

Simulación en Física: Fractales.

Pedro Jesús López Abenza

1. Introducción al problema

Al simular el fenómeno de la percolación en un sistema de un cierto tamaño, surge una distribución de posibles longitudes hasta un cierto valor máximo, relacionado con la longitud de localización, de manera que el fenómeno de percolación genera islas de un tamaño limitado en nuestro sistema. Sin embargo, cuando dicha longitud de localización ξ tiende a infinito, nuestro sistema estará acercándose a la transición de fase, de modo que en tal caso se cumple que todas las localizaciones están involucradas, de modo que se formarán islas de todos los tamaños en nuestro sistema.

Los objetos formados en el punto crítico dan lugar a una agrupación percolante que posee la naturaleza propia de un fractal. Definimos como fractal a un objeto geométrico con una estructura básica fragmentada o aparentemente irregular pero que en realidad se repite a diferentes escalas. De tal modo, estos fractales se caracterizan porque la longitud de las islas formadas por la percolación aumenta con el tamaño del sistema como una ley de potencias. Además, todo fractal se caracteriza por ser autosemejante y un conjunto u objeto de dimensión no entera.

De tal modo, nuestro objetivo en este proyecto es estudiar dicha dimensión no entera, conocida como dimensión fractal o dimensión de Hausdorff, para lo cual trataremos de apreciar la relación entre el tamaño de nuestro sistema y la longitud típica de las islas formadas al realizar la simulación del fenómeno de la percolación. Para ello, contaremos con una red bidimensional con condiciones de contorno periódicas y procederemos a estudiar la mediante el bordeamiento de clusters, de forma que comprobaremos si las trayectorias simuladas son cerradas a derecha o izquierda o son trayectorias extendidas.

De estos tres tipos de trayectorias sólo nos interesan las trayectorias extendidas, en las cuales se ha vuelto al elemento central de la matriz dando una vuelta al toro. Así pues, hemos de calcular el número de pasos necesarios para cerrar dichas trayectorias en función de la dimensión de la red bidimensional y, en base a ello, calcular el exponente que relaciona ambos, el cual será la dimensión fractal o dimensión de Hausdorff.

2. Cálculo numérico y simulación

2.1. Simulación numérica de la percolación

Para simular numéricamente nuestro problema en una red bidimensional, contamos con nuestro programa `percfractal-pjla.f`, en el cual simulamos nuestra red mediante una matriz de tamaño $L \times L$. De tal modo, partiremos de uno de los puntos centrales de la matriz (aunque su elección es meramente estética, pues, como se ha comentado, hemos establecido condiciones de contorno periódicas) y estableceremos una dirección inicial, a partir de la cual nos desplazamos al vecino situado en dicha dirección.

Por tanto, definimos una cierta probabilidad p y, si el vecino situado en la dirección determinada no ha sido visitado con anterioridad, procedemos a sortear si dicho vecino está lleno, lo cual se produce con una probabilidad p , o vacío, lo cual se produce con una probabilidad $(1-p)$. En cambio, si dicho vecino ya ha sido visitado anteriormente, se volverá a tomar el estado que se le asignó previamente.

Así pues, en nuestro criterio hemos establecido que 1 equivale a un sitio lleno y 2 a un sitio vacío. Para seleccionar la dirección de movimiento contamos con una matriz de giro, la cual nos indica la nueva dirección de movimiento en base a la dirección original y el tipo de elemento visitado con dicha dirección. Dicho algoritmo se resume en que:

- Si el vecino visitado es un elemento vacío: se invierte la dirección, dando la vuelta y volviendo al elemento de origen.
- Si el vecino visitado es un elemento lleno: se gira a la derecha, pasando al vecino situado a la derecha del elemento visitado visto desde la dirección original.

