



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

MECÁNICA ESTADÍSTICA Y *COARSE-GRAINING* EN REDES COMPLEJAS
MULTIATRIBUTOS DE SISTEMAS GRANULARES

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE
MAGÍSTER EN CIENCIAS, MENCIÓN FÍSICA

ENRIQUE JOSÉ NAVARRO RIESCO

PROFESOR GUÍA:
CLAUDIO FALCÓN BEAS

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
DENISSE PASTÉN GUZMÁN
GUSTAVO DÜRING HIDALGO
KARIN ALFARO BITTNER

SANTIAGO DE CHILE
2024

Resumen

Este trabajo presentará un estudio teórico y numérico sobre la detección de comunidades en redes complejas basado en las herramientas de la mecánica estadística aplicada a un sistema granular. En particular, se utilizarán los datos del estudio de Castillo *et al* [Phys. Rev. Lett. 109, 095701 (2012)], el cual analiza una transición de fase continua de segundo orden en un sistema granular cuasi bidimensional vibrado verticalmente. En esta investigación se informará sobre la construcción de una red granular de partículas para estudiar la formación, evolución y propiedades estadísticas de grupos de partículas que se desarrollan en las proximidades de la transición líquido-sólido del sistema. Usando los datos de posiciones de partículas y orden local, se extraerán clústeres granulares tomados como comunidades de la red granular mediante optimización de la función modularidad $Q = \frac{1}{2m} \sum_{i,j} (A_{ij} - P_{ij}) \delta(C_i, C_j)$, la cual representa una medida de similitud entre elementos de un mismo grupo C_i . Cada una de estas comunidades será un conjunto de partículas con orden de orientación local bien definido, incrustado dentro de una serie de otros parches que forman una compleja red de cúmulos de partículas ordenadas.

A su vez, se mostrará que la distribución de los tamaños de los grupos, el tiempo de vida medio, y diversas centralidades de la red de clústeres dependen de la distancia a la transición de fase líquido-sólido del sistema granular. Específicamente, la distribución del tamaño de los conglomerados muestra un comportamiento invariante de escala durante al menos una década en los tamaños de los conglomerados, la esperanza de vida de los conglomerados crece monótonamente con cada tamaño de conglomerado, y las centralidades muestran valores cada vez más grandes a medida que se acerca la transición.

Por otra parte, se demostrarán dos modelos entrópicos que representan al sistema: uno microscópico y otro mesoscópico. Esto último permitiendo tener una entropía asociada a la transición, con la cual se entenderá mejor la transición, permitiendo definir un calor específico del sistema. Se mostrará que este no muestra divergencia, lo que responde interrogantes de los estudios anteriores.

A mi familia, verdaderos amigos, y especialmente a Christa, Jorge, Joachim, Carmen y José.

Agradecimientos

Cada vez que alguien me preguntaba sobre qué trataba mi tesis (quizás no fueron tantas, pero sí suficientes) yo respondía la palabra *granos*. Tras la respuesta, surgía, como corresponde, una pregunta: ¿Cómo granos? ¿Qué clase? ¿Trigo? La primera vez no me sorprendí, y traté de explicarlo mejor, insistiendo en que no eran de cualquier clase, sino que unos en particular, que son como pelotitas, y que vibran de una forma particular en una superficie aún más particular; pero cuando la pregunta se volvió a repetir, comenzaron a cambiar las respuestas, un poco al azar, un poco a la broma y un poco en verdad, ¿por qué?, porque sí. Así lo quería mi paredro.

— ¿Qué clase de granos?

— El que quieras. Esto sirve para todo.

— ¿En serio?

— Ojalá.

Mi idea original era otra, pero en fin, heme aquí estudiando granos. Gracias, primero que nada a G. Castillo, N. Mujica y R. Soto por las facilidades para trabajar con sus datos, sin estos no hubiese existido esta investigación. Gracias a todos mis familiares, amigos (especialmente G. de la J), profesores C. F y F. B, por el constante apoyo y tiraje para adelante, y sobre todo, por esa pregunta, que me hizo soñar más de alguna vez y motivarme a que quizás en algún lugar, en algún momento, algún neoleibniziano pueda usar esto para encontrar las neomónadas. Los quiero.

Tabla de Contenido

| | |
|--|-----------|
| 0. Introducción | 1 |
| 0.1. Objetivos | 9 |
| 0.2. Esquema | 9 |
| | |
| I Marco Teórico | 11 |
| | |
| 1. Materia Granular | 12 |
| 1.1. Sistemas Granulares | 12 |
| 1.2. Transiciones de Fase | 16 |
| 1.3. Resultados anteriores de la investigación | 20 |
| | |
| 2. Redes Complejas | 24 |
| 2.1. Redes Complejas Individuales y Múlticapas | 24 |
| 2.1.1. Redes Complejas Individuales | 24 |
| 2.1.2. Redes Complejas Multicapas | 27 |
| 2.1.3. Comunidades y Modularidad | 29 |
| 2.2. Mecánica estadística en redes complejas | 30 |
| 2.3. Coarse Grained | 34 |
| | |
| II Metodología | 36 |
| | |
| 3. Base de Datos | 37 |

| | |
|--|-----------|
| 3.1. Datos preliminares | 37 |
| 3.2. Creación de Redes de Orden de Granos (Base de Datos) | 38 |
| 3.2.1. <i>Red q</i> primer intento y sus defectos | 40 |
| 3.2.2. <i>Red q</i> definitiva | 40 |
| 3.3. Red de Comunidades | 42 |
| 3.3.1. Modelo Newman-Girvan | 42 |
| 3.3.2. Modelo Geográfico | 44 |
| 3.3.3. Modelo Geográfico Modificado | 45 |
| 3.4. Tiempos de Vida | 48 |
| | |
| III Resultados | 51 |
| | |
| 4. Entropía | 52 |
| 4.1. Demostración Modelo Nulo | 52 |
| 4.2. Entropía Sistema Granular | 58 |
| 4.3. Demostración Entropía Coarse Grained en Redes Complejas | 60 |
| 4.4. Entropía Sistema Coarse-Graining | 62 |
| | |
| 5. Distribuciones | 65 |
| 5.1. Tamaño | 65 |
| 5.2. Tiempos de Vida | 68 |
| 5.3. Cantidad de Enlaces | 69 |
| 5.4. Centralidades y Distribución de Grado | 69 |
| | |
| 6. Conclusión | 73 |
| | |
| Bibliografía | 82 |
| | |
| Anexos | 83 |
| | |
| A. Demostraciones | 84 |

| | |
|--|-----------|
| A.1. Demostración Modelo Geográfico | 84 |
| A.2. Modelo Nulo de Comunidades sin pérdida de información | 88 |
| B. Publicación | 93 |
| B.1. Statistical evolution of a granular cluster ensemble at a liquid-solid-like phase transition | 93 |

Capítulo 0

Introducción

« Yet the simplest solution by far would be nothing, that there should be nothing at all in the universe. Nature is far more inventive than that, so I refuse to go along thinking it always has to be simple. »

R.P. Feynmann [1]

Un estudiante se encuentra en su escritorio, ubicado en el tercer piso, al costado norte del edificio de Física de la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de Chile, son las 9 de la mañana. El joven tiene a sus espaldas una ventana por la cual cae la luz sobre su cuerpo, dándole la temperatura perfecta para sentirse cómodo y así escribir su tesis. Mientras pasan las horas, la sensación de calor sobre su espalda va de aumento en aumento, obligándolo a cerrar la cortina. En ese momento, el joven visualiza indirectamente al Sol, cuerpo celeste en equilibrio termodinámico [2]. El cual, si bien tiene una gran masa que lo hace colapsar sobre sí mismo, siente a su vez una gran presión producida por reacciones nucleares que lo expanden, anulándose ambos efectos, y manteniendo así su volumen constante. Desde los mismos rayos que nacen allá lejos en el centro del sistema solar, absorben energía las plantas, o en otras palabras, la vida, lo orgánico, lo cual pareciera estar en perfecto equilibrio, así como lo está el sol. Afortunadamente, esto no es así. Nosotros (si se permite por primera y última vez escribir en primera persona durante esta tesis), la vida, el planeta Tierra y muchos otros fenómenos físicos del universo, son sistemas que no están en equilibrio termodinámico, sino que están lejos de este: sistemas en los cuales las cantidades que los definen evolucionan constantemente en el tiempo y en el espacio. El planeta Tierra, por ejemplo, recibe constantemente energía desde el sol. Este influjo de energía proporciona la fuerza para el mantenimiento y nacimiento de la vida y es, responsable de mantener una atmósfera fuera del equilibrio termodinámico [3], en la cual la presión global no existe, sino que depende de la altura.

Antes de definir los sistemas fuera del equilibrio termodinámico, hay que definir los fenómenos en equilibrio termodinámico. Estos son manifestaciones de dinámicas descritas por variables macroscópicas (entropía, volumen, número de partículas, entre otras) intensivas o extensivas que no cambian en el tiempo, ni el espacio, es decir, un sistema está en un estado de equilibrio si las propiedades observables macroscópicas tienen valores fijos y definidos en un límite de un gran número de constituyentes [4]. Estas propiedades macroscópicas son lla-

madas variables de estado. Una variable de estado es cualquier cantidad física que tiene un valor bien definido para cada estado de equilibrio del sistema, y este equilibrio se define por relaciones entre estas variables vía una ecuación de estado del sistema. Esta última es una función, que contiene todas las variables de estado que definen el equilibrio del sistema. Por ejemplo, en el caso de los gases ideales, las variables que lo describen son el volumen V , la temperatura T y la presión P . Luego la ecuación de estado será una ecuación que cumpla $f(V, T, P) = 0$, la cual será válida siempre que el sistema esté en el equilibrio termodinámico. En palabras más simples, en un sistema en equilibrio termodinámico las variables que definen su estado no dependen del tiempo [5]. Junto con esto, un sistema en el cual se ha llegado a un equilibrio termodinámico, se caracteriza por haber maximizado su entropía S . Esto último fue demostrado por Clausius [6] y refiere directamente con el segundo principio de la termodinámica:

$$dS \geq 0$$

Este muestra; para sistemas donde no existe intercambio de materia y energía con el entorno (sistemas aislados), que al pasar desde un estado hacia otro estado en algún tiempo dt , la variación de entropía siempre es mayor o igual a 0. Esto significa que la entropía de un sistema aumenta constantemente hasta llegar a un máximo, donde se cumple la igualdad $dS = 0$. Cumplida esta, se satisface entonces que al evolucionar de un estado hacia otro, ambos tienen la misma entropía. Para Clausius, la entropía era una medida definida por el calor y la temperatura del sistema; por ejemplo, para procesos reversibles, es decir, procesos donde se puede pasar desde un estado A, hacia otro estado B, así como también al revés, se define la variación de entropía como $dS = \frac{dQ}{T}$. Por otra parte, para procesos irreversibles, es decir, cuando no se cumple esto, la variación de entropía es $dS > \frac{dQ}{T}$. Luego, como la entropía siempre aumenta en función del tiempo, esto explica, por ejemplo, procesos de difusión (ver Figura 1), en particular el porqué el calor fluye desde un cuerpo caliente a uno frío: la transferencia de calor produce un aumento en la entropía del sistema. En el caso en que ya no hay variación de entropía al pasar desde un estado hacia el otro, las cantidades macroscópicas asociadas al sistema no podrán variar en tiempo: el sistema está en equilibrio termodinámico.

Usando la entropía de Clausius, se puede relacionar la evolución de un sistema termodinámico vía sus derivadas parciales, que están bien definidas, y definir potenciales termodinámicos para entender mejor ciertos sistemas termodinámicos. Estos potenciales son funciones de estado con unidades de energía, los cuales permanecen constantes cuando el sistema pasa desde un equilibrio hacia otro [5]. Los más conocidos son la energía libre de Helmholtz $F = U - TS$, la energía de Gibbs $G = U + PV - TS$ y la entalpía $H = U + PV$.

