obtenidos. Por ejemplo se puede mostrar que [1]

$$\beta = \frac{\tau - 2}{\sigma},\tag{18}$$

donde σ es otro exponente que mediremos más adelante. Lo interesante de la expresión (18) es que, como $\beta > 0$, esto implica que $\tau > 2$. Sin embargo, el τ obtenido en la sección anterior era menor a 2. Es por este motivo que, como habíamos adelantado, el valor antes encontrado es inconsistente con el resto de la teoría. Más adelante veremos como encontrar una mejor estimación de τ . De allí se podrá entonces sí calcular β .

E. Determinación de la dimensión fractal D

Resulta particularmente interesante estudiar el tamaño (o masa) del cluster percolante, M_{∞} , en función del tamaño de la red finita, L. Si pensamos a la red finita como una "ventana" con la que miramos la red ideal infinita, resulta a priori intuitivo suponer que la masa del

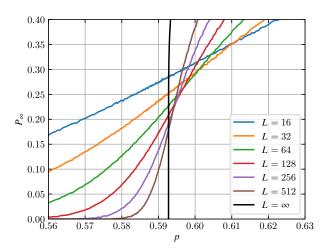


Figura 12. Intensidad del cluster percolante en un entorno cercano a la probabilidad de ocupación crítica p_c para distintos tamaños de red. Se muestra además el resultado teórico para $L=\infty$. Vemos como aún para la red más grande estudiada, L=512, la pendiente difiere significativamente del límite infinito. Ésta es la causa de la pobre estimación de β .

cluster percolante escalará como la dimensión de nuestro problema d=2. Sin embargo, como estudiaremos en esta sección, se tiene un comportamiento mucho más rico.

En primer lugar, precisamente en el punto crítico, sabemos que el sistema es auto-similar y libre de escalas. Esto lleva a que necesariamente M_{∞} en p_c escale de la forma [1]

$$M_{\infty}(p=p_c) \propto L^D$$
, (19)

donde D < d = 2, es la dimensión fractal del sistema.

En la Figura 13 se muestra el gráfico de M_{∞} en función de L en el punto crítico (donde se usó el valor de p_c encontrado en las secciones anteriores). De un ajuste lineal obtenemos que la dimensión fractal es

$$D = 1.880 \pm 0.002,\tag{20}$$

en muy buen acuerdo con el valor teórico de D=1.896.

Por otro lado, resulta también interesante estudiar el comportamiento de M_{∞} para probabilidades mayores a la crítica. Nuevamente, uno podría, erróneamente, esperar un simple scaling dado por d=2. Para estudiar este comportamiento en detalle, se siguió un procedimiento similar al propuesto en [6]. Tomamos una red grande, en nuestro caso de L=256 que supondremos es la red infinita subyacente. Para $p > p_c$ poblamos la red y nos quedamos con aquellas para las cuales el cluster percolante contiene al nodo central de la red. Luego, tomamos "ventanas" de distintos tamaños L, centrados en la red grande, y calculamos la masa del cluster percolante en esta ventana. En la Figura 14 se grafica la densidad del cluster percolante, es decir $\rho_{\infty} = M_{\infty}/L^d$ en función de L obtenida mediante el procedimiento descripto para dos probabilidades $p > p_c$ distintas. En ambos casos

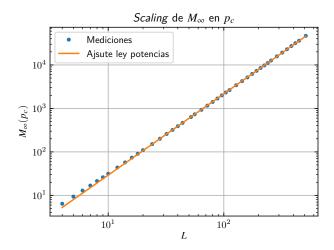


Figura 13. Masa del cluster percolante, M_{∞} en función del tamaño de la red, L, en el punto crítico. Se muestra además el ajuste por la ley de potencias (19). Se observa un comportamiento como el esperado salvo que para redes muy pequeñas.