Este algoritmo nos permite simular la percolación en una cierta red bidimensional dado una cierta probabilidad p . Veamos como, para una malla de 10×10 , y con probabilidades $p = 0$ y $p = 1$ se obtienen las situaciones más extremas:

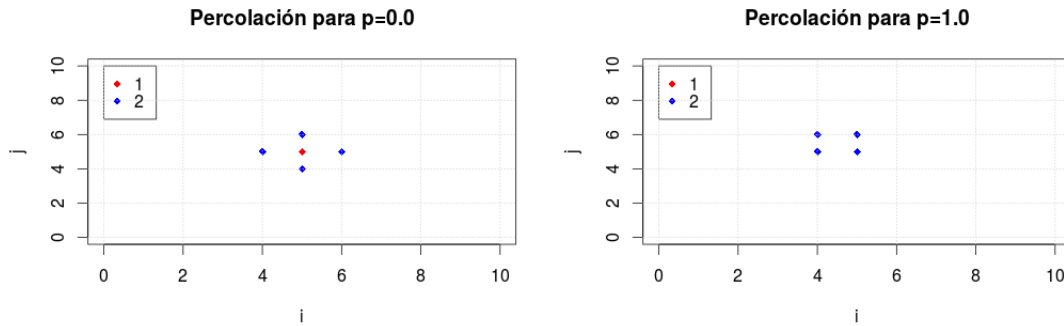


Figura 1: A la izquierda, representación de la percolación en el caso de una probabilidad $p = 0$ para una malla de 10×10 . A la derecha, representación de la percolación en el caso de una probabilidad $p = 1$ para una malla de 10×10 .

Vemos como en el caso de una probabilidad $p = 0$ siempre saldrá un 2, de modo que se produce una vuelta hacia el elemento anterior, donde girará a la derecha y se repetirá el proceso, de modo que viajará sólo en torno a 5 posiciones. Sin embargo, para el caso de una probabilidad $p = 1$ siempre saldrá un 1 y sólo se darán giros hacia la derecha, por lo que viajará sólo en torno a 4 posiciones.

Podemos hacer lo propio para una malla más grande, de 30×30 , y con unas probabilidades más intermedias, como, por ejemplo, $p = 0,55$ y $p = 0,70$. En tal caso obtenemos los siguientes resultados:

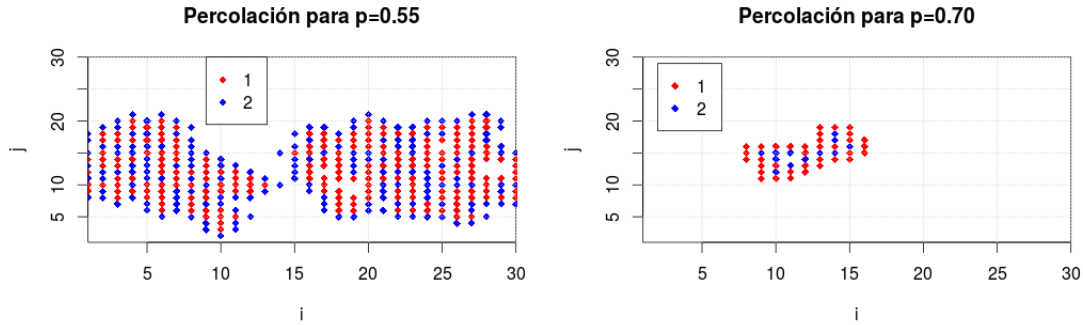


Figura 2: A la izquierda, representación de la percolación en el caso de una probabilidad $p = 0,55$ para una malla de 30×30 . A la derecha, representación de la percolación en el caso de una probabilidad $p = 0,70$ para una malla de 30×30 .

Como podemos apreciar, en probabilidades intermedias hay alternancia entre giros a derecha y vueltas atrás, de modo que las longitudes de los caminos realizados tienen un mayor recorrido. Además, podemos destacar como en el primero de los recorridos se aprecian las condiciones periódicas impuestas en el algoritmo.

Podemos comprobar, por tanto, como la longitud de los caminos está relacionada con la probabilidad p impuesta para asignar que los sitios están llenos o vacíos. Para ello, podemos hacer un primer uso del programa [profractal-pjla.f](#), en el cual se realiza un barrido entre los posibles valores de la probabilidad p , con un total de $N_p = 2000$ pasos. Así pues, podemos calcular la longitud de los caminos en base a un cierto número de simulaciones $N_{sim} = 10000$ para los distintos valores de p y hacer una media de los resultados obtenidos para dichas historias.