Por otra parte, se puede definir el equilibrio termodinámico desde otro punto de vista, este es el de la física estadística desarrollada inicialmente por Boltzmann [8], continuada por Gibbs [9], Planck [10] y Einstein [11] a principios de 1900, y Jaynes en los años 50 [12]. La entropía definida por Clausius, depende de un factor macroscópico T que compone la ecuación de estado, y un factor macroscópico dQ que depende de las variaciones de la misma. Boltzmann intentó explicar el significado de las variables macroscópicas en función de estadísticas microscópicas, llegando a la conclusión de que cantidades microscópicas promedio

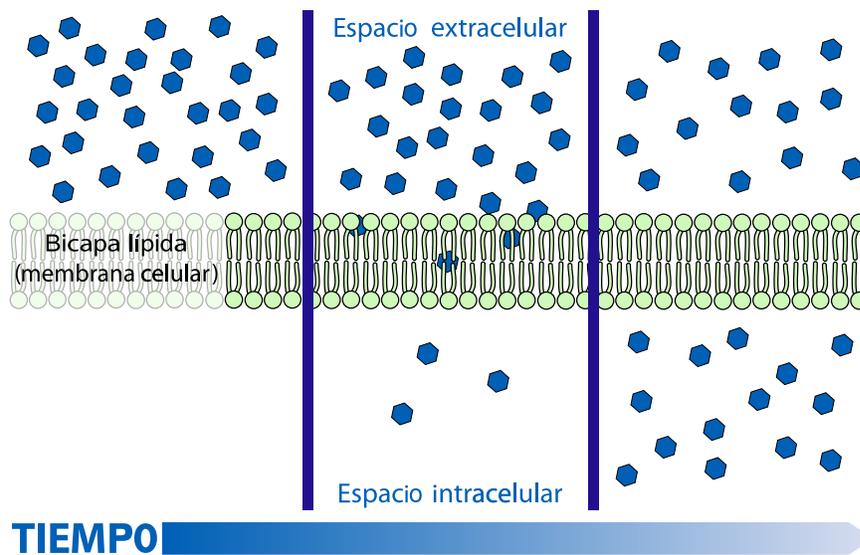


Figura 1: Proceso de difusión en células. En un estado inicial de baja entropía, grandes concentraciones de proteínas se encuentran alrededor de la célula. A medida que pasa el tiempo se equipara la cantidad de proteínas que entran y salen de la célula: se ha llegado a un equilibrio termodinámico. [7].

tenían una correspondencia con las cantidades macroscópicas observadas. Esto último sucede debido a que el estado macroscópico es estable respecto a las pequeñas fluctuaciones de estos valores promedios [13]. Boltzmann entendió los sistemas físicos, como grandes conglomerados de partículas, donde si bien analizar cada partícula en función del tiempo se torna imposible, surgen igualmente leyes estadísticas que rigen al sistema [4]. Para realizar esto se puede pensar de la siguiente forma: la configuración de un sistema termodinámico con todos sus detalles; como las posiciones \vec{r}_i y velocidades \vec{v}_i de las partículas, en un instante de tiempo, es definido como un microestado. El conjunto de microestados, que comparten cantidades macroscópicas similares, se denomina ensamble [9], es decir, definida alguna cantidad macroscópica; como la temperatura, un ensamble será el conjunto de todos los estados posibles de las diferentes posiciones y velocidades de las partículas, con los cuales se puede definir esa temperatura. Desde este punto de vista estadístico, la entropía del sistema se puede definir como:

$$S = \kappa_B \log(\Omega),$$

donde κ_B es una constante denominada constante de Boltzmann, y Ω es la cantidad de microestados asociados a alguna característica macroscópica del sistema. Existe una cantidad verdaderamente grande de microestados, cada cual asociado a alguna cantidad macroscópica medible, y todos; en el caso de ensambles canónicos (ensambles donde los microestados cumplen suavemente una restricción, como por ejemplo, una temperatura T promedio), tienen asociado una probabilidad de ocurrir [9]. El sistema a cada instante, según esta concepción estadística, pasa desde un microestado hacia otro al azar. Luego, que la entropía crezca a cada instante, significa que se pasa constantemente desde un estado con menos microestados que lo pueden representar, a un estado macroscópico con más microestados correspondientes, es decir, pasar constantemente a un estado macroscópico (macroestado) más probable. Cuando se llega finalmente hacia un equilibrio termodinámico, este en realidad es un estado de ciertas

características macroscópicas, con tal cantidad de microestados, que la probabilidad de que suceda un microestado, el cual no lo represente, es muy baja.

El Sol, entonces, es un sistema en equilibrio termodinámico, ya que mantiene sus variables macroscópicas constantes. Un fenómeno fuera del equilibrio es una reacción de un sistema, el cual se lo esta forzando constantemente a no encontrarse en algún equilibrio, sea termodinámico, mecánico, químico, entre otros. Esto provoca que en estos no se cumpla ningún tipo de distribución homogénea, lo que no significa que no existan estados estacionarios, sino que estos no siguen distribuciones del equilibrio. En el caso de sistemas biológicos o ecológicos, nunca se está en equilibrio, sino que se está en un proceso de constante cambio. Ejemplos de estos se pueden ver en las Figuras 2 y 3. La primera muestra el caso de las reacciones químicas de Belousov-Zhabotinsky [14, 15], las cuales a diferencia de una reacción química en el equilibrio, donde pasado un tiempo la concentración de reactantes y productos se vuelve constante, aquí esto último no se cumple, sino que se forman ciclos regulares o incluso caóticos, donde en un momento hay más reactantes que productos, y luego viceversa. Este proceso es completamente irreversible, nunca se vuelve a un mismo estado inicial. Por otra parte, en la segunda imagen, se muestra una Convección de Rayleigh-Bénard[16, 17], la cual consiste en una capa delgada de un fluido laminar, la cual se perturba con una diferencia de temperatura del borde superior e inferior. Tras una diferencia crítica de temperatura, se forman los patrones locales que se pueden ver en la imagen. He aquí una gran motivación para estudiar los sistemas fuera del equilibrio: son la gran mayoría de los fenómenos de la física.

Fuera del equilibrio, nunca se maximiza la entropía del sistema, siempre hay un intercambio de energía o materia entre el sistema y el medio que lo rodea, lo que impide la caracterización del fenómeno mediante cantidades macroscópicas constantes, a diferencia de los sistemas en el equilibrio termodinámico, los cuales no evolucionan en el tiempo. Otra diferencia fundamental entre ambos es que si se divide un sistema en equilibrio termodinámico en subsistemas, todos ellos, deben ser caracterizados con las mismas cantidades intensivas que describen al sistema total, es decir, la presión y la temperatura en cada subsistema debe ser idéntica. Esto último no ocurre en los fenómenos fuera del equilibrio, ya que las cantidades intensivas varían localmente. Otra forma de entender los sistemas fuera del equilibrio es considerar que en sistemas abiertos a reservorios externos, el intercambio de energía u otra cantidad conservada entre el sistema y el reservorio, conduce a corrientes que impulsan la evolución temporal del sistema (eléctricas, de partículas, calor, entre otras), esto produce a nivel microscópico, que entre un par de microestados exista un flujo de probabilidad no nula en el tiempo [18], es decir, la probabilidad de pasar de un microestado al otro o viceversa varía en función del tiempo, lo que implica irreversibilidad. Esto último no ocurre en el caso de sistemas en equilibrio termodinámico, en estos no existe ninguna probabilidad variable asociada entre dos microestados, sino que esta es siempre constante, lo que se denomina balance detallado, lo que provoca que en el equilibrio todo cambio sea reversible.

Dentro de estos fenómenos existen, al igual que en la termodinámica del equilibrio, transiciones de fase, es decir, el paso desde un estado hacia otro al aumentar o disminuir las variables de estado mencionadas anteriormente. Para comprender estos cambios de estados en los sistemas fuera del equilibrio, se ha buscado herramientas que permitan estudiar las diferentes transiciones y sus mecanismos. Una forma de mejorar la comprensión de estos es analizar sistemas granulares [21], los cuales cumplen todos los requisitos para dar más in-



Figura 2: Reacción de Beloúsov-Zhabotinsky: conjunto de reacciones químicas donde la relación entre reactantes y productos varía continuamente en el tiempo. [19].

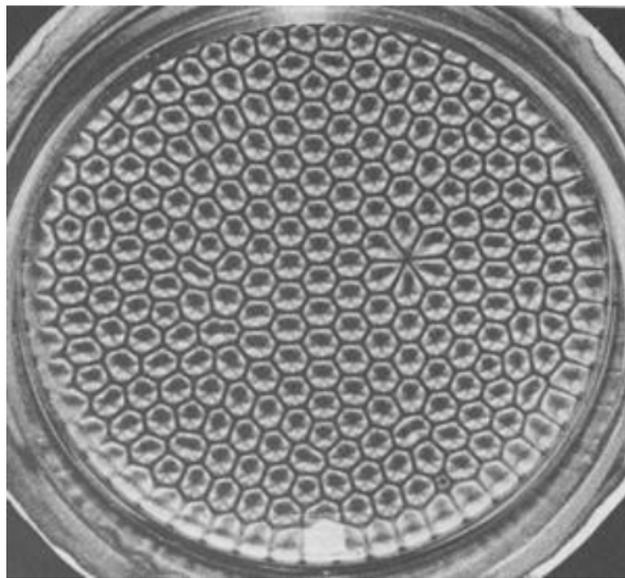


Figura 3: Patrones generados por una convección de Rayleigh-Bénard en un fluido laminar [20].

formación sobre esta clase de fenómenos, ya que: tienen transiciones de fase de diferentes tipos, tienen la ventaja de que se pueden estudiar sistemáticamente, y lo más importante, son sistemas fuera del equilibrio. Esto porque, en primer lugar, los sistemas granulares se componen de largas conglomeraciones de partículas macroscópicas discretas, las cuales interactúan entre sí con fuerzas disipativas (fricción y choques inelásticos) lo que produce una pérdida de energía constante y, por otra parte, el peso de la energía potencial de los granos es muy superior a la temperatura que se puede definir en estos. Luego ambas condiciones evitan cualquier clase de equilibrio termodinámico que se pueda definir en el sistema.

El estudio que abordará esta tesis tiene como base de datos un sistema granular que ya ha sido estudiado anteriormente [22, 23] en el cual ocurre una transición tipo líquido-sólido. El sistema consiste en $N \approx 10^4$ partículas de diámetro $d = 1mm$ en una caja cuasi-2d de área cuadrada $A = (100d)^2$, la cual es acelerada verticalmente en diferentes aceleraciones. Los resultados de los estudios anteriores dan a entender que hay una aceleración crítica en la cual hay un cambio en el promedio del orden local cuádruple de los granos, siendo este cambio una transición continua de segundo orden. Esta transición se estudió en dichas investigaciones utilizando herramientas teóricas que se basan en argumentos de simetría, dimensionalidad y conservación [18, 24, 25]. Estos argumentos permiten una forma genérica y universal de caracterizar, en particular, la evolución macroscópica del sistema granular y las propiedades generalmente vinculadas a los modos lentos a gran escala que dominan la dinámica del sistema. En este sentido, la localidad de las interacciones entre los granos se borra en la dinámica a gran escala. Por lo tanto, la información granular local (como fluctuaciones de fuerzas locales y/o aglomeraciones de partículas) se pierde dentro de este modelado. Esta información local es de suma importancia para la estabilidad mecánica de la materia granular cuando están presentes cadenas de fuerza [26–29], así como para la descripción de defectos en la materia granular vibrada [30–33], especialmente en el caso de sistemas granulares estructurados (como el caso de granos no isométricos [34–38]). Uno de los objetivos de esta tesis será estudiar el rol de esta información local en el sistema.

Una gran dificultad; para estudiar este sistema y cualquier otro sistema fuera del equilibrio, consiste en lo difícil que es definir una entropía del sistema, debido a la no existencia de variables macroscópicas que no evolucionen en el tiempo. Esto conduce a no entender en algunos casos qué realmente pasó en la transición de fase. Si bien, no es necesario obtener una entropía para poder describir y analizar transiciones de estado, sí es útil obtenerla para poder comprender la evolución de un sistema, así como las estructuras más probables según cómo varíe en el tiempo esta entropía. Luego, si se tiene una entropía bien definida del sistema, se puede saber qué estructuras debiesen aparecer o desaparecer en función de esta, cómo se comportará el sistema en el futuro, así como también saber cuantos microestados posibles pueden representar dicho sistema. Un ejemplo de la relevancia de definir la entropía son los mismos estudios anteriores. Estos logran captar una transición de fase a través del seguimiento de un parámetro de orden orientacional local [22, 23], y al estudiarla en profundidad mediante modelos de hidrodinámica granular, concluyen que el calor específico asociado al sistema no diverge; sin embargo, debido a que nunca definen una entropía del sistema no logran tener una clara interpretación sobre qué significa este calor específico.

