Percolação

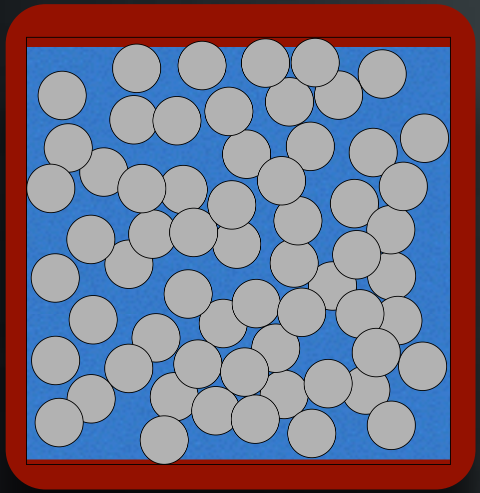
Métodos computacionais II
2015-2

Percolação

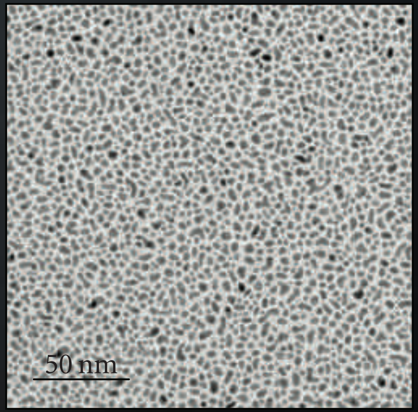
Problema matemático que requer apenas conhecimento de geometria e probabilidade

Ótima introdução a transições de fases , relações de escala e grupo de renomalização

Exemplos



- Pão de Queijo forno-de-minas na assadeira
- Se botarmos muitos eles grudam
- Podem formar pedaços maiores



- Partículas metálicas em uma matriz condutora
- Após uma determinada concentração, o sistema conduz