A continuación, se muestra la representación gráfica de la longitud media de las trayectorias en función del valor de la probabilidad p impuesta para redes bidimensionales de unos tamaños de $50 \times 50, 100 \times 100, 200 \times 200$ y 300×300 :

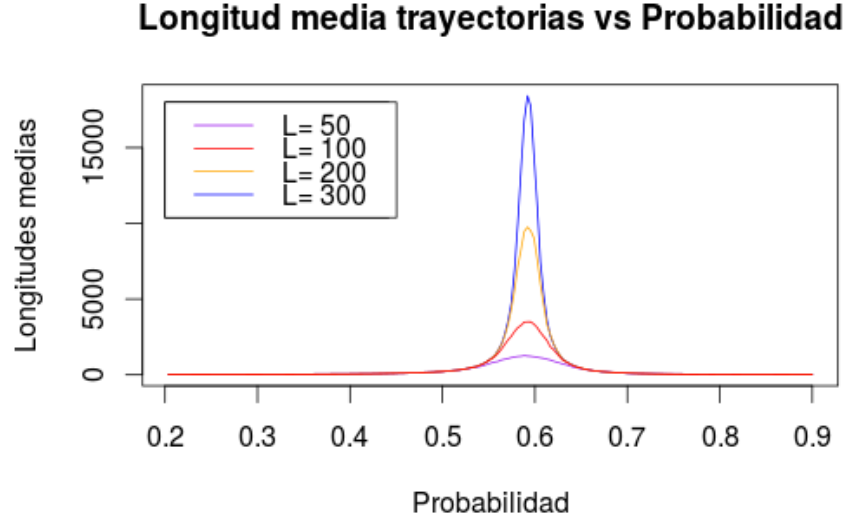


Figura 3: Representación de la longitud media de todas las trayectorias en función de la probabilidad para unas mallas de tamaños 50×50 , 100×100 , 200×200 y 300×300 .

Se puede apreciar para todos los tamaños como la longitud media de las trayectorias es muy reducida para los valores extremos pero, para aquellos cercanos a la probabilidad crítica p_c , aumenta notablemente. Como se ha comentado anteriormente, ello es resultado de que en el caso crítico la longitud media de las islas abarca todos los tamaños posibles. Así, podemos apreciar como a medida que mayor es el tamaño de la red, más se acentúa dicho comportamiento, de modo que que el pico en la probabilidad crítica se hace más agudo. Además, podemos ver como el número de pasos realizado aumenta a medida que mayor es el tamaño de la red bidimensional.

2.2. Búsqueda de la probabilidad crítica de percolación

Siguiendo con el mismo algoritmo, procedemos a buscar la probabilidad crítica mediante métodos estadísticos. Para ello, procedemos de nuevo a ejecutar el programa `probfractal-pjla.f`, el cual hace un barrido de los distintos valores de la probabilidad, con un total de $N_p = 2000$ pasos. De tal modo, contamos con un total de $N_{sim} = 10000$ simulaciones para cada valor de la probabilidad p y trabajamos en base a los resultados promediados para dichas simulaciones.

En este punto, hemos de realizar una clasificación de las simulaciones en función de si la trayectoria es cerrada a la derecha, cerrada a la izquierda o extendida. Para estudiar esto utilizaremos el siguiente algoritmo: Contamos con un contador, de modo que cuando la simulación numérica alcance un elemento lleno (1) en una cierta historia se añadirá un +1 a dicho contador, mientras que cuando se alcance un elemento vacío (2) añadirá un -2 a dicho contador. Es decir, el giro a la derecha equivale a un +1 y la vuelta hacia atrás equivale a un -2.

En este punto, es posible afirmar que, cuando vuelvan al elemento inicial de la red, el contador asociado a las trayectorias sólo podrá tener 3 valores:

- **0:** Trayectoria extendida.
- **+4:** Trayectoria cerrada a derechas.
- **-4:** Trayectoria cerrada a izquierdas.

En este punto, podemos obtener la probabilidad crítica obtenida en el proyecto anterior. Para ello tenemos dos procedimientos para los cuales nos centraremos en el intervalo de probabilidades contenido en $[0,585, 0,6]$. No obstante, cabe destacar que, para descartar las trayectorias más lejanas de la transición de fase, en ambos casos se considerarán sólo aquellas cuya longitud sea mayor a un total de 100 pasos.