Ante estas dificultades, una solución para estudiar esta clase de fenómenos, son las denominadas redes complejas. Estas al igual que en la mecánica estadística de Boltzmann, pueden estudiarse mediante ensambles de redes que cumplan alguna condición [39]. Luego, si se ma-

ximizan estos ensamblajes bajo restricciones asociadas al sistema de manera correcta, se puede describir una entropía bien definida del sistema [40], la cual permite entender la termodinámica del problema, su dinámica, y en específico las transiciones de fase, logrando explicar qué significa para la termodinámica de la red, el calor específico u otra variable dependiente de la entropía.

La definición de una red, es simple: colección de puntos (nodos) unidos mediante líneas (enlaces) [41]. A través de estos conjuntos de puntos y enlaces se intenta representar diversos fenómenos, donde la forma en que se producen los enlaces y el significado de los nodos, es amplia y depende del contexto en el que se las utilice. Los nodos enlazados entre sí producen estructuras que tienen propiedades complejas, conociéndose estas como redes complejas. Estas han sido utilizadas para intentar comprender algunos de los comportamientos físicos complejos de sistemas mecánico-cuánticos [42], de materia condensada [43] y en particular de medios granulares [44, 45], lo que ha permitido describir y predecir fenómenos nuevos de estos sistemas, como también visualizar y entender de manera más completa comportamientos ya observados.

En el último tiempo, el estudio de sistemas mediante redes ha despertado un fuerte interés, esto debido al enorme potencial de caracterizar y visualizar problemas de distintas índoles a través de propiedades de estructuras de redes. Este interés ha ido en aumento año a año (Figura 4) en las distintas áreas del conocimiento (Figura 5), como lo son el estudio de epidemias [46–48], la economía [49–51], las redes sociales [52–54], la educación [55–58], entre otras, permitiendo así obtener nuevas formas para tratar de comprender la dinámica y propiedades de sistemas complejos.

Gracias a los avances en esta ciencia que utiliza grafos para modelar sistemas, lo bien que ha funcionado para describir y entender sistemas físicos, y lo interesante de los fenómenos fuera del equilibrio para comprender mejor la naturaleza, en específico la transición de fase mostrada en los estudios anteriores, nace esta investigación. Se necesita entender mejor lo que sucede localmente en el sistema granular, así como también entender en profundidad qué es lo que está sucediendo en esta transición. Para esto, en primer lugar, la investigación resolverá la falta de información local con un análisis del comportamiento mesoscópico del sistema. Estudiar mesoscópicamente sistemas es común y útil en la Física. Es conocido el uso de *coarse-grainings* (definido como la representación de un sistema con menos grados de libertad de los que realmente tiene [59]) en dinámicas donde existen demasiadas variables. Por otra parte, para abordar mejor la transición, una buena alternativa es encontrar una entropía bien definida que represente al sistema. Ante esto surge natural la idea de entender el sistema granular mediante una red granular compleja, donde los nodos serán granos, y los enlaces el orden local entre granos. Luego, uniendo el estudio de la información local y la entropía, se puede realizar un estudio mesoscópico a través de *coarse graining* en redes.

Recientemente, se han realizado muchos estudios que intentan entender fenómenos mediante la dinámica de conjuntos de partículas [60–64], algo curioso es la diversidad de formas en que se realiza esto en los estudios que utilizan las redes complejas [65–71], pasando por métodos donde generan clústeres a través de la unión de todos los nodos que poseen alguna estadística similar como por ejemplo el grado de orden x , a otros métodos sofisticados de renormalización, conservando así estadísticas de la red. Es importante sistematizar la forma en que se simplifican los sistemas mediante *coarse-graining* y realizarlo de una forma genéri-

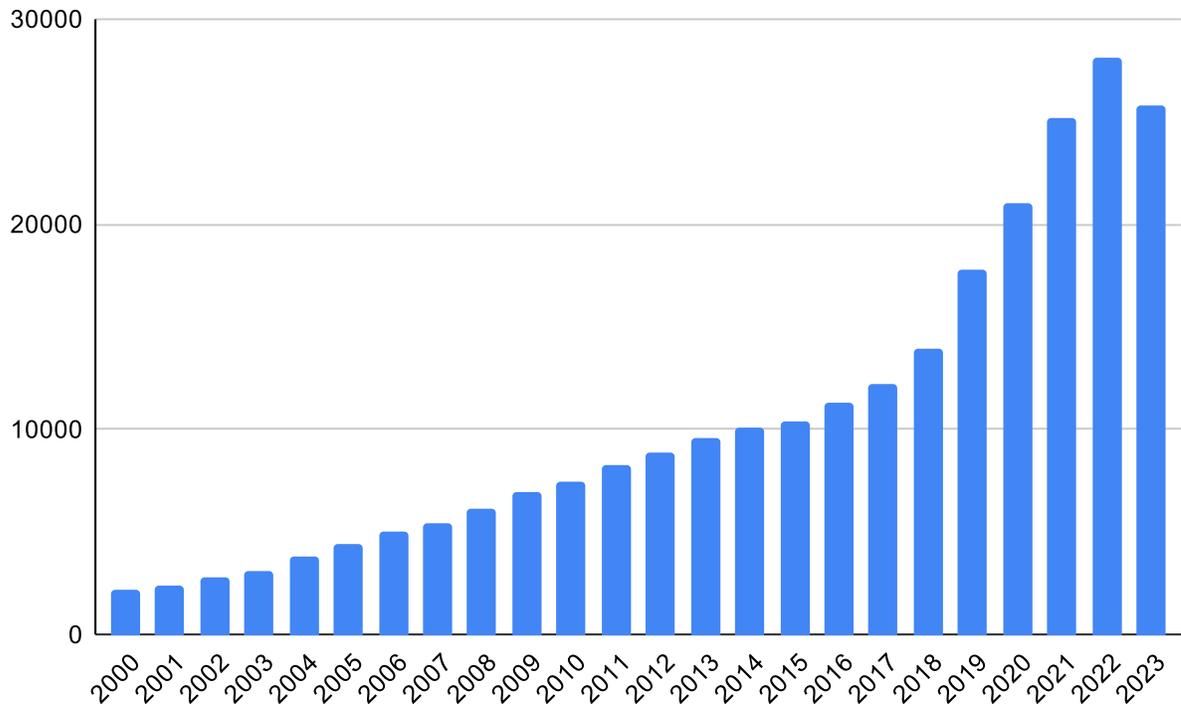


Figura 4: Cantidad de artículos con la palabra *complex-networks* en función del año de su publicación de la base de datos *Web Of Science*.



Figura 5: Categorías de los artículos de la base de datos *Web Of Science* al buscar la palabra *complex-networks* tanto en títulos como resúmenes de artículos.

ca que represente cada sistema, entendiendo así cuáles son las ventajas o desventajas de los diversos tipos de simplificación del sistema. Por otra parte, el entender el sistema como una red compleja permite encontrar una entropía que lo represente, cuantificando así el grado

de complejidad de un ensamble de redes, definiendo correctamente el tipo de restricciones a las cuales están sujetas. Este tipo de acercamiento al estudio de la complejidad de redes vía una definición estadística de entropía ha sido exitoso para recuperar información útil de un ensamble de redes de una manera sistemática y precisa. Esto además es una herramienta potente la cual permite, al escribir de manera correcta las restricciones, abordar variedad de sistemas fuera del equilibrio termodinamicamente.

0.1. Objetivos

Esta tesis tendrá dos objetivos principales:

- Estudiar el sistema granular analizado en [23] mediante redes complejas, realizando un coarse grained que evalúe el rol de las estructuras locales del sistema antes de la transición.
- Encontrar una entropía que represente al sistema, la cual sea capaz de describir correctamente las cercanías de la transición.

Por otra parte, se tendrán como objetivos específicos:

- Calcular y obtener estadígrafos de redes complejas que caractericen el acercamiento a la transición.
- Analizar el cambio en la estructura de las redes complejas vía el cálculo de su entropía y su derivada.
- Observar si la entropía que describe al sistema coincide con las interpretaciones del estudio anterior.
- Lograr una interpretación de la transición en base a los cambios estadísticos de las redes y sus centralidades.

Importante señalar, que en esta investigación no se buscará ni replicar ni confirmar resultados del estudio anterior. Se buscará continuar la investigación, pero aplicando redes complejas para entender desde otra perspectiva el problema. Esto generará resultados acordes a esta perspectiva, la cual es una visión mesoscópica del sistema diferente a la visión a gran escala del estudio anterior.

0.2. Esquema

Esta tesis se estructura de la siguiente forma. En la Parte I se aborda todo el marco teórico necesario para entender la investigación, el cual está dividido en dos capítulos. El Capítulo 1

expone una explicación de lo que significan los sistemas granulares, las transiciones de fase y un análisis de los resultados obtenidos en la investigación anterior. Luego, el Capítulo 2, muestra un desarrollo de las herramientas de redes complejas que se utilizarán en esta tesis, en específico las relacionadas con la mecánica estadística. En la Parte II; la cual solo se compone del Capítulo 3, se explica todo el proceso de creación de redes microscópicas y mesoscópicas que fue desarrollado para modelar el sistema a través de grafos. Tras esto, la Parte III contiene 3 capítulos y detalla todos los resultados obtenidos en esta investigación. En el capítulo 4, se demuestra un modelo entrópico asociado al sistema microscópico y se estudia la variación entrópica de este. En ese mismo capítulo se demuestra nuevamente un modelo, pero esta vez mesoscópico, calculando así entropías con degeneración debido a la simplificación del sistema. Después, en el Capítulo 5 se caracteriza la dinámica mesoscópica del sistema granular en las cercanías de la transición a través de estadísticas de redes complejas en función de la aceleración del sistema. Tras esto, la conclusión de esta investigación, se desarrolla en el Capítulo 6. Por último hay dos Anexos: El Anexo A muestra dos demostraciones vía un argumento entrópico, la primera consiste en un modelo nulo (Modelo Geográfico) muy utilizado en la literatura de redes complejas aplicada a sistemas granulares, mientras que la segunda un intento de modelo para clusterización de partículas. Luego, se adjuntó en el Anexo B el pre-print de un artículo enviado durante esta tesis.

Parte I

Marco Teórico

Capítulo 1

Materia Granular

« Son las generalizaciones prematuras, y no su verdad, las que han conducido a la ciencia a oponer al hombre y al mundo que trata de comprender. »

I. Prigogine y I. Stengers [13]

Esta investigación se centra en el estudio de redes complejas utilizadas para comprender la dinámica y estructura de ciertos sistemas físicos. Un ejemplo de estos sistemas son los medios granulares, y en particular, un sistema granular que presenta una transición de fase fuera del equilibrio entre un estado tipo líquido a uno tipo sólido. Para comprender el contexto de este estudio, se necesita primero entender qué es un sistema granular y qué es una transición de fase. Se describirá, en primer lugar, un sistema granular y sus características; luego se analizarán los conceptos básicos de las transiciones de fase, definiéndolas y caracterizándolas en los diversos tipos que existen, en particular aquella que describe al sistema que se estudiará en esta tesis.