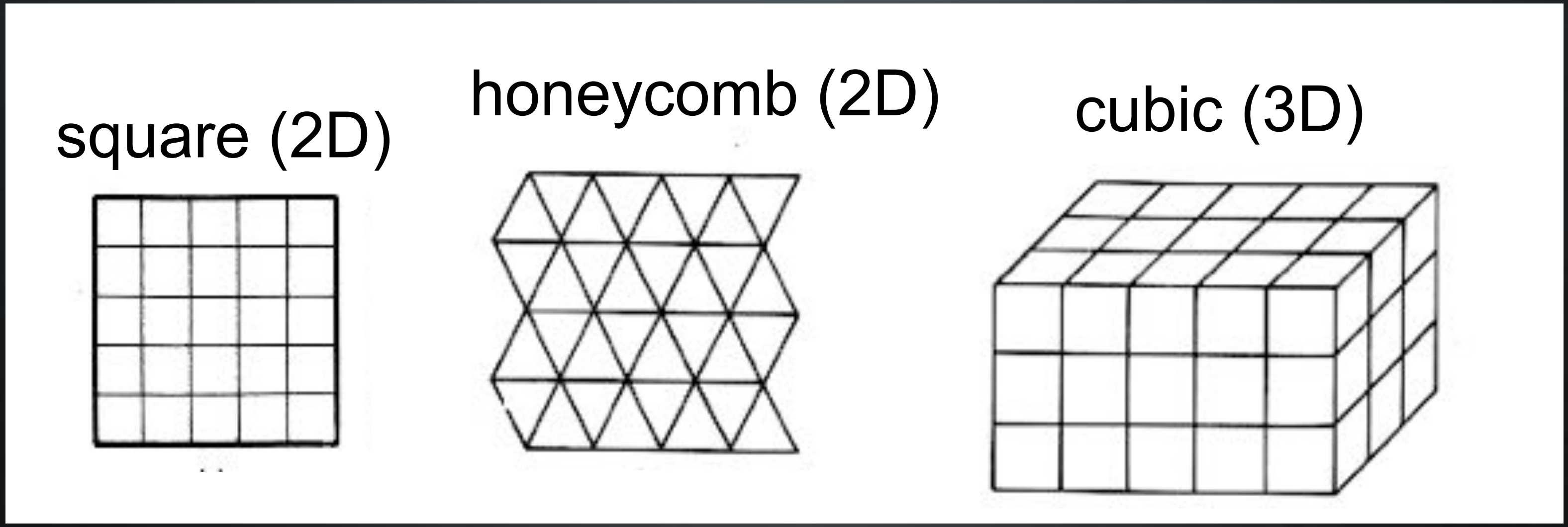
Percolação ➡ Conectividade

Transições de fase

- Mudança da fase de um sistema termodinâmico
- Transição é caracterizada por mudança abrupta em uma ou mais propriedades físicas (muitas vezes em função da temperatura)
    - Fases líquidas, sólidas e gasosas.
    - Diferentes propriedades magnéticas em transições magnéticas (ver modelo de Ising)
    - Condutividade em transições metal-isolante
- Exemplo de transição de fase de percolação
    - Transição de isolante para metal devido à percolação

Estudando percolação

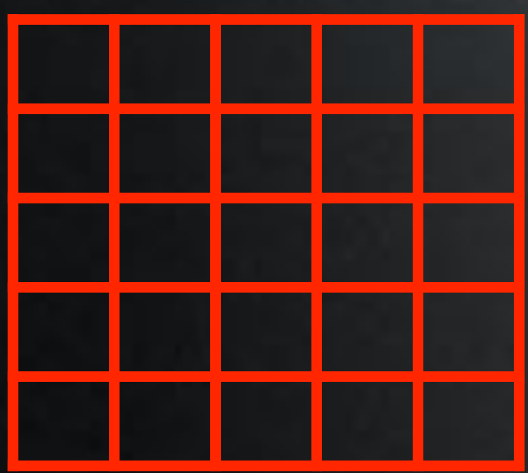
- Estudamos percolação em uma rede

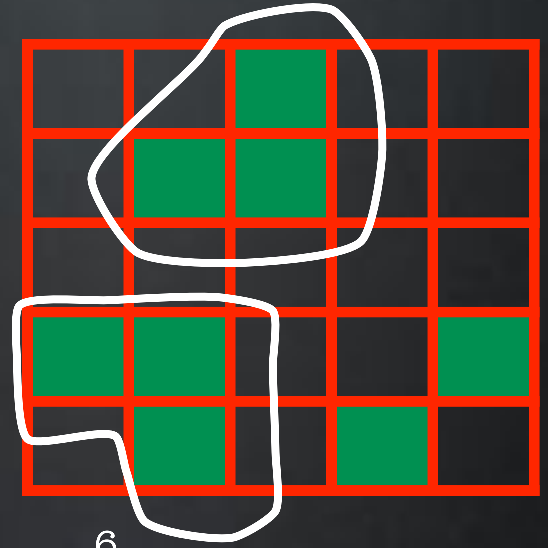


- Comportamento da percolação depende muito da dimensionalidade e pouco do tipo de rede