Por un lado, podemos estudiar la distribución del número medio de trayectorias destróginas y levóginas frente a la probabilidad, de modo que para encontrar la probabilidad crítica se ha de encontrar el valor de la probabilidad para el cual dichas magnitudes se igualan.

A continuación, se muestra la representación gráfica del número medio de trayectorias destróginas y levóginas en función del valor de la probabilidad p impuesta para el caso de una red bidimensional de 50×50 , 100×100 , 200×200 y 300×300 :

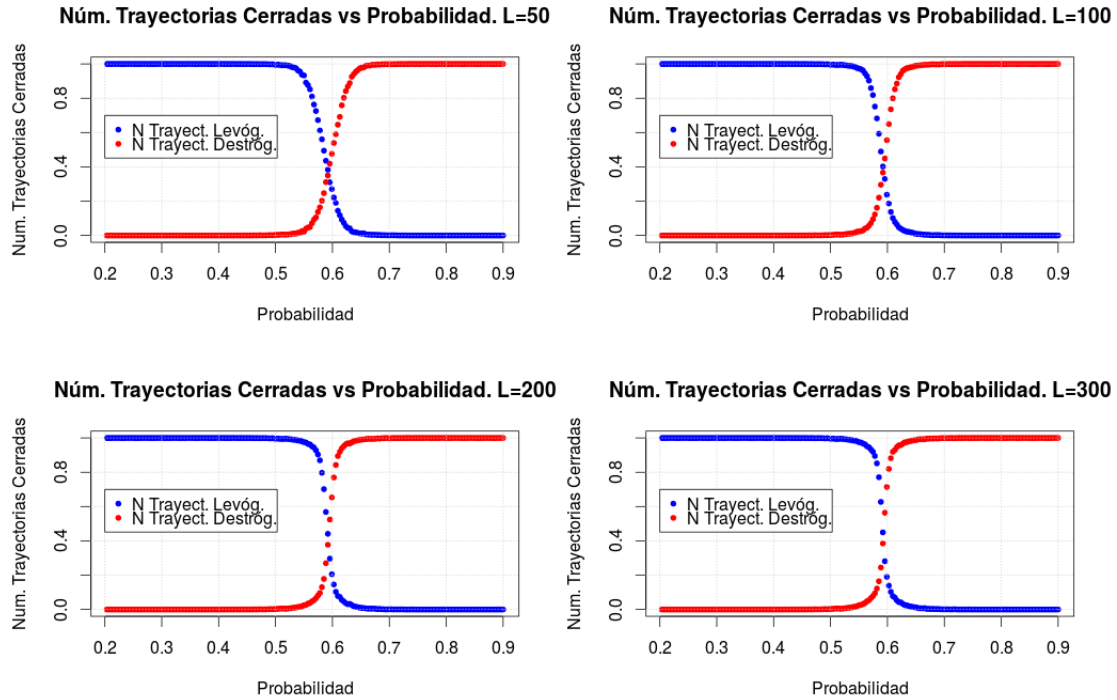


Figura 4: Representación del número medio de trayectorias cerradas a izquierda y a derecha obtenidas en función de la probabilidad para unas mallas de tamaños 50×50 , 100×100 , 200×200 y 300×300 .

Vemos como, independientemente del tamaño de la red bidimensional, el número de trayectorias cerradas a izquierdas es máximo para las probabilidades más reducidas, lo que indica que únicamente se dan trayectorias cerradas a izquierdas, y que, cerca de la probabilidad crítica, comienza a decrecer bruscamente, hasta que se hace nulo, de modo que pasa a no haber ninguna trayectorias cerrada a izquierdas. Por su parte, podemos apreciar como para el caso del número de trayectorias cerradas a derechas tenemos un comportamiento totalmente opuesto.

Cabe destacar que tanto el decrecimiento para trayectorias cerradas a izquierdas como el crecimiento para trayectorias cerradas a derechas se produce cerca de la probabilidad crítica de forma muy brusca y de un modo que nos recuerda a un cambio lineal. Por tanto, podemos hacer un análisis más exhaustivo de los puntos situados en dicho intervalo y, en base a un ajuste lineal de los mismos, obtener cómo crecen/decrecen las curvas.

