



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Transiciones de fase percolativas en estrategias de siembra con
columnas alternadas

Tesis presentada al

Colegio de Matemáticas

como requisito parcial para la obtención del grado de

LICENCIADO EN MATEMÁTICAS

por

Diana Rosales Herrera

Asesorada por

Dr. Hugo Adán Cruz Suárez
Dr. Jhony Eredi Ramírez Cancino

Puebla Pue.
Diciembre de 2020



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas

Transiciones de fase percolativas en estrategias de siembra con
columnas alternadas

Tesis presentada al

Colegio de Matemáticas

como requisito parcial para la obtención del grado de

LICENCIADO EN MATEMÁTICAS

por

Diana Rosales Herrera

Asesorada por

Dr. Hugo Adán Cruz Suárez
Dr. Jhony Eredi Ramírez Cancino

Puebla Pue.
Diciembre de 2020

Título: Transiciones de fase percolativas en estrategias de siembra con columnas alternadas

Estudiante: DIANA ROSALES HERRERA

COMITÉ

Dr. Víctor Hugo Vázquez Guevara
Presidente

Dr. Jorge Velázquez Castro
Secretario

Dr. Arturo Fernández Téllez
Vocal

Vocal

Dr. Hugo Adán Cruz Suárez
Dr. Jhony Eredi Ramírez Cancino
Asesor

Agradecimientos

Esta investigación fue realizada gracias al apoyo del Consejo de Ciencia y Tecnología del Estado de Puebla.

Índice general

Lista de figuras	III
1. Introducción	1
Bibliografía	3
2. Percolación en una dimensión	5
2.1. Tamaño promedio y longitud de correlación en una dimensión	7
Bibliografía	11
3. Red de Bethe	13
Bibliografía	17
4. Percolación en dos dimensiones	19
4.1. Umbral de percolación y longitud de correlación	21
4.2. Strength y tamaño promedio de racimos finitos	24
Bibliografía	29
5. Aplicaciones de la teoría de percolación en la agricultura	31
5.1. Modelo	31
5.2. Columnas alternadas	34
5.3. Diagonales alternadas	35
5.4. Simulación	35
5.5. Resultados	37
Bibliografía	41
6. Conclusiones	43
A. Prueba de que existe al menos una solución $0 \leq Q \leq 1$ para la ecuación 3.5	45

Índice de figuras

1.1. Experimento de la rejilla	2
2.1. Ejemplo de racimos	5
2.2. Resultados de simulación para n_s	6
2.3. Resultados de simulación para sn_s	6
2.4. Ejemplo de simulación de racimos	7
2.5. Tamaño promedio de los racimos	9
2.6. Longitud de correlación.	10
3.1. Red de Bethe	14
4.1. Algunas redes bi-dimensionales.	19
4.2. Racimos en una red cuadrada	20
4.3. Distintas densidades en la red cuadrada	20
4.4. Efecto de sistema finito.	23
4.5. Δ_L y p_c	24
4.6. Streight.	25
4.7. Tamaño promedio de racimos finitos	26
4.8. Exponente crítico γ	26
4.9. Exponente crítico β	27
5.1. Combinaciones ocupación-inoculación	32
5.2. Modificación a la definición de vecinos cercanos	33
5.3. Esquema de formas de contagio	34
5.4. Columnas alternadas	34
5.5. Diagonales alternadas	35
5.6. Implementación del algoritmo <i>Hoshen-Kopelman</i>	36
5.7. Esquema de propagación de <i>Phytophthora</i>	37
5.8. Susceptibilidad crítica para una sola especie	37
5.9. Resultados a primeros vecinos	38
5.10. Resultados a segundos vecinos	40

Capítulo 1

Introducción

La teoría de percolación es una herramienta que nos permite modelar el paso de un fluido a través de un medio poroso (flujo), lo cual puede ser bien representado por un medio aleatorio [1.1]. Sus precedentes se remontan al tiempo de la segunda guerra mundial cuando los químicos Paul J. Flory y Walter H. Stockmayer determinaron el nexo entre la longitud de las cadenas de moléculas y las reacciones que determinan [1.2]. Años después, el inglés S. R. Broadbent notó que la disposición y forma de los poros del carbón, que era el principal elemento para la elaboración de máscaras antigás, influía en la porción de gas que penetraba el filtro de carbón [1.2]. Broadbent, en colaboración con el matemático J. M. Hammersley, concluyó que el movimiento del gas por el camino de poros era un nuevo proceso de difusión por lo que nombró a los de este estilo *procesos de percolación* [1.2]. En 1957, ambos científicos nombraron y formalizaron la teoría de percolación apoyándose en conceptos geométricos y probabilísticos [1.2].

Los fenómenos descritos por la teoría de percolación pertenecen a los llamados *fenómenos críticos* en los que existe un valor característico de un parámetro a partir del cual cambia drásticamente el comportamiento del sistema [1.2]. Generalmente para modelar estos fenómenos se emplean redes bidimensionales como la red cuadrada, triangular y *panal de abeja*, pero también pueden emplearse redes de mayor dimensión y complejidad. En todos los casos, se declara el parámetro de ocupación p como la probabilidad independiente de que un sitio (celda, nodo o enlace) en la red esté ocupado; los conjuntos de sitios ocupados adyacentes reciben el nombre de racimos.

El problema central de la teoría de percolación es determinar la probabilidad de ocupación mínima p_c que estructura por primera vez un racimo lo suficientemente grande para cruzar la red de extremo a extremo, es decir, busca la probabilidad mínima a la cual el sistema percola. Ejemplo de esto es el experimento de la rejilla realizado por los físicos norteamericanos B. P. Watson y P. L. Leath en los años 70, ver Figura 1.1. Este consistía en una rejilla cuadrada con 137×137 nodos equidistantes en la que soldaron electrodos de cobre en dos lados opuestos de la red y conectaron esta a un circuito eléctrico [1.2]. Posteriormente, elegían al azar un nodo y cortaban los cuatro alambres enlazados a este para interrumpir el flujo de energía con el fin de estudiar la resistencia eléctrica en función de la cantidad de nodos cortados. A medida que aumentaba el número de nodos cortados, la electroconductividad de la rejilla disminuía llegando a cero cuando se cortaba la última vía de nodos que conectaban los electrodos, esto es, existía una relación x_c entre el número de nodos cortados y el número total de nodos a partir de la cual la electroconductividad se perdía, y precisamente la determinación de esta cantidad era uno de los objetivos del experimento.

Un problema similar es el de plantar árboles frutales en los nodos de un retículo trazado en la tierra, considerando las enfermedades contagiosas de estos [1.2]. Pensando en el modelo de la rejilla, los nodos continuos (nodo no cortado) representan árboles cercanos que se encuentran enlazados, supongamos por las ramas, y que inevitablemente se contagian si alguno de ellos está enfermo, mientras que en los árboles inmediatos no enlazados (nodo cortado) no ocurre contagio [1.2]. Notar que un árbol enfermo contagia a todos los árboles de su racimo y a ningún otro fuera de este. Así, de manera análoga se puede pensar en la densidad crítica x_c de enlaces continuos en la red que dan lugar al racimo percolante por el cual la enfermedad es capaz de propagarse. Claramente el racimo percolante es la amenaza que puede sufrir el huerto y del cual debe protegerse [1.2]. La determinación de x_c permite conocer el tope máximo de árboles conectados; mantener densidades de enlace menores a x_c garantiza que los racimos de árboles

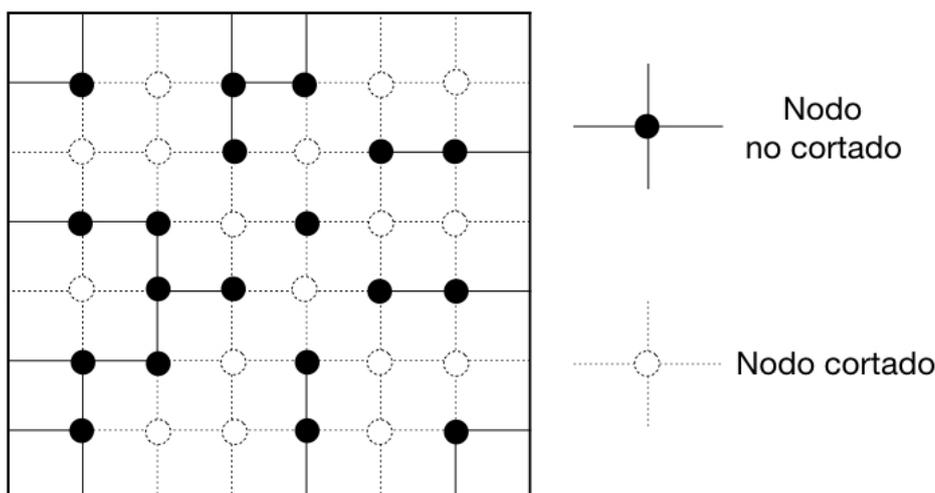


Figura 1.1: Modelo del experimento de la rejilla de B. P. Watson y P. L. Leath, los círculos color negro con los enlaces continuos representan los nodos que se mantuvieron intactos mientras que los blancos con enlaces punteados indican aquellos que fueron cortados arbitrariamente.

serán zonas aisladas, y en caso de infección el inicio de la enfermedad se localizará cerca del lugar a donde fue a parar. Aunque el modelo del huerto frutal parece sencillo, retrata los daños y pérdidas en terrenos de cultivo causados por el ataque de diferentes plagas y enfermedades, siendo uno de los de mayor impacto ambiental y económico los atribuidos al género *Phytophthora*.

El género *Phytophthora* es un patógeno sumamente agresivo muy vinculado al medio acuoso, se encuentra en forma de pequeños sacos llamados esporangios que al estar sumergidos en agua liberan de 20 a 40 esporas (zoosporas) biflageladas capaces de nadar [1.3]. Los suelos anegados y mal drenados propician condiciones favorables para este patógeno, el cual detecta la presencia de plantas y nada hacia ellas afectando principalmente raíces y tallo, causando un estado de marchitez en la planta y la pudrición de frutos [1.3]. En México, cultivos de chile, papa y calabaza, que constituyen una importante base alimenticia, se ven perjudicados debido a la presencia de *Phytophthora* ya que disminuye la cantidad y calidad de sus productos. Desde hace mucho tiempo se han desarrollado técnicas y herramientas para el control de la enfermedad como el uso de fungicidas y sistemas de fumigación, sin embargo no se ha encontrado una forma eficaz que permita eliminar o al menos controlar el patógeno [1.4, 1.5].

En este trabajo, haciendo uso de la teoría de percolación, se estudia la estrategia de siembra alternada (*intercropping*) como una propuesta para evitar la propagación del patógeno en terrenos de cultivo, específicamente se estudian los arreglos en columnas y diagonales alternadas, ambos con dos tipos diferentes de plantas. En los capítulos 2 y 3 se introducen aspectos importantes de la teoría de percolación, en particular en el capítulo 4 se discute a fondo la teoría de percolación en la red cuadrada que será la base del modelo propuesto. En el capítulo 5 se introducen las condiciones del modelo y se describen los algoritmos de simulación utilizados así como los resultados obtenidos. Finalmente, en el capítulo 6 se presentan las conclusiones de este trabajo.

Bibliografía

- [1.1] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction To Percolation Theory*. Taylor & Francis, 1994.
- [1.2] A. Efros, *Physics And Geometry of Disorder*. Mir Publishers, 1982.
- [1.3] M. K. Hausbeck and K. H. Lamour, “Phytophthora capsici on vegetable crops: research progress and management challenges,” *Plant dis.*, vol. 88, no. 12, pp. 1292–1303, 2004.
- [1.4] D. C. Erwin and O. K. Ribeiro, *Phytophthora diseases worldwide*. St. Paul, Minnesota, USA: American Phytopathological Society (APS Press), 1996.
- [1.5] Y. Cohen and M. D. Coffey, “Systemic fungicides and the control of oomycetes,” *Annu. Rev. Phytopathol.*, vol. 24, no. 1, pp. 311–338, 1986.

Capítulo 2

Percolación en una dimensión

La percolación de sitios para una dimensión parte de suponer una cadena de eslabones donde cada eslabón tiene probabilidad p de estar ocupado y $1 - p$ de quedar vacío. Los eslabones de la cadena únicamente aceptan estas dos posibilidades y la ocupación o no de uno de ellos es independiente de lo que suceda con los restantes. Un racimo en la red uno-dimensional es una colección de eslabones ocupados de manera consecutiva que quedan limitados por un eslabón vacío en cada orilla. Por ejemplo, un racimo de tamaño s queda determinado por un grupo de s sitios ocupados que son vecinos y uno vacío a cada extremo, para $s = 1$ un eslabón ocupado queda aislado entre dos vacíos como se muestra en el extremo izquierdo de la Figura 2.1. La determinación del umbral de percolación en una dimensión es bastante intuitiva pues es claro que cuando $p = 1$ todos los eslabones de la cadena se encuentran ocupados formando así el único racimo. Tomar $p < 1$ garantiza la existencia de al menos un sitio vacío con probabilidad positiva que rompe la secuencia de eslabones ocupados y por tanto desconecta los extremos de la cadena. Sin embargo, es interesante en este caso el estudio de la formación de racimos y sus características, como a continuación se aborda.

Se comienza por suponer una cadena de tamaño L con $L \rightarrow \infty$ y se elige un sitio arbitrario en ella, la probabilidad de que éste sea el primer eslabón ocupado (de izquierda a derecha) de un racimo de tamaño $s \in \mathbb{N}$ es

$$n_s = p^s(1 - p)^2, \quad (2.1)$$

por tanto el número promedio de racimos de tamaño s , lejos de los efectos de la frontera, es Ln_s . Para evitar dependencia con el tamaño de la cadena esta cantidad se estandariza concluyendo así que n_s es el número promedio de racimos de tamaño s por sitio en la cadena.

Además, la probabilidad indicada en (2.1) es la misma si se hubiese pedido que el eslabón elegido figurara en la segunda, tercera, ..., o la s -ésima posición posterior al extremo izquierdo, por lo que la probabilidad de que un eslabón arbitrario pertenezca a un racimo de tamaño s es:

$$sn_s = sp^s(1 - p)^2. \quad (2.2)$$

Para estudiar la formación de racimos y su cálculo numérico se simuló R racimos de eslabones ocupados para distintos valores de $p < p_c$. Dado que p es menor que el umbral de percolación se garantiza la existencia de $R + 1$ conjuntos de eslabones vacíos que se alternan con los ocupados. A su vez, se genera una *lista* cuya i -ésima entrada registra la cantidad observada de racimos de tamaño i , al dividir cada entrada por el tamaño total del sistema se obtiene n_i , es decir, la probabilidad de observar un racimo



Figura 2.1: Un eslabón en la cadena que ha sido ocupado será marcado con 1 y en caso contrario con 0. En la imagen se muestra, de izquierda a derecha, racimos de tamaño 1, 4 y 2, respectivamente.

