

Simulación en Física: Percolación y transición de fase.

Pedro Jesús López Abenza

1. Introducción al problema

La percolación consiste en el proceso físico del paso o filtración de una sustancia a través de un espacio o medio poroso. Es un fenómeno de gran importancia en física, puesto que puede ser estudiado como un problema geométrico y empleado en el estudio de cambios de fase de sistemas físicos. De tal modo, esta percolación está íntimamente relacionada con conceptos fundamentales como fractales e invariancia de escala y constituye una buena prueba para estudiar técnicas numéricas a utilizar en el estudio de transiciones de fase de gran complicación, como por ejemplo puede ser el caso del grupo de renormalización.

Así pues, en este proyecto se analizará la percolación de sitios, de forma que realizaremos un estudio de la probabilidad de que exista un camino conexo entre dos extremos dentro de un conjunto de elementos distribuidos de forma aleatoria. Para ello, en nuestro problema se realizará nuestro estudio de la percolación suponiendo una red o malla en la que se comienza por un extremo con una percolación total y a partir de la cual el fenómeno se va extendiendo o no a los sitios vecinos. Estos sitios presentan una probabilidad p de estar ocupado y una probabilidad $(1-p)$ de estar vacío.

Surgen así agrupaciones de sitios ocupados con determinadas formas, de forma que el objetivo es encontrar un camino conexo entre los dos extremos de la malla compuesto sólo por sitios ocupados, obteniendo así la percolación. Definimos así una probabilidad de percolación en la malla, P , la cual será mayor a medida que aumente la probabilidad de ocupación p . De tal modo, nuestra simulación consistirá en reproducir la propagación de un fuego de árbol en árbol, suponiendo que cada elemento de nuestra malla es un árbol y que cada uno de ellos interacciona con sus vecinos más inmediatos. Así pues, realizaremos nuestro cálculo numérico recorriendo nuestra matriz y lanzando números aleatorios para los elementos de esta que cumplan la condición de ser vecino de otro árbol quemado.

Existe un umbral crítico de percolación al que le corresponde una probabilidad crítica de percolación p_c , de modo que para $p > p_c$ es posible asegurar que existirá al menos un camino de nodos interconectados que se extiende por la red. Cabe destacar que la percolación posee dos magnitudes características fundamentales. Una de ellas es la ya mencionada probabilidad crítica de percolación, p_c , y la otra será el exponente crítico, relacionado con la longitud de localización y que determina si existe un proceso de cambio de fase geométrico.

2. Cálculo numérico y simulación

2.1. Simulación numérica de la percolación

Como se ha comentado, realizaremos como ejemplo de problema de percolación el estudio de la propagación de un fuego en un bosque mediante cálculos numéricos. Así pues, en nuestro programa `percola-pjla.f` hemos simulado numéricamente el problema mediante una matriz 10×10 de que simula nuestra malla. Así, hemos utilizado el criterio convencional estipulado en clase: 1 significa árbol que arde, 2 significa árbol que nunca arde, 3 significa árbol que ha ardido y 4 que hace referencia a la última columna.

De tal modo, partiendo de una matriz de ceros salvo en su primera columna (que será todo 1) y la última (que será todo 4), se ha reproducido la evolución del frente activo, buscando todos los elementos de la matriz con un 1 asignado y sorteando lo que ocurrirá en sus vecinos con un 0 asociado. Así, una vez se ha realizado el análisis en torno a los vecinos de un cierto fuego activo, este pasa a ser un fuego extinto, de forma que el 1 se convierte en un 0.

Este proceso se repite hasta que no queden fuegos activos o se llegue a un 4, lo cual significará que la percolación se ha producido y el frente activo ha llegado al otro extremo de la malla. Es importante señalar que se realizan varios barridos de la matriz para así buscar todos los 1 (es decir, todos los fuegos activos) que nos hayan quedado, para lo cual contamos con una *bandera*, que nos permite seguir ejecutando el bucle de barrido de la matriz mientras que en ella existan fuegos activos. Asimismo, cabe destacar que existen condiciones periódicas en el eje vertical, de forma que tendremos que el primer sitio de una columna será el vecino del último.