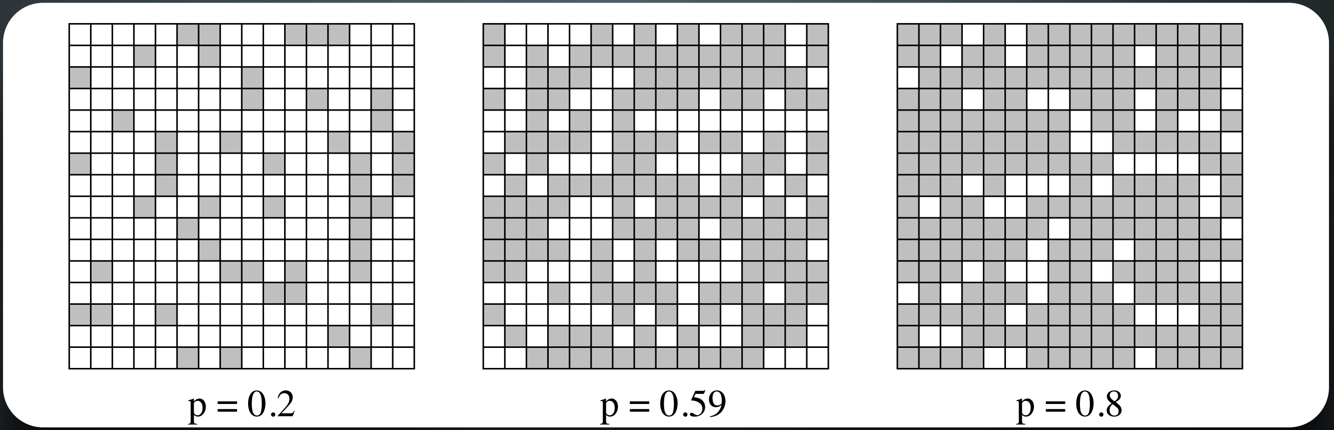
Procedimento

- Para cada sítio da rede, gerar um número aleatório r
    - $0 < r < 1$
- O sítio será ocupado se o número r satisfazer a condição $r \leq p$
    - p é um número fixo que define a probabilidade de ocupação dos sítios
- Sítios serão ocupados de forma aleatória





Propriedades dos Clusters



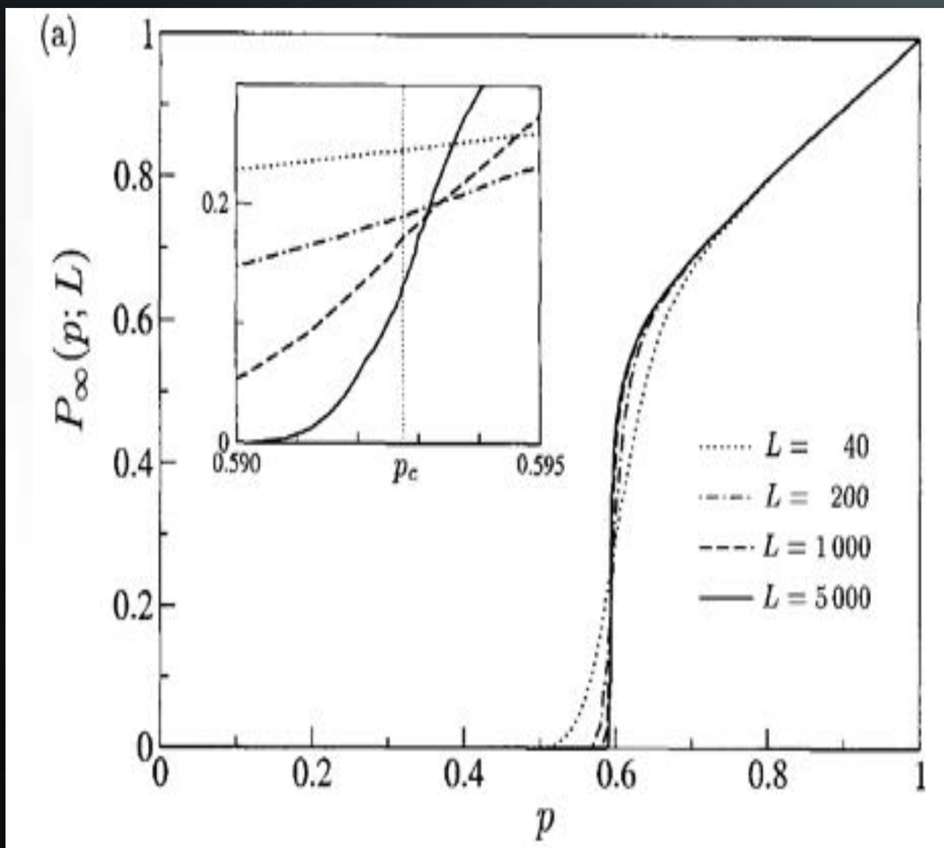
- Se p<<1, poucos sítios ocupados
  - apenas clusters isolados
- se p ≅ 1, quase toda a rede é ocupada
  - sítios formam grande cluster que atravessa a rede
    - “Spanning cluster”(SC) ou cluster de percolação

