

Umbral de percolación en las redes de Kagomé y Dice

W. Lebrecht

*Departamento de Física, Universidad de La Frontera, Casilla 54-D, Temuco, Chile,
e-mail: lebrecht@ufro.cl*

Recibido el 13 de junio de 2012; aceptado el 28 de septiembre de 2012

Se presenta en este trabajo una manera alternativa de calcular los umbrales de percolación de enlaces y sitios en la red de Kagomé (K) y en la red de Dice (D). La metodología se basa en considerar la estructura topológica de éstas redes y caracterizarlas mediante una función polinomial que proveen las estructuras más simples, como los son: la red cuadrada (C), la red triangular (T) y la red hexagonal (H). Para obtener las funciones polinomiales de percolación de las redes C, T y H, se usa la técnica de hacer crecer pequeñas celdas finitas y determinar exactamente la ocupación de enlaces (ó sitios). El umbral de percolación se obtiene a través de dos métodos con el objetivo de comparar y validar los resultados. Se usa escalamiento de tamaño finito y se consideran correcciones a las leyes asintóticas de escala en cada caso. La técnica permite determinar en forma independiente el umbral de percolación tanto para el problema de enlaces, como de sitios. Los resultados obtenidos para el umbral de percolación de enlaces (sitios) para la red K es 0.52440516 (0.65270365) y para la red de D es 0.47559502 (0.58504625).

Descriptor: Percolación; umbral de percolación; red Kagomé.

An alternative way to calculate percolation thresholds of bonds and sites on Kagome (K) and Dice (D) lattices are presented. The methodology used is based on considering the topological structures of these lattices and characterize them by a polynomial function provided by the simplest structures, as are the square lattice (C), the triangular lattice (T), and the hexagonal lattice (H). To obtain the polynomial functions associated to C, T, and H, the technique associated to the growth of small cells is used to determine the exact finite occupation of bonds (or sites). The percolation threshold is obtained through two methods in order to compare and validate results. Techniques related to finite size of lattices are used, including the asymptotic corrections to the laws of scale in each case. The technique allows independently know the percolation threshold for both the problem of bonds, such as sites. The results obtained for the bond (site) percolation threshold for the K lattice is 0.52440516 (0.65270365) and for D lattice is 0.47559502 (0.58504625).

Keywords: Percolation; percolation threshold; Kagomé lattice.

PACS: 64.60.Ak; 64.60.Fr

1. Introducción y Teoría

El fenómeno de percolación describe de manera simple una variedad de sistemas complejos. Su gran mérito está basado en algunos elementos que lo contienen, tales como, aleatoriedad, transición de fase y criticalidad [1-5]. La percolación puede ser estudiada mediante la interacción entre sus enlaces (E) ó sitios (S) en una red; en ambos casos, se trata de un problema de conectividad.

Este problema puede ser resuelto mediante simulaciones numéricas sobre redes Arquimedianas de gran tamaño [6-12], donde entre otros parámetros, se calcula el punto exacto donde la red se vuelve percolante al ir aumentando la ocupación de E (ó S). Por otro lado, la obtención del umbral de percolación, también puede ser resuelto en forma exacta mediante la resolución de una ecuación polinomial, basada originalmente en la transformación triángulo-estrella propuesta por Sykes y Essam [1-2]. Esta técnica ha sido desarrollada actualmente por Ziff y Scullard y ha sido aplicada a diferentes redes Arquimedianas [13-18] y cuyos resultados para el umbral de percolación obtenidos con gran precisión, sirven como referencia para otras metodologías, ya sea analíticas [19-25], como numéricas.