Así pues, a continuación se muestra en forma de matriz el resultado obtenido para una de las simulaciones del proceso de percolación en la cual se ha obtenido la percolación y otra en la cual no ha logrado percolar para el caso de una red bidimensional de tamaño 10×10 . Cabe destacar que los cuadrados grises hacen referencia a los 0 de nuestro criterio; los cuadrados negros hacen referencia a los 2; los círculos rojos hacen referencia a los 3 y los triángulos rojos hacen referencia a los 4. Así, se pueden apreciar en rojo los posibles caminos de percolación:



Figura 1: A la izquierda, representación de la percolación en el caso de una probabilidad $p = 0,5$. A la derecha, representación de la percolación en el caso de una probabilidad $p = 0,65$.

Vemos como el caso de $p = 0,65$ presenta percolación, de forma que siguiendo las islas rojas se puede pasar de un extremo a otro, mientras que en el caso de $p = 0,5$ no existe percolación, de modo que el fuego se extingue.

2.2. Búsqueda del exponente crítico de percolación

Siguiendo el mismo procedimiento anteriormente descrito, podemos realizar un barrido de los distintos valores para la probabilidad de ocupación y estudiar cómo evoluciona la probabilidad de percolación. Esta probabilidad de percolación se define como el cociente entre el número de simulaciones que consiguen percolar frente al total de las realizadas:

$$P_{perc} = \frac{N_{perc}}{N_{sim}}$$

Por su parte, la desviación típica vendrá dada como:

$$\sigma = \sqrt{\frac{p(1-p)}{N_{sim}}}$$

Así pues, podemos realizar el cálculo numérico de esta probabilidad de percolación mediante el programa `probpercol-pjla.f`, en el cual realizamos el cálculo para distintos valores de la probabilidad de ocupación, desde 0 hasta 1, con un total de $N_{pasos} = 50$ pasos. Así pues, realizamos para cada probabilidad de ocupación un total de $N_{sim} = 10000$ simulaciones, con un mallado de 10×10 .

A continuación se muestra la representación gráfica de la probabilidad de percolación en función de la probabilidad de ocupación definida para el caso 10×10 , con sus correspondientes barras de error:

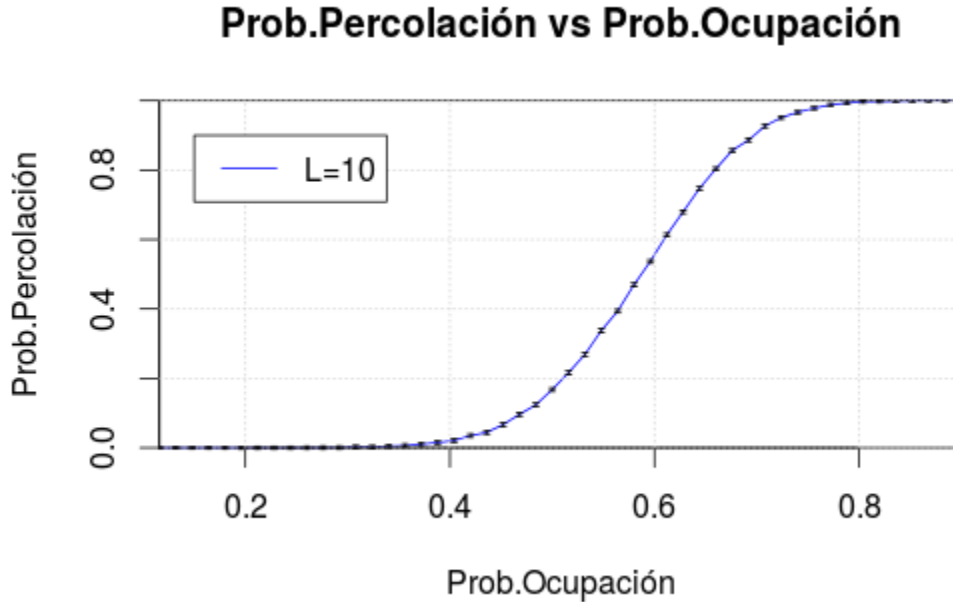


Figura 2: Representación gráfica de la probabilidad de percolación en función de la probabilidad de ocupación para el caso de una red bidimensional de tamaño 10×10 .