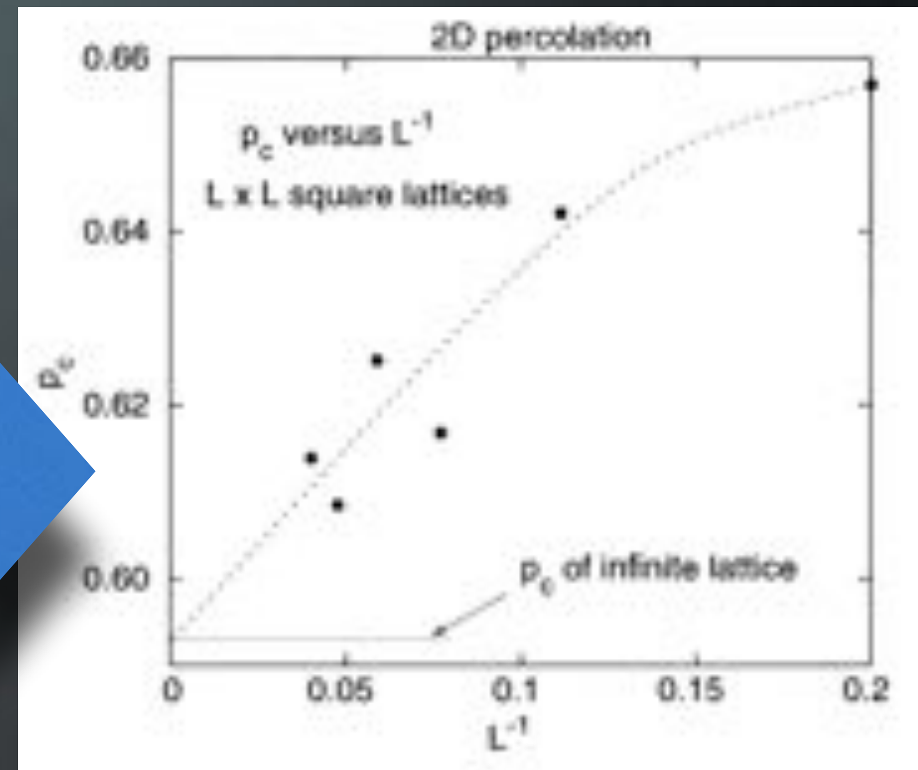
Transição de Percolação

- $p<p_c$ → Não há Spanning Cluster
- $p>p_c$ → Existe um Spanning Cluster
- Existência ou não de SC → Transição de fase de 2a ordem
    - É o Spanning Cluster que leva à transição metal isolante do exemplo!
- p_c é a probabilidade de ocupação dos sítios para qual aparece um SC na rede infinita
- Na rede finita há uma probabilidade finita de termos um SC para $p<p_c$

Percolação na rede finita

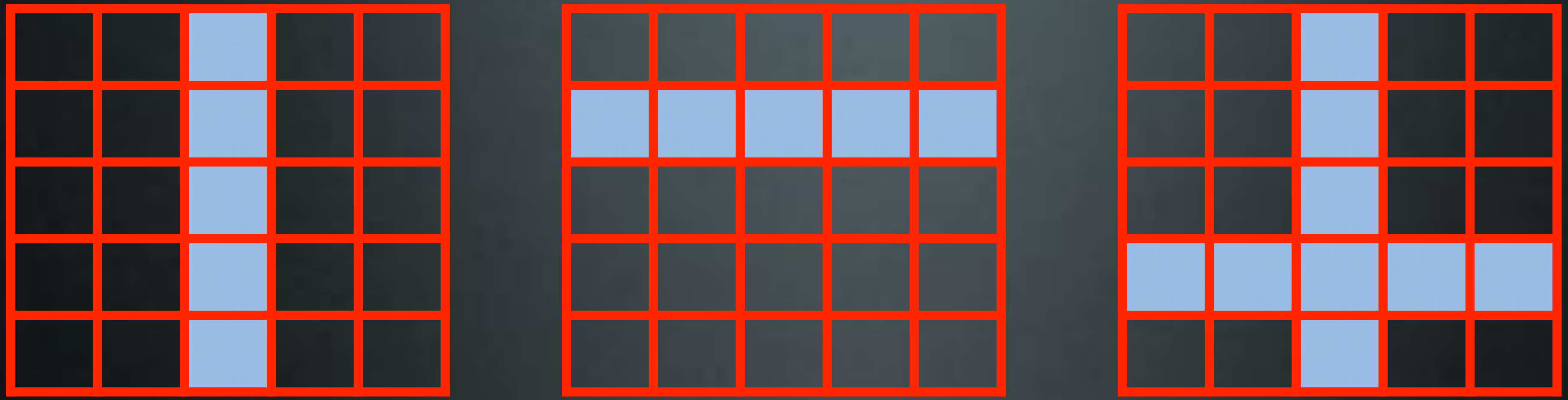
Prob. de aparecimento de um SC
numa rede finita