Una manera alternativa de obtener el umbral de percolación, corresponde al estudio creciente de pequeñas celdas de una red (C, T ó H), que permite obtener una función de

percolación caracterizada por un polinomio que la representa [21,22-24]. A través de esta función, se pueden obtener varios parámetros asociados al comportamiento de la transición, como algunos exponentes críticos y el umbral de percolación. La metodología se basa en estudiar el comportamiento de la sucesión de celdas en el límite termodinámico, aplicando la técnicas de escalamiento para sistemas finitos para ambos problemas de E (ó S). La idea básica al considerar esta metodología, es que cada celda pequeña está representada por una función polinomial de percolación, cuyos coeficientes corresponden a la ocupación de E (ó S) que en ella percolan en una dirección. De este modo, para una celda de tamaño N , esta función de percolación queda expresada como:

$$f_{E(S)}^G(L_x, p) = \sum_{L=L_x}^N g_{E(S)}(L) p^L (1-p)^{N-L} . \quad (1)$$

Donde G es una geometría cualquiera, en este caso C, T ó H ya sea para el problema de E (ó S). L_x representa la longitud mínima de percolación en la dirección x , siendo la longitud máxima de percolación cuando la celda está completamente ocupada cuyo valor es N . Así, una longitud de percolación cualquiera L está en el rango $L_x \leq L \leq N$. La probabilidad que un E (ó S) esté ocupado se representa por la variable p y si está desocupado por $1-p$. Los coeficientes $g_{E(S)}(L)$, representan el número de longitudes de percola-

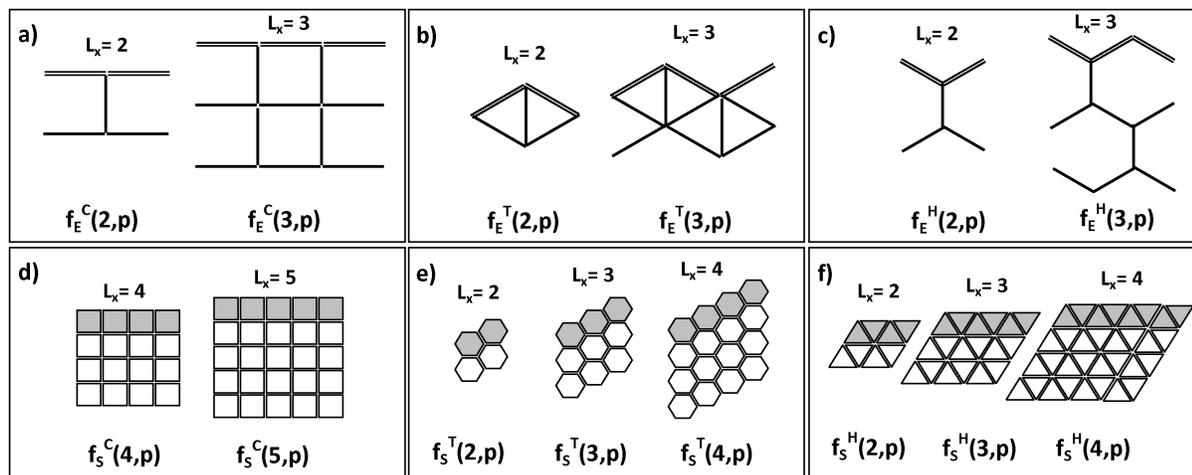


FIGURA 1. Construcción de celdas para el problema de percolación de enlaces (sitios) a,d) Cuadradas, b,e) Triangulares y c,f) Hexagonales.

ción con E (ó S) ocupados en la celda. Para determinar estos coeficientes, se contruye un algoritmo computacional mediante enumeración de E (ó S) de la celda y un contador los determina en función de L . A medida que crece la celda, este número crece cada vez, con lo cual se requiere de mucho tiempo de proceso de cálculo computacional. Se debe hacer notar que se trata de un proceso computacional de cálculo exacto de coeficientes y no de una simulación numérica. Finalmente, obtenidos todos los coeficientes para todo L de una celda, la función de percolación resulta ser un polinomio cuyo rango se ubica entre 0.0 – 1.0. Para ilustrar los conceptos mencionados anteriormente, la Fig. 1 muestra las celdas para el problema de enlaces (Fig. 1a-c) y para el problema de sitios (Fig. 1d-f) en las redes C, T y H respectivamente. En el primer caso, la doble línea corresponde a la longitud mínima de percolación y en el segundo caso éste parámetro se ilustra mediante color gris. En este sentido, cada celda se identifica por su longitud mínima de percolación L_x y su función de percolación de acuerdo a la Ec. (1). No se han ilustrado las celdas restantes que son consideradas en el presente trabajo, las cuales se enumeran a continuación: para E $L_x = 4$ en la red C y $L_x = 4, 5$ en las redes T y H. Finalmente para S, $L_x = 6$ en la red C.