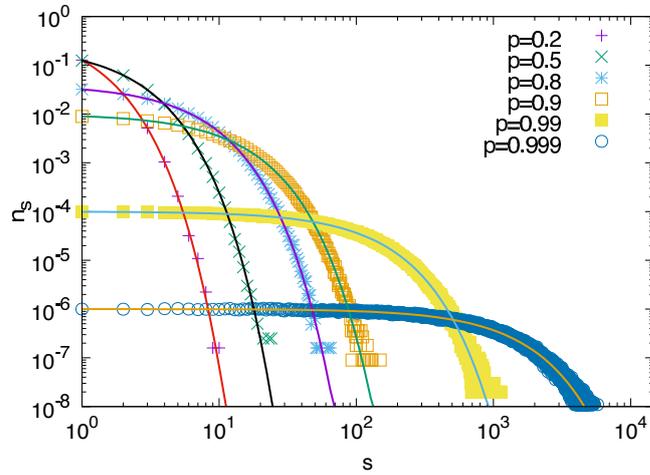


Figura 2.2: Resultados de la simulación de 1 millón de racimos para distintos valores de p . La línea sólida corresponde a $n_s = p^s(1 - p)^2$ que coincide con el valor teórico de n_s .

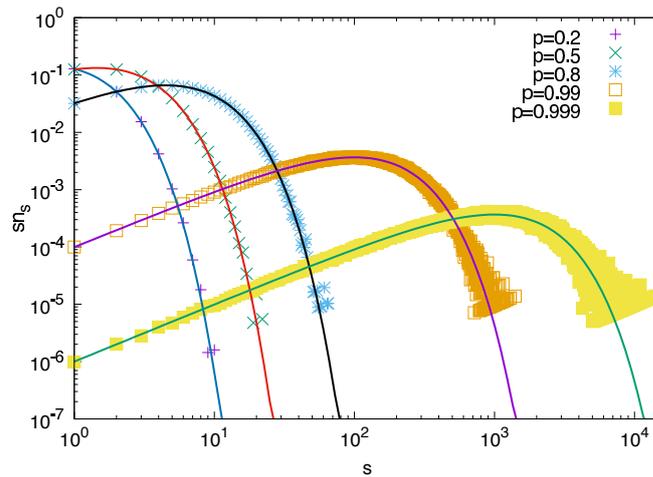


Figura 2.3: Resultados de simulación (figuras) y teórico (línea continua) de sn_s vs s para sistemas percolantes lineales.

[0	4	2	0	0	1	2	0	0	1]
[0	$\frac{4}{50}$	$\frac{2}{50}$	0	0	$\frac{1}{50}$	$\frac{2}{50}$	0	0	$\frac{1}{50}$]
[0	$\frac{4}{50}$	$\frac{4}{50}$	0	0	$\frac{5}{50}$	$\frac{12}{50}$	0	0	$\frac{9}{50}$]

Figura 2.4: Simulación de 10 racimos para $p = 0.75$; el tamaño total de la cadena fue de 50 eslabones siendo el racimo más grande de tamaño 9. En la primera fila se muestra la lista cuya i -ésima entrada proporciona la cantidad de racimos de tamaño i que se observaron, donde la primer entrada corresponde al tamaño $i = 0$. La segunda fila muestra la división de cada cantidad por el tamaño de la cadena, esto corresponde a n_i . Finalmente cada entrada se multiplica por i para obtener in_i .

de tamaño i por eslabón en la cadena. Más aún, si posteriormente se multiplica la i -ésima entrada por i se obtiene in_i , así, la lista final proporciona la probabilidad de que un sitio arbitrario pertenezca a un racimo de tamaño i , ver Figura 2.4.

En las Figuras 2.2 y 2.3 se muestra la concordancia entre los resultados reportados teóricamente y los obtenidos mediante la simulación realizada en Python.

2.1. Tamaño promedio y longitud de correlación en una dimensión

En esta sección se busca conocer los tamaños de los racimos que se forman y la frecuencia con que aparecen al considerar $p < p_c$ fija. La pregunta clave es: ¿qué tan grande, en promedio, es el racimo (finito) al que pertenece un sitio elegido al azar?

Para determinar la probabilidad de que un sitio arbitrario pertenezca a cualquier racimo se suma sobre los posibles tamaños del racimo al que puede pertenecer, esto es, la probabilidad de que el sitio arbitrario pertenezca a un racimo de tamaño $s = 1$ más la probabilidad de que pertenezca a un racimo de tamaño $s = 2$, etc. Matemáticamente se expresa de la siguiente manera:

$$\sum_{s=1}^{\infty} sn_s = \sum_{s=1}^{\infty} sp^s(1-p)^2.$$

Usando que $\frac{dp^s}{dp} = sp^{s-1}$, se tiene el siguiente desarrollo

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^{\infty} sp^s(1-p)^2 &= (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} sp^s \\ &= (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} p \left(\frac{dp^s}{dp} \right) \\ &= p(1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{dp^s}{dp} \\ &= p(1-p)^2 \frac{d(\sum_{s=1}^{\infty} p^s)}{dp}. \end{aligned} \tag{2.3}$$

CAPÍTULO 2. PERCOLACIÓN EN UNA DIMENSIÓN

2.1. TAMAÑO PROMEDIO Y LONGITUD DE CORRELACIÓN EN UNA DIMENSIÓN

Recordando que la serie geométrica es $\sum_{i=0}^{\infty} x^i = \frac{1}{1-x}$ para $|x| < 1$, se separa el primer término de la suma y se despeja $\sum_{i=1}^{\infty} x^i$, por lo que $\sum_{i=1}^{\infty} x^i = \frac{x}{1-x}$. Posteriormente, se sustituye y se calcula la correspondiente derivada:

$$\begin{aligned} p(1-p)^2 \frac{d(\sum_{s=1}^{\infty} p^s)}{dp} &= p(1-p)^2 \frac{d\left(\frac{p}{1-p}\right)}{dp} \\ &= p(1-p)^2 \frac{1}{(1-p)^2} \\ &= p. \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\sum_{s=1}^{\infty} sn_s = p. \quad (2.4)$$

En resumen, la ecuación (2.2) indica que sn_s es la probabilidad de que un sitio arbitrario (ocupado o no) pertenezca a un racimo de tamaño s , mientras que la ecuación (2.4) muestra que la probabilidad de que un sitio arbitrario pertenezca a cualquier racimo es igual a la probabilidad p de que esté ocupado. De lo anterior se infiere que

$$w_s := \frac{sn_s}{\sum_{s=1}^{\infty} sn_s} = \frac{sn_s}{p} \quad (2.5)$$

es la probabilidad de que el racimo al cual pertenece un sitio ocupado elegido al azar sea de tamaño exactamente s . Así, si se eligen sitios ocupados arbitrarios y se mide el tamaño del racimo al que pertenecen, el tamaño promedio será:

$$S = \sum_{s=1}^{\infty} sw_s = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{s^2 n_s}{p}. \quad (2.6)$$

De manera similar al desarrollo de la expresión (2.3) y usando el operador $\mathcal{G} = p \frac{d}{dp}$, el numerador de la ecuación (2.6) se obtiene como sigue:

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^{\infty} s^2 p^s (1-p)^2 &= (1-p)^2 \sum_{s=1}^{\infty} s^2 p^s \\ &= (1-p)^2 \left(p \frac{d}{dp} \left(p \frac{d}{dp} \left(\sum_{s=1}^{\infty} p^s \right) \right) \right) \\ &= (1-p)^2 \left(p \frac{d}{dp} \left(\frac{p}{(1-p)^2} \right) \right) \\ &= (1-p)^2 \left(\frac{p(1+p)}{(1-p)^3} \right) \\ &= \frac{p(1+p)}{(1-p)} \end{aligned}$$

Por tanto, el tamaño promedio de los racimos finitos es:

$$S = \frac{1+p}{1-p} \quad (2.7)$$

para $p < p_c$.

De esta forma, se puede conocer el comportamiento del tamaño promedio de los racimos en función de p . En la Figura 2.5 se observa la divergencia de los tamaños de racimos cuando $p \rightarrow p_c = 1$. En el caso unidimensional no es posible sobrepasar el umbral de percolación, por lo que se espera encontrar racimos de gran tamaño pero siempre finitos.

Para mostrar la importancia de S , pensemos que una persona se encuentra en un eslabón ocupado de la cadena, si la persona camina r sitios hacia la derecha ¿cuál es la probabilidad de que el sitio de partida y el sitio de llegada pertenezcan al mismo racimo? Si $r = 0$, claramente esta probabilidad es igual a 1,

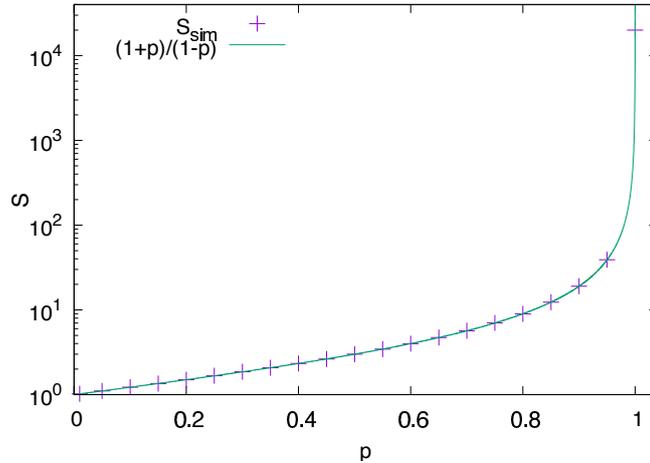


Figura 2.5: Comportamiento del tamaño promedio de los racimos; concordancia entre resultados analíticos (línea sólida) y numéricos (cruces moradas).

para un sitio a una distancia r el sitio de llegada y los $r - 1$ sitios que se encuentran entre éste y el de partida que corresponde a $r = 0$ deben estar ocupados sin excepción [2.2]. Con esto en mente, se define la función de correlación $g(r)$ como la probabilidad de que un eslabón ocupado y uno que se encuentra a una distancia r de él pertenezcan al mismo racimo. Puesto que la probabilidad de ocupación de un eslabón en la cadena es p , se tiene que:

$$g(r) = p^r, \tag{2.8}$$

para toda p y toda $r \in \{0\} \cup \mathbb{N}$. Notar que

$$\begin{aligned} p^r &= \exp(\ln(p^r)) \\ &= \exp(r \ln(p)) \\ &= \exp\left(-r \ln\left(\frac{1}{p}\right)\right) \end{aligned}$$

para $p < p_c$ fija, donde $\xi^{-1} := \ln\left(\frac{1}{p}\right) = -\ln(p)$ es una constante llamada longitud de correlación. Recordando la expansión en serie de Taylor: $\ln(1 - x) \approx -x$ para x cercana a 0, se hace el cambio $p = 1 - x$, entonces $-x = p - 1$. Al sustituir, se obtiene que $-\ln(p) = 1 - p$ y así $\xi^{-1} = 1 - p$. Para el caso unidimensional se tiene que la longitud de correlación es $\xi^{-1} = p_c - p$ cuyo comportamiento se muestra en el gráfico de la Figura 2.6, donde se puede ver la concordancia entre los datos teóricos y los de simulación conforme disminuye $p_c - p$.

Más aún, es posible reescribir la función de correlación como

$$g(r) = \exp(-r\xi^{-1}).$$

Su nueva forma hace notar que $g(r)$ decae exponencialmente a 0 si la distancia r se va a infinito. Cuando p tiende a p_c el tamaño promedio de un racimo crece rápidamente y al mismo tiempo lo hace la longitud promedio ya que la longitud de un racimo de tamaño s es $s - 1$, que no es muy distinto de s cuando s es muy grande. Esto deja ver la relación de ambos conceptos vía leyes de potencias

$$S \propto \xi^{-1} \tag{2.9}$$

cuando $p \rightarrow p_c$.

Un último hecho de importancia respecto al tamaño promedio de los racimos es que $\sum_{r=0}^{\infty} g(r) = S$; como se comenta en [2.2] hay que notar que dicha suma contempla los vecinos que se encuentran tanto a la derecha como a la izquierda de un eslabón ocupado. Se ha interpretado r como una distancia positiva moviéndose hacia la derecha y no tendría sentido pensar en $r = -1, -2$, etc. para indicar el movimiento

CAPÍTULO 2. PERCOLACIÓN EN UNA DIMENSIÓN

2.1. TAMAÑO PROMEDIO Y LONGITUD DE CORRELACIÓN EN UNA DIMENSIÓN

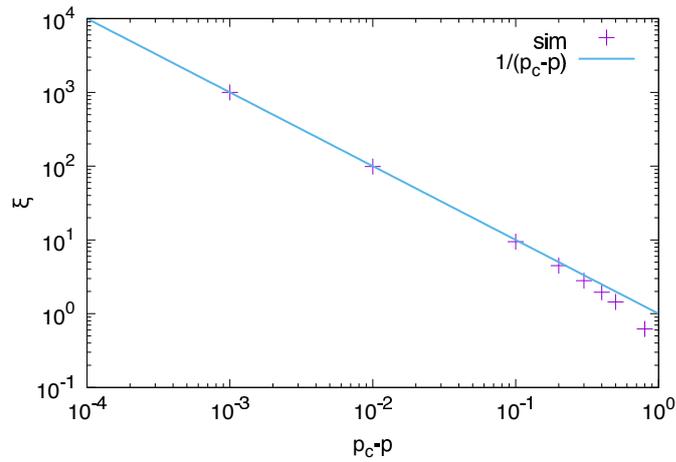


Figura 2.6: Longitud de correlación.

hacia la izquierda, por lo que bastaría sumar para $r = 0, 1, 2, \dots$ como se introdujo anteriormente, multiplicar por 2 y restar 1, pues el sitio de partida que corresponde a $r = 0$ se cuenta dos veces.

Para concluir este capítulo se remarca el hecho de que la mayoría de las cantidades aquí estudiadas se definieron a través de n_s , lo que da pauta para abordar el caso en dos dimensiones. En cuanto a comportamiento se observa que ciertas cantidades divergen en el umbral de percolación y esta divergencia puede ser escrita como leyes de potencias considerando el parámetro de orden de $|p_c - p|$, siendo p_c el umbral de percolación.

Bibliografía

- [2.1] D. Stauffer, “Scaling theory of percolation clusters,” *Phys. Rep.*, vol. 54, no. 1, pp. 1 – 74, 1979.
- [2.2] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction To Percolation Theory*. Taylor & Francis, 1994.

Capítulo 3

Red de Bethe

La red de Bethe es una estructura muy conocida que se utiliza en distintas áreas y en el estudio de la teoría de percolación no es la excepción ya que, además del caso unidimensional, puede encontrarse de manera exacta una solución para el umbral de percolación.

Se inicia con un sitio denominado origen del cual se desprenden $z \in \mathbb{N}$ nodos que formarán la primera generación de la red, de cada sitio se desprenderán $z - 1$ nuevos nodos que en suma con el sitio de partida resultan z . Siguiendo con este proceso se pueden construir tantas generaciones como se quieran, siendo

$$n'_k = z(z - 1)^{k-1} \quad (3.1)$$

el número de sitios nuevos que constituyen la k -ésima generación.

Notar que en la primera emanación el total de sitios en la red constará del origen y los z sitios que brotan de él, es decir, habrá $z + 1$ sitios; la segunda generación constará de $z(z - 1)$ puntos y por tanto $1 + z + z(z - 1)$ será el total de sitios, de esta forma el total de sitios en la red de Bethe hasta la k -ésima generación será $N'_k = 1 + z \sum_{i=0}^{k-1} (z - 1)^i$. Haciendo el cambio $u = z - 1$ y usando que $u^k - 1 = (u - 1) \sum_{i=0}^{k-1} u^i$ se obtiene

$$N'_k = \frac{z(z - 1)^k - 2}{z - 2}, \quad (3.2)$$

que está indeterminado en $z = 2$, sin embargo el análisis de la red de Bethe para $z = 2$ es equivalente al caso de percolación en una dimensión que fue analizado en el capítulo 2.