1.1. Sistemas Granulares

Los sistemas granulares están en contacto con el ser humano día a día. Es más, son tan comunes en la vida, que después del agua, son el segundo componente más utilizado en las industrias [72]. Estos sistemas son definidos como conjuntos de partículas macroscópicas rígidas, cuyo tamaño característico sea al menos mayor que $100 \mu\text{m}$ [73]. Ejemplos de esto son la arena, las frutas y el café, partículas macroscópicas inelásticas, las cuales interactúan de diversas formas entre sí, mediante fuerzas elásticas, disipativas, de adherencia, entre otras. Estas partículas son lo suficientemente masivas para no ser afectadas en sus movimientos por las fluctuaciones de temperatura, a diferencia de sistemas en equilibrio termodinámico. Para notar esto último, basta comparar el orden de magnitud de la energía potencial necesaria para levantar un grano sobre otro con respecto a la energía de activación térmica. La constante de Boltzmann κ_B es del orden de $\sim 10^{-23}$ J/K, por lo que la energía de activación térmica $\kappa_B T$ a temperatura ambiente ($T \sim 300^\circ$ K) es del orden de 10^{-21} J mientras que la energía potencial necesaria para levantar un grano de diámetro $d \sim 10^{-3}$ m y densidad similar a la

del agua es $mgd \sim 10^{-8}\text{J}$. Es decir, en estos sistemas:

$$mgd \gg \kappa_B T$$

La dinámica de estos conjuntos de partículas son muy complicadas de estudiar. En general son descritos por una gran cantidad de grados de libertad que presentan interacciones en general irreversibles y, además, altamente no lineales [74]. Esto provoca que no exista una conservación de la energía luego que los granos interactúen (típicamente vía colisiones), es decir, $\Delta E < 0$, lo que muestra otra gran diferencia con los sistemas en equilibrio termodinámico, donde la energía permanece constante. Estas interacciones entre granos, por otra parte, son disipativas. Esto produce que la mayoría de los regímenes granulares estáticos sean metaestables [75], o en otras palabras, mínimos locales, lo que impide que el sistema evolucione hacia alguna energía mínima global. Además, en estos sistemas la descripción continua se dificulta, debido a la falta de claridad del límite entre la escala de tamaños de los granos que componen el sistema y el flujo de estos. Esto último se puede observar en la Figura 1.1, donde una pila de semillas se encuentra inicialmente en reposo (1.1 (a)), y luego tras aumentar la inclinación se provoca un flujo de granos (1.1 (b)). El tamaño de este es del orden de 10 diámetros de granos. Esto dificulta la obtención de promedios que representen al sistema [73]. La nula relevancia de la temperatura en estos sistemas, la disipación de la energía y la dificultad de promediar hacen que estos sean considerados sistemas fuera del equilibrio termodinámico.

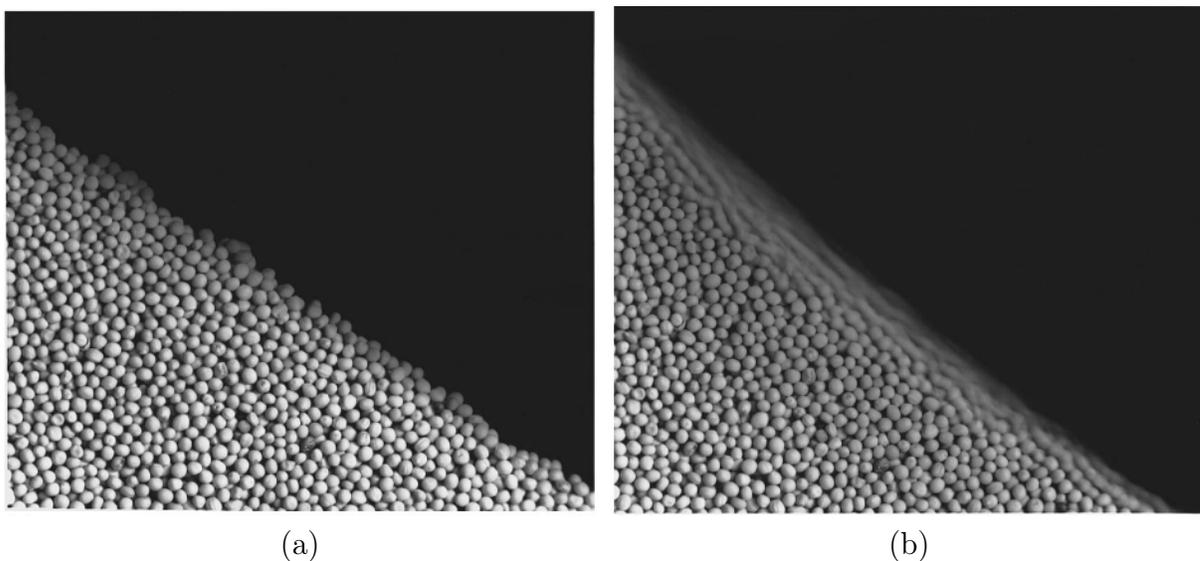


Figura 1.1: (a) Un montón de semillas de mostaza inclinadas en un ángulo menor que el ángulo de reposo. (b) El mismo montón de semillas después de haber aumentado ligeramente la pendiente para crear una avalancha. [26]

Los sistemas granulares, al presentar fenómenos fuera del equilibrio, son sistemas donde las dinámicas locales cumplen un rol en el comportamiento del sistema, produciendo heterogeneidades en él. Debido a esto, los sistemas tienen comportamientos muy diversos y diferentes. Al presionar un sistema de granos se pueden generar efectos como lo son la dilatación [76], cadenas de fuerza [45] y formación de puentes [77]. Por ejemplo, al presionar un sistema

de granos de arena con agua, si la presión es alta, estos aumentan el volumen del sistema (proceso de dilatación), colocándose el agua entre los granos. Por otra parte, al agitar con aceleraciones más grandes que la aceleración de gravedad aparecen otros efectos, así como el efecto nuez de Brasil [78], convección [79], segregación por tamaño [80], incluso patrones que pueden ser cuadrados [22], hexagonales [81], espirales [82], oscilones [83], dependiendo de la frecuencia de vibración. Estos se pueden ver en la compra de un paquete de papas fritas, donde las más pequeñas se encuentran en el fondo, mientras las más grandes se encuentran arriba (efecto nuez de Brasil). En definitiva, son sistemas con tal cantidad de efectos y características que requieren mucha investigación sobre cómo funciona cada uno de estos efectos particulares.

Imágenes de estos sistemas se pueden observar en las Figuras 1.1 y 1.2. En la primera se puede ver cómo en estos sistemas, el comportamiento de los granos depende localmente y no globalmente. La avalancha ocurre solamente en la superficie, lo que se puede pensar como un conjunto de granos que se comportan como un fluido, en cambio, en las profundidades del sistema, los otros granos no se mueven. Por otro lado, en la segunda se muestra que en los desiertos (sistema enorme de granos de arena) se forman; debido a flujos de aire que inyectan energía al sistema, diversos patrones en la arena, los cuales muestran distintos comportamientos que emergen localmente [84].



Figura 1.2: Patrones locales generados por flujos de aire en las arenas de un desierto

Los sistemas granulares pueden soportar tensiones y crear una pila estática de granos, fluir como un líquido o comportarse como un gas cuando están fuertemente presionados [73], dependiendo de la inyección de energía que reciba el sistema y las fuerzas que actúen en él. Incluso pueden coexistir en varios de estos estados al mismo tiempo. Es más, si la energía y/o la fuerza aplicada sobre el sistema varían de alguna forma, se pueden producir cambios de fase dentro del sistema granular. Ejemplo de esto es el sistema que se estudiará en esta tesis, así como también lo es la transición fluido-cristal que ocurre al vibrar granos de acero compactados en un anillo cuasi bidimensional al aumentar la cantidad de granos que cubren el anillo [85], o el caso de un medio granular perturbado con un campo eléctrico, el cual sufre una transición de fase desde un estado sólido granular a un estado dilatado de gas granular

[86].

Ante tal cantidad de comportamientos, han surgido distintas teorías que intentan describirlos. Cada una intenta explicar una serie de fenómenos y no todas inician desde las mismas ecuaciones fundamentales [75]. Al igual que en la totalidad de sistemas fuera del equilibrio, aún no existe ninguna teoría general que sea capaz de abordar tal cantidad de problemas de manera genérica. Se podría pensar en primera instancia que las teorías asociadas a los átomos, y partículas pequeñas, podrían funcionar para describir estos sistemas, pero como ya se mencionó, la disipación en los choques, el nulo aporte al movimiento de la temperatura, y la no conservación de la energía impiden por ejemplo aplicar la termodinámica clásica en estos. Sin embargo, en ciertos límites, sí existen teorías que explican con precisión gran variedad de fenómenos. Por ejemplo, para abordar sistemas granulares poco densos que se comportan como gases, se utiliza la Teoría Cinética Granular [87–89], la cual obtiene una función distribución $f(v, r, t)$ desde la ecuación de Boltzmann-Enskog que permite describir el sistema mediante el caos molecular. El límite de esta teoría es cuando la densidad del sistema es grande y las correlaciones entre velocidades de partículas no se pueden despreciar. Por otra parte, la Hidrodinámica Granular, intenta modelar, con ideas de la hidrodinámica, flujos granulares [90, 91]. Para ello modifica la ecuación de Navier-Stokes considerando que los granos son compresibles, la energía no se conserva y que los coeficientes de transporte en el sistema dependen de la temperatura. Nuevamente, esto tiene un límite: como se mencionó anteriormente, la escala de los flujos en sistemas granulares no tiene una clara separación respecto la escala de los mismos granos, por otra parte, esta teoría, como aborda a los granos como flujos, describe muy bien la dinámica macroscópica del sistema, pero pierde la noción de las interacciones locales, las cuales son fundamentales para la estabilidad mecánica de los sistemas. Por otra parte, hay modelos fenomenológicos para explicar ciertos comportamientos. Por ejemplo, el uso de la ecuación de Ginzburg-Landau para describir patrones en sistemas de capas granulares periódicamente vibradas [92, 93], el uso de células autómatas para entender avalanchas y pilas de arena [94], la descripción de campos de fase para comprender transiciones [95], entre muchos otros ejemplos.

Con la diversidad de métodos y teorías, surge la pregunta sobre si se podrían estudiar estos sistemas de alguna forma más sencilla. Ante esto, en el último tiempo, muchos estudios de física granular han intentado comprender fenómenos de sistemas granulares, como cadenas de fuerza, mediante redes complejas [44, 45, 96, 97]. Mostrando que en la estructura de estas, a partir de información puramente geométrica, sin la necesidad de mediciones fotoelásticas detalladas u otras mediciones de fuerza de contacto, se pueden obtener resultados similares y de forma mucho más sencilla. Por ejemplo, se han encontrado correlaciones entre la centralidad de intermediación [98] y la presión en sistemas de granos comprimidos cíclicamente [99], permitiendo relacionar una cantidad microscópica de la red (centralidad), con una característica mesoscópica del sistema como lo es la presión, lo que permite predecir distribuciones de fuerza, coeficientes de transporte de calor y la velocidad del sonido en el medio.

Observando los aportes que las redes complejas dan al estudio de cadenas de fuerza, a sistemas granulares, se debiesen seguir desarrollando herramientas que permitan estudiar con cada vez más claridad sistemas de granos. El sistema granular a estudiar en esta tesis; el cual será explicado más adelante en detalle, es un sistema granular el cual transita desde un estado líquido hacia un estado sólido. Para describir esta transición, en los estudios anteriores, se utilizaron los modelos de hidrodinámica granular. Ante la poca información local que aporta

este modelo, y los aportes comentados anteriormente sobre estudios de las redes complejas aplicadas a materia granular, surge natural la tentativa de intentar modelar el sistema y la transición mediante redes complejas y ver en qué puede aportar esta visión en sistemas en transición. Antes de entrar en las redes, primero se necesita explicar qué son las transiciones de fase y cuál es este sistema que se estudiará.

1.2. Transiciones de Fase

Las transiciones de fase en la termodinámica del equilibrio, son explicadas a través de cambios de variables que describen macroscópicamente el sistema y que no son difíciles de definir, como lo es la temperatura, entropía, entalpía, el calor específico, entre otras. Cuando no existe dicho equilibrio, no es sencillo definir una termodinámica asociada al sistema que explique la transición, es más, se necesita crear nuevas variables de estado no generales que describan el comportamiento global del sistema. Esto quiere decir, que debido a que por ejemplo (en el caso de medios granulares) la temperatura no afecta al sistema, no es sencillo encontrar una entropía con la cual se pueda definir alguna variable de estado que describa la transición, como si pasa en sistemas en equilibrio. Esto último debido a que a diferencia de la termodinámica del equilibrio, donde la entropía se puede definir por las probabilidades asociadas a los microestados, en estos sistemas, esas probabilidades varían en función del tiempo [18]. Por otra parte, en sistemas fuera del equilibrio termodinámico no hay independencia en los comportamientos de las partículas, lo que permite tener distintas dinámicas dentro del sistema. Ante esto se puede definir densidades de entropía [3] que describan localmente el comportamiento del sistema, pero esto en sistemas complejos es difícil de realizar.