El presente trabajo consiste en determinar el umbral de percolación de E (ó S) en la red de Kagomé (K) y en la red de Dice (D) mediante la función de percolación y usando una misma metodología de cálculo. Aquí se propone, una forma indirecta de obtener la función de percolación para las redes K y D y por lo tanto, evitar calcular los coeficientes $g_{E(S)}$ indicados en la Ec. (1) que requieren de mucho proceso computacional.

Scullard y Ziff [15] mediante el estudio de un doble triángulo - estrella, han derminado en forma exacta el umbral de percolación de enlaces de la red K, cuyo valor es 0.5244087... Por otro lado, el umbral de percolación de enlaces en la red D es el complemento de la red K de enlaces,

al ser su red dual [19]. Una búsqueda bibliográfica respecto de algunos resultados numéricos y analíticos sobre el umbral de percolación de sitios en la red D, se pueden encontrar en trabajos desarrollados por Yonezawa [6-7] y Parviainen [25], este último usando teoría de grafos. Un trabajo más reciente [26] determina con mayor precisión el umbral de percolación de sitios en la red D en forma numérica.

El interés del autor en estudiar la red K y D consiste en la dualidad existente, esto permite de antemano validar los resultados obtenidos a través de la metodología en forma independiente. Por otro lado, los puntos de red a primeros vecinos en K es 4, en tanto que para D es mixta, 3 y 6, lo cual muestra un componente topológico que no ocurre en otras redes (ej. triangular-hexagonal). Finalmente, la motivación más importante consiste en determinar de una manera analítica o fenomenológica el umbral de percolación de la red D, dado que sólo se conocen resultados numéricos para ella.

Aquí se presenta una alternativa para determinar el umbral de percolación de sitios en la red D. La idea se basa en conceptos topológicos que otros autores [27] han aplicado al estudio de umbrales de percolación. Básicamente se considera la forma como se construye la red en el plano, tal como lo ilustra la Fig. 2. Se ha usado la red de Kagomé (K), (3,6,3,6) como referencia, dado que se conoce analíticamente el umbral de percolación de enlaces [15], ello valida la metodología y comprueba los resultados propuestos. La numeración entre paréntesis corresponde a la notación de Grünbaum y Shephard [28] para la red K.

La Fig. 2a representa la red K, en tanto la Fig. 2b la red D. En ambas figuras, se observa que la repetición periódica en el plano de las estructuras básicas mostradas en color gris genera las redes, siendo aquella que contiene dos plaquetas triangulares y una hexagonal la generadora de la red K y la estructura formada por tres romboides la generadora de la red D.

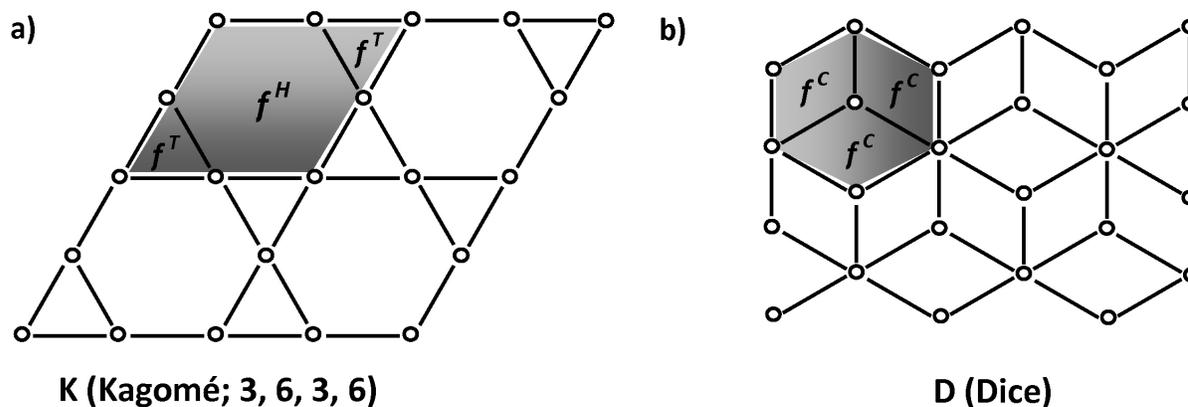


FIGURA 2. Estructuras básicas generadoras (ó arreglos) que generan en el plano las redes K y D.