podemos distinguir tres regiones con comportamientos distintos. La región (II) corresponde a lo que se espera intuitivamente, donde ρ_{∞} es aproximadamente constante, es decir, $M_{\infty} \propto L^d$. En esta región al aumentar L el tamaño del cluster percolante crece como la dimensión del problema. Para valores de L muy grande, se entra a la región (III) dónde ρ_{∞} rápidamente decrece. Esto se debe a los efectos de red finita debidos a que la red subyacente sobre la cual estamos tomando las ventanas tiene un tamaño L=256 y no es verdaderamente infinita. Finalmente, la región más interesante es la región (I). Allí se puede ver que M_{∞} escalea con una dimensión menor a d=2. Realizando un ajuste en esta región obtenemos $M_{\infty} \propto L^D$, con $D = 1.88 \pm 0.01$, la dimensión fractal antes encontrada. Por lo tanto, a distancias menores a una distancia característica ξ , el sistema se comporta de forma auto-similar y libre de escalas, recuperando el comportamiento del punto crítico aún cuando $p > p_c$. Notemos, sin embargo, que la distancia característica ξ disminuye al aumentar p. Por lo tanto, para p suficientemente grande la región (I) desaparecerá por completo. En conclusión verificamos, como se puede obtener por argumentos teóricos, que [1]

$$M_{\infty}(L) \propto \begin{cases} L^D & \text{si } L << \xi \\ L^d & \text{si } L >> \xi \end{cases}$$
 (21)

F. Espectro de fragmentos y verificación de la hipótesis de scaling

En la sección II C vimos que la ecuación (13) nos produce un valor de τ que es inconsistentes con el resto del modelo. Una primer corrección que se puede hacer a la

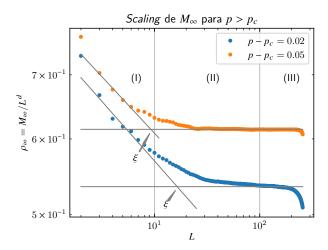


Figura 14. Densidad del cluster percolante, $\rho_{\infty} = M_{\infty}/L^d$ en función del tamaño de las ventanas L para dos probabilidades $p > p_c$. Se observar tres regiones distintas: (I) donde se recupera el comportamiento de auto-similaridad del punto crítico y $M_{\infty} \propto L^D$. (II) donde $M_{\infty} \propto L^d$. (III) donde los efectos de red finita se vuelven relevantes. Se indican además las distancias características ξ que indican el punto de crossover de un comportamiento al otro.

ecuación es notar que, en realidad, la constante q_0 tiene una dependencia en τ . Efectivamente, se puede mostrar que q_0 está relacionada con la función ζ de Riemann mediante la ecuación [1]

$$q_0 = \frac{1}{\sum_s s^{1-\tau}} \,. \tag{22}$$

Por lo tanto, se puede realizar un ajuste no lineal de (13) utilizando esta dependencia adicional en q_0 . De tal forma se obtiene que

$$\tau = 2.103 \pm 0.002,$$
 (23)

que es un resultado mucho mejor en cuanto satisface que $\tau > 2$. Sin embargo, como vimos ya en distintos casos, el hecho de estar trabajando con redes finitas produce apartamientos del comportamiento respecto al sistema infinito de los cuales no nos podemos deshacer.

Resulta útil además estudiar cómo se comporta n_s no sólo en el punto crítico sino que también en su vecindad. Realizando una estudio detallado, como se puede seguir en [1], se puede llegar a proponer la siguiente expresión para la distribución de clusters

$$n_s(p) = q_0 s^{-\tau} f(z), \ z = s^{\sigma} (p - p_c)$$
 (24)

donde σ es un nuevo exponente crítico y f(z) es una función de scaling. La forma analítica de f(z) es desconocida, sin embargo es sencillo verificar la ecuación (24) a partir de los estudios numéricos realizados. Efectivamente, la ecuación (24) implica la condición no trivial que los cocientes $n_s(p)/n_s(p_c)$ colapsan todos a una misma función f independientemente de s o p. En la Figura

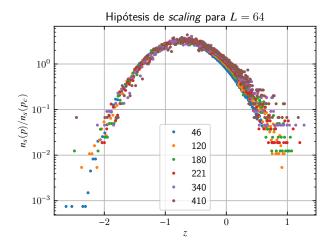


Figura 15. Gráfico del cociente $n_s(p)/n_s(p_c)$ para distintos tamaños de cluster s en función de $z=s^{\sigma}(p-p_c)$. Notamos que, como predice la ecuación (24) todos los puntos colapsan sobre una misma función f(z), verificando así la hipótesis de scaling.