Vemos como obtenemos la forma adecuada, de manera que la probabilidad de percolación va creciendo a medida que aumentamos la probabilidad de ocupación. Así, podemos apreciar como en un valor de la probabilidad de ocupación cercano a 0,59, la probabilidad de percolación se dispara.

A continuación, realizamos el mismo cálculo numérico con las mismas cantidades definidas anteriormente ($N_{pasos} = 50$, $N_{sim} = 10000$) para distintos mallados de mayor tamaño al anterior. Así, lo haremos para varios mallados de distintos tamaños desde 20×20 a 80×80 . De tal modo, a continuación se muestra la representación gráfica de las 7 curvas obtenidas para la probabilidad de percolación en función de la probabilidad de ocupación:

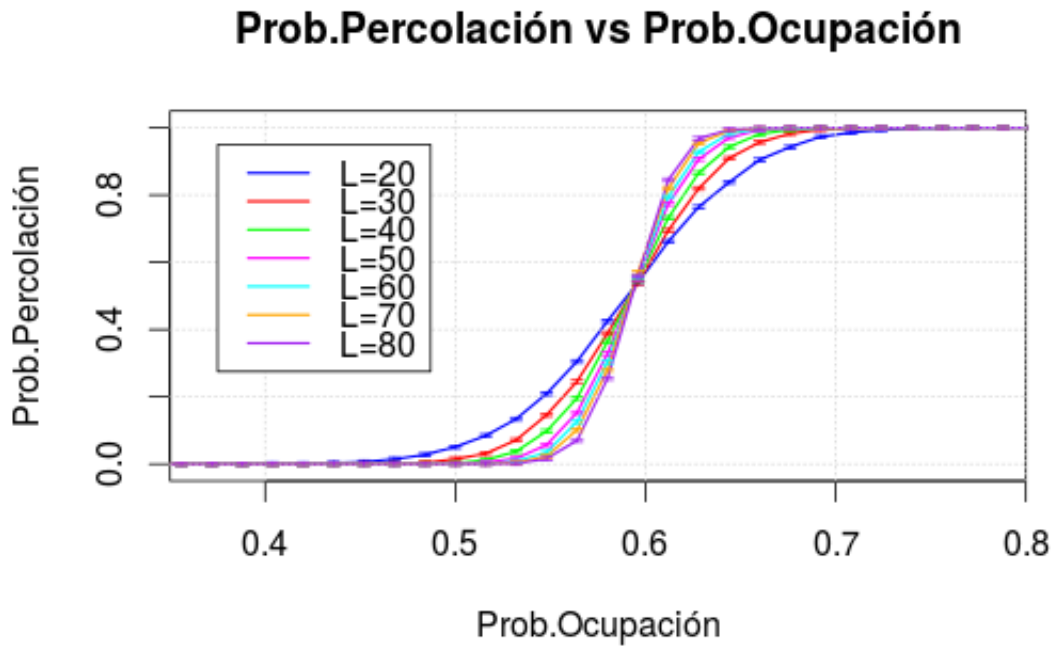


Figura 3: Representación gráfica de la probabilidad de percolación en función de la probabilidad de ocupación para el caso de una red bidimensional de diversos tamaños.

Vemos como el comportamiento explicado anteriormente para la curva del caso de 10×10 se acentúa a medida que aumenta el tamaño de la red, hasta el punto que el crecimiento de la probabilidad se produce de una forma mucho más abrupta.