De las ecuaciones (3.1) y (3.2) se deduce que hasta la k -ésima generación la fracción de sitios en la superficie de la red es:

$$\frac{n'_k}{N'_k} = \frac{z(z - 1)^{k-1}(z - 2)}{z(z - 1)^k - 2}$$

y cuando $k \rightarrow \infty$ éste cociente se aproxima a $\frac{z-2}{z-1}$.

Una vez descritas algunas características de la red de Bethe se implementa lo habitual en la teoría de percolación, esto es, dotar a cada sitio con probabilidad p de estar ocupado y hallar la probabilidad mínima a partir de la cual aparece el racimo percolante. Cuando se elige un sitio siempre es de interés los puntos que conectan con él, es decir, sus *vecinos*. Cada vecino y sus $z - 1$ emanaciones conforman una *rama*, y el trayecto de puntos que comienza desde la emanación de un vecino se le conoce como la *sub-rama* de un sitio, ver Figura 3.1.

Supongamos que el origen está ocupado y que p es la probabilidad de ocupación, entonces en la primera generación habrá en promedio pz nuevos lugares disponibles, mientras que al contemplar la segunda generación habrá en promedio $pz p(z - 1)$ nuevos lugares disponibles. Sumando ambos resultados se obtiene que el número promedio total de lugares disponibles serán $1 + pz + p^2 z(z - 1)$. En general, para la k -ésima generación habrá $n_k = p^k z(z - 1)^{k-1}$ nuevos puntos disponibles y, por tanto, el promedio total de lugares disponibles será $N_k = 1 + zp \sum_{i=0}^{k-1} [p(z - 1)]^i$. Notar que para $p = 1$ estas cantidades coinciden con las ecuaciones (3.1) y (3.2), respectivamente, y cuando $p = 0$ el único punto que existe es el origen.

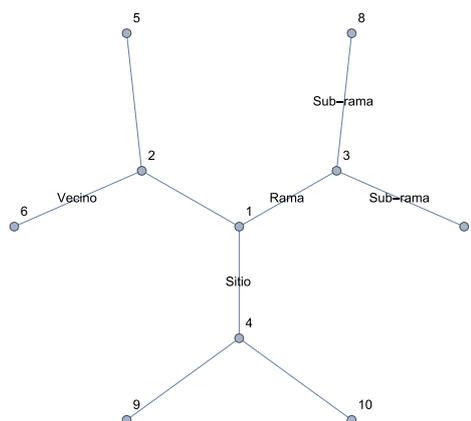


Figura 3.1: Red de Bethe para $z = 3$ hasta la segunda generación cuyos sitios están marcados por números; se identifican los conceptos de *vecino*, *rama* y *sub-rama* que forman parte del entorno inmediato de un sitio en la red.

Dado que se busca p_c , se considera el cociente

$$\frac{n_k}{N_k} = (p(z-1) - 1) \left(\frac{p^k z (z-1)^{k-1}}{z p^{k+1} (z-1)^k - (p+1)} \right) \quad (3.3)$$

que proporciona la fracción de nuevos sitios disponibles respecto al total. Lo usual es preguntarse por las condiciones necesarias para la formación del racimo percolante, pero ésta vez el problema se aborda por el camino opuesto, esto es, para que no exista el racimo percolante (para alguna k) el cociente $\frac{n_k}{N_k}$ debe tender a 0, lo cual sucede cuando $p(z-1) - 1 = 0$. De esto, se concluye que

$$p_c = \frac{1}{z-1}. \quad (3.4)$$

Cabe remarcar que aún cuando $p > \frac{1}{z-1}$ el origen no siempre enlaza con el racimo percolante, por ejemplo, no hay manera de que el origen pertenezca al racimo percolante si sus z vecinos permanecen vacíos [3.1].

Para conocer la conectividad del origen, o cualquier otro sitio elegido arbitrariamente, al racimo percolante se define el *strength* P_{str} como la probabilidad de que un sitio arbitrario pertenezca al racimo percolante. Si $p < p_c$, se tiene que $P_{str} = 0$ por lo que es de interés conocer su valor para valores de p mayores al umbral de percolación. Es importante no confundir el *strength* P_{str} del racimo percolante con la *concentración* p , que es la probabilidad de que un sitio en la red esté ocupado. Para hallar P_{str} se define la probabilidad Q de que un sitio arbitrario no pertenezca al racimo percolante a través de una rama fija que brota de él. Observar que la probabilidad de que las $z-1$ sub-ramas que inician en un vecino no conecten con el racimo percolante es Q^{z-1} , por tanto pQ^{z-1} es la probabilidad de que el vecino esté ocupado pero no conectado a través de sus sub-ramas. Más aún, otra forma de que la rama no conecte con el racimo percolante es que el vecino esté vacío, lo cual sucede con probabilidad $1-p$, por consiguiente la probabilidad de que una rama fija que brota de un sitio arbitrario no enlace al racimo percolante es

$$Q = 1 - p + pQ^{z-1}. \quad (3.5)$$

Finalmente, la probabilidad de que el origen esté ocupado pero no ligado al racimo percolante por ninguna de sus ramas es pQ^z , por lo que $p - P_{str} = pQ^z$. En consecuencia

$$P_{str} = p(1 - Q^z), \quad (3.6)$$

donde se sustituyen los $z-1$ valores de Q , salvo multiplicidades, que garantiza el teorema fundamental del álgebra al resolver la ecuación (3.5). Una de estas raíces es $Q = 1$ que arroja $P_{str} = 0$, lo cual puede pensarse que se debe a que $p < p_c$. Recordar que al ser Q una probabilidad se buscarán aquellas raíces

Q_i que cumplan $0 \leq Q_i \leq 1$ (ver Apéndice A). Por ejemplo, cuando $z = 3$ la ecuación (3.5) se establece como $Q = 1 - p + pQ^2$, cuyas raíces son $Q = 1$ y $Q = \frac{1-p}{p}$ dando como resultado

$$P_{str} = p \left[1 - \left(\frac{1-p}{p} \right)^3 \right], \quad (3.7)$$

que proporciona la fracción de sitios en la red que están conectados al racimo percolante.

Por otro lado, multiplicando ambos lados de la ecuación (3.5) por Q y usando que $p - P_{str} = pQ^z$, se obtiene una ecuación de segundo grado para Q como se muestra en seguida:

$$\begin{aligned} Q^2 &= Q(1-p) + pQ^z \\ &= Q(1-p) + p - P_{str}. \end{aligned}$$

Después de haber completado el cuadrado perfecto y despejado Q se tiene que

$$Q = \sqrt{p - P_{str} + \left(\frac{1-p}{2} \right)^2} + \frac{1-p}{2}.$$

Finalmente, al sustituir en (3.6) se obtiene de manera general que

$$\frac{P_{str}}{p} = 1 - \left[\sqrt{p - P_{str} + \left(\frac{1-p}{2} \right)^2} + \frac{1-p}{2} \right]^z. \quad (3.8)$$

Haciendo el cambio de variable $x = \frac{P_{str}}{p}$ puede re-escribirse la ecuación (3.8) como

$$(1-x)^{\frac{1}{z}} = \sqrt{p} \sqrt{1-x + \frac{(1-p)^2}{4p}} + \frac{1-p}{2} \quad (3.9)$$

donde $(1-x)^{\frac{1}{z}} \approx 1$ a medida que z crece, lo cual indica que el valor de x es 0, y por lo tanto que $P_{str} = 0$, esto significa que para z muy grande y $p < 1$ la conectividad al racimo percolante se pierde.

Al igual que en una dimensión, en la red de Bethe también se puede medir el tamaño promedio de los racimos S . Para esto, se define T como el tamaño promedio para una rama, es decir, el número promedio de sitios a través de los cuales el origen está conectado y tales que pertenecen a un rama [3.1]. Como se explicó anteriormente, cada sitio en la red es equivalente por lo que cada sub-rama tiene el mismo tamaño promedio T como la rama misma, entonces si un vecino está vacío el tamaño promedio del racimo para esa rama es $(1-p)0 = 0$. Por otro lado, si el vecino se encuentra ocupado aporta al racimo con él mismo y suma las contribuciones de cada una de sus $z-1$ sub-ramas, es decir, $p + p(z-1)T$, de ahí que

$$T = (1-p)0 + p + p(z-1)T.$$

Despejando T se encuentra que

$$T = \frac{p}{1-p(z-1)} \quad (3.10)$$

para $p < p_c$.

Notar que si el origen está vacío, el tamaño promedio del racimo es 0, pero si está ocupado es $1 + zT$ por lo que $S = 1 + zT$. Al sustituir el valor hallado de T se obtiene

$$S = \frac{1+p}{1-p(z-1)} \quad (3.11)$$

cuya singularidad en $p(z-1) = 1$ lleva a que $p = \frac{1}{z-1}$, lo cual coincide con la probabilidad crítica para la red de Bethe. Para ilustrar lo anterior, en el caso $z = 3$ se tiene que $T = p/(1-2p)$ para $p < \frac{1}{2}$, además el

tamaño total del racimo S es 0 si el origen está vacío y $1 + 3T$ si está ocupado. De este modo, el tamaño promedio de racimo para $z = 3$ es

$$\begin{aligned} S &= 1 + 3T \\ &= \frac{1+p}{1-2p}. \end{aligned} \tag{3.12}$$

En conclusión, la ecuación (3.8) provee la forma de hallar el *strength* P_{str} del racimo percolante para la concentración $p > p_c$, mientras que la ecuación (3.11) proporciona una expresión exacta para determinar el tamaño promedio de racimo S para p menor al umbral de percolación. Por simplicidad, observar que en la expresión (3.7) $P_{str} = 0$ en $p = \frac{1}{2}$, lo cual hace pensar que una concentración p escasamente mayor que el umbral de percolación dará un racimo percolante *débil*, y con esto P_{str} muy pequeño. De ahí, que en la red de Bethe el *strength* escala como

$$P_{str} \propto (p - p_c) \tag{3.13}$$

si p se aproxima a p_c por la derecha. Por otra parte, sabiendo que existe el racimo percolante para $p > p_c$, tiene sentido pensar que justo antes de p_c el tamaño promedio de racimos sea muy grande, lo cual se observa en el denominador de la ecuación (3.12) cuando $p = \frac{1}{2} = p_c$. En este caso, S escala como

$$S \propto \frac{1}{p_c - p} \tag{3.14}$$

si p se aproxima a p_c por la izquierda [3.1].

Bibliografía

[3.1] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction To Percolation Theory*. Taylor & Francis, 1994.

Capítulo 4

Percolación en dos dimensiones

La teoría de percolación en dos dimensiones puede ser estudiada en distintos tipos de redes que varían en forma y complejidad, las más comunes y en las que se basa éste trabajo son las redes planas como la cuadrada, triangular y la llamada *panal de abeja* (ver Figura 4.1).

La red cuadrada, siempre comparada con un tablero de ajedrez, tiene casillas que de forma aleatoria e independiente pueden estar ocupadas con probabilidad p o vacías con probabilidad $1 - p$. Los racimos en la red constan de casillas ocupadas adyacentes y quedan determinados por su *perímetro* t , el cual se define como el número de casillas vacías que se encuentran a una unidad de distancia del racimo, por ejemplo, si una casilla ocupada queda rodeada por sus cuatro vecinos vacíos se habrá formado un racimo de tamaño uno. Es importante no confundir el perímetro con la superficie de un racimo ya que t también incluye los sitios vacíos que se encuentran atrapados dentro del racimo como se ejemplifica en el apartado B) de la Figura 4.2.

Para abordar la red cuadrada y lo que sucede en ella, imaginemos una cuadrícula de tamaño $L \times L$ de fondo blanco en la que se pinta de algún color la celda que resulte ocupada al declarar el parámetro $0 \leq p \leq 1$. En la Figura 4.3 se observan pequeños racimos aislados y desconectados para $p = 0.2$, mientras que para $p = 0.6$ las casillas ocupadas logran formar un racimo que percola a través de la red, claramente para $p = 0.8$ restan pocos sitios vacíos. El cambio que sufre el sistema indica que existe una probabilidad de ocupación crítica p_c a partir de la cual la red percola. Se define entonces la probabilidad $P_L(p)$ de que exista un racimo percolante en una red cuadrada de tamaño $L \times L$, por lo que

$$P_L(p)_{L \rightarrow \infty} \sim \begin{cases} 0 & \text{para } p < p_c, \\ 1 & \text{para } p \geq p_c. \end{cases} \quad (4.1)$$

En un sistema infinito la probabilidad de percolación $P_L(p)$ debe corresponder con una función escalón ya que cambia drásticamente de 0 a 1 cuando $p = p_c$, sin embargo para un sistema finito se espera que

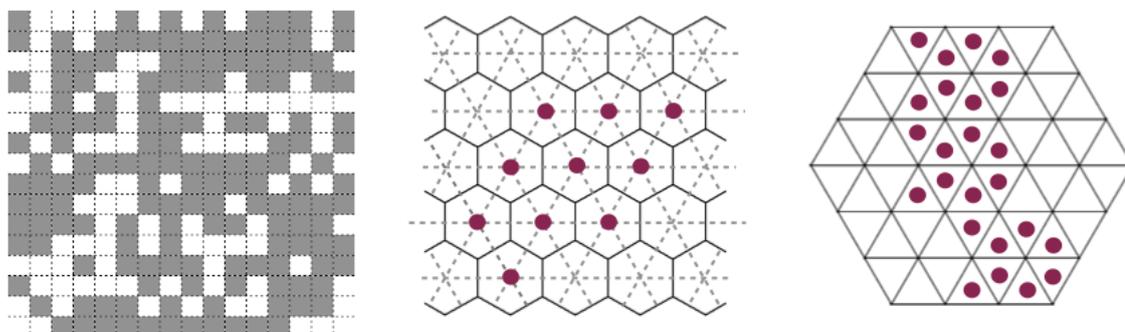


Figura 4.1: Se observa la red cuadrada, triangular y *panal de abeja*.

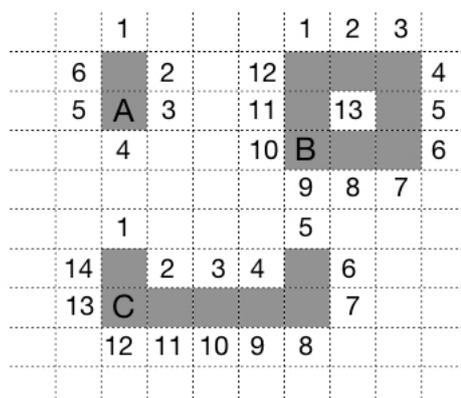


Figura 4.2: Ejemplo de racimos en una red cuadrada, se muestran racimos de tamaño dos (A), siete (C) y ocho (B); se enumeran los vecinos vacíos que conforman el perímetro de cada racimo.