15 se muestra el gráfico de este cociente para una red de tamaño L=64 para distintos tamaños de cluster s tales que $0.01 < s/L^2 < 0.12$, para evitar los efectos de las fluctuaciones de clusters muy pequeños y los efectos de red finita. Observamos que, efectivamente, los puntos caen todos, aproximadamente, sobre una misma curva, f(z). En particular observamos que, como era de esperar, para z=0, como $p=p_c$ el cociente es aproximadamente 1 (i.e. f(z=0)=1), pues la densidad de clusters está descripta por la ley de potencias (13).

Se puede notar que, como se puede predecir a priori por otros medios [1], la función f(z) tiene un único máximo $f_{\rm max}=f(z_{\rm max})$. Éste máximo se corresponde, para cada tamaño de cluster s a una respectiva probabilidad máxima $p_{\rm pax}$, que es justamente la probabilidad para la cuál se maximiza la producción de clusters de tamaño s. Esta probabilidad resulta importante, pues una vez determinada la podemos relacionar con el exponente crítico σ mediante la ley de potencias [1]

$$\log|p_{\max} - p_c| = -\sigma \log s + \log z_{\max} + C, \qquad (25)$$

donde C es alguna constante.

En la Figura 16 se muestra el ajuste de la ley de potencias (25), que solamente parece ser válida para s pequeños. Del ajuste se obtiene

$$\sigma = 0.366 \pm 0.005,\tag{26}$$

lo cual está en razonable acuerdo con el valor teórico de $\sigma=0.396.$

Finalmente, a partir de ν , σ y de D se puede calcular el valor del exponente problemático, τ usando la relación [1]

$$\tau = 2 + \nu \sigma (2 - D) \tag{27}$$

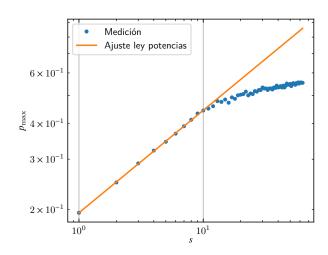


Figura 16. Gráfico de la probabilidad $p_{\rm max}$ de ocupación correspondiente a la producción máxima de *clusters* de tamaño s. Del ajuste según ley de potencias, solamente válido para s pequeños, obtenemos una estimación del exponente crítico σ .

Se tiene que $\tau = 2.06 \pm 0.01,$ en muy buen acuerdo con el valor teórico.

G. Determinación de γ

Otra cantidad interesante para estudiar es el segundo momento de la distribución de *clusters*, $m_2(p)$, que cumple, cerca del punto crítico, la ley de potencias [1]

$$m_2(p) = \sum_s n_s(p) s^2 \propto |\epsilon|^{\gamma}, \ \epsilon = \frac{p - p_c}{p_c}.$$
 (28)

En las Figuras 17 y 18 se muestran los segundos momentos para redes de tamaño L=6 y L=128, respectivamente. Se observa que la pendiente a ambos lados del punto crítico $\epsilon = 0$ es, general distinta. Por lo tanto, para encontrar el valor del exponente γ mejor consistente con la ecuación (28) se realizó un procedimiento, comúnmente llamado en la literatura γ matching, en el cual nos desplazamos a ambos lados de las curvas y realizamos ajustes localmente de la curva por una ley de potencia. De esta forma, obtenemos dos valores distintos de γ , a derecha (γ_{-}) y a izquierda (γ_{+}) de $\epsilon = 0$, como se muestra en las Figuras 19 y 20. Observamos que hay un punto en el cual los dos valores de γ se cruzan. Tomamos este valor como el valor de γ correcto. De tal forma tanto para L = 128 como para L = 6 se obtuvieron resultados similares de γ

$$\gamma \sim 2.01, \tag{29}$$

que es del mismo orden del valor teórico esperado $\gamma = 2.39.$

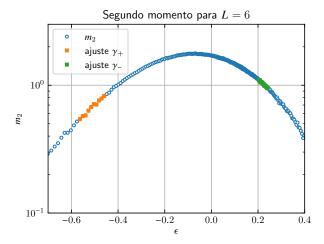


Figura 17. Segundo momento m_2 de la distribución de clusters cerca del punto crítico ($\epsilon=0$), para una red de tamaño L=6. Se indican también los puntos utilizados para el ajuste de γ resultante del procedimiento de γ matching.