Las transiciones de fase, tanto para sistemas fuera del equilibrio, como en el equilibrio, estas significan un cambio abrupto en alguna cualidad del sistema, al variar algún parámetro de control. En el caso de sistemas termodinámicos en equilibrio, estos cambios están bien definidos por las variables de estado (Figura 1.3), las cuales permanecen constantes en el equilibrio termodinámico sin necesitar ninguna inyección de energía. En el caso de sistemas fuera del equilibrio, no se puede definir correctamente ninguna de las variables de estado que se utilizan en sistemas que cumplan la termodinámica del equilibrio, en el mejor de los casos se puede definir localmente [3], pero esto no es genérico. Luego, cuando existen transiciones, éstas deben depender de otras variables que describan el problema. Estas variables dependerán y serán distintas en cada sistema granular que transite. Ejemplos de estas variables de estado son parámetros de control externos que inyectan energía a los diferentes sistemas granulares. Estos pueden ser alguna aceleración externa que haga vibrar a los granos [22], alguna presión externa provocada por un pistón que comprima las partículas [96], entre otras.

Existen diversos tipos de transiciones desde un estado a otro. Una forma de clasificar estos diversos tipos de transiciones es observar qué sucede con las distintas simetrías antes y después de una transición. Por ejemplo, al pasar de un estado líquido a un estado sólido hay un quiebre de simetría. El estado líquido contiene dos simetrías: rotacional y traslacional, en cambio, el estado sólido no contiene ninguna. Las transiciones descritas por un quiebre en la simetría, son denominadas *transiciones estructurales* [101]. Por otra parte, aquellas transiciones donde

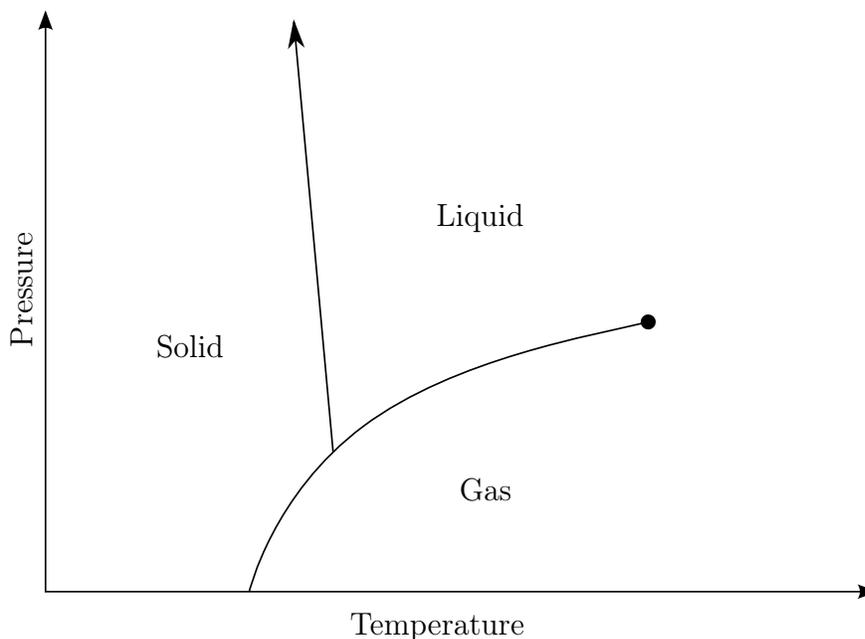


Figura 1.3: Diagrama de transiciones de fase en función de la temperatura y la presión para el caso del agua [100].

no hay quiebres de simetría son denominadas *transiciones isoestructurales* [102]. Ejemplo de esto es la transición líquido-gas, donde ambos estados poseen las dos simetrías mencionadas anteriormente y el único cambio en el sistema es una diferencia de densidad.

A su vez, cada uno de estos tipos de transiciones se puede clasificar en otras clases de transiciones, denominadas transiciones de *n-ésimo* orden. Paul Ehrenfest introdujo esta clasificación. Para determinar a qué orden corresponde una transición, se debe definir algún potencial termodinámico Φ que represente el estado termodinámico del sistema. Si la derivada *n-ésima* del potencial termodinámico es la primera en ser discontinua, la transición es de *n-ésimo* orden. Para comprender mejor esto, uno puede analizar los primeros dos órdenes. En las transiciones de primer orden existe un calor latente $l_Q \neq 0$, es decir, en la temperatura crítica de la transición, se debe absorber o ceder un calor para lograr el cambio de fase. Por otra parte, en las transiciones de segundo orden este calor latente $l_Q = 0$. Ante esto, se dice que las transiciones de primer orden, son transiciones abruptas (debido a esta cantidad de calor que se necesita), mientras que las de segundo orden son continuas.

Un ejemplo para observar estas diferencias son los gases de van der Waals. Esto es un modelo propuesto por Van der Waals, que mejora la ecuación para gases ideales considerando el efecto de tamaño finito y la atracción entre partículas. Para ello, la ecuación de estado es:

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = N\kappa_B T$$

Donde a y b son constantes que dependen del fluido a modelar. Si uno dibuja isothermas respecto de esta ecuación, esto es, curvas de temperatura constante en un diagrama de presión y volumen, puede observar una transición de primer orden. En la Figura 1.4 se pueden visualizar distintas isothermas. La isoterma C-D se le denomina la isoterma de la temperatura

crítica T_c . A temperaturas menores que esta, aparecen isothermas como E-L, las cuales tienen un comportamiento de coexistencia de fases extraño, que se explicará a continuación. A la izquierda de F, el estado es líquido, mientras que a la derecha de J, el estado es gaseoso. Por otra parte, en las zonas F-G e I-J son metaestables ambos estados, mientras que en G-I es una zona de inestabilidad (debido a la pendiente de la curva, no hay un mínimo local de energía). Ahora, si la transición es abrupta, se debe entonces cumplir que la primera derivada de un potencial termodinámico Φ sea discontinua. Tomando el potencial de Gibbs $G = U + PV - TS$, una relación que cumple es:

$$\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T = -V$$

En las isothermas como E-L, existe una diferencia entre el volumen del estado líquido y el volumen del estado gaseoso, es decir, la derivada $\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T$ es discontinua y, por tanto, la transición es de primer orden.

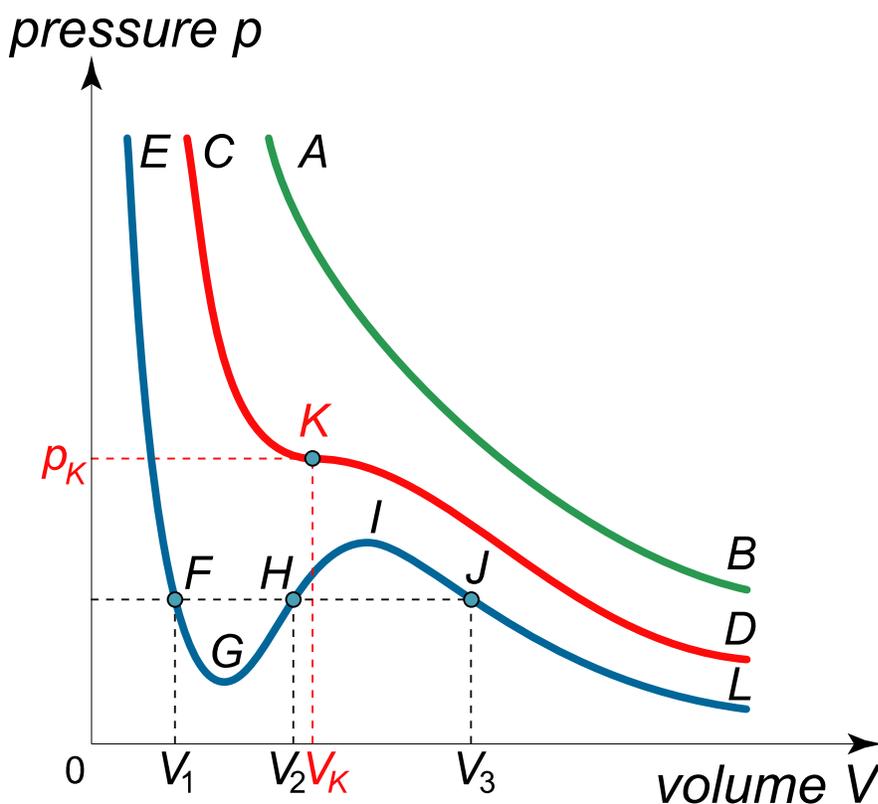


Figura 1.4: Diagrama de transiciones de fase en función de la presión y el volumen para el caso de gases de Van der Waals [103].

La transición asociada al sistema que se estudiará en esta tesis, es una transición de segundo orden. Estas transiciones son muy interesantes debido a que además de ser discontinuas en la segunda derivada del potencial, se caracterizan por comportamientos universales tipo potencia en distintas magnitudes. Ejemplos de estos son la susceptibilidad χ y correlaciones de largo alcance ξ [18]. La primera se define como:

$$\chi = \frac{\partial X}{\partial Y} \quad (1.1)$$

Con X alguna propiedad que describa el sistema, e Y una perturbación externa. Un ejemplo clásico de esto es la susceptibilidad magnética $\chi_m = \frac{\partial M}{\partial B}$, la cual mide la variación de la magnetización del sistema M cuando se varía un campo magnético externo B . Cuando la transición es continua, esta diverge mientras se acerca al valor crítico de la transición, cumpliendo entonces para el caso tanto de equilibrio como fuera del equilibrio que $\chi \sim \left| \frac{Y-Y_c}{Y_c} \right|^{-\gamma}$. Siendo Y la variable de estado que describe al sistema, Y_c el valor de Y en donde ocurre la transición, y γ una constante parte de los llamados exponentes universales que describen a las transiciones de fase continuas.

Por otra parte, se mencionó la correlación de largo χ . Para entender el significado de esta se debe primero definir la función correlación $C(r)$, la cual correlaciona en algún espacio, dos variables $s_1(r)$ y $s_2(r)$ que, definidas en todo ese espacio del sistema (en este caso se tomó $s_1(r) = s_2(r) = s(r)$), describen una característica del sistema:

$$C(r) = \langle s(R) \cdot s(R+r) \rangle - \langle s(R) \rangle \langle s(R+r) \rangle \quad (1.2)$$

La función correlación $C(r)$ en las cercanías del punto crítico, se puede asumir como un comportamiento exponencial [23] tipo:

$$C(r) \sim e^{-r/\xi} \quad (1.3)$$

Este largo de correlación ξ , es una medida del rango de la función de correlación $C(r)$ cerca del punto crítico de la transición. Siguiendo con el ejemplo de magnetismo referido antes, tomando a $s(r)$ como una función que describe el valor del espín en toda posición de algún sistema, el largo de correlación señala cuál es la distancia promedio en donde existe una correlación entre los espines de las diversas posiciones. Esta al igual que la susceptibilidad, diverge en las transiciones continuas a medida que se acerca al punto crítico, es decir, $\xi \sim \left| \frac{Y-Y_c}{Y_c} \right|^{-\nu}$. Al igual que el caso anterior, Y es la variable de estado que describe correctamente la transición y ν otra constante, la cual al igual que γ es otro exponente universal en este tipo de transiciones.

Para estudiar transiciones en un sistema fuera del equilibrio como lo es un sistema granular, lo que se debe hacer entonces es, en primer lugar, tener una variable de estado asociado al sistema, la cual en nuestro caso será una aceleración externa que inyectará energía al sistema, luego se debe determinar qué tipo de transición es, para ello hay que observar si lo que sucedió fue un quiebre de simetría, una percolación, un cambio de densidad, etc. Por último, para definir si esta es continua o no, se debe observar los valores de la susceptibilidad χ y la correlación de largo ξ y ver si divergen o no. Es esto mismo lo que se mostrará en la sección siguiente: cómo se estudió la transición en el estudio anterior del sistema.

Antes de mostrar esto, es importante notar que en esta tesis se busca estudiar una transición de segundo orden mediante la obtención de la entropía del sistema. El que la transición sea continua es clave para poder entender el sistema de esta forma. En transiciones abruptas,

como las explicadas anteriormente en gases de Van der Waals, existe histéresis, es decir, hay una diferencia entre las temperaturas críticas (por ejemplo, de solidificación y de fusión), lo que implica que hay dos máximos para los cuales la entropía se puede maximizar, complicando un estudio de transiciones mediante esta. No es así, en transiciones continuas, en éstas hay un solo máximo, lo que permite, en el caso de estudiar un sistema mediante redes complejas, que la entropía maximizada mediante restricciones asociadas al sistema, sea capaz de explicar la transición. Luego, esto puede ser de muchísima utilidad para comprender transiciones continuas en fenómenos fuera del equilibrio.