Para desarrollar la idea ligada a un sistema percolativo, se ha agregado en la Fig. 2, la función de percolación asociada a cada construcción más simple C, T y H ($f^C = f_{E(S)}^C(L_x, p)$), ($f^T = f_{E(S)}^T(L_x, p)$) y ($f^H = f_{E(S)}^H(L_x, p)$), entendiéndose que la estructura mayor, puede ser representada por la combinación de éstas funciones de percolación. En este sentido, se considera que el umbral de percolación puede tratarse como un parámetro topológico, cuya dependencia es directa con las estructuras básicas generadoras. Este concepto, ha sido usado en redes Arquimedianas [29] y otras geometrías [30] para obtener una función de probabilidad que representa la frustración de redes con interacciones de intercambio mixtas ferromagnéticas y antiferramagnéticas [31]. De este modo, se define aquí la función de percolación para la red K de la siguiente manera:

$$f_{E(S)}^K(\langle L_x \rangle, p) = [f_{E(S)}^T(L_x, p)]^2 \times [f_{E(S)}^H(L_x, p)], \quad (2)$$

donde $\langle L_x \rangle = \ell$ representa el promedio mínimo de la longitud de percolación en la red K, provisto por los L_x de las redes generadoras. Análogamente, la función de percolación para la red D se define como:

$$f_{E(S)}^D(\ell, p) = [f_{E(S)}^C(L_x, p)]^3. \quad (3)$$

En base a los argumentos expresados anteriormente, la función de percolación de enlaces en la red K de menor tamaño se expresan como $f_E^K(2, p) = [f_E^T(2, p)]^2 \times [f_E^H(2, p)]$ siendo un polinomio de grado 15. Del mismo modo, la función de percolación de enlaces en la red K de mayor tamaño se expresa como $f_E^K(5, p) = [f_E^T(5, p)]^2 \times [f_E^H(5, p)]$ siendo un polinomio de grado 99. La metodología permite analizar los arreglos asimétricos cuando las longitudes mínimas de percolación de las redes generadoras L_x son diferentes. En este trabajo sólo se consideran los pares $(L_x, L_x + 1)$, con esto, se obtienen longitudes promedios mínimos $\ell = 2.0, 2.5, 3.0, 3.5, 4.0, 4.5, 5.0$ para la red K de E y $\ell = 2.0, 2.5, 3.0, 3.5, 4.0$ para la red K de S. El mismo procedimiento se aplica en la red D en E (ó S) con las celdas C. Los polinomios obtenidos para las funciones de percolación en cada caso, son de grado creciente, lo cual permite determinar con precisión los umbrales de percolación en función

de ℓ . Ellos se calculan mediante dos procedimientos independientes, de la siguiente manera:

Forma 1 (F1): Obteniendo la segunda derivada de la función de percolación $f^{K,D}(\ell, p)$, para E (ó S) y determinar el valor $p_{\text{inf}}^{K,D}(\ell)$ para la cual se anula.

Forma 2 (F2): Calculando la probabilidad que un E (ó S) pertenezca al dominio percolante y determinar el valor para el cual se satisface la ecuación $f^{K,D}(\ell, p_{\text{ren}}) = p_{\text{ren}}^{K,D}(\ell)$.

Como se puede ver, en ambos casos se trata de resolver un polinomio de grado mayor en el intervalo [0.0-1.0], el cual se realiza mediante un software matemático de libre disposición wxMaxima. Para obtener el umbral de percolación en el límite termodinámico p_∞ en cada geometría y para el problema de E (ó S), se realiza un escalamiento de tamaño finito, considerando correcciones a las leyes asintóticas de escala. Este tema, se viene desarrollando desde hace tiempo [32] y ha adquirido una gran relevancia en la actualidad, dado que diversos métodos numéricos suponen que se puede extraer información de un sistema infinito, extrapolando el comportamiento de un sistema finito de tamaño creciente. Es aquí donde se ha observado, que la corrección puede ser no despreciable [33-35]. Usando la definición propuesta en la Ref. 33 a esta corrección, se tiene:

$$p_{\text{inf}}^{K,D}(\text{ren})(\ell, p) = p_\infty + \ell^{-1/\nu}(a + b\ell^{-1} + c\ell^{-2} + \dots), \quad (4)$$

donde ν es el exponente crítico cuyo valor es $4/3$ para sistemas bidimensionales y las constantes a, b, c, \dots son parámetros de ajuste. En este trabajo, se considera para todos los efectos de cálculo, una aproximación de segundo orden en la ecuación anterior. De modo que:

$$\chi = p_{\text{inf}}^{K,D}(\text{ren})(\ell, p) - p_\infty = \ell^{-1/\nu}(a + b\ell^{-1}). \quad (5)$$

En la próxima sección se informan los resultados obtenidos para los umbrales de percolación de E y S en las redes K

y D usando la metodología propuesta anteriormente. Las funciones de percolación para estas geometrías se han calculado de acuerdo a las Ecs. (2) y (3) provistas por la topología descrita en la Fig. 2. La Ec. (5) determina el umbral de percolación en el límite termodinámico. Por otro lado, las funciones de percolación de las estructuras más simples, en las redes C, T y H, han sido calculadas usando la Fig. 1 y realizando el procedimiento descrito a partir de la Ec. (1). De este modo, la idea es validar la presente metodología con los valores bien conocidos e informados para la red K, tanto para E(ó S) y a continuación, aplicar directamente este procedimiento a la red de D, para determinar en forma teórica el umbral de percolación para E (ó S).

2. Resultados

2.1. Red K

Para determinar el umbral de percolación de enlaces en la red K, se usaron funciones polinomiales de grado entre 15 y 99

provistas por las funciones de percolación de las celdas de redes T y H provistas por la Fig. 1 y combinadas mediante la Ec. 2. En el caso del umbral de percolación de sitios, los grados polinomiales fluctuaron entre 12 y 62. Los umbrales de percolación para cada ℓ en la red K, se determinan mediante las formas F1 y F2 explicadas anteriormente. Los resultados en el límite termodinámico están presentados en la Fig. 3. Como se puede observar, para la red K, el umbral de percolación de E (ó S) es 0.52440516 (ó 0.65270365), mostrando un mejor ajuste lineal de la variable χ en la F1.

2.2. Red D

Para determinar el umbral de percolación de enlaces en la red D, se usaron funciones polinomiales de grado entre 15 y 75 provistas por las funciones de percolación de las celdas de la red C provistas por la Fig. 1 y combinadas mediante la Ec. 3. En el caso del umbral de percolación de sitios, los grados polinomiales fluctuaron entre 48 y 108. Los umbrales de percolación para cada ℓ en la red D, se determinan mediante las formas F1 y F2 explicadas anteriormente. Los resultados en