Así pues, podremos buscar el punto de corte entre ambas y obtener la probabilidad asociada a dicho punto de corte, que será la probabilidad crítica. Para ello, podemos utilizar ambas ecuaciones de la recta y despejar el valor de la probabilidad en el que tiene lugar el punto de corte:

$$\begin{aligned} L_l &= a_l \cdot p + b_l \\ L_r &= a_r \cdot p + b_r \end{aligned} \Rightarrow a_l \cdot p + b_l = a_r \cdot p + b_r \Rightarrow p = \frac{b_l - b_r}{a_r - a_l}$$

Por su parte, el error asociado a nuestra medida vendrá dado por propagación de errores de la función anterior:

$$\Delta p = \left| \frac{1}{a_r - a_l} \right| \Delta b_l + \left| \frac{-1}{a_r - a_l} \right| \Delta b_r + \left| \frac{b_r - b_l}{(a_r - a_l)^2} \right| \Delta a_l + \left| \frac{b_l - b_r}{(a_r - a_l)^2} \right| \Delta a_r$$

De tal modo, es posible realizar un ajuste lineal de las probabilidades críticas obtenidas para cada tamaño, teniendo en cuenta su error, y obtener la probabilidad crítica mediante una extrapolación buscando la intersección con el eje vertical. De tal modo, hemos utilizado un total de $N_{prob} = 50$ pasos para el barrido de probabilidades del intervalo $[0,585, 0,6]$.

Así pues, a continuación se muestra la representación gráfica de la probabilidad crítica en función de la inversa del tamaño de la muestra elevado a la inversa del exponente crítico (calculado en el proyecto anterior como $\nu^{-1} = 0,75$) para los tamaños anteriormente tratados:

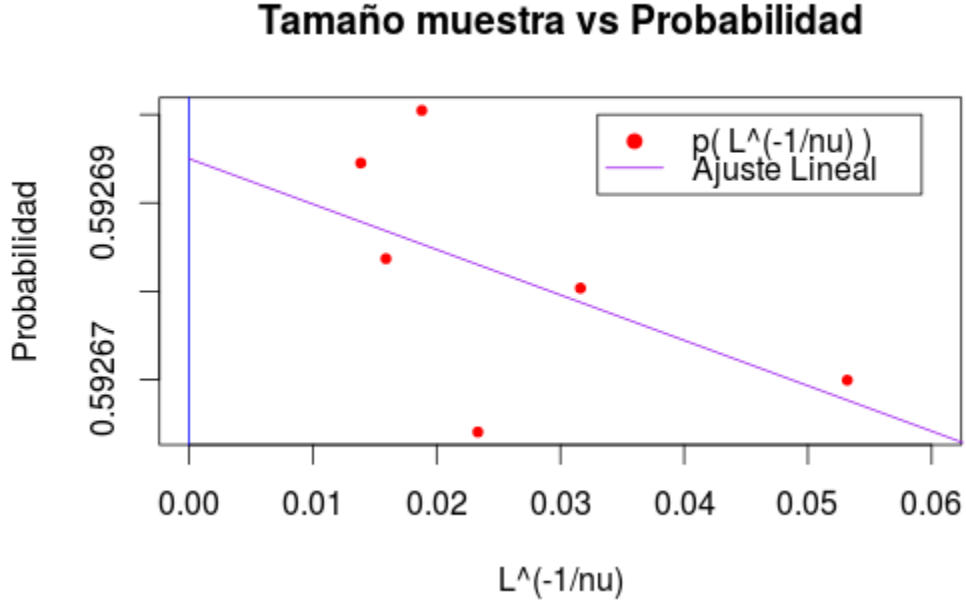


Figura 5: Representación gráfica de las probabilidad críticas obtenidas en función del tamaño de la red bidimensional elevado a la inversa del exponente crítico, $L^{-\frac{1}{\nu}}$.

Realizando la extrapolación con un nuevo ajuste lineal de los resultados obtenidos para las probabilidades críticas de cada tamaño obtenemos que la probabilidad crítica es:

$$p_c = 0,592695 \pm 0,000012$$

Por otro lado, podemos estudiar la distribución del número medio de trayectorias extendidas frente a la probabilidad, de modo que podemos obtener de forma aproximada la probabilidad crítica. Esta probabilidad se caracterizará por ser aquella para la que el número de trayectorias extendidas es el máximo posible. Este máximo ha sido calculado numéricamente utilizando el propio programa `probfactal-pjla.f`, el cual nos indica que en qué valor de la probabilidad se sitúa el máximo para cada tamaño.