1.3. Resultados anteriores de la investigación

Esta investigación se centra en el proceso de transición líquido a sólido en un sistema granular cuasi bidimensional acelerado verticalmente [22]. Antes de mostrar la investigación en sí y las herramientas que se usarán en ella, se necesita definir correctamente el sistema que se estudiará, y cómo se describe este sistema en los estudios anteriores.

El sistema consiste en un volumen cuasi-2d con $N = 11,504$ partículas, las cuales cubren aproximadamente el 90 % del área del sistema. Este sistema es acelerado verticalmente, en diferentes aceleraciones Γ (esta será la variable de estado del sistema), logrando una transición en una aceleración crítica Γ_c . Esta transición es una transición estructural de segundo orden. Éstas tienen como característica un quiebre de simetría, y en general estos quiebres relacionados con las transiciones de fase tipo estructural pueden ser descritos por un parámetro de orden. Este parámetro consiste en un campo escalar o vectorial definido en todo el espacio, el cual en el punto crítico de la transición tiene un cambio de comportamiento. En el marco de esta investigación, este parámetro ya fue encontrado y se puede definir su valor sobre cada partícula j como:

$$Q_4^j = \frac{1}{N_j} \sum_s^{N_j} e^{4i\alpha_s^j} \quad (1.4)$$

Con N_j el número de vecinos cercanos, y α_s^j el ángulo respecto al eje horizontal entre el vecino s y j .

El parámetro Q_4^j describe el orden local cuádruple de cada partícula j . Esto sirve para estudiar el orden local de una partícula individual respecto a las demás partículas cercanas. Existen también parámetros de orden local hexagonal, pentagonal, entre otros, bastan definir $Q_n^j = \frac{1}{N_j} \sum_s^{N_j} e^{ni\alpha_s^j}$, pero se ha mostrado que si bien en sistemas bidimensionales se privilegia un orden hexagonal, en el caso cuasi bidimensional de altura $L_z \approx 1,8d - 1,9d$ el orden privilegiado es cuádruple [23]. Este parámetro Q_4^j es cercano a 1 en su módulo cuando a su alrededor hay 4 partículas cada una a un ángulo de $\frac{\pi}{2}$ respecto a la más cercana, es decir, formando un cuadrado alrededor de la partícula j , por el contrario, es cercano a 0, cuando esto está lejos de cumplirse, generando que los vecinos de la partícula j no formen cuadrados alrededor de él. Para estudiar el orden general de estructuras cuadradas de todo el conjunto de partículas se analizó el promedio de este:

$$\langle |Q_4| \rangle = \langle \frac{1}{N} \sum_j |Q_4^j| \rangle \quad (1.5)$$

Lo que se observó con este promedio, es que existe una aceleración crítica Γ_c , para la cual, antes de llegar a ella, el orden global $\langle Q_4 \rangle$ aumenta linealmente, y tras ella hay un cambio en el comportamiento, lo que se observa en la Figura 1.5. Este cambio de orden también se puede visualizar en la Figura 1.6, donde se ve que en (a) no existe un orden muy claro (estado líquido), sino que en ciertos lugares pequeños hay orden local visible, mientras que en (b) es evidente que en medio hay un gran conjunto de granos ordenados entre sí (estado sólido).

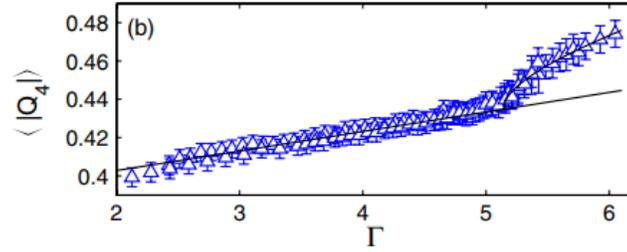


Figura 1.5: $\langle |Q_4| \rangle$ en función de la aceleración Γ en el sistema granular [22]

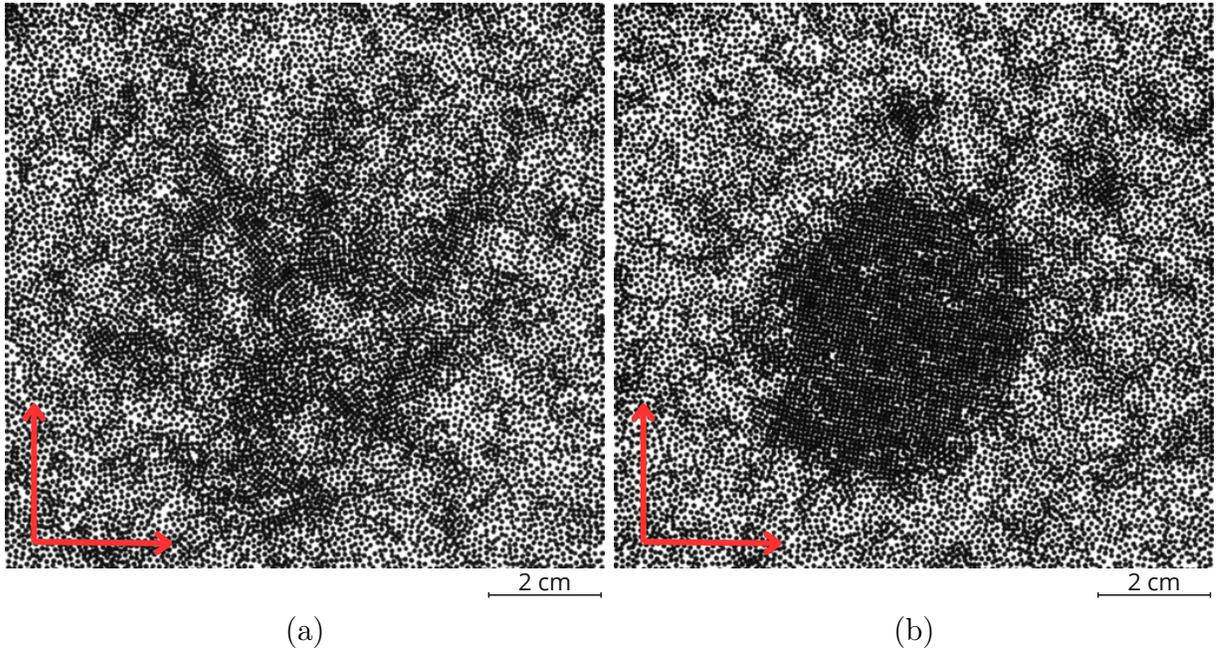


Figura 1.6: (a) Imagen de granos para $\Gamma < \Gamma_c$. (b) Imagen de granos para $\Gamma > \Gamma_c$

Esta transición estructural detectada se estudió con mayor profundidad mediante las fluctuaciones del parámetro de orden en el espacio de Fourier del sistema. Esto con el objetivo de saber qué clase de transición estructural es. Para ello, la fluctuación en el espacio de Fourier por definición es:

$$S_4(\vec{k}) = \frac{\langle |\hat{Q}_4(\vec{k}, t) - \langle \hat{Q}_4(\vec{k}, t) \rangle|^2 \rangle}{N} \quad (1.6)$$

Donde $\hat{Q}_4(\vec{k}, t) = \sum_j^N Q_4^j e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j(t)}$ es la transformada de Fourier del parámetro de orden definido anteriormente. Esta fluctuación tiene un comportamiento tipo Ornstein-Zernike para vectores de onda pequeños $k \ll 1$ [23]. Esto implica que en el límite de vectores de onda pequeños; esto es, estudiar el sistema a gran escala; las fluctuaciones $S_4(k)$ se pueden aproximar en función de la susceptibilidad estática $S_4(0)$ y el largo de correlación del parámetro de orden en el espacio ξ_4 :

$$S_4(k) \simeq S_4(0) \frac{1}{1 + (\xi_4 k)^2} \quad (1.7)$$

Como se menciona en la sección anterior, expresar el sistema en función de estos dos términos es muy útil para determinar el tipo de transición. Escribiendo la aceleración normalizada como $\varepsilon = |\frac{\Gamma - \Gamma_c}{\Gamma_c}|$ se sabe que si la transición es continua se deben cumplir:

$$\xi_4 \sim \varepsilon^{-\nu}, \quad S_4(0) \sim \varepsilon^{-\gamma}, \quad (1.8)$$

Este comportamiento tipo potencia efectivamente ocurre en el sistema, como se puede observar en la Figura 1.7. Este satura cuando es cercano a 0, debido a que la caja es finita (comportamiento que también se visualizará en esta tesis). Con esto se demostró en el estudio anterior que la transición es continua. Es decir, esta transición es una transición estructural, lo cual lo podemos ver en que es descrita por un cambio en un parámetro de orden, y es de segundo orden debido al comportamiento de su susceptibilidad y correlación de largo.

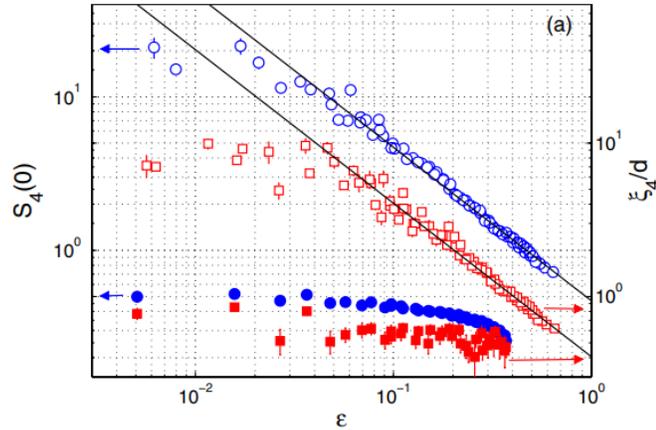


Figura 1.7: ξ_4 y $S_4(0)$ en función de ε . Los símbolos (círculos y cuadrados) abiertos son los correspondientes al sistema de estudio. El color azul corresponde a ξ y el rojo a $S_4(0)$. [22]

Como se puede desprender de lo escrito, en esta última sección de este primer capítulo del marco teórico, se entendió que al acelerar verticalmente un sistema granular con ciertas características, se da una transición estructural de segundo orden. Sin embargo, quedan algunas interrogantes respecto a cómo aporta la información local del sistema en esta transición. Debido a que solo se estudió el sistema para longitudes de onda grande, el aporte de estructuras mesoscópicas no se puede apreciar en este análisis. Si bien se puede decir que el sistema se ordenó, no hay más información del cómo. Este será uno de los objetivos de esta investigación. Por otra parte, en el análisis realizado en el estudio anterior del sistema se

concluyó que debido a la combinación de los distintos exponentes universales, como γ y ν , el calor específico del sistema no divergía a medida que se acercaba a la transición, lo cual está completamente de acuerdo con que sea una transición de segundo orden. El problema está en que esto no tiene un claro significado en los fenómenos fuera del equilibrio [22]. En esta tesis se realizará una interpretación de este calor específico que concordará con lo expuesto en el estudio anterior, el cual se encontrará mediante el estudio del sistema como una red compleja. Así se definirá una entropía asociada a la red con la cual se podrá interpretar e incluso obtener este calor específico, pero para ello, primero se debe entender qué es una red compleja, cómo se estudian sus estadísticas y cómo se entienden mecánica-estadísticamente.

Capítulo 2

Redes Complejas

«Es imposible meditar sobre el tiempo y el misterio del pasaje creativo de la naturaleza sin una emoción abrumadora frente a las limitaciones de la inteligencia humana.»

A.N Whitehead [104]

Esta investigación se fundamenta principalmente en redes complejas. Se utilizan éstas como herramienta para poder entender el comportamiento local en la transición del sistema granular, así como también para poder interpretar de mejor manera la termodinámica del sistema. Para entender lo que se utilizará en la investigación, en este capítulo se explicarán estadígrafos que se aplicarán posteriormente en los resultados, se mostrará el método de obtención de comunidades, el cual será el coarse graining que se mencionó en la introducción, y luego de esto se mostrará la visión mecano-estadística que se puede realizar en redes, encontrando, dada ciertas restricciones, redes más probables que otras vía entropía. Desde esta última se mostrará cómo encontrar un modelo nulo adecuado, si se escriben correctamente las restricciones de un sistema.