Podemos centrarnos en la zona central en la cual se presenta el corte entre gráficas, puesto que en dicha zona podemos hacer un estudio del aumento como un crecimiento lineal. Así pues, hemos optado por realizar la representación en el intervalo de valores de la probabilidad de ocupación de $[0,585, 0,6]$, haciendo uso de $N_{pasos} = 10$ pasos y con un total de $N_{sim} = 10000$ simulaciones para cada uno de estos pasos. Así, lo haremos para mallados de todos tamaños desde 10×10 a 80×80 .

De tal modo, la representación gráfica de la probabilidad de percolación en función de la probabilidad de ocupación en dicho intervalo es la siguiente:

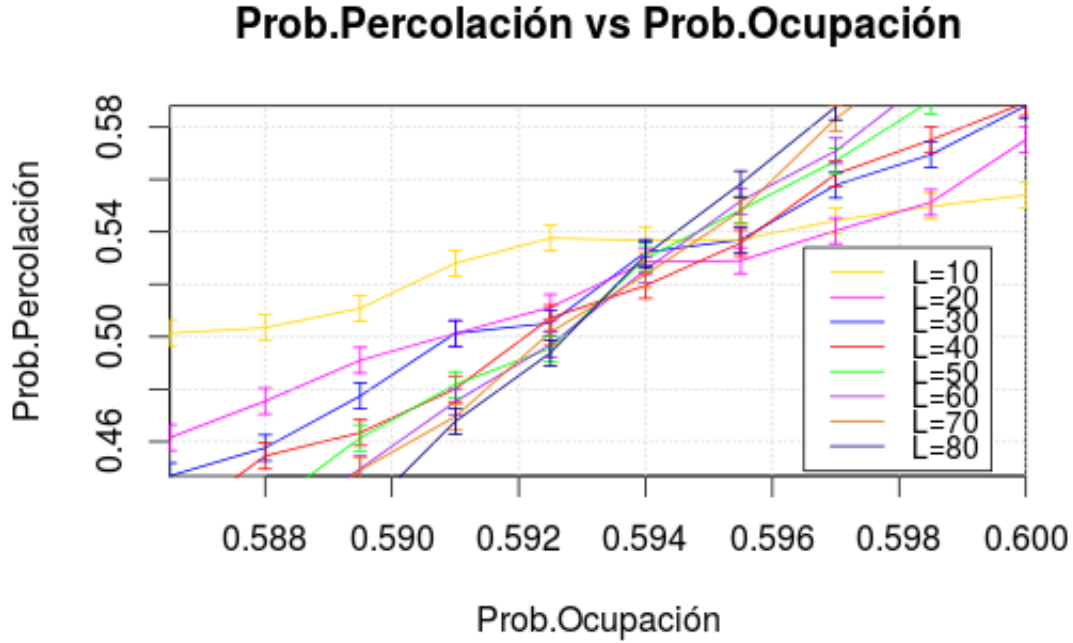


Figura 4: Representación gráfica de la probabilidad de percolación en función de la probabilidad de ocupación para el caso de una red bidimensional de diversos tamaños en el intervalo de valores de la probabilidad de ocupación de $[0.585, 0.6]$.

Puesto que, como podemos apreciar, en dicha zona nuestras gráficas presentan un comportamiento lineal, optamos por realizar un ajuste lineal de varias de las rectas ajustadas obtenidas anteriormente. Así, estas pendientes satisfacen la ecuación $b = a \cdot L^{1/\nu}$, donde b es la pendiente obtenida en el ajuste lineal y ν es el exponente crítico que buscamos calcular.

Para obtener el exponente crítico ν hemos de linealizar la ecuación, aplicando logaritmos y obteniendo una expresión del tipo $\ln(b) = \nu^{-1} \ln(L) + \ln(a)$. Así, volvemos a aplicar un ajuste lineal sobre los resultados obtenidos para las pendientes en función del tamaño. A continuación se muestra la representación gráfica de las pendientes obtenidas frente al tamaño de la red y sus correspondientes errores:

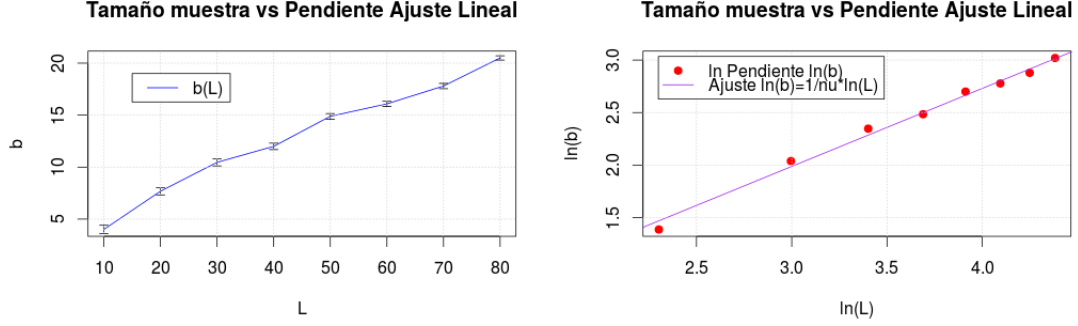


Figura 5: A la izquierda, la representación gráfica del tamaño de la red bidimensional frente a las pendientes obtenidas en el ajuste lineal realizado sobre los datos de la zona intermedia anterior y sus correspondientes errores del ajuste. A la derecha, la representación gráfica del logaritmo del tamaño de la red bidimensional frente al logaritmo de las pendientes obtenidas en el ajuste lineal realizado sobre los datos de la zona intermedia anterior.

De tal modo, el exponente crítico ν obtenido mediante dicho ajuste lineal será:

$$\nu^{-1} = 0,74 \pm 0,03$$

2.3. Búsqueda de la probabilidad crítica de percolación

Pasamos ahora a calcular la probabilidad crítica p_c , para lo cual buscamos el punto de corte entre dos rectas horizontales y las rectas obtenidas mediante el ajuste lineal de los datos obtenidos para los distintos tamaños en el intervalo de probabilidades de ocupación de $[0,585, 0,6]$. Así, estaremos buscando aquellas probabilidades de ocupación para las que la probabilidad de percolación es la misma, lo cual implica que el cociente de la longitud de correlación y el tamaño del sistema, $\frac{\xi}{L}$, también es constante.

Estas rectas horizontales han de estar situadas en puntos cercanos a corte, de manera que una debe estar sobre dicho punto y otra debajo de él. Así pues, hemos decidido situarlas en unas probabilidades de percolación de $P = 0,48$ y $P = 0,56$, de modo que procedemos a buscar las probabilidades de ocupación para las que nuestra recta horizontal intersecciona con rectas ajustadas, cuya forma nos es conocida, de forma que podemos obtener la probabilidad de ocupación p para la que interseccionan despejando de la ecuación general de la recta:

$$P = a_L \cdot p + b_L \Rightarrow p = \frac{P - b_L}{a_L}$$

Por su parte, el error asociado a cada probabilidad de ocupación, Δp vendrá dado por la propagación de errores como:

$$\Delta p = \left| \frac{\partial p}{\partial a_L} \right| \Delta a_L + \left| \frac{\partial p}{\partial b_L} \right| \Delta b_L + \left| \frac{\partial p}{\partial P} \right| \Delta P = \left| \frac{b_L - P}{a_L^2} \right| \Delta a_L + \left| \frac{-1}{a_L} \right| \Delta b_L$$

A continuación, se muestra la representación gráfica de la probabilidad de ocupación en función de la inversa del tamaño de la muestra elevado a la inversa del exponente crítico y los correspondientes errores de cada probabilidad de ocupación para los tamaños anteriormente tratados:

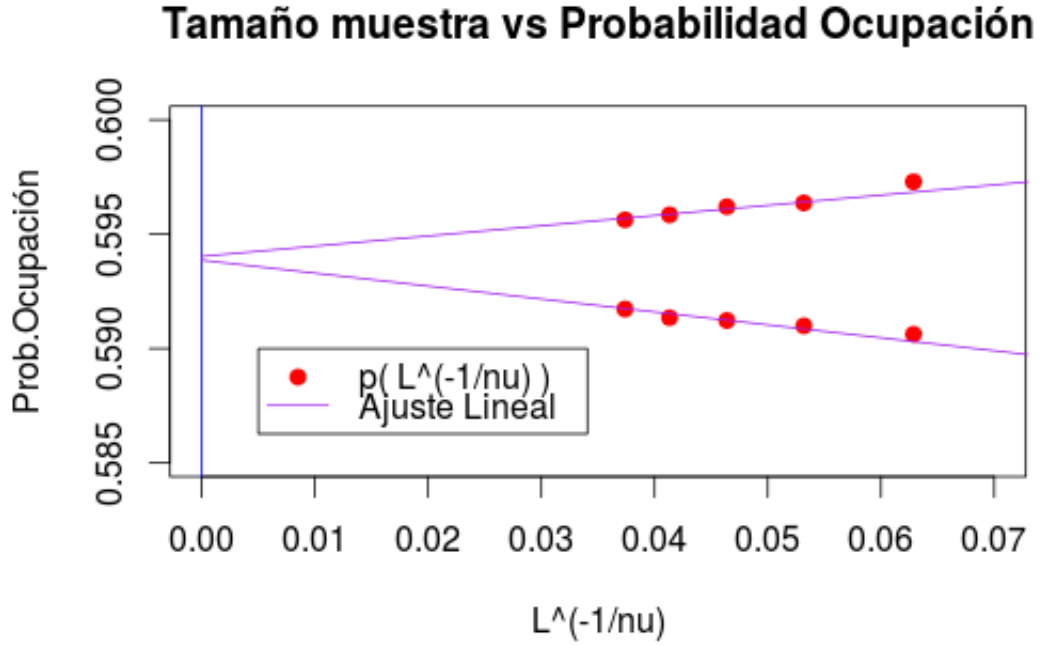


Figura 6: Representación gráfica de las probabilidades de ocupación obtenidas para una probabilidad de percolación constante ($P = 0,48$ y $P = 0,6$) en función de la inversa del tamaño de la red bidimensional elevado a la inversa del exponente crítico, $L^{-\frac{1}{\nu}}$.

Así pues, hemos de realizar una extrapolación con los resultados obtenidos, de modo que la probabilidad crítica vendrá dada por las ordenadas en el origen de nuestros ajustes lineales. Las probabilidades críticas obtenidas para los ajustes lineales realizados para obtener la probabilidad crítica en base a las probabilidades de ocupación asociadas a la probabilidad de percolación situada sobre el punto de corte y bajo el punto de corte son:

$$p_{c,sup} = 0,5940 \pm 0,0002 \quad p_{c,inf} = 0,5939 \pm 0,0003$$

Por tanto, tenemos dos valores para la probabilidad crítica y su respectivo error, de acuerdo a nuestros ajustes lineales. Calculamos el valor promedio y el error de la probabilidad crítica, los cuales vendrán dados por la siguiente relación entre valores y errores:

$$p_c = \frac{\frac{p_{c,sup}}{\Delta p_{c,sup}} + \frac{p_{c,inf}}{\Delta p_{c,inf}}}{\frac{1}{\Delta p_{c,sup}} + \frac{1}{\Delta p_{c,inf}}} \quad \Delta p_c = \left(\frac{1}{\Delta p_{c,sup}^2} + \frac{1}{\Delta p_{c,inf}^2} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

De tal modo, el resultado obtenido para la probabilidad crítica es:

$$p_c = 0,59396 \pm 0,00017$$

3. Conclusiones

En conclusión, en este trabajo se ha podido realizar un estudio de la simulación numérica del fenómeno de la percolación en una red bidimensional, de forma que se ha podido apreciar como dicha probabilidad de percolación varía con la probabilidad de ocupación. Así pues, mediante el uso de métodos estadísticos, hemos sido capaces de calcular numéricamente las magnitudes críticas, como la probabilidad de ocupación crítica, p_c y el exponente crítico, ν , las cuales se han obtenido con una precisión bastante aceptable.