Asímismo, cabe destacar que podemos situar nuestro criterio para el error asociado a las probabilidades obtenidas como la mitad del intervalo de muestro, aunque también es importante señalar que esto no influye en nuestro cálculo, puesto que será común para todos los valores de la probabilidad y, por tanto, todos tendrán el mismo peso a la hora de hacer el ajuste lineal.

A continuación, se muestra la representación gráfica del número medio de trayectorias extendidas en función del valor de la probabilidad p impuesta para los casos de una red bidimensional de tamaños 50×50 , 100×100 , 200×200 y 300×300 :

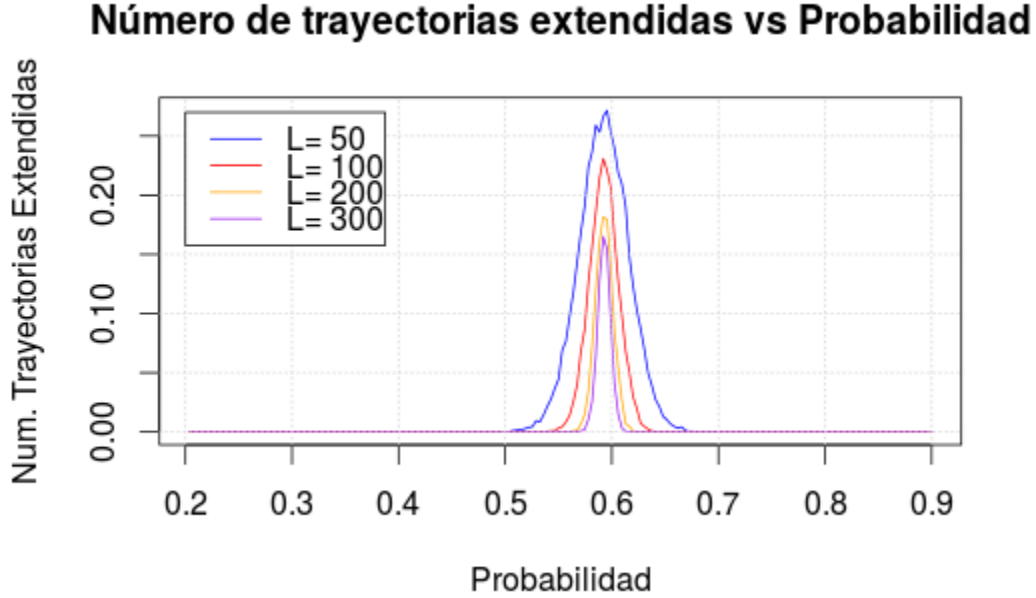


Figura 6: Representación del número medio de trayectorias extendidas obtenidas en función de la probabilidad para unas mallas de tamaños 50×50 , 100×100 , 200×200 y 300×300 .

Así pues, vemos como aparece un máximo para el número de trayectorias extendidas en torno al 0.59, de modo que es en este máximo donde se sitúa la probabilidad crítica que buscamos. Así pues, si hacemos un ajuste lineal de los resultados obtenidos, podemos obtener el valor de la probabilidad crítica mediante una extrapolación buscando la intersección con el eje vertical.

Por tanto, a continuación se representan los resultados obtenidos en nuestro programa de Fortran para la probabilidad crítica en función de la inversa del tamaño de la red bidimensional elevado a la inversa del exponente crítico, utilizando unas mallas de tamaños 50×50 , 100×100 , 150×150 , 200×200 , 250×250 y 300×300 :

