Percolação

Lucas Monteiro (fc52849@alunos.fc.ul.pt)

Implementação de um gerador de configurações canónicas de percolação local e do método da queima de modo a estudar diferentes estatísticas de redes quadradas de diferentes tamanhos, por exemplo, calcular a probabilidade crítica destas.

Introdução

A teoria da percolação é o modelo mais simples que exibe uma transição de fase. Simulando diferentes configurações podemos estudá-las utilizando diversos métodos. Neste trabalho vai ser estudada uma configuração de percolação local (site percolation) quadrada utilizando o método da queima, que é especialmente útil para calcular a probabilidade crítica ou p_c do sistema, que vai ser a p, ou a probabilidade de encontrar um espaço ocupado num sítio qualquer da rede, onde ocorre a transição de fase. Também se vai determinar outros parâmetros como por exemplo confirmar se a configuração produz um agregado percolativo e, se produz, o caminho mais curto de um lado ao outro da rede.

1. Gerar configurações canónicas de percolação

Para criar diferentes configurações de percolação foi primeiro escrito um código que cria uma rede quadrada com $N=L^*L$ sítios com o valor inicial igual a ${\bf 0}$ ou estado vazio. Seguidamente, o algoritmo gera um número pseudo-aleatório $i\in[0;N[$ e preenche o sítio i da rede alterando o seu valor para ${\bf 1}$, ou estado ocupado. Assim repete-se este processo ${\bf n}$ vezes de modo a preencher o mesmo número de sítios da rede. O valor de n é dado pelo produto de N com o p definido.

Os números aleatórios foram criados utilizando as funções implementadas no C++ rand(), para obter os valores, e srand(), de modo a alterar a semente de rand() para obter configurações sempre diferentes. Notou-se que gerar n números aleatórios não preenchia o mesmo número de sítios da rede, logo alterou-se o código de modo a, em vez de gerar n números, gerar números até que n sítios fossem ocupados.

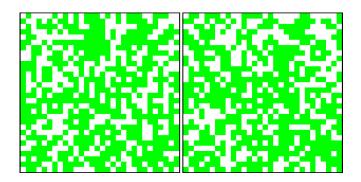


Figura 1. Duas configurações de rede quadrada com L=30 de lado e p=0.6, lado a lado. Os sítios ocupados estão representados a verde e os vazios a branco.

2. Método da queima

Foi então implementado o método da queima, que começa por alterar o valor de todos os sítios ocupados da primeira linha da matriz para 2 ou para o estado ardendo. Depois a cada iteração o fogo propaga para todos os sítios ocupados vizinhos, sendo estes o diretamente á esquerda, direita, cima e baixo do que está a arder no momento, alterando também os seus estados para ardendo.

Depois de o fogo se propagar altera-se o estado do sítio que estava a arder. De modo a simplificar o cálculo dos diferentes parâmetros em estudo, como o tempo que o fogo demora a parar completamente, este valor é alterado para tempo+2 ('+2' para não haver conflito com os valores de vazio, ocupado e ardendo), definindo o estado de queimado como qualquer sítio com valor > 2. O tempo é apenas a iteração que o algoritmo se encontra no momento e o tempo inicial (igual a 1) quando se queima a primeira linha da matriz. Desta forma determina-se facilmente o que se pretende analisando os valores dos sítios da configuração final.

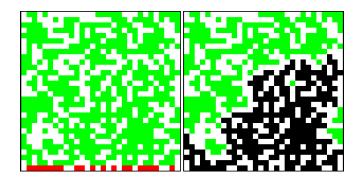


Figura 2. Configuração de L=30 e p=0.6 no tempo inicial (à esquerda) e final (à direita) da queima. Os sítios ardendo estão representados a vermelho e os queimados a preto.

Ao implementar este código é necessário ter especial atenção ás condições de fronteira da matriz pois pode causar problemas no cálculo dos vizinhos próximos de cada sítio e, consequentemente, na propagação do fogo.

3. Estatística

Passou-se assim para o estudo das configurações geradas por diferentes combinações dos parâmetros p e L. Para cada combinação foram geradas 1000 configurações de percolação diferentes de modo a calcular o tempo de queima médio, a fração de amostras que apresentam agregado percolativo e, destas, o caminho curto médio.

Fixou-se então o valor de L=30 e gerou-se configurações para 100 valores diferentes de p uniformemente distribuídos. Notou-se que os valores da fração de amostras que apresentavam agregado concentravam-se em 0, quando p<0.50 e 1, quando p>0.70, com um grande crescimento entre estes valores.