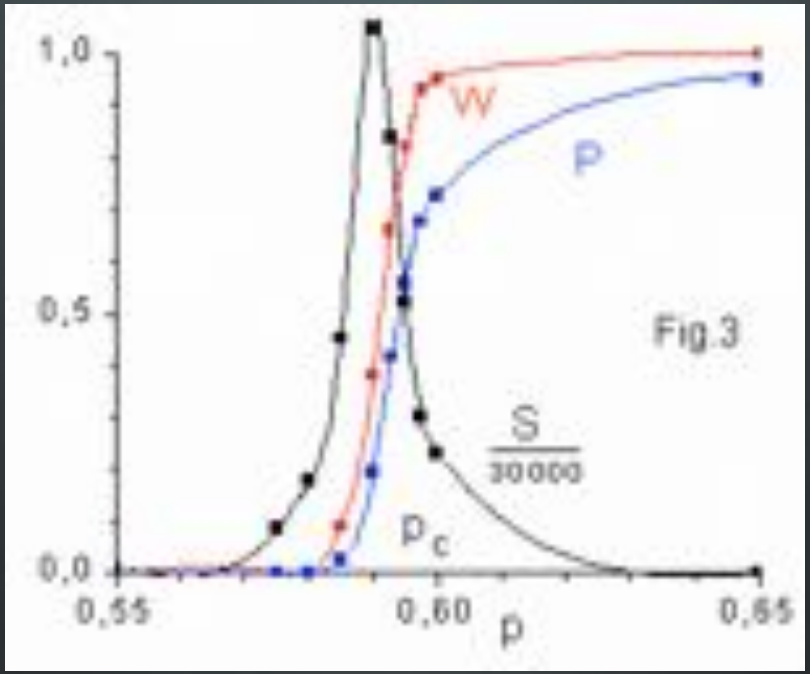
- Podemos calcular $p_c(L)$ e extrapolar resultado para L infinito
- Finite-size scaling

S. Cluster na rede finita



- Definição de S. Cluster é arbitrária
- $p_c(L)$ é valor médio de p para primeira vez que o SC aparece
- Qualquer critério leva ao mesmo valor de p_c ao extrapolarmos $p_c(L=\infty)$

Outras Quantidades



- W(p) é probabilidade de aparecimento de um spanning cluster em um sistema finito
- P(p) é a probabilidade de que um sítio pertença ao SC ou a densidade do SC, já que
  - P(p) = (num de sítios no SC)/ num de sítios ocupados

Criticalidade

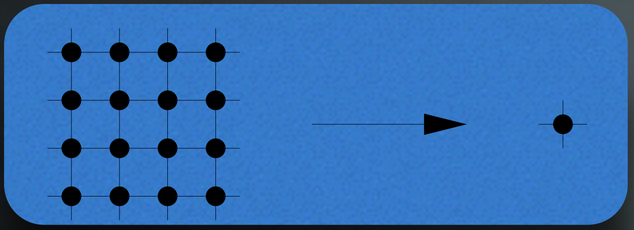
- P é parametro de ordem:
- $P \neq 0$ para $p > p_c$ e $P = 0$ para $p < p_c$
- Perto da transição.. $P(p) \propto (p - p_c)^{\beta}$
- Em $p = p_c$, S. Cluster é fractal já que densidade tende a zero quando L tende a infinito
- Transição de fase geométrica
- Com outras quantidades, podemos mostrar que