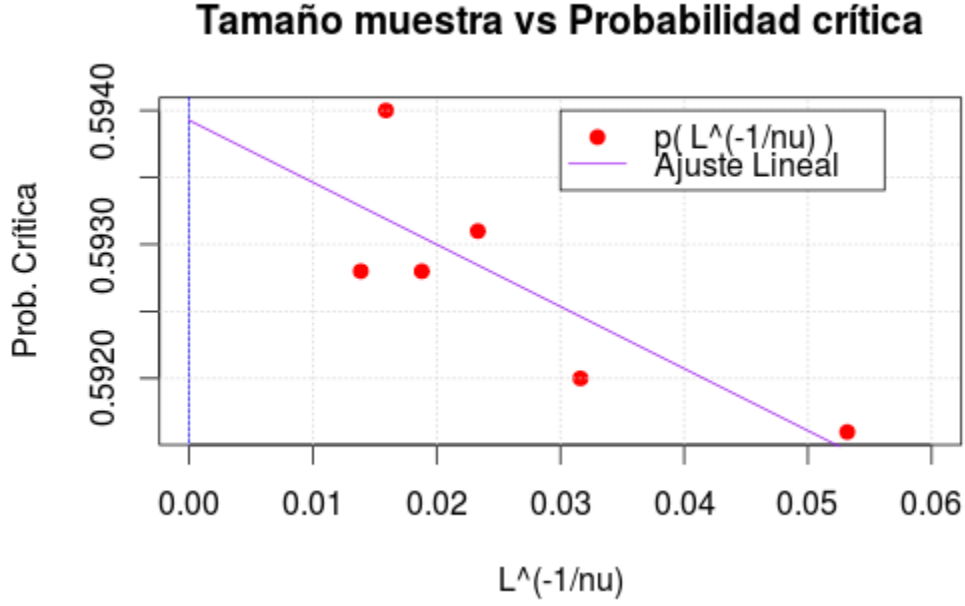


Figura 7: Representación del valor obtenido mediante la simulación para la probabilidad crítica en función el tamaño de la red bidimensional.

De tal modo, mediante el procedimiento descrito obtenemos una probabilidad crítica es:

$$p_c = 0,5939 \pm 0,0005$$

Vemos como es un valor muy cercano al real, aunque cabe destacar que este método es menos fiable, ya que en nuestro análisis estadístico no hemos hecho uso de ningún tipo de errores.

2.3. Cálculo de la dimensión fractal

Procedemos ahora a calcular la dimensión fractal ejecutando el programa `dimfractal-pjla.f`, en el cual continuaremos utilizando el procedimiento anterior. Así pues, dada una red bidimensional de tamaño $L \times L$, establecemos como probabilidad p a la probabilidad crítica obtenida en el proyecto anterior ($p_c = 0,5927$), ya que la naturaleza fractal aparece en el sistema justo en la transición de fase.

Así, nuestro objetivo consiste en calcular el número de pasos para las trayectorias extendidas (es decir, aquellas cuyo contador total daba un 0) dado un total de $N_{sim} = 10000$ historias. Nuevamente cabe destacar que, para descartar las trayectorias más lejanas de la transición de fase, en ambos casos se considerarán sólo aquellas cuya longitud sea mayor a un total de 100 pasos. A modo de comprobación, en los archivos `fractal-extendways-xxx.dat` se pueden apreciar los resultados obtenidos para el contador y el número de pasos en cada una de las simulaciones realizadas.

De tal modo, calculamos el número medio de pasos de las trayectorias extendidas y, puesto que éste se relaciona con el tamaño del sistema como una ley de potencias, del tipo:

$$N \propto L^{d_F}$$

De tal modo, podemos linealizar dicha ecuación y tratar de obtener mediante un ajuste lineal el factor de proporcionalidad entre los logaritmos de ambas magnitudes, el cual será la dimensión fractal. Dicha linealización nos deja una relación del tipo:

$$\ln(N) \propto d_F \ln(L)$$

A continuación, se muestra la representación gráfica del tamaño del sistema frente al número medio de pasos de las trayectorias extendidas, lo cual se ha simulado para tamaños de la red bidimensional de 50×50 , 100×100 , 150×150 , 200×200 , 250×250 , 300×300 , 400×400 y 500×500 :