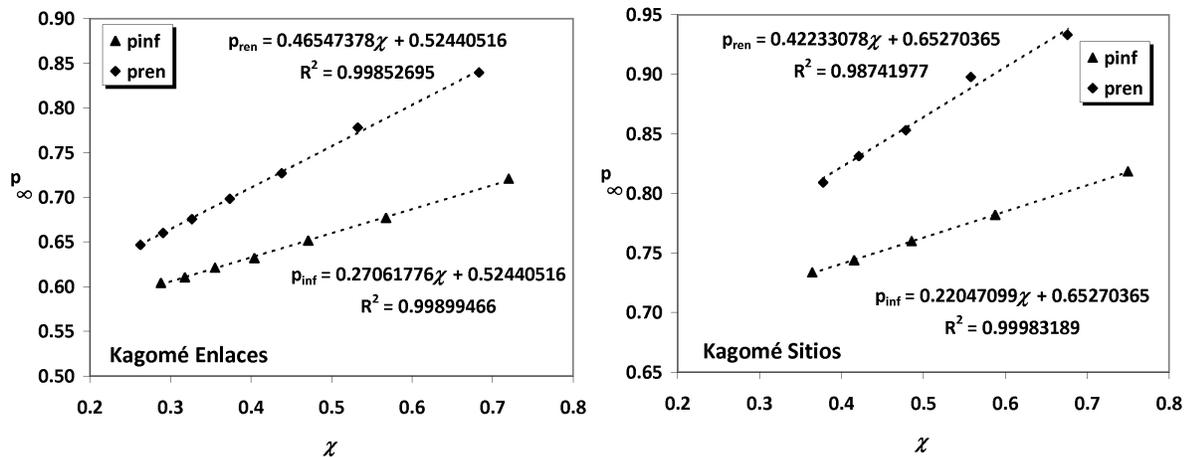


FIGURA 3. Umbral de percolación de enlaces y sitios de la red K, calculada indirectamente por funciones polinomiales de las redes T y H que caracterizan su estructura.

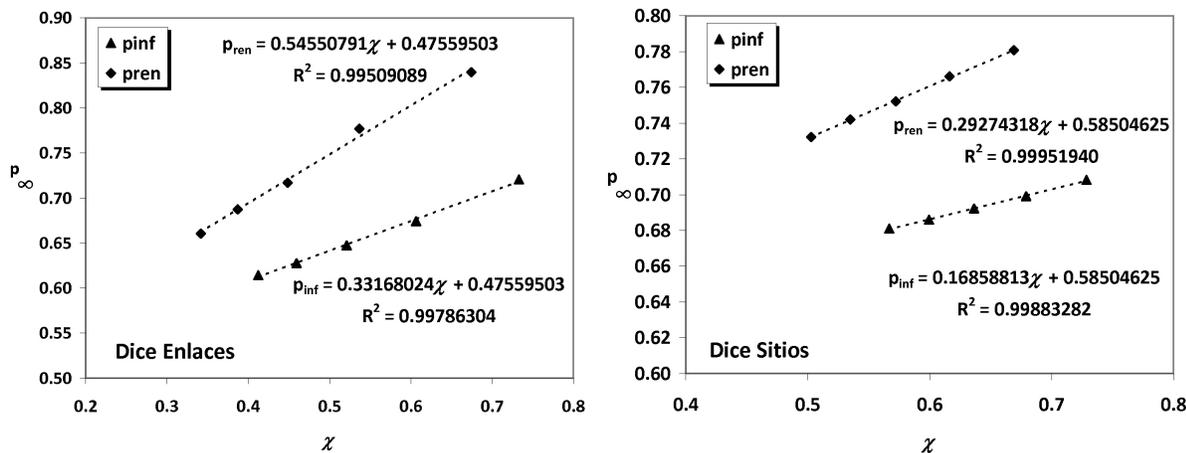


FIGURA 4. Umbral de percolación de enlaces y sitios de la red D, calculada indirectamente por funciones polinomiales de la red C que caracterizan su estructura.

el límite termodinámico están presentados en la Fig. 4. Como se puede observar, para la red D, el umbral de percolación de E (ó S) es 0.47559503 (ó 0.58504625), mostrando un buen ajuste lineal respecto de la variable χ en ambas formas F1 y F2.

3. Conclusiones

Se ha propuesto una forma alternativa y analítica (ó fenomenológica) de obtener los umbrales de percolación de las redes K y D para E (ó S). Esta idea está basada en la topología de cada una de las redes K y D al considerar la construcción de las mismas, mediante la combinación de redes C, T y H como ilustra la Fig. 2. Se ha definido una función de percolación $f_{E(S)}^{K,D}(\ell, p)$ en base a la función de percolación de las redes generadoras, siendo ℓ el promedio de la longitud mínima de percolación. El umbral de percolación en el límite termodinámico se ha establecido usando escalamiento de tamaño finito y considerando las correcciones a las leyes asintóticas

de escala, usando la Ec. (4). El resultado calculado para la red K en E (ó S) está de acuerdo con el resultado exacto propuesto en la Ref. 15, lo cual valida la metodología. El resultado calculado para la red D en E es 0.47559503, correspondiente al complemento de la red K de enlaces por ser su red dual, el cual ha sido obtenido en forma independiente en este trabajo. El resultado calculado para la red D en S es 0.58504625, el cual está en acuerdo con la Ref. 26 obtenida por métodos numéricos.

Finalmente, esta metodología podría aplicarse a otras redes, tales como las Arquimedianas $(3^2, 4, 3, 4)$ y $(3, 4, 6, 4)$ que mantienen una misma distancia entre sus puntos de red.