O tempo médio de queima cresce cada vez mais rapidamente até ao valor máximo, por volta dos 55 passos em $p\approx 0.65$, onde começa a decrescer linearmente até 30 passos. O caminho curto médio registado até p=0.45 foi recorrentemente 0 e depois, até p=0.50, cresce abrutamente chegando ao seu pico de 50 passos, decrescendo rapidamente até estabilizar em 30 passos, analogamente ao tempo médio de queima.

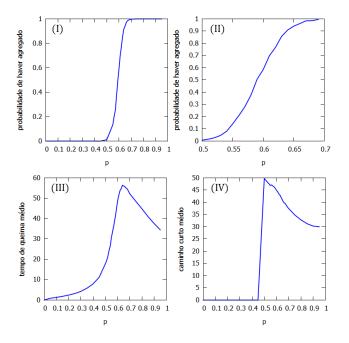


Figura 3. Representações gráficas da probabilidade de haver agregado, com p a variar entre (I) 0 e 1 e (II) 0.5 e 0.7; (III) do tempo de queima médio e (IV) do caminho curto médio, em função de p, para L=30.

Repetiu-se o processo para $L=60,\ 90,\ 120$ e 150; e verificaram-se resultados semelhantes aos anteriores. Em todos a probabilidade de haver agregado aumentava bruscamente de 0 para 1 por volta do mesmo valor de p. Para além das semelhanças notou-se que quanto maior o L mais abrupta esta subida e mais fácil era de calcular o p onde se dava a transição, que se define como p_c .

O tempo de queima médio também cresce rapidamente até cerca de 2L em p um pouco maior de p_c , e começa a decrescer linearmente até L, que é o tempo de queima numa rede onde todos os sítios da rede quadrada estão ocupados. Isto acontece pois quanto mais sítios ocupados há mais tempo leva a arder, no entanto quando $p > p_c$ o facto de haver menos sítios vazios implica que o fogo propaga-se mais rapidamente pela rede.

O gráfico do caminho curto médio mantém-se nulo até um $p < p_c$, pois a probabilidade de se criar agregado para valores de p menores ser extremamente baixa, sendo mesmo 0 enquanto n < L, ou $p < \frac{1}{L}$. Depois cresce muito rapidamente até cerca de 2L e decresce, cada vais mais rápido, para o valor do caminho curto de uma rede totalmente ocupada L. Notou-se que o p onde ocorre a transição aproxima-se de p_c quanto maior o L.

Analisando os diferentes gráficos nota-se que á medida que L aumenta várias eventos acumulam-se em $p=p_c$. A probabilidade de haver agregado percolativo salta de 0 para 1, e tanto o tempo de queima médio como o caminho mais curto médio de um lado ao outro do sistema atingem os seus valores máximos. Calcula-se assim $p_c \approx 0.59$. Na Figura 4 observa-se a comparação de alguns dos gráficos.

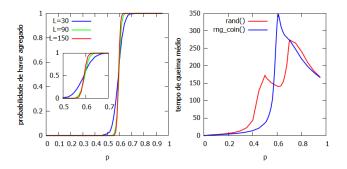


Figura 4. Comparação entre os gráficos da probabilidade de haver agregado para $L=30,\ 90$ e 150 (á esquerda) e do tempo médio de queima para L=150 utilizando diferentes geradores de números aleatórios (á direita) em função de p.

Salienta-se a importância da escolha de um bom gerador de números aleatórios. Começou-se por utilizar a função rand() no entanto ao testar configurações de rede maiores começou-se a notar irregularidades que não se esperavam, como se pode ver na Figura 4. Isto pode-se dever a sequências de números aleatórios com períodos pequenos por isso passou-se a utilizar o gerador $Mer-senne\ Twister\ e\ rng_coin\ da\ biblioteca\ random,\ onde\ já\ não\ se verificaram\ problemas.$

Conclusão

Conclui-se que o comportamento das configurações de percolação local não depende do seu tamanho e que $p_c \approx 0.59$ para redes quadradas, muito próximo do valor teórico $p_c \approx 0.592746$. No entanto não podemos saber o seu valor exato simulando redes finitas pois apenas numa rede infinita a probabilidade de haver agregado saltaria instantaneamente de 0 para 1 em $p=p_c$, por exemplo. Quanto maior o L maior a aproximação a uma rede infinita, no entanto ao simular grandes configurações surgem outros problemas como poder de computação e capacidade de gerar números aleatórios.

 $(1)\ mathworld.wolfram.com/PercolationThreshold.html$