2.1. Redes Complejas Individuales y Múlticapas

2.1.1. Redes Complejas Individuales

Una colección de nodos, los cuales son relacionados entre ellos de alguna forma entre sí, es lo que se denomina red. Matemáticamente, se pueden definir como un grafo G [105]:

$$G = (V, E), \tag{2.1}$$

Donde V es el conjunto de los nodos (vértices) de la red, y E el conjunto de los enlaces entre nodos de la red. Estos grafos son utilizados para modelar diversos sistemas, por lo que el

significado de los nodos y de las relaciones entre ellos, varía en función del problema que abordan. Una red se puede visualizar mediante puntos (nodos) que se vinculan con otros mediante líneas (enlaces) como se puede observar en la figura 2.1. Para utilizar redes como modelos que representan un fenómeno hay una idea detrás en la que se debe insistir, esta es: estudiar los fenómenos mediante relaciones, éstas son las relevantes. Si es que se puede encontrar relaciones entre sujetos, se puede entender un problema mediante redes. En el caso de esta investigación, como se explicará en el próximo capítulo, los sujetos serán granos, y las relaciones el orden que existe localmente entre ellos.

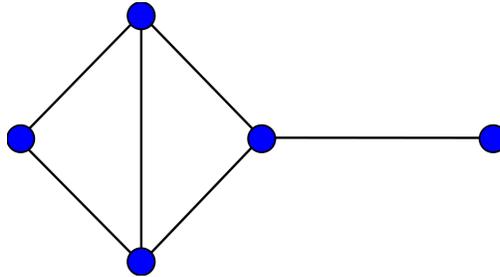


Figura 2.1: Visualización de una red

Dado un sistema que se está modelando como una red, existe una forma de estudiarlo y así conocer sus propiedades y estructura: analizar su matriz de adyacencia A , la cual contiene la mayoría de la información que puede ser obtenida de la red. Los elementos que la componen se definen como:

$$A_{ij} = \begin{cases} \text{peso del enlace entre el nodo } i \text{ y el nodo } j \\ 0 \text{ si no hay enlace} \end{cases} \quad (2.2)$$

Además, si dentro del sistema hay características o atributos asociados a los mismos nodos, como pueden ser tamaño, espín, densidad, entre otras, se pueden expresar estas propiedades del nodo i como un vector de atributos \vec{a}_i . Lo mismo puede ocurrir para los enlaces, un ejemplo de esto es una red de colaboración en la publicación de artículos científicos. Esta es una red, en la cual entre dos países hay un enlace si existe algún artículo escrito por dos científicos que investiguen en estos dos respectivos países. Este enlace puede contener además la información de cuántos son los artículos, cuántos científicos de cada país participaron, el porcentaje de mujeres y hombres que participaron, entre otras cosas. Si bien estos atributos se pueden separar en diversos layers como se verá más adelante, en el caso de estas redes que se acaban de definir, se puede construir un vector de atributos \vec{e}_{ij} .

Definido ya la matriz de adyacencia y los vectores de atributos, ahora se puede explicar cómo estudiar una red en base a esta matriz y vectores. Para estudiar propiedades de alguna red, existen estadígrafos que entregan distinta información sobre ella. Cada uno de estos será más útil que otro o entregará cierta información más relevante dependiendo del problema. Algunos utilizados comúnmente y que se utilizarán en esta investigación son [98]:

1. Grado k_i : Informa la cantidad de enlaces que posee cada nodo, es decir, la cantidad de relaciones que contiene respecto a los demás. Para obtener esta cantidad, basta sumar

sobre todos los N nodos j , los elementos de la matriz de adyacencia (A_{ij}):

$$k_i = \sum_{j=1}^N A_{ij} \quad (2.3)$$

2. Cantidad de enlaces m : Tomando la cantidad de enlaces de cada nodo de la ecuación 2.3, se puede calcular la cantidad total de enlaces que existen en la red. Para esto basta sumar sobre todos los nodos la cantidad de enlaces que ellos poseen, y luego dividirlo por dos debido a que la suma cuenta dos veces cada relación. Esto dará información de qué tan densa es la red.

$$m = \frac{1}{2} \sum_i k_i \quad (2.4)$$

3. Centralidad de intermediación B_i : Existen nodos en las redes, los cuales participan más en las conexiones entre nodos que los demás. Para determinar estos, los cuales son fundamentales para que la información de un nodo pueda llegar a otro, se define la centralidad de intermediación (*betweenness* en inglés). Para calcular esta centralidad referida a un nodo i , hay que sumar sobre todos los pares de nodos existentes s, t , y calcular la razón entre la cantidad de caminos más cortos en los que participa i (n_{st}^i) y la cantidad total de caminos más cortos entre el par de nodos g_{st} . Tras sumar, se normaliza respecto a N^2 ($\sum_{s,t} 1 = N^2$) para que tenga valores entre 0 y 1. Luego, si el nodo i participa en todos los caminos más cortos entre cualquier par de nodos, su valor es 1, por el contrario, si no participa en ningún camino, su valor será 0. De esta forma se puede discriminar qué nodos son los relevantes en la conexión de la red.

$$B_i = \frac{1}{N^2} \sum_{s,t} \frac{n_{st}^i}{g_{st}} \quad (2.5)$$

4. Centralidad de cercanía C_i : En una red existen distancias d_{ij} , las cuales se definen como la cantidad de enlaces para conectar un nodo desde otro. Esta distancia es 1 si dos nodos derechamente están conectados, pero en caso de que necesiten de otro nodo que los conecte esta va aumentando en cantidad. Es por esto mismo que hay nodos que están en promedio más cerca de los demás nodos y nodos que están en promedio más lejos de los demás nodos. Para determinar quiénes son los más cercanos, se define la centralidad de cercanía (*closeness* en inglés) para cada nodo i . Esta se calcula como la suma del inverso de las distancias entre el nodo i y los demás nodos. Luego se normaliza multiplicando por $N - 1$ (cantidad de nodos menos él i), así tiene valores entre 0 y 1:

$$C_i = (N - 1) \frac{1}{\sum_{j \neq i} d_{ij}} \quad (2.6)$$

5. Densidad $\rho(n)$ de algún atributo n . Tomando todos los nodos, se puede analizar cuál es la probabilidad de encontrar cierto atributo en la red. Para ello se analiza su densidad respecto a todos los valores:

$$\rho(n) = \frac{\sum_i n_i \delta(n_i = n)}{N} \quad (2.7)$$

6. Densidad $\rho(e)$ de atributo de los enlaces e . Al igual que la anterior, se puede encontrar la probabilidad de encontrar cierto atributo en los enlaces de la red:

$$\rho(e) = \frac{\sum_{i < j} e_{ij} \delta(e_{ij} = e)}{m} \quad (2.8)$$

2.1.2. Redes Complejas Multicapas

Si el sistema que se quiere estudiar, contiene distintos tipos de relaciones entre nodos, se necesita generalizar lo que se mencionó anteriormente, pero para una serie de redes interconectadas. Los sistemas complejos, ya sean físicos o de otras áreas del conocimiento, generalmente son tan complejos que a veces no se pueden entender desde una sola red. De esta complejidad nacen las *redes multicapas*. Estas consisten en un conjunto de redes que representan al sistema en las diferentes aristas que el problema toma. Esto sucede cuando existen diferencias en la naturaleza de las relaciones (enlaces).

Un ejemplo (Figura 2.2) para visualizar esto: imagine la red de transporte de la ciudad X. Esta es una red donde los nodos son diferentes lugares de la ciudad y los enlaces las conexiones que existen mediante transporte entre los distintos lugares. Para llegar de un lugar a otro, se pueden tomar diferentes medios de transporte como por ejemplo metro, tren o bus. La relación (enlace) de un lugar a otro mediante alguno de estos tres medios es distinta, por lo que el problema se puede separar en tres tipos de relaciones de diferente naturaleza, la red de transporte de metro, la cual conecta lugares mediante líneas del metro, la red de transporte de trenes, la cual conecta lugares mediante los recorridos de trenes, y la red de transporte de buses, la cual conecta lugares mediante recorridos de buses. Pero también hay interconexión entre medios, existen lugares donde hay una estación de tren y una estación de metro, por lo que además de los enlaces de estas tres redes de transporte por sí solas, existen conexiones entre redes, es decir, tomar un tren, hasta un paradero en el cual también hay una estación de metro, y luego tomar el metro para llegar al lugar de destino. Cada plano a su vez tiene nodos que se pueden conectar a otros nodos de los otros planos.

Matemáticamente, la definición de una red multicapas debiese ser entonces un conjunto de grafos \vec{G} [105]:

$$\vec{G} = (G_1, G_2, \dots), \quad (2.9)$$

Donde a su vez, cada cual, es un grafo como los que se definieron anteriormente, es decir:

$$G_x = (V_x, E_x), \quad (2.10)$$

Pero no son solamente un conjunto de grafos separados, sino que las multicapas contienen relaciones entre grafos distintos (layers). Por lo que falta un término \mathcal{G}_{xy} que caracterice estas relaciones entre dos grafos G_x, G_y :

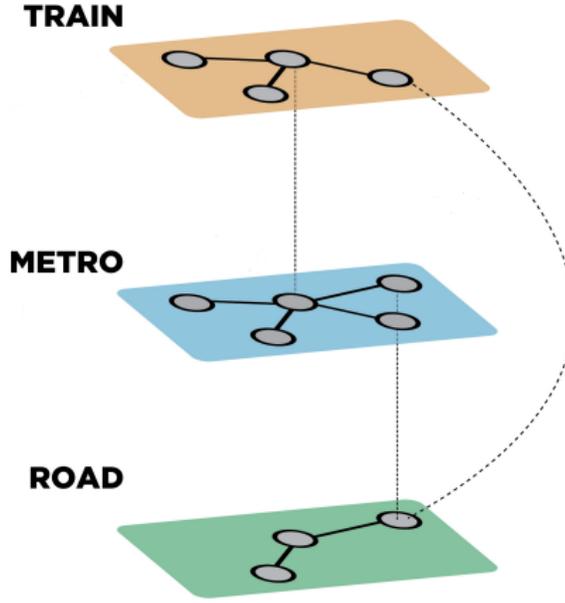


Figura 2.2: Ejemplo de una red multicapa modelando un sistema de transporte público. Cada capa representa un medio de transporte distinto. Los nodos, dibujados como círculos grises, son las estaciones de los respectivos medios de transporte, y existen dos enlaces: los enlaces negros continuos, los cuales corresponden a estaciones de un mismo medio de transporte conectadas entre sí, y los enlaces grises discontinuos, los cuales corresponden a una interconexión de estaciones de distintos medios de transporte [106].

$$\mathcal{G}_{xy} = (V_x, V_y, E_{xy}), \quad (2.11)$$

Donde V_x y V_y son los conjuntos de nodos en las capas x, y que se conectan entre sí y E_{xy} los enlaces existentes entre estas distintas capas x, y . Este término de comunicación entre capas implica que en realidad $\vec{G} \neq (G_1, G_2, \dots)$ ya que falta esta conexión. Luego G debe ser:

$$G = (G_1, G_2, \dots, G_x, \dots, \mathcal{G}_{12}, \dots, \mathcal{G}_{xy}, \dots) \quad (2.12)$$

En una red compleja descrita por un grafo G existía una matriz de adyacencia, la cual permitía estudiar la red. En el caso de las redes multicapas, también existe una matriz, esta es llamada matriz de multiadyacencia y sus elementos se pueden escribir como:

$$\mathcal{A}_{ix,jy} = \begin{cases} \text{peso del enlace entre el nodo } i \text{ del layer } x \text{ y el nodo } j \text{ del layer } y & \\ 0 \text{ si no hay enlace} & \end{cases} \quad (2.13)$$

La cual contiene en su interior todas las matrices de adyacencia de cada layer y las conexiones de nodos de distintos layers [105]. Con esta se pueden obtener los mismos estadígrafos que se mencionaron anteriormente y también obtener otros que involucren a los distintos

layers, como por ejemplo la centralidad de grado total (considerando todos los planos de conexiones) de un nodo i , el coeficiente de clustering de nodos de las multicapas, entre otras, las cuales no se profundizará en este marco teórico, ya que no serán parte de esta investigación.