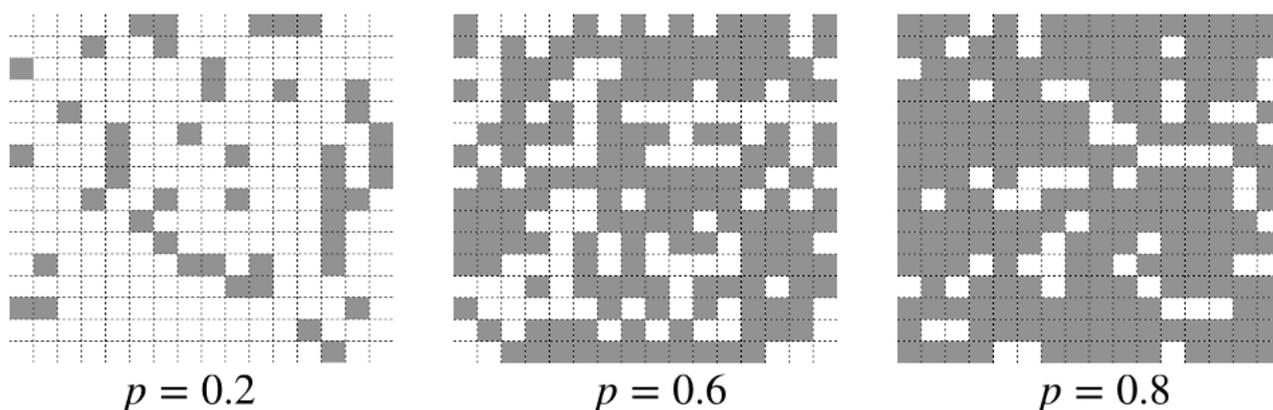


Figura 4.3: Esquema de sistemas percolantes en redes cuadradas en donde se muestra el aumento de sitios ocupados en la red conforme aumenta el parámetro de ocupación de p . Al rededor de $p = 0.6$ aparece el racimo percolante.

esta cantidad depende del tamaño de la red.

Por otro lado, una particularidad que se presenta en la red cuadrada es la imposibilidad de calcular el número promedio de racimos de tamaño s por casilla en la red (n_s) para s arbitraria. El caso más sencillo muestra que $n_1 = p(1-p)^4$, pero para racimos de mayor tamaño es necesario considerar la orientación o posición en la que se encuentran, por ejemplo, un racimo de tamaño dos puede encontrarse horizontal o verticalmente por lo que $n_2 = 2p^2(1-p)^6$, siendo seis su perímetro en ambos casos. En lo que respecta al racimo de tamaño tres, además de hallarse en línea horizontal o vertical, también puede encontrarse en forma de L siendo cada rotación de $\frac{\pi}{2}$ una nueva configuración, por lo que $t = 8$ cuando el racimo es lineal y $t = 7$ en su otra forma, de este modo $n_3 = 2p^3(1-p)^8 + 4p^3(1-p)^7$. Por otra parte, para un racimo de tamaño cuatro se tienen diecinueve posibles configuraciones y para uno de tamaño cinco suman sesenta y tres [4.1].

En la teoría de percolación es posible definir $g_{s,t}$ como el número de configuraciones de un racimo de tamaño s y perímetro t , por ejemplo, un racimo de tamaño $s = 3$ y perímetro $t = 8$ tiene $g_{3,8} = 2$

configuraciones, y $g_{3,7} = 4$ cuando $t = 7$. De forma general n_s puede ser descrito como

$$n_s = \sum_{t=1}^{\infty} g_{st} p^s (1-p)^t. \quad (4.2)$$

Es fácil ver que la ecuación (4.2) sólo es válida para ciertos casos como el de la red de Bethe, donde cada racimo de tamaño s tiene un único perímetro de la forma $t = (z-2)s + 2$, por lo que en esta red

$$n_{s_{Bethe}} = g_{st} p^s (1-p)^{(z-2)s+2}. \quad (4.3)$$

En el caso de la red cuadrada la ecuación (4.2) queda comprometida al sumar sobre todos los posibles perímetros t de un racimo de tamaño s , por lo que cada posible configuración tiene que ser encontrada y detallada para poder determinar $g_{s,t}$. En los años 60 se contó computacionalmente 10^{13} configuraciones para un racimo de tamaño veinticuatro en un tiempo de diez meses y en el 2000 se reporta el conteo de configuraciones para racimos de tamaño hasta cuarenta y seis [4.1].

Ante esto, el apoyo en herramientas computacionales está fuera de duda.

4.1. Umbral de percolación y longitud de correlación

En esta sección se calculará la probabilidad de percolación $P_L(p)$ para determinar el umbral de percolación en las distintas redes bidimensionales que se mostraron en la Figura 4.1, para ello se usará el algoritmo propuesto en [4.2], donde los autores Newman y Ziff proponen que en el contexto del ensamble microcanónico una observable Q puede ser estimada como función de p de la siguiente manera

$$Q(p) = \sum_{n=0}^N \mathcal{B}(N, n, p) Q_n, \quad (4.4)$$

donde Q_n son los valores observados al medir Q para cada valor de n desde 0 hasta el valor máximo de sitios ocupados en la red, mientras que $\mathcal{B}(N, n, p) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n}$ es la función de masa de probabilidad de una variable aleatoria con parámetros $N \geq 1$ y $p \in [0, 1]$, que corresponde a las fluctuaciones de n cuando un sistema es llenado con una densidad p . Una de las ventajas del algoritmo de Newman y Ziff es que crea sistemas a partir de los ya existentes, es decir, para crear un sistema con $n+1$ sitios ocupados se agrega al azar un sitio extra a un sistema de n sitios ocupados ya creado.

La implementación de este algoritmo (ver pseudocódigo 2) se desarrolló en el lenguaje de programación Python, en el que se requirió una matriz auxiliar, una estructura de datos y el algoritmo *Union/Find* (ver pseudocódigo 1) como a continuación se describe.

Se simula una red cuadrada como una matriz nula de tamaño $L \times L$ donde cada entrada representa un sitio vacío en la red. Cada una de las entradas es determinada por el par ordenado (i, j) , con $i, j = 0, 1, 2, \dots, L-1$, por lo que se les proporciona de manera unívoca una etiqueta de la forma $iL + j$. Con esto se genera la lista de etiquetas de la red $\mathcal{L} = \{0, 1, 2, \dots, L^2 - 1\}$. Un paso importante es decidir el orden en el que los sitios serán ocupados, por lo que mediante un generador de permutaciones de la lista \mathcal{L} se agregan sitios en la matriz cambiando del estado 0 (vacío) al 1 (ocupado).

Al inicio de la simulación, los primeros sitios añadidos de manera aleatoria se encontrarán dispersos, formando así racimos de tamaño 1 que irán creciendo conforme se agreguen más sitios en la red. Cada vez que se agrega un sitio se verifica el estado de ocupación de sus vecinos, así, para tener un registro correcto de la formación de racimos se hecha mano del algoritmo *Union/Find* como sigue:

- *Find*: Cuando existen dos sitios ocupados que son vecinos, encuentra el racimo al que pertenece cada elemento.
- *Union*: Si ambos sitios pertenecen a diferentes racimos, estos deben ser amalgamados en un mismo racimo, de lo contrario hay nada que hacer.

Es importante comentar que la búsqueda y unión de racimos se realiza mediante la modificación en la estructura de datos de la *raíz* del racimo. La raíz de un racimo permite su identificación y la de sus elementos, de este modo, dos sitios ocupados con la misma raíz pertenecerán al mismo racimo [4.2].

CAPÍTULO 4. PERCOLACIÓN EN DOS DIMENSIONES
4.1. UMBRAL DE PERCOLACIÓN Y LONGITUD DE CORRELACIÓN

Algorithm 1 Algoritmo *Union/Find* y monitoreo de tamaño de racimos

Input: Etiquetas l_1 y l_2 en la matriz

- 1: Definir función $\text{Size}[r]$ = tamaño del racimo con raíz r
- 2: Hallar la raíz r_1 del racimo al que pertenece l_1
- 3: Hallar la raíz r_2 del racimo al que pertenece l_2
- 4: **if** $r_1 = r_2$ **then**
- 5: ambos sitios pertenecen al mismo racimo
- 6: **else**
- 7: Obtener $\text{Size}[r_1]$ y $\text{Size}[r_2]$
- 8: **if** $\text{Size}[r_1] < \text{Size}[r_2]$ **then**
- 9: $\text{Size}[r_2] \leftarrow \text{Size}[r_2] + \text{Size}[r_1]$
- $\text{Size}[r_1] \leftarrow 0$
- $r_1 \leftarrow r_2$
- 10: **if** $\text{Size}[r_2] < \text{Size}[r_1]$ **then**
- 11: $\text{Size}[r_1] \leftarrow \text{Size}[r_1] + \text{Size}[r_2]$
- $\text{Size}[r_2] \leftarrow 0$
- $r_2 \leftarrow r_1$
- 12: **if** $\text{Size}[r_2] = \text{Size}[r_1]$ **then**
- 13: **if** $r_1 < r_2$ **then**
- 14: $\text{Size}[r_1] \leftarrow \text{Size}[r_1] + \text{Size}[r_2]$
- $\text{Size}[r_2] \leftarrow 0$
- $r_2 \leftarrow r_1$
- 15: **else**
- 16: $\text{Size}[r_2] \leftarrow \text{Size}[r_2] + \text{Size}[r_1]$
- $\text{Size}[r_1] \leftarrow 0$
- $r_1 \leftarrow r_2$

Algorithm 2 Implementación del algoritmo de Newman y Ziff

- 1: Generar matriz \mathcal{M} nula de tamaño $L \times L$
- 2: Asignar a cada entrada una etiqueta de la forma $iL + j$, con $i, j \in \{0, 1, \dots, L - 1\}$
- 3: Generar lista de etiquetas $\mathcal{L} = \{0, 1, \dots, L^2 - 1\}$
- 4: Generar $\mathcal{L}_{\text{perm}}$, es decir, permutar lista de etiquetas \mathcal{L}
- 5: Set $a \leftarrow 0$
- 6: Tomar $l = \mathcal{L}_{\text{perm}}[a]$
- 7: Buscar celda l en \mathcal{M} y cambiar del estado 0 al 1
- 8: Revisar el estado de ocupación de los vecinos de l
- 9: Aplicar algoritmo *Union/Find* sobre l y sus vecinos
- 10: **if** la red percola **then**
- 11: Detener la simulación y almacenar número $n_c = a + 1$ de sitios que fueron agregados hasta que el sistema percoló
- 12: **else**
- 13: Set $a \leftarrow a + 1$ y repetir desde el paso 6
- Repetir el programa 10^4 veces.

CAPÍTULO 4. PERCOLACIÓN EN DOS DIMENSIONES
4.1. UMBRAL DE PERCOLACIÓN Y LONGITUD DE CORRELACIÓN

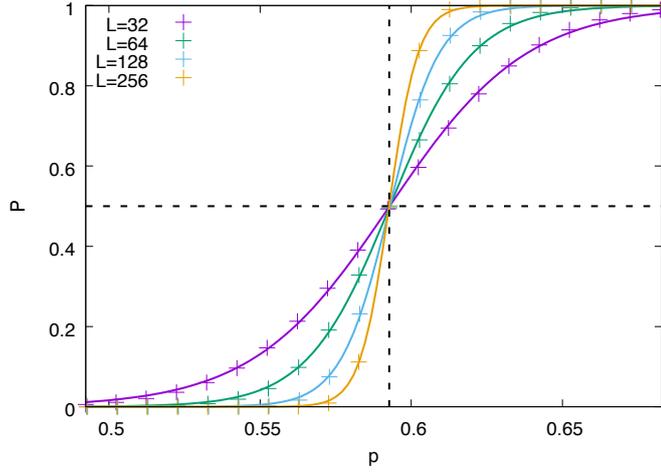


Figura 4.4: Las estrellas indican los datos computacionales para $L = 32, 64, 128, 256$ mientras que las líneas sólidas corresponden al ajuste indicado en la ecuación (4.8). La línea punteada vertical muestra el umbral de percolación en el límite termodinámico.

El proceso se repite hasta que se detecta que algún sitio de la columna izquierda tiene la misma raíz que algún sitio de la columna derecha, es decir, hasta que el sistema percola. De esta forma, la densidad crítica se estima como n_c/L^2 , donde n_c es el número de sitios que fueron agregados en la matriz hasta la aparición del racimo percolante. Al correr muchas veces este programa se obtiene una colección de números críticos n_c con los cuales se puede estimar la probabilidad de percolación $P_L(p)$. Para esto, notar que la probabilidad f_L de que un sistema de tamaño L percole con exactamente n sitios agregados es:

$$f_L(n) = \frac{\text{frecuencia de } n}{\text{total de simulaciones realizadas}}, \quad (4.5)$$

que depende explícitamente del tamaño del sistema. De ahí que la probabilidad de que el sistema percole con a lo más n sitios agregados sea

$$F_L(n) = \sum_{k=0}^n f_L(k). \quad (4.6)$$

Puesto que la probabilidad de que un sistema, con probabilidad de ocupación p , tenga exactamente n sitios ocupados en el ensamble canónico es una distribución binomial $\mathcal{B}(L^2, n, p)$, la estimación de la probabilidad de percolación se calcula como

$$P_L(p) = \sum_{n=0}^{L^2} F_L(n) \mathcal{B}(L^2, n, p). \quad (4.7)$$

Para dar una estimación del umbral de percolación p_{cL} se grafica $P_L(p)$ como función de p (Figura 4.4), la forma sigmoidal del gráfico motiva a proponer el ajuste

$$P_L(p) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{p - p_{cL}}{\Delta_L} \right) \right), \quad (4.8)$$

el cual coincide con los puntos obtenidos en la simulación. En particular, se busca hallar el valor de p en el que la ecuación (4.8) es igual a 0.5 pues implicaría que $p = p_{cL}$. El gráfico de la Figura 4.4 muestra la intersección de la recta $y = 1/2$ y las curvas para distintos valores de L , la línea punteada vertical indica en el eje x el umbral de percolación p_{cL} en el límite termodinámico.