$$P(p) \propto L^{\beta/\nu}$$

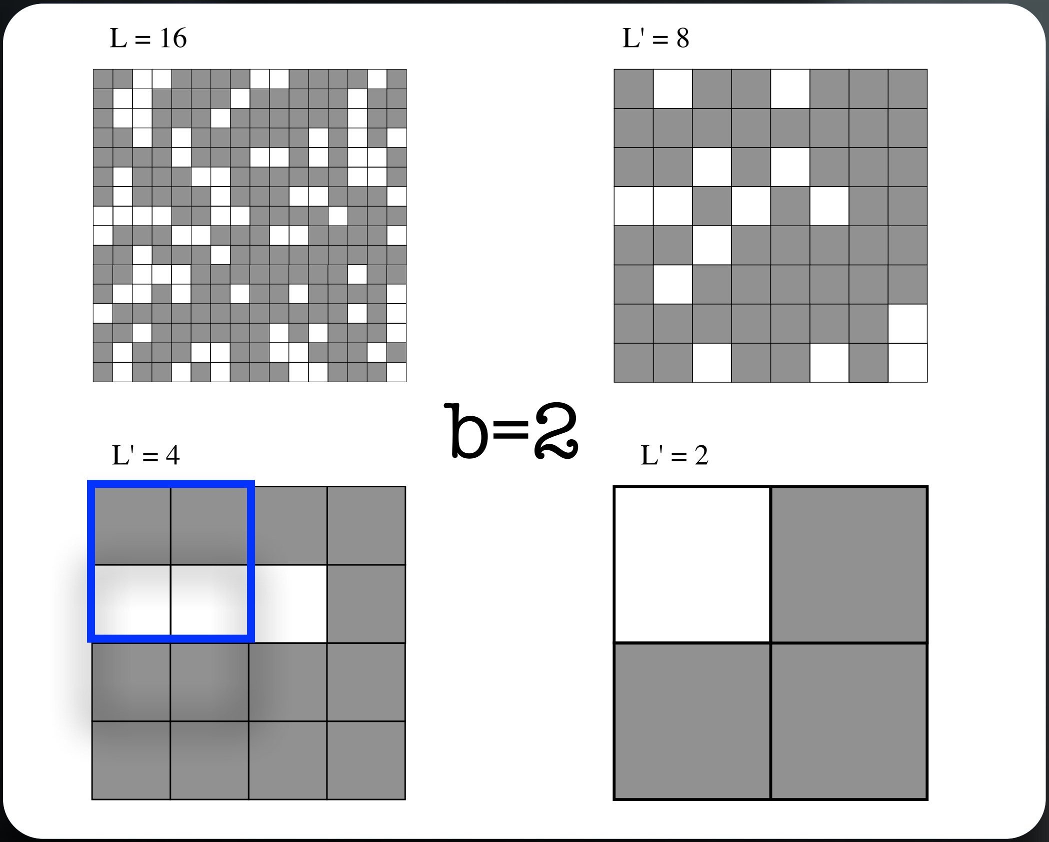
- Outro finite-size scaling!