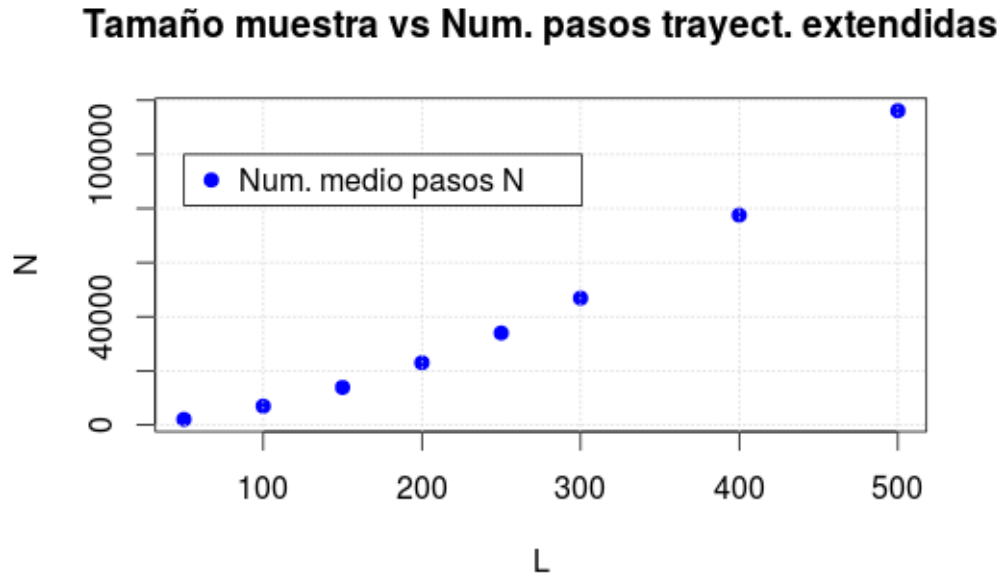


Figura 8: Representación gráfica del número medio de pasos de las trayectorias extendidas frente al tamaño del sistema.

Y, a continuación, se muestra la representación de la relación del logaritmo del tamaño del sistema frente al logaritmo del número medio de pasos de las trayectorias extendidas para tamaños de la red bidimensional de 50×50 , 100×100 , 150×150 , 200×200 , 250×250 , 300×300 , 400×400 y 500×500 :

Tamaño muestra vs Num. pasos trayect. extendidas

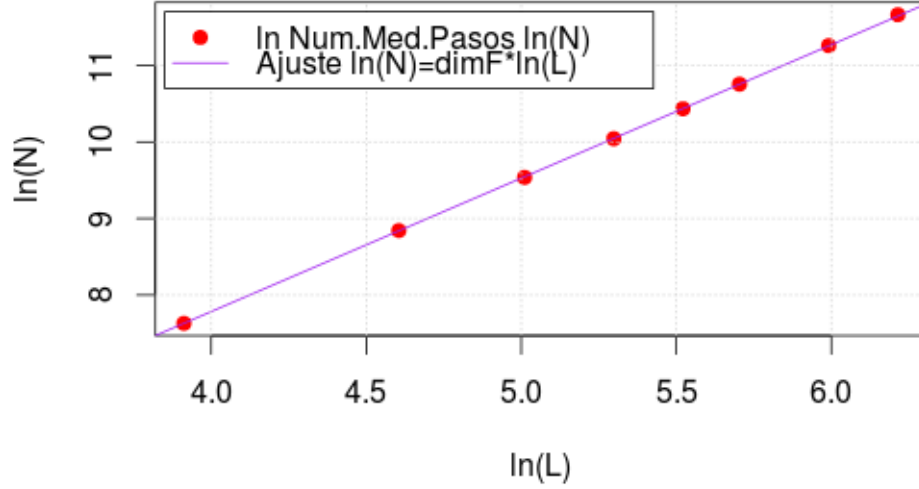


Figura 9: Representación gráfica del logaritmo del número medio de pasos de las trayectorias extendidas frente al logaritmo del tamaño del sistema, con su correspondiente ajuste lineal.

Así pues, la pendiente obtenida en el ajuste lineal de los logaritmos nos indica la dimensión fractal o de Hausdorff:

$$d_F = 1,743 \pm 0,002$$

Vemos como el valor obtenido es muy cercano al teórico de $d_{F,teo} = 1,75$ y con un error reducido, por lo que podemos decir que nuestros resultados son bastante buenos.

3. Conclusiones

En conclusión, en este trabajo hemos sido capaces utilizar la percolación y métodos estadísticos para poder calcular las magnitudes características de nuestro sistema. Así pues, hemos obtenido la probabilidad crítica con una precisión bastante buena y muy cercana al valor que se nos indica en la bibliografía y una dimensión fractal muy cercana al valor real.