Agradecimientos

El autor agradece a la Universidad de la Frontera a través del proyecto DIDUFRO DI11-0031 por el apoyo parcial en el desarrollo de este trabajo.

1. M. F. Sykes, and J. W. Essam, *J. Math. Phys.* **5** (1964) 1117.
2. F. Y. Wu, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **12** (1979) L645.
3. J. W. Essam, *Rep. Prog. Phys.* **43** (1980) 834.
4. D. Stauffer, *Introduction to Percolation Theory* (Taylor & Francis, London, 1985).
5. Allen G. Hunt, *Percolation Theory for Flow in Porous Media* (Springer - Verlag Berlin Heidelberg, 2005)
6. Fumiko Yonezawa, Shoichi Sakamoto and Motoo Hori, *Math. Gen.* **22** (1989) L699.
7. Fumiko Yonezawa, Shoichi Sakamoto and Motoo Hori, *Phys. Rev. B* **40** (1989) 636.
8. Serge Galam and Alain Mauger, *Phys. Rev. E* **53** (1996) 2177.
9. Naeem Jan, *Physica A* **266** (1999) 72.
10. M. E. J. Newman and Robert M. Ziff, *Phys. Rev. E* **64** (2001) 016702.
11. Frank O. Pfeiffer and Heiko Rieger, *Phys. Rev. E* **67** (2003) 056113.
12. S. Fortunato, A. Aharony, A. Coniglio and D. Stauffer, *Phys. Rev. E* **70** (2004) 056116.
13. Robert Parviainen, *J. Phys. A: Math. Theor.* **40** (2007) 9253.
14. John C. Wierman, *J. Phys. A: Math. Gen.* **17** (1984) 1525.
15. Christian R. Scullard and Robert M. Ziff, *Phys. Rev. E* **73** (2006) 045102.
16. Christian R. Scullard and Robert M Ziff, *J. Stat. Mech.* (2010) P03021
17. W. Lebrecht, *Rev. Mex. Fís. E* **56** (2010) 190.
18. Christian R. Scullard, *J. Stat. Mech.* **9** (2011) P09022.
19. Robert M. Ziff and Paul N. Suding, *J. Phys. A: Math. Gen.* **30** (1997) 5351.
20. Paul N. Suding and M. Ziff, *Phys. Rev. E* **60** (1999) 275.
21. Robert M. Ziff and M. E. J. Newman, *Phys. Rev. E* **66** (2002) 016129.
22. W. Lebrecht y J. F. Valdés, *Rev. Mex. Fís.* **54** (2008) 349.
23. E.E. Vogel, W. Lebrecht, J.F. Valdés, *Physica A* **389** (2010) 1512.
24. W. Lebrecht y M. I. González, *Rev. Mex. Fís.* **57** (2011) 344.
25. Robert Parviainen, *Uppsala Dissertations in Mathematics* (UPPSALA 2004)
26. Xiaomei Feng, Youjin Deng and Henk W. J. Blöte, *Phys. Rev. E* **78** (2008) 031136.
27. Richard A. Neher, Klaus Mecke and Herbert Wagner, *J. Stat. Mech.* **8** (2008) P01011.
28. B. Grünbaum, G. C. Shephard, *Tilings and Patterns*, (W.H. Freeman and Company, New York, 1987).
29. W. Lebrecht, E. E. Vogel, J. Cartes and J. F. Valdés, *Physica A* **342** (2004) 90.
30. J. F. Valdés, W. Lebrecht and E. E. Vogel, *Physica A* **385** (2007) 551.
31. W. Lebrecht, J. F. Valdés and E. E. Vogel, *Physica A* **387** (2008) 5147.
32. J. Hermann and D. Stauffer, *Phys. Lett.* **100A** (1984) 366.
33. Robert M. Ziff, *Phys. Rev. E* **83** (2011) 020107(R).
34. P. M. C. de Oliveira, R. A. Nóbrega and D. Stauffer, *Brazilian Journal of Physics* **33** (2003) 616.
35. Jesús Salas and Alan Sokal, *J. Stat. Phys.* **98** (2000) 551.