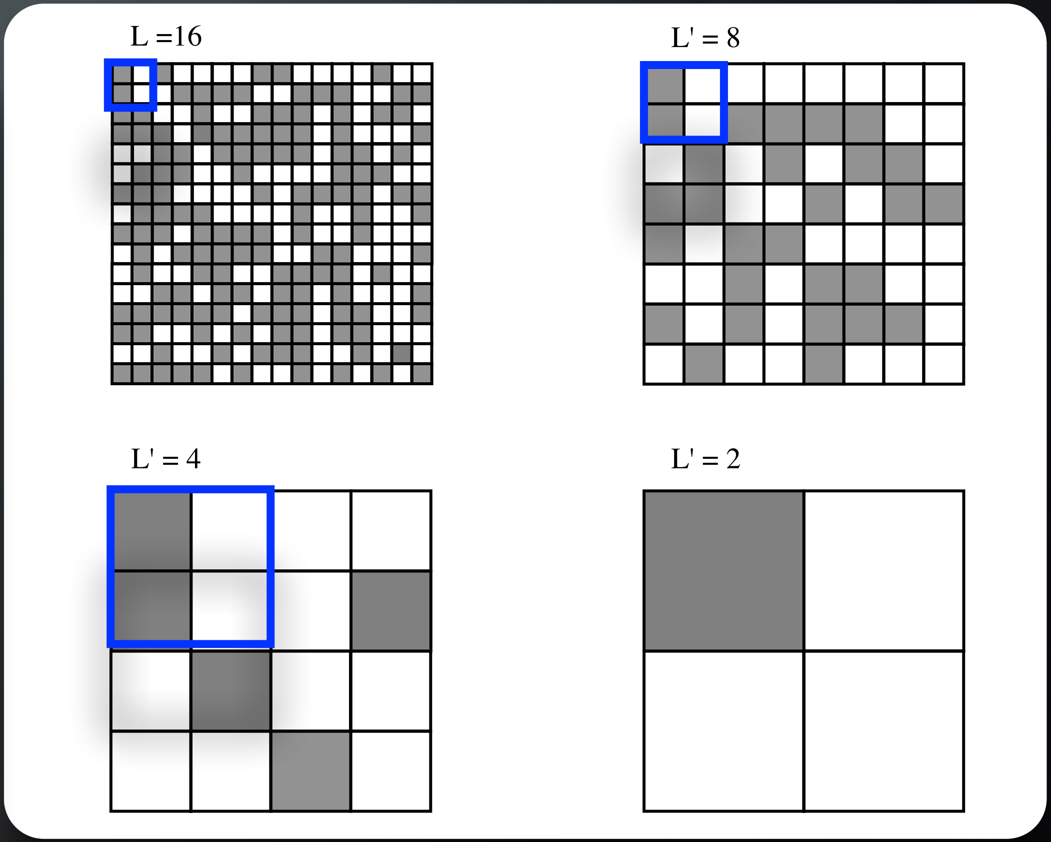
Quantity	Functional form	Exponent	$d=2$
Percolation			
order parameter	$P_\infty \sim (p-p_c)^\beta$	β	5/36
mean size of finite clusters	$S(p) \sim \lvert p-p_c\rvert^{-\gamma}$	γ	43/18
connectedness length	$\xi(p) \sim \lvert p-p_c\rvert^{-\nu}$	ν	4/3

Grupo de renormalização



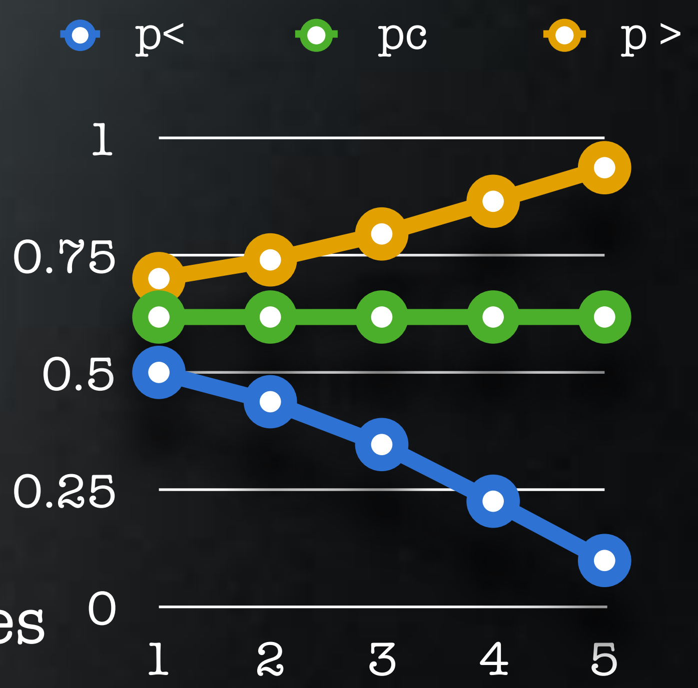
Utilizar mesma regra global para definir se célula 2x2 tem SC.