Para cada determinación estadística de p_{cL} , para un sistema de tamaño L , se mide Δ_L que representa el ancho de la región de transición y que escala como función del tamaño del sistema como [4.3]

$$\Delta_L \propto L^{-1/\nu}, \quad (4.9)$$

CAPÍTULO 4. PERCOLACIÓN EN DOS DIMENSIONES
4.2. STRENGTH Y TAMAÑO PROMEDIO DE RACIMOS FINITOS

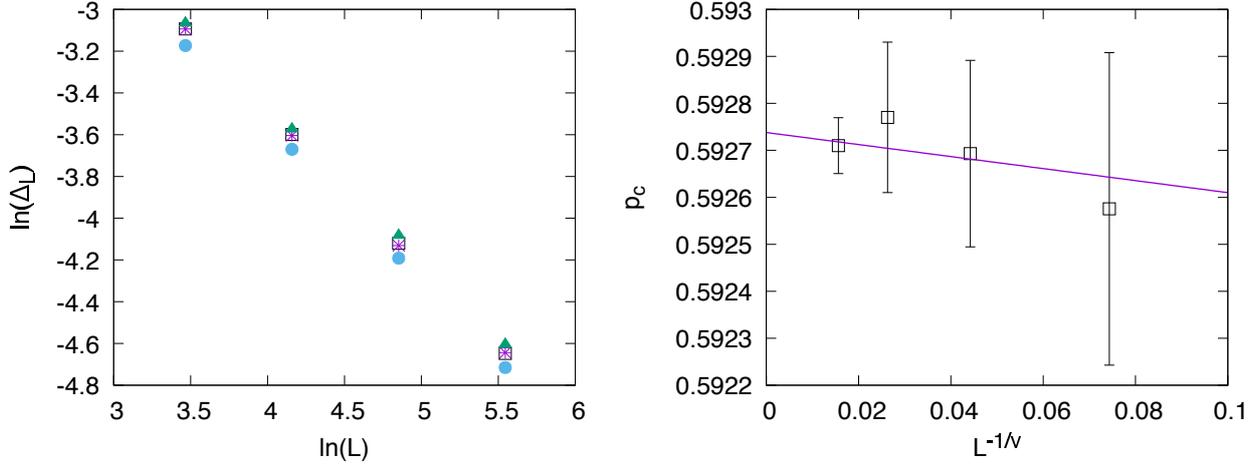


Figura 4.5: Del lado izquierdo se muestra el comportamiento de Δ_L como función de L en escala logarítmica para las distintas redes, mientras que del lado derecho se observa el umbral de percolación en la red cuadrada para $L = 32, 64, 128, 256$ y su error.

donde ν es el exponente crítico asociado a la longitud de correlación mediante

$$\xi^{-1} \propto (p - p_c)^\nu.$$

De manera análoga, se grafica Δ_L contra L en escala logarítmica (Figura 4.5) y se propone el ajuste mediante una función de la forma $g(x) = ax^b$, de donde se obtiene el valor de ν que se reporta en la Tabla 4.1. Una vez estimado ν se utiliza la relación de escalamiento finito para el umbral de percolación, el cual está dado por

$$p_{cL} - p_c \propto L^{-1/\nu}. \quad (4.10)$$

La relación anterior permite estimar el umbral de percolación en el límite termodinámico como la extrapolación del comportamiento de p_{cL} como función de $L^{-1/\nu}$. Para esto, se ajustan los datos de p_{cL} de acuerdo con la función $f(x) = mx + b$, donde $x = L^{-1/\nu}$. De esta forma, si $L \rightarrow \infty$, entonces $x \rightarrow 0$, por lo que la estimación del umbral de percolación en el límite termodinámico es justamente b . En la Figura 4.5 se muestra la determinación de ν y p_{cL} con su ajuste lineal para la red cuadrada a primeros vecinos. El análisis se realizó de los datos sobre diferentes tamaño de sistema $L = 32, 64, 128, 256$, en donde cada uno se repitió 10^4 veces para cada una de las redes.

Tabla 4.1: Estimaciones para p_c y ν en distintas redes bi-dimensionales, en todas ellas se implementó el algoritmo explicado al inicio de esta sección.

Red	p_c (en este trabajo)	p_c (en la literatura)	$-1/\nu$
Cuadrada (NN)	0.59273 ± 0.00006	$0.59274 \dots$ [4.4]	-0.747 ± 0.005
Cuadrada (NNN)	0.4069 ± 0.0001	$0.407 \dots$ [4.5]	-0.747 ± 0.003
Triangular	0.4999 ± 0.0004	$1/2$ [4.6]	-0.739 ± 0.003
Honeycomb	0.6974 ± 0.0002	$0.69704 \dots$ [4.7]	-0.733 ± 0.007

4.2. Strength y tamaño promedio de racimos finitos

En el capítulo 3 se definió el *strength*, P_{str} , como la probabilidad de que un sitio elegido al azar pertenezca al racimo percolante. Es importante recordar que es una cantidad que depende de la probabilidad de ocupación p . El strength mide la fracción de sitios que pertenecen al racimo percolante del total de

CAPÍTULO 4. PERCOLACIÓN EN DOS DIMENSIONES
4.2. STRENGTH Y TAMAÑO PROMEDIO DE RACIMOS FINITOS

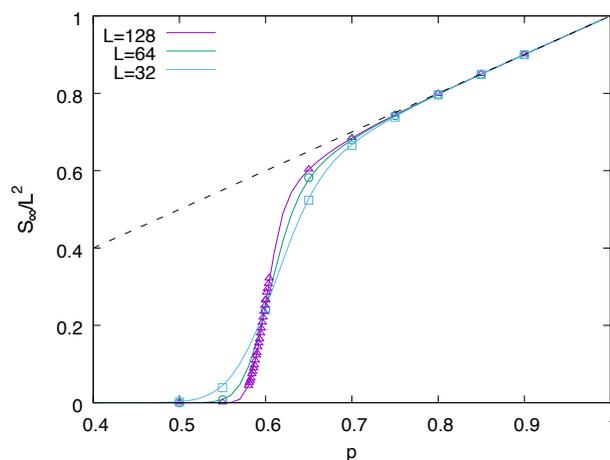


Figura 4.6: Datos obtenidos de simulación del strength para redes cuadradas de tamaño $L=32, 64$ y 128 ; la línea sólida corresponde al algoritmo basado en el trabajo de Newman y Ziff, mientras que los puntos al de Hoshen y Kopelman. La línea punteada es la función identidad.

sitios ocupados en la red, así en la cadena unidimensional se tiene que $P_{str} = 0$ para $p < 1$, mientras que en la red de Bethe se comporta como en la ecuación (3.7). En general, P_{str} es cero para valores por debajo de p_c y mayor que cero apenas por arriba del umbral de la percolación.

En esta sección se estimará el strength para la red cuadrada a primeros vecinos aplicando nuevamente el algoritmo de Newman y Ziff con la diferencia de que el tamaño promedio del racimo percolante será la observable de interés, determinando su valor para distintos valores de $0 \leq n \leq L^2$. Otro cambio realizado al programa fue la condición que detiene el proceso, que en este caso será cuando se hayan ocupado todos los sitios en la red. Tras finalizar la simulación se repite la convolución presentada en (4.4) con los valores medidos previamente.

Adicionalmente, basados en el trabajo de Hoshen y Kopelman [4.8] (ver pseudocódigo 3), se simuló un sistema para distintos valores de p en el que se midió el tamaño promedio del racimo percolante. Este algoritmo se diferencia del de Newman y Ziff porque para cada valor de p genera un sistema completamente nuevo, posteriormente analiza columna por columna (o fila por fila) la formación de racimos haciendo uso de la técnica de *multietiquetado* [4.8] o *conteo de racimos* [4.9].

Algorithm 3 Implementación del algoritmo de Hoshen y Kopelman

- 1: Fijar $p \in [0, 1]$
- 2: Generar vector booleano X_0 de tamaño L con probabilidad de ocupación p
- 3: **for** $i \in \{1, 2, \dots, L - 1\}$ **do**
- 4: Generar vector booleano X_1 de tamaño L con probabilidad de ocupación p
- 5: **for** $j \in \{1, 2, \dots, L\}$ **do**
- 6: **if** $j = L$ **then**
- 7: Inspeccionar el vecino $X_1[j]$
- 8: Aplicar el algoritmo *Union/Find* sobre $X_0[j]$ con su vecino $X_1[j]$
- 9: **else**
- 10: Inspeccionar los vecinos $X_0[j + 1]$ y $X_1[j]$
- 11: Aplicar el algoritmo *Union/Find* sobre $X_0[j]$ con sus vecinos $X_0[j + 1]$ y $X_1[j]$
- 12: Set $X_1 \leftarrow X_0$
- 13: Determinar si el sistema percoló

De las 10^4 repeticiones de ambos algoritmos se obtuvo el tamaño promedio del racimo percolante de manera recursiva usando que

$$\langle A \rangle_{k+1} = \frac{1}{k+1} (k \langle A \rangle_k + A_{k+1}),$$

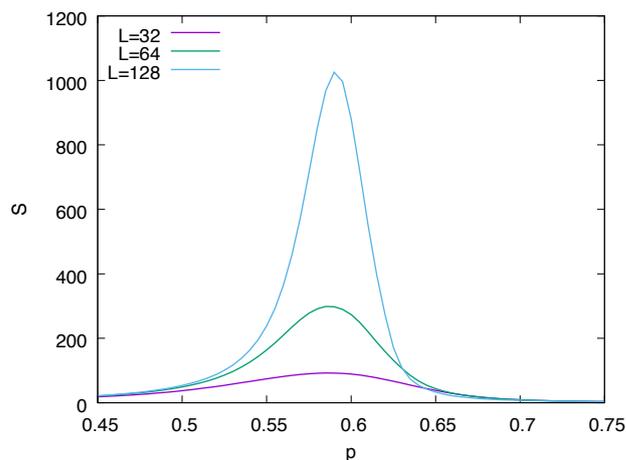


Figura 4.7: Tamaño promedio de racimos finitos en función de p , el máximo de cada distribución ocurre en las cercanías de p_c .

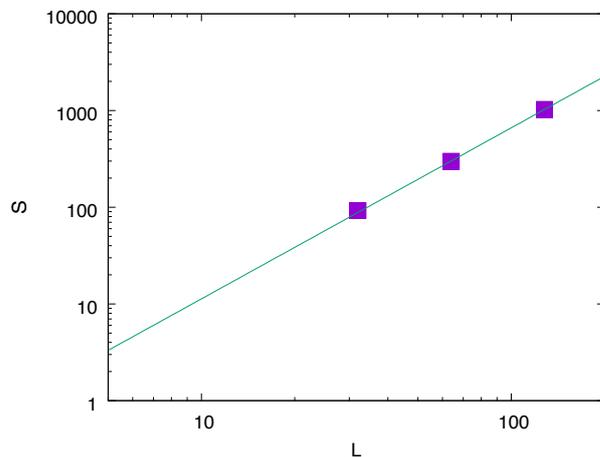


Figura 4.8: Ajuste de los datos de S y la concordancia de la simulación para el tamaño promedio de racimos en el umbral de percolación como función de L .

donde $\langle A \rangle_n$ es el promedio sobre n muestreos y A_{n+1} es el valor de la variable aleatoria en el muestreo $n + 1$. En la Figura 4.6 se puede ver el tamaño promedio del racimo percolante normalizado por L^2 como función de p para la implementación de ambos algoritmos, los cuales concuerdan bastante bien en los distintos tamaños de la red cuadrada; la línea punteada es la función identidad que muestra que la densidad del racimo percolante es igual a la probabilidad de ocupación para valores de p grandes. Esto último, se debe a que en este caso predomina el racimo percolante sobre los racimo finitos a medida que p se vuelve mayor que p_c . En cuanto a tiempo de cómputo, el algoritmo de Newman y Ziff resultó ser más rápido que el Hoshen y Kopelman por la manera en que se generan los sistemas.

Por otro lado, la simulación concerniente a la formación de racimos finitos consiste nuevamente en una matriz cuadrada nula y la lista \mathcal{L} permutada, además de una estructura de datos en la que se registra y actualiza los tamaños de los racimos que formar al ir agregando sitios. Notar que el tamaño de un racimo que resulta de la unir, mediante un sitio nuevo, un racimo de tamaño u con uno de tamaño v es $u + v + 1$. Así, cada vez que se agrega un sitio en la red el algoritmo cuenta los racimos existentes e identifica al racimo más grande que hay en ese momento, luego procede a calcular las siguientes cantidades:

- s_1 igual a la suma de los tamaños de los racimos finitos,

CAPÍTULO 4. PERCOLACIÓN EN DOS DIMENSIONES
4.2. STRENGTH Y TAMAÑO PROMEDIO DE RACIMOS FINITOS

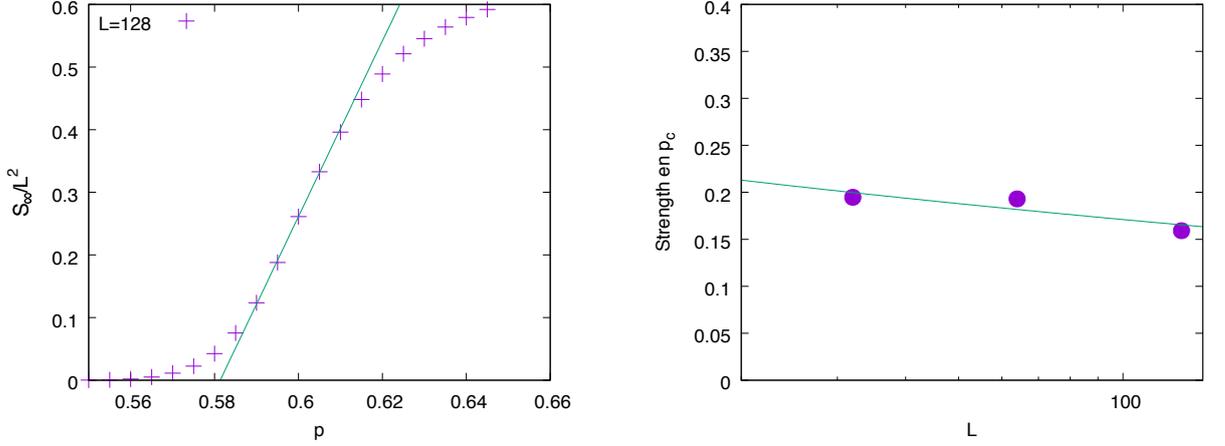


Figura 4.9: Del lado izquierdo se muestra el ajuste lineal a los puntos cercanos a p_c para una red con $L = 128$; de lado derecho se tiene la interpolación de valores de P_{str} en p_c como función de L , los puntos morados corresponden a lo obtenido a través de la interpolación.

- s_2 igual a la suma de los cuadrados de los tamaños de los racimos finitos.

Si el sistema no percola el tamaño promedio de los racimos finitos está dado por el cociente $s = s_2/s_1$, sin embargo cuando el sistema percola debe sustraerse a las cantidades s_1 y s_2 la aportación del racimo percolante antes de realizar el cociente, esto es, $s_1 - a$ y $s_2 - a^2$, donde a corresponde al tamaño del racimo percolante. El momento de la percolación es un paso importante en el algoritmo, por lo que en algún momento de la simulación puede ocurrir que el único racimo presente en la red sea el percolante, de ser así se tiene que $s = 0$. Por cada vez que se ejecuta el algoritmo se almacena el valor del cociente s para cada n y se halla su promedio de manera recursiva, el resultado es una lista cuya n -ésima entrada nos dirá el tamaño promedio de los racimos finitos en un sistema con n sitios ocupados. De esta forma se calcula la observable S_n , la cual se convolucionca con la distribución binomial para así obtener el tamaño promedio de racimos finitos S en función de p .

Finalmente, con la información recabada de las simulaciones se procede a la determinación de los exponentes críticos γ y β asociados al tamaño promedio de racimos S y al strength P_{str} , respectivamente, mediante

$$S \propto (p - p_c)^{-\gamma}$$

y

$$P_{str} \propto (p - p_c)^\beta$$

pensando en ambos en una red infinita. La forma de hacerlo es aplicar las técnicas de escalamiento de tamaño finito como anteriormente se hizo para el cálculo del exponente crítico ν , esto es,

$$S \propto L^{\gamma/\nu} \tag{4.11}$$

y

$$P_{str} \propto L^{-\beta/\nu}. \tag{4.12}$$

Las relaciones (4.11) y (4.12) generalmente permiten una estimación más precisa de estos exponentes ya que sus expresiones no están ligadas al valor de p_c [4.3].