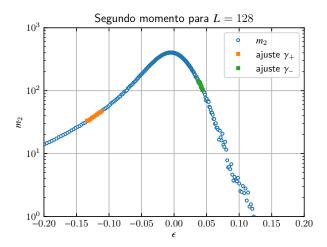


Figura 18. Segundo momento m_2 de la distribución de clusters cerca del punto crítico ($\epsilon = 0$), para una red de tamaño L = 128. Se indican también los puntos utilizados para el ajuste de γ resultante del procedimiento de γ matching.

III. RENORMALIZACIÓN

Es posible explotar aún más de lo ya hecho que cerca de la transición de fase el sistema es libre de escalas. Efectivamente, de ser esto cierto si se re-escala el sistema mediante un proceso de renormalización, en el punto crítico el comportamiento debe permanecer invariante.

Vamos a verificar esto, al menos de forma aproximada, para renormalización de celda pequeña. Para ello, consideremos una sección de la red de lado b=2. La idea es reemplazar los 4 nodos que la componen por un nuevo super-nodo. Para hacer esto es necesario establecer una regla p'=R(p) para asignar nuevas probabilidades

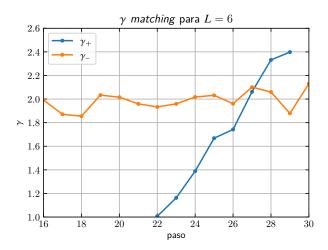


Figura 19. Valores de γ_+ y γ_- obtenidos por medio del método de γ matching. El punto donde se cruzan se toma como el valor de γ . (Para una red de tamaño L=6).

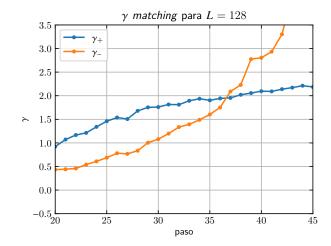


Figura 20. Valores de γ_+ y γ_- obtenidos por medio del método de γ matching. El punto donde se cruzan se toma como el valor de γ . (Para una red de tamaño L=128).

de ocupación de los super-nodos (p') en función de la probabilidad de ocupación de los nodos originales (p). Una vez determinada, la regla p' = R(p), el punto crítico corresponderá a un punto fijo de R(p), es decir a la probabilidad tal que p = p', o sea la probabilidad no se ve afectada ante un cambio de escala. Además, se puede mostrar que conociendo la relación se puede también estimar el exponente ν según [1]

$$\frac{1}{\nu} = \log_b \frac{\mathrm{d}p'}{\mathrm{d}p} \tag{30}$$

Una posible regla es mayoría simple, es decir, el supernodo estará ocupado si más de la mitad de los nodos del cluster 2x2 está ocupada. Por lo tanto, en tal caso

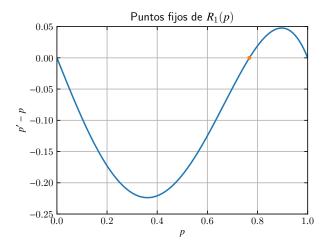


Figura 21. Gráfico de p'-p según la regla $p'=R_1(p)$, dada por (31). Se identifica además con una marca cuadrada (naranja) el punto fijo de la transformación.

tenemos que

$$p' = R_1(p) = 4p^3(1-p) + p^4$$
. (31)

En la Figura 21 se muestra el gráfico de p'-p. Se observan 3 puntos fijos, dos de ellos triviales correspondientes a p=0 y p=1 (efectivamente, si la red está completamente llena o vacía una cambio de escala no cambia nada). El tercer punto fijo corresponde a la estimación del punto crítico. Tenemos

$$p_1^* = 0.758 \ \tau_1 = 1.40. \tag{32}$$

Notamos que la estimación del punto crítico difiere significativamente del valor verdadero, mientras que τ_1 está relativamente cerca.