Grupo de renormalização

- $p' = R(p) = p^4 + 4p^3(1-p) + 2p^2(1-p)$
  - Soma das probabilidades de todas as configurações de SC na célula 2x2
  - (1-p) é a prob. do sítio estar vazio
  - Pontos fixos: $p^* = R(p^*)$
  - $p^*=0$, $p^*=1$, $p^*=0.6180$
  - Pode ser usado p/ encontrar expoentes



Catalogando clusters

- Iniciar com rede vazia.
- Varrer a rede
    - Para cada sítio varrido:
        - sorteio de r. Se $r < p$, ocupa sítio
        - verifica vizinho tiver já está catalogado.
            - se sim, segue mesmo label do vizinho (l)
                - se não, utiliza novo label m

catalogando..

- verifica vizinho tiver já está catalogado.
  - se sim, segue mesmo label do vizinho (l)
    - se não, utiliza novo label m
- caso vizinhos tenham labels distintos, fazer link entre labels (vetor links)
  - ex: link(m)=n
- Se mesmo label atingiu extremidades da rede, temos um SC

Leath Algorithm

- Ocupe uma único sítio semente na rede
    - Os primeiros vizinhos (4 na rede quadrada) são os sítios do perímetro
- Para cada sítio do perímetro, gere um número aleatório. Se $r <= p$, sítio é ocupado e adicionado ao cluster. Senão, não é ocupado e não é testado novamente.
- Para cada sítio ocupado, determine se há novos sítios de perímetro (vizinhos não testados) e adicione os novos à lista de perímetro
- Repita até não haver sítios de perímetro a serem testados

Leath Algorithm

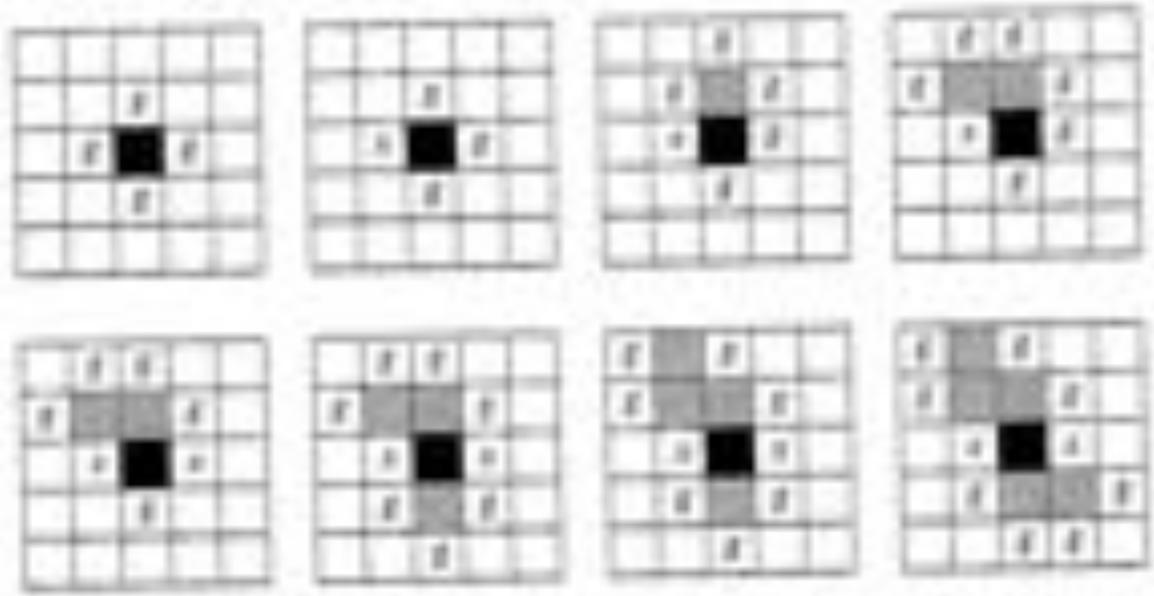


Figure 13.3 An example of the growth of a percolation cluster. Sites are occupied with probability p. Occupied sites are represented by a shaded square, growth or perimeter sites are labeled by g, and tested unoccupied sites are labeled by x. Because the seed site is occupied but not tested, we have represented it differently than the other occupied sites. The growth sites are chosen at random.

- No Gould (pag 494-495)!

Um único cluster