Para calcular γ se identifica el tamaño promedio de racimos en el umbral de percolación para distintos tamaños de la red, estos valores corresponden a los puntos máximos de las gráficas presentadas en la Figura 4.7, por lo que en la Figura 4.8 se muestra la dependencia de estas cantidades como función de L . Mediante un ajuste de la forma $f(x) = mx^b$ se extrapolan los puntos y se llega a que $\gamma/\nu = 1.76871 \pm 0.01969$, por lo que $\gamma = 2.367$ que concuerda con el valor reportado en la literatura $\gamma = 43/18$ [4.1]. En cuanto a β , observar que en el lado izquierdo de la Figura 4.9 los puntos alrededor del umbral de percolación parecen tender a una línea, por lo que en un rango específico que contenga a p_c se ajustan dichos puntos

CAPÍTULO 4. PERCOLACIÓN EN DOS DIMENSIONES
4.2. STRENGTH Y TAMAÑO PROMEDIO DE RACIMOS FINITOS

a una función $h(x) = ax + b$ con la que se puede hallar el valor del strength en p_c , es decir, se calcula $h(0.5927)$. Las cantidades obtenidas en los distintos tamaños de la red se grafican y ajustan de la misma manera que se hizo para γ , por lo que se encuentra que $-\beta/\nu = -0.136262 \pm 0.07799$ y finalmente que $\beta = 0.1824$, siendo $\beta = 5/36$ el valor aceptado.

Bibliografía

- [4.1] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction To Percolation Theory*. Taylor & Francis, 1994.
- [4.2] M. E. J. Newman and R. M. Ziff, “Fast monte carlo algorithm for site or bond percolation,” *Phys. Rev. E*, vol. 64, p. 016706, 2001.
- [4.3] M. D. Rintoul and S. Torquato, “Precise determination of the critical threshold and exponents in a three-dimensional continuum percolation model,” *J. Phys. A-Math. Gen.*, vol. 30, no. 16, pp. L585–L592, 1997.
- [4.4] J. L. Jacobsen, “Critical points of potts and $o(n)$ models from eigenvalue identities in periodic temperley–lieb algebras,” *J. Phys. A-Math. Theor.*, vol. 48, no. 45, p. 454003, 2015.
- [4.5] K. Malarz and S. Galam, “Square-lattice site percolation at increasing ranges of neighbor bonds,” *Phys. Rev. E*, vol. 71, p. 016125, 2005.
- [4.6] D. Stauffer, “Scaling theory of percolation clusters,” *Phys. Rep.*, vol. 54, no. 1, pp. 1 – 74, 1979.
- [4.7] J. L. Jacobsen, “High-precision percolation thresholds and potts-model critical manifolds from graph polynomials,” *J. Phys. A-Math. Theor.*, vol. 47, no. 13, p. 135001, 2014.
- [4.8] J. Hoshen and R. Kopelman, “Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm,” *Phys. Rev. B*, vol. 14, pp. 3438–3445, 1976.
- [4.9] K. Murthy, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Universities Press, 2004.

Capítulo 5

Aplicaciones de la teoría de percolación en la agricultura

El material abordado en los capítulos anteriores ha permitido familiarizarse con la teoría de percolación y sus conceptos más importantes. El objetivo fundamental del presente trabajo es utilizar la teoría de percolación como herramienta para modelar la dispersión de ciertos patógenos sobre una plantación como un fenómeno de transporte, que ocurre sobre un medio aleatorio, y proponer configuraciones de sembrado que permitan eliminar o al menos minimizar la propagación y sus posibles consecuencias. En particular se discute el caso del género *Phytophthora* que es uno de los organismos más devastadores en agricultura.

Del griego *phytón*, “planta” y *phthorá*, “destrucción”, el género *Phytophthora* abarca más de 50 organismos responsables de la descomposición y muerte de especies vegetales, entre ellos se encuentra *P. Capsici* que ataca un amplio rango de importantes especies alimenticias como la papa, el tomate y los chiles. En México, las zonas de el Bajío y Puebla han reportado mortandad de hasta el 100 % en plantaciones de chile debido a este organismo [5.1]. Una vez que el patógeno hace contacto con la planta afecta principalmente las raíces y el tallo, causando su marchitez y pudrición de frutos. Debido a que algunos tratamientos fúngicos y químicos resultan ineficaces y hasta dañinos para el suelo [5.2] se vuelve necesaria la búsqueda de configuraciones que permitan disminuir las afectaciones de este patógeno.

Si bien es cierto que distribuir homogéneamente distintas especies de plantas sobre la plantación resulta ser una buena estrategia para evitar la propagación de enfermedades en plantaciones [5.3, 5.4], a nivel práctico el cuidado y manejo de éstas puede resultar no factible a los productores ya que diferentes tipos de plantas pueden requerir cuidados y consumo de nutrientes específicos. Además, en la literatura se encuentran estudios experimentales que relacionan un aumento en la producción neta de una plantación debido a intercalar columnas enteras con distintas variedades de plantas [5.5–5.7]. Por esto, se estudiará la propagación de *Phytophthora* sobre plantaciones con estrategias de siembra alternada y se buscará determinar la combinación de susceptibilidades (de las plantas) que eviten la formación de un racimo percolante de plantas susceptibles o enfermas, contrarrestando así la propagación del patógeno sobre toda la plantación.

5.1. Modelo

En este trabajo se modela una plantación como una red cuadrada de tamaño $L \times L$ en cuyas celdas se puede sembrar una planta. Se define el espaciamiento de la red como la distancia máxima que el organismo es capaz de desplazarse antes de entrar en un estado de inactividad o morir por inanición, esto asegura que un patógeno activo solo puede propagarse hacia los vecinos cercanos (2N o 3N según se especifique). Además, es necesario considerar los siguientes parámetros:

- La probabilidad de ocupación p , que representa el porcentaje de celdas sembradas;
- La susceptibilidad χ_A , que es la probabilidad de que la planta tipo A expuesta al patógeno se enferme;



Figura 5.1: Las celdas con combinaciones *ocupado-susceptible-inoculado* y *ocupado-susceptible-no inoculado* favorecen la propagación del patógeno. Por otra parte las celdas *ocupado-resistente-inoculado* y *vacío-inoculado* pueden servir como conectores entre racimos ajenos. Los casos restantes quedan descartados del análisis al no propiciar la propagación.

- La porción de celdas inoculadas en la red al inicio del proceso de propagación denotada por I .

La susceptibilidad de cada variedad de planta puede ser determinada al observar experimentalmente la supervivencia (\mathcal{P}), es decir, observar el número de plantas que no enfermaron tras ser expuestas al patógeno. Estas cantidades se relacionan a través de la siguiente fórmula [5.3]:

$$\chi = 1 - \frac{\mathcal{P}}{100}. \quad (5.1)$$

En la Tabla 5.1, se muestran los resultados experimentales de la susceptibilidad de algunas de plantas de chiles contra varias cepas de *Phytophthora* reportados en [5.3].

Tabla 5.1: Resultados experimentales de susceptibilidades al patógeno para diferentes variedades del género *Capsicum*: “Chile Serrano” (χ_S), “Chile de Arbol” (χ_{Ar}) y “Chile Poblano” (χ_P), expuestas a varios aislamientos de *Phytophthora*.

Oomiceto	χ_S	χ_{Ar}	χ_P
PcV01	0.60	1.0	0.89
PcV51	0.46	0.27	0.76
PcV77	0.64	0.36	0.04
PcV90	0.40	0.10	0.19
Testigo	0	0	0

Las celdas inoculadas se distribuyen de manera uniforme considerando los valores $I = 0, 0.1, 0.5, y 0.8$, donde el caso extremo $I = 0$ indica que únicamente una celda de la red tiene presencia del patógeno. En cuanto a la probabilidad de ocupación se estudia $p = 1, 0.9, 0.8, 0.7$.

El caso $I = 0$ y $p = 1$ permite ver que la susceptibilidad χ_A de la planta tipo A juega el rol de la probabilidad de ocupación en el caso tradicional de la teoría de percolación, por lo que si χ_A es menor que el umbral de percolación p_c la propagación del patógeno solo puede ocurrir sobre racimos finitos de plantas susceptibles. La pregunta que surge es: ¿qué pasa si la especie que se desea sembrar tiene una susceptibilidad mayor que el umbral de percolación? Puesto que la porción de suelo inoculado y la susceptibilidad de una planta son parámetros que no se pueden modificar a nuestro gusto, se recomienda sembrar una densidad menor, es decir, $p < 1$. La reducción del porcentaje de ocupación implica que quedarán celdas sin sembrar lo que puede complicar al patógeno su acceso a plantas susceptibles, sin embargo, no sembrar un terreno en su totalidad conlleva a pérdidas económicas.

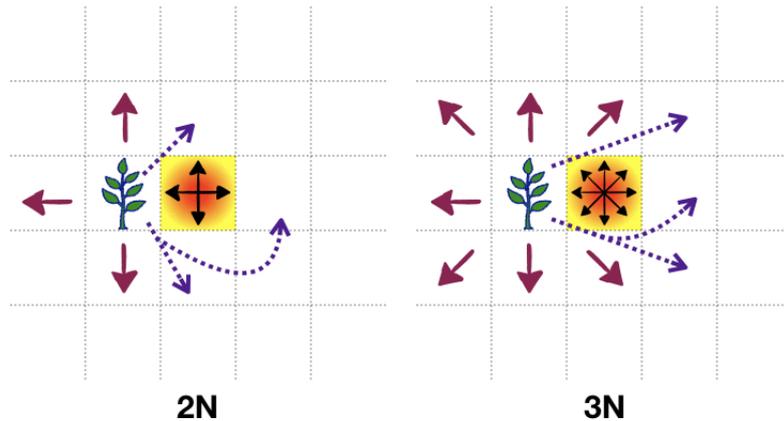


Figura 5.2: Modificación a la definición de vecinos cercanos. La celda gradiente amarillo-rojo representa el sitio inoculado con el patógeno, aunque no se indica esta celda forma parte de los vecinos cercanos habituales señalados por flechas continuas. Las flechas punteadas indican las celdas que se incorporan en la nueva definición.

La estrategia de siembra alternada propone plantar conjuntamente una segunda planta tipo B con mayor resistencia al patógeno que pueda servir como una barrera natural para contenerlo localmente. En este trabajo se busca determinar la susceptibilidad χ_B que hace percolar el sistema para los parámetros I, p y χ_A fijos. El caso particular $\chi_B = \chi_A$ se analiza por separado ya que, aunque no implica que se trate de la misma especie, al final del proceso de propagación su comportamiento es como el de una plantación monocultivo. Las estrategias de siembra alternada que se analizarán son

- Columnas alternadas;
- Diagonales alternadas.

Notar que cuando $p < 1$ puede haber celdas en la red con distintas condiciones de ocupación e inoculación como lo muestra la Figura 5.1 y que se describen a continuación:

- *Ocupado-susceptible-inoculado* indica celdas dotadas de una planta susceptible que al crecer sobre suelo inoculado inevitablemente enferma y transmite la enfermedad;
- *Ocupado-susceptible-no inoculado* son celdas ocupadas por una planta susceptible que inicialmente están sin presencia del patógeno pero que pueden contraerlo de alguien cercano y después propagarlo a las plantas susceptibles adyacentes;
- *Ocupado-resistente-inoculado* se refiere a las celdas ocupadas por una planta resistente que pese a estar inicialmente sobre suelo inoculado no desarrolla síntomas de la enfermedad pero puede transmitirla a sus vecinos;
- *Ocupado-resistente-no inoculado* representa las celdas que al comienzo no tienen presencia del patógeno y se encuentran ocupadas por una planta que por su resistencia no contrae la enfermedad de sus vecinos, más aún, si un patógeno alcanza una celda de este tipo no puede salir de ella;
- *Vacío-no inoculado* son celdas vacías sin presencia del patógeno que, al igual que el punto anterior, retienen al patógeno que llega durante el proceso de propagación;
- *Vacío-inoculado* describe celdas vacías con presencia del patógeno al inicio del proceso de propagación, el organismo detecta y ataca a plantas susceptibles que se encuentren en celdas adyacentes.

Sin embargo, en la simulación, las celdas *vacías-no inoculadas* y *ocupadas -resistente-no inoculadas* no serán tomadas en cuenta ya que no propician la propagación. Por otra parte, uno de los efectos

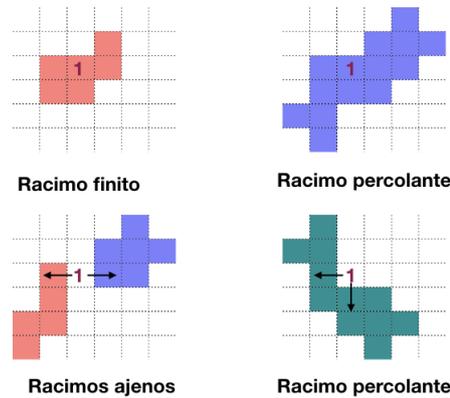


Figura 5.3: Las redes superiores muestran el caso en el que un sitio inoculado (1) queda dentro de los racimos de plantas. En las redes inferiores el punto de infección queda por fuera de los racimos pero las características de movilidad del patógeno le permiten llegar a ellos.

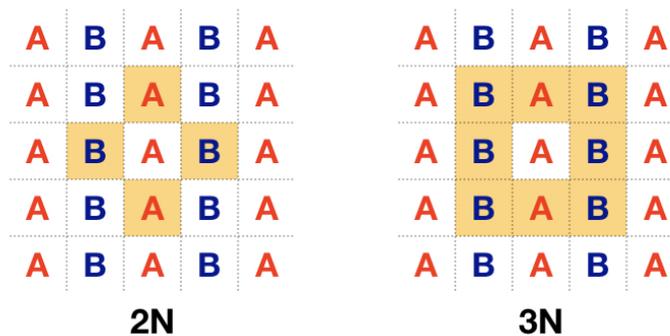


Figura 5.4: Ejemplo del arreglo de las plantas en la red y configuración local de primeros (2N) y segundos (3N) vecinos cercanos para una planta tipo A en el modelo de columnas alternadas.

importantes que deben ser tomados en cuenta en la simulación es cuando una planta susceptible tiene como vecino una celda vacía e inoculada, ya que modifica la definición de vecinos cercanos en la red, permitiendo que la planta y sitios que se encuentran a mayor distancia que el espaciado de la red formen parte del mismo racimo. En la Figura 5.2 se muestra cómo la celda inoculada sirve de enlace a la planta susceptible, de este modo la planta conecta con sus vecinos cercanos habituales y con 3 celdas más indicadas con flechas punteadas que en la definición tradicional no puede alcanzar. Más aún, las celdas vacías e inoculadas pueden conectar racimos ajenos como se observa en las redes inferior izquierda de la Figura 5.3. En las secciones 5.2 y 5.3 se discute brevemente las particularidades de cada uno de los modelos de sembrado propuestos.

5.2. Columnas alternadas

La primera configuración de siembra que se analizará sitúa plantas de la especie A en la primera columna (de izquierda a derecha), del tipo B en la segunda y nuevamente plantas tipo A en la tercera, alternando así por toda la red.

Como se muestra en la Figura 5.4 los primeros vecinos de una especie tipo A están conformados por dos de su tipo y dos del tipo B, mientras que en sus segundos vecinos aumenta a 6 el número de plantas tipo B que la resguardan.

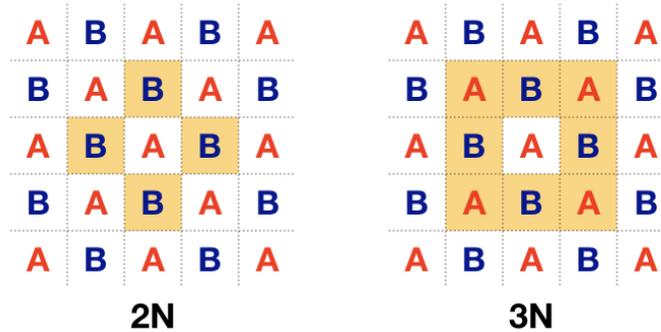


Figura 5.5: Configuración de 2N y 3N para el modelo de diagonales alternadas.