Parte del motivo por el cual la aproximación no es muy satisfactoria se debe a que con mayoría simple todos los casos con dos nodos ocupados pasan a un super-nodo no ocupado. Sin embargo, algunos de estos nodos quizás son los que conectan al *cluster* percolante y al quitarlos lo "cortamos", pasando a un caso no percolante (esto es sobre todo cierto cerca del punto crítico, donde el *cluster* percolante es muy tenue).

Por lo tanto, podemos proponer una nueva regla que incluye en el caso de super-nodo ocupado los casos en que la celda 2x2 percola verticalmente. En tal caso tenemos

$$p' = R_2(p) = R_1(p) + 2p^2(1-p)^2$$
. (33)

En la Figura 22 se muestra el gráfico de p'-p para esta nueva regla. Nuevamente tenemos 3 puntos fijos, los dos triviales y el de interés. Se tiene que

$$p_2^* = 0.618 \ \tau_1 = 1.63. \tag{34}$$

Notamos que ahora la estimación del punto crítico ha mejorado significativamente, estando ahora relativamente cerca al valor verdadero. Sin embargo notamos que la estimación de τ empeoró.

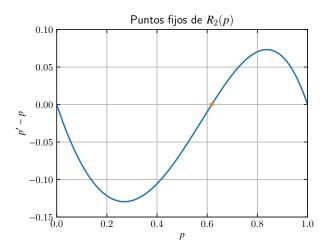


Figura 22. Gráfico de p'-p según la regla $p'=R_2(p)$, dada por (33). Se identifica además con una marca cuadrada (naranja) el punto fijo de la transformación.

En teoría, al aumentar aún más el tamaño de la celda tomada para crear los super-nodos nos acercamos cada vez más al valor verdadero de p_c .

IV. CONCLUSIONES

En conclusión, mediante simulaciones numéricas logramos estudiar y caracterizar la transición de fase asociada a percolación de nodos en redes cuadradas 2d. Logramos medir el punto crítico, tanto para le caso ideal de red infinita como para redes de tamaño finito.

Pudimos además estimar la mayoría de los exponentes críticos que caracterizan la clase universal de transiciones de fase a la cual pertenece el problema. Cabe recordar que debido a las varias relaciones entre exponentes críticos (algunas de las cuales usamos explícitamente en el trabajo), conociendo tan sólo dos exponentes se pueden calcular los otros. Dado que pudimos medir más de dos exponentes distintos con buena precisión podemos también, de forma indirecta, calcular los valores en los casos más problemáticos.

Observamos también cómo se comporta el sistema dependiendo de la escala a la cual se lo mira. Por un lado verificamos la hipótesis de *scaling* para la distribución de tamaños de *clusters*. Por otro lado, estudiando la masa del *cluster* infinito vimos que por encima del punto crítico, para distancias menores a una distancia característica podemos recuperar el comportamiento auto-similar que defina a la transición.

Finalmente, analizamos, muy brevemente, como se puede utilizar el método de renormalización de celda pequeña para estimar la probabilidad crítica.

- [1] D. Stauffer and A. Aharony, Introduction to percolation theory (Taylor & Francis Inc, 2003) pp. 57–87.
- [2] J. Hoshen and R. Kopelman, Physical Review B 14, 3438 (1976).
- [3]F. Cerisola, "https://github.com/cerisola/percolacion," .
- [4] R. L. Schilling, Measures, Integrals and Martingales (Cam-
- bridge University Press, 2005).
- [5] Z. W. Birnbaum, Journal of the American Statistical Association 47 (1952).
- [6] G. D. D. S. A. Kapitulnik, A. Aharony, J. Phys. A: Math. Gen. 16, 269 (1983).