5.3. Diagonales alternadas

En este modelo se alternan ambos tipos de plantas sobre las diagonales de la red. El contraste entre esta configuración y la de columnas se puede apreciar en la Figura 5.5 donde se indican los primeros y segundos vecinos cercanos de una planta tipo A.

Bajo el supuesto de que la planta tipo B resiste mejor el ataque del patógeno y no lo propaga a sus vecinos, puede verse en el apartado 2N de la Figura 5.5 que el arreglo en diagonales alternadas puede derivar en una disminución de la tasa de transmisión del patógeno, ya que todos los vecinos de la planta tipo A son una especie B. En contraste, el modelo de columnas alternadas para la misma definición de vecindad promueve la formación de racimos susceptibles a través de las verticales. En ambos modelos el sistema queda dividido en dos subsistemas de tamaño $L^2/2$ donde uno es llenado con plantas tipo A y el otro con plantas tipo B.

5.4. Simulación

Para simular la red cuadrada y el proceso de propagación se generan dos matrices nulas, M_1 y M_2 , de tamaño $L \times L$. La matriz M_1 registrará la ubicación de las celdas inoculadas una vez fijado el parámetro I , mientras que en M_2 se marcarán las entradas con plantas susceptibles. De igual manera que en el capítulo 4, se identifica las entradas de ambas matrices de forma única con las etiquetas de la lista $\mathcal{L} = \{0, 1, 2, \dots, L^2 - 1\}$.

La simulación realizada es una implementación híbrida entre los algoritmos Hoshen-Kopelman y Newman-Ziff (ver pseudocódigo 4). Dicha implementación consta de dos partes y será explicada en el modelo de columnas alternadas:

- 1) Una vez que el parámetro I ha sido establecido, el número n_I de celdas inoculadas al inicio del proceso de propagación es generado aleatoriamente de la distribución binomial $\mathcal{B}(L^2, I)$. Para ubicar las entradas en la matriz M_1 que tendrán presencia del patógeno se eligen al azar n_I elementos de \mathcal{L} . Las entradas de la matriz M_1 asociadas a las etiquetas seleccionadas cambiarán del estado 0 al 1; este sistema permanecerá sin más cambios hasta el final de la simulación. En cuanto a la matriz M_2 , las columnas asignadas a la planta tipo A serán consideradas como sistemas uno-dimensionales con probabilidad de ocupación $p\chi_A$. Con el algoritmo de Hoshen y Kopelman se producen estos sistemas lineales, los cuales indicarán mediante un 1 las entradas de la matriz que resultan con planta susceptible como se muestra en la Figura 5.7 a). Las condiciones para amalgamar sitios es que una plantas susceptible tenga como vecino otra susceptible o tenga por vecino celdas que en la matriz M_1 corresponden a una zona inoculada. En la Figura 5.6 se muestra la matriz M_1 con los sitios inoculados y la matriz M_2 con los racimos lineales de tipo A que fueron generados. Notar que si una entrada de M_2 con planta susceptible corresponde a una celda inoculada en M_1 se mantendrá la definición tradicional de vecinos cercanos para dicho elemento en M_2 . Por otro lado, si la correspondiente entrada en M_1 no está inoculada pero alguno de sus vecinos sí lo está significa

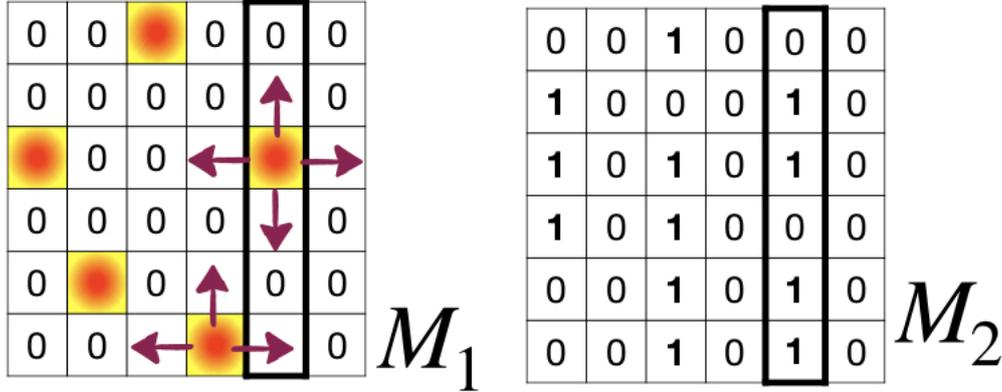


Figura 5.6: Plantas susceptibles tipo A han sido colocadas en el sistema M_2 , la posición de cada una de ellas es comparada con su correspondiente en la matriz M_1 . La celda inferior de la columna marcada en M_2 tiene por vecino izquierdo un sitio inoculado el cual le induce la nueva definición de vecino cercano.

que se hará la modificación de vecino cercano explicada en la Figura 5.2. Al final de este proceso la matriz M_2 brindará una configuración inicial sobre la cual se aplica el siguiente paso.

- ii) Una vez establecida la configuración inicial de las plantas tipo A , se estimará el umbral de percolación agregando plantas tipo B mediante el algoritmo de Newman y Ziff (Figura 5.7 b) y c)). Recordar que este algoritmo se caracteriza por el cálculo de una observable Q_n agregando de forma aleatoria sitio por sitio en la red. Las plantas tipo B se colocan en las columnas que les corresponden según el modelo de la siguiente manera: Se toma un etiqueta de la lista permutada $\mathcal{L}_B = \mathcal{L} - \mathcal{L}_A$ y se genera un número aleatorio x de una distribución uniforme en el intervalo $(0, 1)$, si $x < p$ la celda de la matriz M_2 correspondiente a la etiqueta seleccionada tiene una planta tipo B , en caso contrario pasa nada y se repite el proceso para otra etiqueta en \mathcal{L}_B . Las entradas de M_2 que resulten con una planta tipo B pasarán del estado 0 al 1 y sus vecinos serán examinados y, en su caso, unidos a través del algoritmo *Union/Find* (ver sección 4.1). Las plantas tipo B podrán amalgamarse con plantas de su mismo tipo, con las plantas A y con los sitios vacíos e inoculados indicados en M_1 que resulten adyacentes. El proceso finaliza cuando el sistema percola.

Algorithm 4 Algoritmo híbrido Newman-Ziff y Hoshen-Kopelman

Input: Parámetros p, χ_A e I

- 1: Generar matrices, \mathcal{M}_1 y \mathcal{M}_2 , nulas de tamaño $L \times L$
 - 2: Asignar a cada elemento de las matrices \mathcal{M}_1 y \mathcal{M}_2 una etiqueta de la forma $iL + j$, con $i, j \in \{0, 1, \dots, L - 1\}$
 - 3: Elegir al azar $n_I = \mathcal{B}(L^2, I)$ elementos de la lista de etiquetas $\mathcal{L} = \{0, 1, \dots, L^2 - 1\}$ y ubicarlos en la matriz \mathcal{M}_1
 - 4: Generar con el algoritmo de Hoshen y Kopelman sistemas uno-dimensionales con probabilidad de ocupación $p\chi_A$ sobre las columnas de la matriz \mathcal{M}_2 destinadas a plantas tipo A
 - 5: Aplicar el algoritmo de Newman y Ziff sobre las columnas de la matriz \mathcal{M}_2 destinadas a plantas tipo B hasta que la red percola
 - 6: Determinar el número de plantas tipo B que fueron añadidas hasta el que sistema percoló
-

Para hallar χ_B se calcula la probabilidad Q_n de que el sistema percole al agregar n plantas tipo B como un promedio sobre las 10^4 veces que se ejecuta el programa para cada pareja (I, p) con I, p y χ_A fijos. Así, la probabilidad de percolación $P_L(\chi_B)$ se calcula como en la ecuación (4.4) con $N = L^2/2$ que es el número máximo de plantas tipo B que se pueden colocar. Posteriormente se resuelve la ecuación (4.8) igualando $P_L(\chi_B) = 0.5$. Finalmente se estima el umbral de percolación en el límite termodinámico

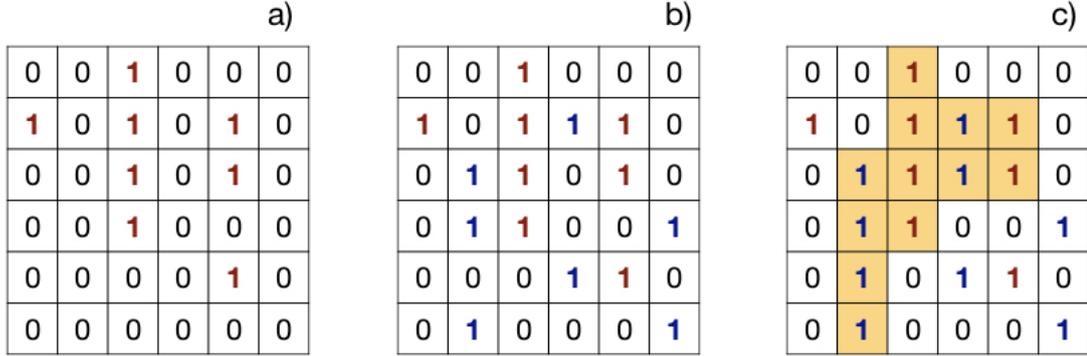


Figura 5.7: Ejemplo de simulación para el modelo de columnas alternadas. a) Dada χ_A se marcan las plantas del tipo A que son susceptibles, esta será la configuración inicial en la que se aplica el algoritmo de Newman y Ziff; b) el algoritmo agrega una por una, y de manera aleatoria, plantas tipo B hasta que el sistema percola; c) ejemplo de un racimo percolante.

como la extrapolación de los datos con el exponente crítico $\nu = 4/3$. Para investigar los efectos de tamaño finito, se realizan simulaciones con tamaños del sistema $L = 32, 64, 128$ y 256 .

5.5. Resultados

Empezaremos la discusión de los resultados analizando el caso $\chi_A = \chi_B$, el cual consiste en que ambos tipos de plantas tienen la misma susceptibilidad aunque no necesariamente son el mismo tipo de planta. Sin embargo, al final del proceso de propagación, el sistema debe comportarse como si estuviera constituido por una sola especie. En la Figura 5.8 a) se aprecian los casos para $p = 0.7, 0.8, 0.9, 1$, de

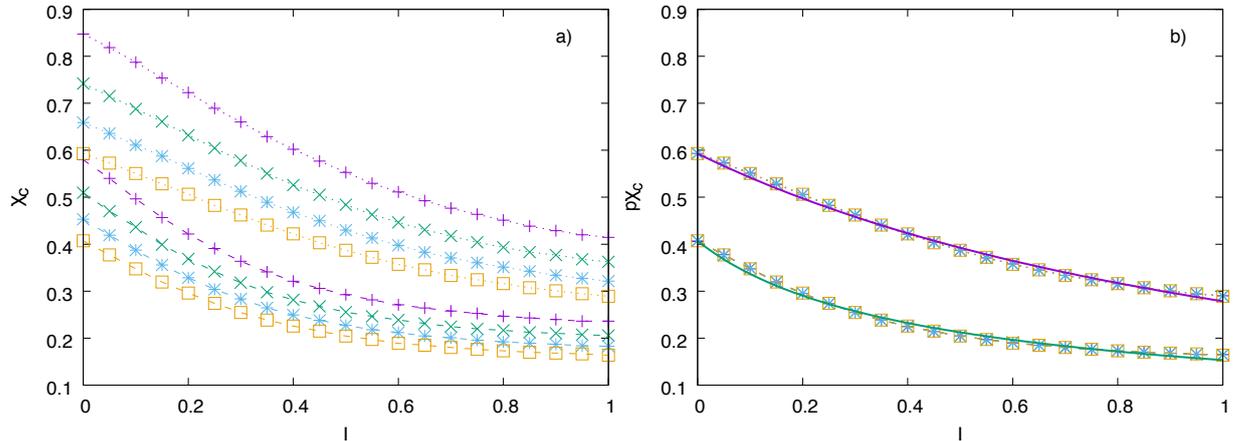


Figura 5.8: a) Susceptibilidad crítica para una sola especie a primeros vecinos para $p = 0.7, 0.8, 0.9, 1$, de arriba hacia abajo, y a segundos vecinos en el mismo orden las restantes. b) Colapso de los puntos $p\chi_c$ para $p = 0.7, 0.8, 0.9$ a las respectivas curvas $p = 1$ para 2N y 3N.

arriba hacia abajo para primeros vecinos y en el mismo orden las curvas restantes para segundos vecinos. Dichas curvas pueden ser ajustadas mediante la distribución de Tsallis como

$$\chi_c(I, p) = \frac{p_c}{p(1 + \alpha I/n)^n}, \quad (5.2)$$

donde p_c es el umbral de percolación, $\alpha = 0.91 \pm 0.03$ y 2.1 ± 0.1 , $n = 2.0 \pm 0.4$ y 0.68 ± 0.06 , para la red cuadrada a $2N$ y $3N$, respectivamente. Esto se debe a que

$$\chi_c(I, p = 1) = \frac{p_c}{(1 + \alpha I/n)^n},$$

pero como se observa en la Figura 5.8 b), los puntos $p\chi_c$ con $p = 0.7, 0.8, 0.9$, para $2N$ y $3N$, caen sobre la curva $p = 1$, es decir,

$$p\chi_c(I, p) = \chi_c(I, p = 1).$$

El ajuste propuesto concuerda con la información de los gráficos de las Figuras 5.9 y 5.10 pues al fijar I y variar p , la ecuación (5.2) reproduce los puntos de intersección entre las curvas críticas y la función identidad.

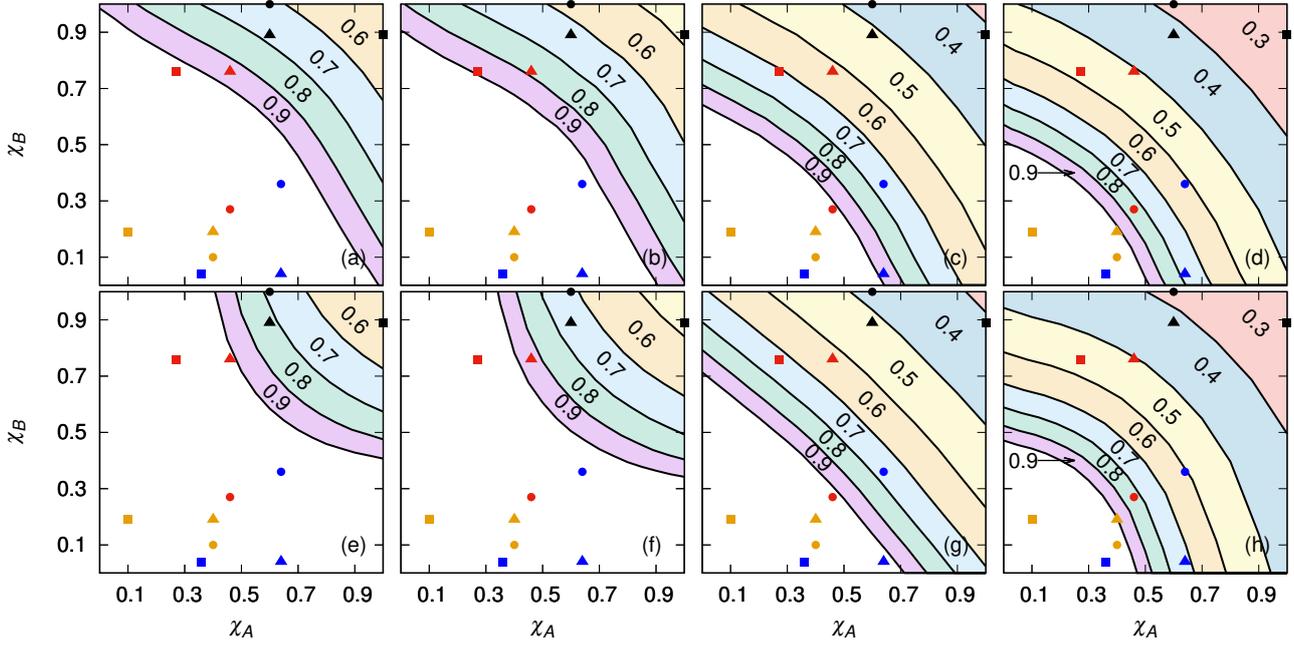


Figura 5.9: De izquierda a derecha se muestran las curvas críticas para $I = 0, 0.1, 0.5, 0.8$ a primeros vecinos, la fila superior corresponde al modelo de columnas alternadas mientras que la inferior al de diagonales. En cada gráfico se indican las recomendaciones del porcentaje de ocupación y se ubican combinaciones de los chiles *Serrano*, *Árbol* y *Poblano* de la Tabla 5.2.

El principal resultado de este trabajo es la determinación de curvas críticas formadas por las parejas de susceptibilidades (χ_A, χ_B) para valores de I y p fijos, estas curvas son umbrales de percolación que indican la transición a un sistema percolativo donde los pares ordenados ubicados en el área bajo la curva sólo permiten la propagación del patógeno en racimos finitos. A pesar de que no es posible determinarlas de manera analítica, las curvas críticas deben cumplir las siguientes condiciones:

1. Ser decrecientes, ya que se espera la disminución de una susceptibilidad ante el aumento de la otra;
2. El umbral de percolación debe ser invariante al intercambio $A \leftrightarrow B$, es decir, los puntos (χ_B, χ_A) reproducen la misma curva que los puntos (χ_A, χ_B) ;
3. Reproducir el caso de una sola especie (Figura 5.8 a)) cuando $\chi_B = \chi_A$.

En las Figuras 5.9 y 5.10 se muestran los resultados de simulación para las curvas críticas considerando los valores de $I = 0, 0.1, 0.5$ y 0.8 , y p empezando en 1 y disminuyendo en $\Delta p = 0.1$ hasta antes de alcanzar el valor de χ_c . El caso $p = 1$, que corresponde a la primera curva de abajo hacia arriba, indica que un terreno puede ser sembrado en su totalidad por ambos tipos de plantas, mientras que aquellas

Tabla 5.2: Combinaciones de chiles para las cepas y susceptibilidades mostradas en la Tabla 5.1.

Cepa	Figura	Par ordenado
PcV01	●	(S,A)
	▲	(S,P)
	■	(A,P)
PcV51	●	(S,A)
	▲	(S,P)
	■	(A,P)
PcV77	●	(S,A)
	▲	(S,P)
	■	(A,P)
PcV90	●	(S,A)
	▲	(S,P)
	■	(A,P)

que están por arriba de la curva dan lugar al racimo percolante y sólo se pueden usar siempre que el porcentaje de ocupación se reduzca. Las regiones sombreadas indican el porcentaje máximo de celdas sembradas necesarias para evitar la formación del racimo percolante. De este manera, al contar con una aproximación del porcentaje de suelo inoculado se puede elegir la configuración de siembra que permita mayor porcentaje de suelo sembrado. Observar también que en las Figuras 5.9 y 5.10, tanto para 2N como para 3N, cuando el porcentaje de inoculación es bajo, los modelos de columnas y diagonales alternadas arrojan diagramas de fase muy distintos, pero a medida que aumenta I se incrementa el número de sitios que sirven de enlace creando en la red un efecto de homogenización, que da lugar a diferencias imperceptibles entre ambos modelos de siembra. Ejemplo de esto se puede apreciar en la Figura 5.9 a) y e) donde se comparan ambos modelos para $I = 0$, los puntos experimentales dejan ver que sembrar en diagonales alternadas permite sembrar al 100% más combinaciones de susceptibilidad que el modelo de columnas, pero para $I = 0.8$ en los apartados d) y h) se puede elegir cualquiera de los modelos.

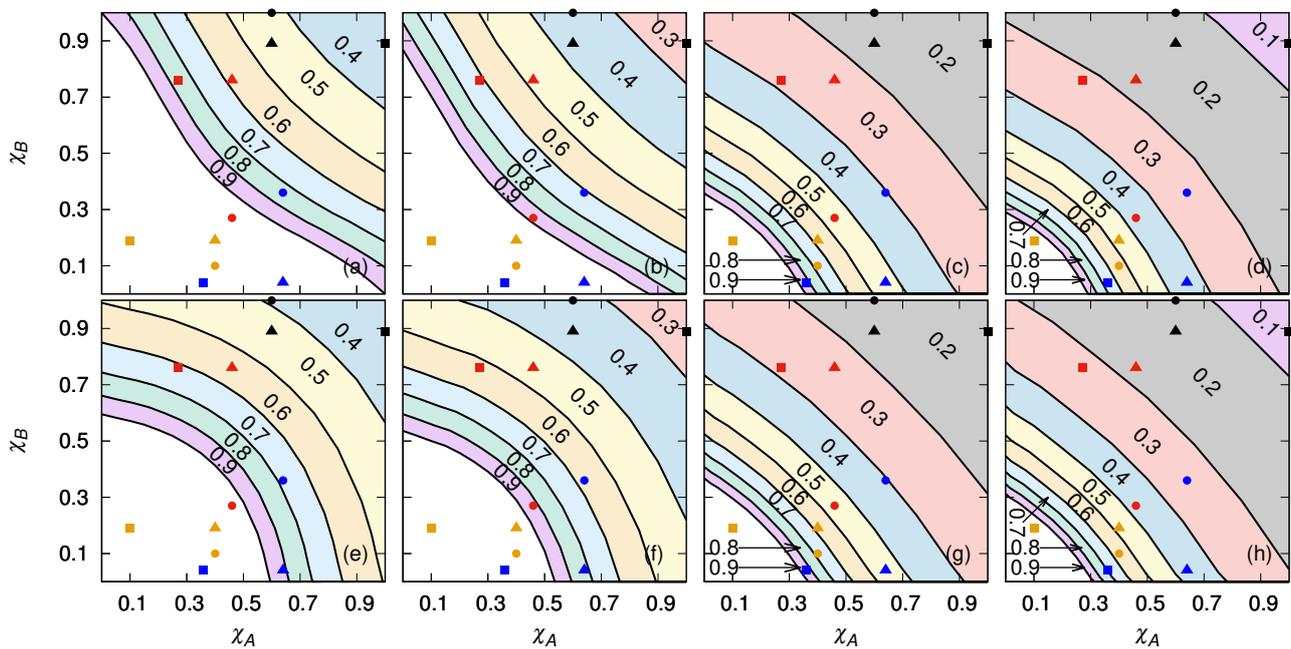


Figura 5.10: Se observa de izquierda a derecha las curvas críticas para $I = 0, 0.1, 0.5, 0.8$ a segundos vecinos en el modelo de columnas (fila superior) y diagonales (fila inferior) alternadas. En cada gráfico se indican las recomendaciones del porcentaje de ocupación y se ubican combinaciones de los chiles *Serrano*, *Árbol* y *Poblano* de la Tabla 5.2.

Bibliografía

- [5.1] J. Chávez, E. Zabaleta, and D. Téliz, “Control integrado de la marchitez del chile (*capsicum annuum* l.) ocasionado por el hongo *Phytophthora capsici* en la región de Valsequillo, Puebla, México,” *Revista Mexicana de Fitopatología*, vol. 30, pp. 47–55, 1995.
- [5.2] T. Reglinski, T. M. Spiers, M. A. Dick, J. T. Taylor, and J. Gardner, “Management of phytophthora root rot in radiata pine seedlings,” *Plant Pathol.*, vol. 58, no. 4, pp. 723–730, 2009.
- [5.3] J. E. Ramírez, E. Molina-Gayosso, J. Lozada-Lechuga, L. M. Flores-Rojas, M. I. Martínez, and A. Fernández Téllez, “Percolation strategy to improve the production of plants with high pathogen susceptibility,” *Phys. Rev. E*, vol. 98, p. 062409, 2018.
- [5.4] Y.-J. Zhang, Z.-X. Wu, P. Holme, and K.-C. Yang, “Advantage of being multicomponent and spatial: Multipartite viruses colonize structured populations with lower thresholds,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 123, p. 138101, 2019.
- [5.5] D. K. Letourneau, “Mechanisms of predator accumulation in a mixed crop system,” *Ecol. Entomol.*, vol. 15, no. 1, pp. 63–69, 1990.
- [5.6] M. Bange, P. Carberry, J. Marshall, and S. Milroy, “Row configuration as a tool for managing rain-fed cotton systems: review and simulation analysis,” *Aust. J. Exp. Agr.*, vol. 45, no. 1, pp. 65–77, 2005.
- [5.7] A. Elhakeem, W. van der Werf, J. Ajal, D. Lucà, S. Claus, R. A. Vico, and L. Bastiaans, “Cover crop mixtures result in a positive net biodiversity effect irrespective of seeding configuration,” *Agr., Ecosyst. Environ.*, vol. 285, p. 106627, 2019.

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo se hizo una revisión de la teoría de percolación encaminada al estudio de propagación de *Phytophthora* en sembradíos como un fenómeno de transporte. Considerando las características de movilidad del patógeno así como la susceptibilidad a enfermar de las plantas se modelaron diferentes arreglos de cultivo. El intercalo de distintas especies no es algo nuevo pues en el caso de México desde tiempos muy remotos los sistemas de cultivo llamados milpas han garantizado la alimentación básica.

El principal resultado de este trabajo son los diagramas de fase presentados en las Figuras 5.9 y 5.10, en ellos se comparan los modelos de columnas y diagonales alternadas a primeros y segundos vecinos, respectivamente. Se puede notar que a primeros vecinos el modelo de diagonales resulta mejor para valores pequeños de inoculación, pues en el caso $I = 0$ la combinación (S, P) para la cepa PcV51, indicada mediante triángulo rojo, permite sembrar el 100% de terreno, mientras que de utilizar la configuración de columnas alternadas se debe sembrar el 90% de terreno si se quiere evitar que el sistema percole. De manera similar sucede para $I = 0.1$, este mismo par de plantas muestra una diferencia del 10% en el porcentaje de suelo recomendado para sembrar, sin embargo, a partir de $I = 0.5$ los diagramas de fase parecen ser los mismos para ambos modelos. En la Figura 5.10 correspondiente a segundos vecinos, para $I = 0$ e $I = 0.1$, se observa que conviene sembrar en columnas alternadas excepto para el caso (S, P) de la cepa PcV77; nuevamente para $I = 0.5$ e $I = 0.8$ las diferencias entre ambos modelos son casi nulas. Más aún, los diagramas de fase reproducen los umbrales de percolación en los casos en que se elige sembrar diferentes especies con igual susceptibilidad pues, como se mencionó anteriormente, al final del proceso de propagación parece como si se sembrara una sola especie. Este comportamiento se muestran en la Figura 5.8 a) en la se emiten recomendaciones de porcentaje de suelo sembrado según los valores de inoculación del suelo y susceptibilidad de la planta.

En conclusión, los diagramas de fase proporcionan a los productores la capacidad de decidir estrategias y densidades de sembrado en función de la resistencia de ciertas especies así como de las condiciones del suelo. Estas estrategias pueden ser extendidas para configuraciones de siembra de distinta complejidad, tomando en cuenta más variedades de plantas o patógenos con características de movilidad parecidas a *Phytophthora*.

Apéndice A

Prueba de que existe al menos una solución $0 \leq Q \leq 1$ para la ecuación 3.5

En la ecuación 3.5 del capítulo *Red de Bethe* se tiene que

$$Q = 1 - p + pQ^{z-1}. \quad (\text{A.1})$$

Más adelante se comenta que al multiplicar ambos lados de la ecuación anterior por Q se obtiene

$$Q^2 = Q(1 - p) + pQ^z,$$

pero sabiendo que

$$P_{str} = p(1 - Q^z)$$

se llega a que

$$Q^2 = Q(1 - p) + p - P_{str}.$$

Posteriormente se completa el cuadrado perfecto y se despeja Q , obteniendo

$$Q = \sqrt{p - P_{str} + \left(\frac{1-p}{2}\right)^2} + \frac{1-p}{2}, \quad (\text{A.2})$$

para toda z . De esto se analizan los siguientes casos:

- Si $p \leq p_c$, entonces $P_{str} = 0$ por lo que la ecuación A.2 queda como:

$$Q = \sqrt{p + \left(\frac{1-p}{2}\right)^2} + \frac{1-p}{2},$$

donde

$$\begin{aligned} p + \left(\frac{1-p}{2}\right)^2 &= \frac{4}{4}p + \frac{1}{4} - \frac{2}{4}p + \frac{1}{4}p^2 \\ &= \frac{1}{4} + \frac{2}{4}p + \frac{1}{4}p^2 \\ &= \left(\frac{1+p}{2}\right)^2, \end{aligned}$$

por lo que

$$\begin{aligned} Q &= \sqrt{\left(\frac{1+p}{2}\right)^2} + \frac{1-p}{2} \\ &= \frac{1+p}{2} + \frac{1-p}{2} \\ &= 1. \end{aligned}$$

**APÉNDICE A. PRUEBA DE QUE EXISTE AL MENOS UNA SOLUCIÓN $0 \leq Q \leq 1$
PARA LA ECUACIÓN 3.5**

- Por otro lado, si $p > p_c$, entonces $P_{str} > 0$. Además, como $P_{str} + \sum_s n_s s = p$ se tiene que $P_{str} \leq p$. En este caso la ecuación A.2 queda como:

$$Q \leq \sqrt{2p + \left(\frac{1-p}{2}\right)^2} + \frac{1-p}{2},$$

donde

$$\begin{aligned} \sqrt{2p + \left(\frac{1-p}{2}\right)^2} &= \frac{1}{2}\sqrt{1 - 6p + p^2} \\ &= \frac{1}{2}\sqrt{(p - 3 - 2\sqrt{2})(p - 3 + 2\sqrt{2})}. \end{aligned}$$

Notar que $-3 - 2\sqrt{2} < 1$ y $-3 + 2\sqrt{2} < 1$, por lo que $p - 3 - 2\sqrt{2} < p + 1$ y $p - 3 + 2\sqrt{2} < p + 1$. Así

$$\begin{aligned} Q &< \frac{1}{2}\sqrt{(p+1)^2} + \frac{1-p}{2} \\ &< 1. \end{aligned}$$

Finalmente, cuando $p = 1$ la ecuación A.1 queda como

$$Q = Q^{z-1},$$

lo cual sucede cuando $Q = 0$ o $Q = 1$. El caso $Q = 1$ queda descartado pues implicaría que el sistema está completamente desconectado, lo que contradice el supuesto $p = 1$. Por tanto $Q = 0$.