2.1.3. Comunidades y Modularidad

Para estudiar la estructura de una red, sea multicapas o simple, se usan diferentes herramientas. Esto con el objetivo de saber si la estructura es tipo jerárquica, circular, concentrada en un centro, periférica, entre otras. La estructura de una red consiste en la forma en que se vinculan los nodos del fenómeno que estamos representando. Estas estructuras se pueden analizar mediante diferentes estadígrafos y algoritmos. Entre ellos, encontrando k -cores (conjunto de n nodos donde cada uno al menos está conectado a otros k del mismo conjunto), componentes (máximo subgrupo de nodos de la red, tal que cada nodo puede llegar por algún camino hacia cualquier otro nodo del subgrupo), comunidades (nodos más conectados entre ellos que con el resto), entre otras. Esta última obtiene subgrupos divisibles dentro de la red (lo que se llama una partición dura); como se puede ver en la Figura 2.3, y será utilizada en esta investigación como método de coarse-graining. Para la obtención de las comunidades de una red hay que maximizar la función modularidad, la cual se define como [98]:

$$Q_{mod} = \sum_{i,j} [A_{ij} - \gamma P_{ij}] \delta(c_i, c_j), \quad (2.14)$$

Donde γ es denominado el parámetro de resolución, el cual es un número arbitrario (generalmente se ocupa como $\gamma = 1$) que se utiliza para privilegiar la obtención de comunidades más grandes o más pequeñas, P_{ij} es la probabilidad de enlace entre los nodos i y j , la cual dependerá del problema que represente la red (modelo nulo) y c_i es la comunidad en la cual se encuentra el nodo i . Esta probabilidad P_{ij} es fundamental para que se puedan categorizar los nodos en diferentes grupos. Para una red aleatoria definida por una secuencia de grado por cada nodo (modelo nulo aleatorio) la probabilidad de enlace entre dos nodos es [39]:

$$P_{ij} = \frac{k_i k_j}{\sqrt{\sum_i k_i}} \quad (2.15)$$

Para otros tipos de problemas, donde por ejemplo los nodos tienen atributos, u alguna restricción, se debe crear un modelo que represente la red, y en función de este encontrar esta probabilidad. En el caso de un atributo tipo posición en los enlaces, se han propuesto modelos nulos donde incluyen restricciones espaciales y se han modelado de la siguiente manera [96, 108]:

$$P_{ij} = I_i I_j f(d_{ij}), \quad (2.16)$$

Donde I_i es la importancia del nodo i (puede ser k_i u otro atributo a_i del nodo i , dependiendo del problema) y $f(d_{ij})$ alguna función de la distancia (puede ser decreciente o creciente, dependerá de la descripción del problema).

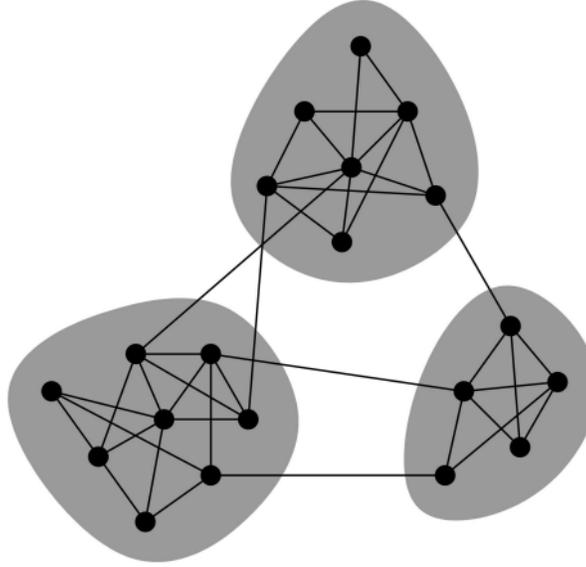


Figura 2.3: Mediante la maximización de la función modularidad, se puede dividir a los distintos nodos de la red, en diferentes grupos (región sombreada) donde se cumple que los nodos correspondientes a cada grupo, son más similares entre ellos, que con el resto de la red [107].

Para encontrar matemáticamente el modelo más acorde a algún problema en particular, se puede obtener esta probabilidad de enlace mediante un análisis de ensambles que describa al sistema y desde estos obtener la probabilidad P_{ij} , así como se hace en mecánica estadística. Esto se detallará en la siguiente sección.

La obtención de comunidades es fundamental en esta tesis. Como uno de los objetivos de la investigación es comprender la dinámica local mesoscópica del sistema, estas serán utilizadas como método de coarse grained, pero como se puede notar, para obtener comunidades correctamente, se necesita un modelo nulo P_{ij} que represente al sistema.

2.2. Mecánica estadística en redes complejas

Para realizar un análisis con visión de mecánica estadística en redes complejas se deben definir ensambles de grafos. Para esto se considerará a un conjunto de nodos y a sus vínculos como un microestado y se denominará como macroestado a el conjunto de estos microestados que cumplan con alguna condición común. En ese sentido se pueden tener ensambles microcanónicos y canónicos, cada uno con distintas restricciones ($F(\vec{A}) = \vec{C}$ [40]). En los primeros las restricciones que se deben cumplir son exactas, mientras que en el segundo las restricciones son sobre promedios. En el caso del microcanónico se puede trabajar, por ejemplo, con la cantidad de enlaces $\sum_{i<j} A_{ij} = L$, el grado de cada nodo $\sum_{j,j \neq i} A_{ij} = k_i$, entre otras, mientras que en el canónico se debe trabajar con la cantidad promedio enlaces $\sum_{i<j} P(G)A_{ij} = L$ (con $P(G)$ la probabilidad de esa red), con el grado promedio por cada nodo $\sum_{j,j \neq i} P(G)A_{ij} = k_i$, etc. Para estudiar estos sistemas mediante ensambles, primero se debe definir la entropía:

$$S = - \sum P(G) \ln(P(G)) \quad (2.17)$$

Donde la probabilidad de los grafos $P(G)$ dependerá de las cantidades asociadas a las restricciones (F_μ) y las restricciones del sistema (C_μ), las cuales como se mencionó anteriormente pueden ser exactas o sobre promedios. Tomando el caso de los ensambles canónicos, los cuales serán los que se utilizarán en esta tesis, se puede escribir las restricciones como:

$$C_\mu = \sum_G P_C(G) F_\mu(G) \quad (2.18)$$

Luego se puede maximizar la entropía dada las restricciones:

$$\frac{\partial}{\partial P_C(G)} (S + \sum_\mu \lambda_\mu (\sum_G P_C(G) F_\mu(G) - C_\mu)) + \Lambda (\sum_G P_C(G) - 1) = 0$$

Y así encontrar la probabilidad de cada ensamble $P_C(G)$, la cual será al igual que en termodinámica [39] una función exponencial tipo Gibbs:

$$P_C(G) = \frac{1}{Z_C} \exp(- \sum \lambda_\mu F_\mu(G)) \quad (2.19)$$

con Z_C la función partición del ensamble canónico, λ_μ los multiplicadores de Lagrange que aparecen al colocar las restricciones y Λ el encargado de normalizar la probabilidad. Luego, si se coloca esta probabilidad en la definición de entropía, se puede escribir esta de la siguiente manera:

$$S = - \sum_G P(G) \log\left(\frac{1}{Z_C} \exp(- \sum \lambda_\mu F_\mu(G))\right)$$

$$S = \sum_\mu \lambda_\mu C_\mu + \log(Z_C) \quad (2.20)$$

Para encontrar valores en estos cálculos, se debe obtener valores para los multiplicadores de Lagrange, para esto, derivando la última ecuación respecto a λ_μ se puede encontrar una relación que permite encontrar estos multiplicadores usando a la función partición:

$$C_\mu = - \frac{\partial \log(Z_C)}{\partial \lambda_\mu} \quad (2.21)$$

Luego, toda la información del sistema se puede obtener, así como en mecánica estadística, encontrando la función partición:

$$Z_C = \sum_G \exp(-\sum \lambda_\mu F_\mu(G)) \quad (2.22)$$

Siguiendo todo este proceso, uno puede obtener un valor definido de la entropía S . Ejemplo de esto es un sistema donde la restricción asociada a la red es $L = \sum_G P(G) \sum_{i<j} A_{ij}$, es decir, la cantidad total de enlaces de la red describe al sistema. Desarrollando esta entropía como se hizo de manera genérica anteriormente, se puede demostrar que $S = \log\left(\binom{N-1}{L}\right)$ [39], con N la cantidad de nodos en la red. Luego, se puede observar en la Figura 2.4, cómo cambia esta en función de la cantidad de enlaces totales de la red.

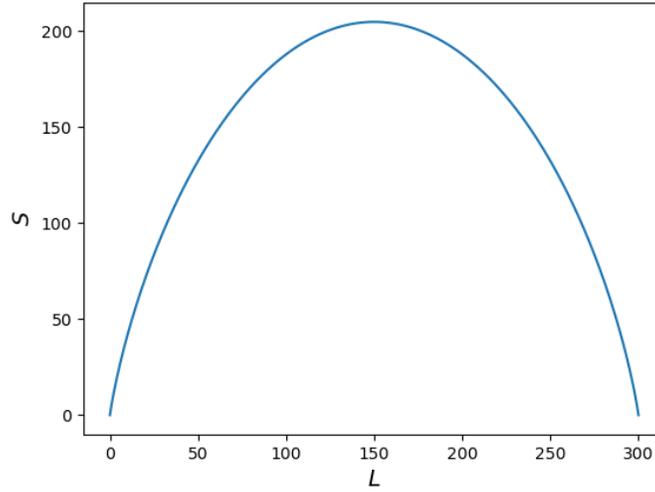


Figura 2.4: Gráfico de la entropía S en función de la cantidad de enlaces L de un sistema de redes, donde la restricción es $L = \sum_G P(G) \sum_{i<j} A_{ij}$ y la cantidad de nodos N es 25.

Al igual como se hizo en la sección anterior con las redes, se puede generalizar esto para nuevos ensambles, esta vez de redes multicapas. Al igual que antes, se puede definir la entropía multicapas, pero con la diferencia de trabajar con un vector de grafos, es decir $G \implies \vec{G}$:

$$S = -\sum_{\vec{G}} P(\vec{G}) \ln(P(\vec{G})) \quad (2.23)$$

Las restricciones C_μ pueden ser respecto a cada layer o entre layers y dependiendo de éstas se cumplirán distintas probabilidades para cada grafo [39], las cuales nuevamente tendrán la forma exponencial tipo Gibbs:

$$P_C(\vec{G}) = \frac{1}{Z_C} \exp(-\sum_{\mu} \lambda_\mu F_\mu(\vec{G})) \quad (2.24)$$

Con Z_C la función partición del ensamble de redes multiatributos, λ_μ los multiplicadores de Lagrange que aparecen al colocar las restricciones y F_μ las restricciones. Análogamente, al

caso anterior se puede escribir la entropía de forma más sencilla si se utiliza esta probabilidad $P_C(\vec{G})$ en la ecuación de definición de la entropía multicapas:

$$S = \sum_{\mu} \lambda_{\mu} C_{\mu} + \log(Z_C) \quad (2.25)$$

Lo distinto entre la mecánica estadística en redes complejas individuales y redes complejas multicapas ocurre cuando existen correlaciones entre layers, lo que complica la obtención de la probabilidad del grafo multicapas $P_C(\vec{G})$, ya que las ecuaciones para obtener los multiplicadores de Lagrange, pueden ser más complicadas. En el caso en que no exista correlaciones, encontrar la probabilidad del grafo multicapas es sencillo: depende de la de los distintos layers, pero cada uno es independiente entre sí, luego la probabilidad es:

$$P(\vec{G}) = \prod_x^N P(G_x) \quad (2.26)$$

Esto implica que la función partición total del sistema debe ser la multiplicación de todas las funciones partición respectivas a cada layer:

$$Z = \prod_x Z_x \quad (2.27)$$

Y esto a su vez implica que la entropía de la red multicapas es la suma de las entropías individuales de cada capa de la red:

$$S = \sum_x S_x \quad (2.28)$$

Esta visión mecanoestadística descrita permite obtener la probabilidad de enlace entre dos nodos, que es algo fundamental en esta tesis. Para lograr ello simplemente hay que sumar sobre todos los grafos posibles en los cuales hay enlace y dividirlo por toda la cantidad de grafos posibles del sistema. Lo que es lo mismo que:

$$P_{ij} = \sum_G P(G) \delta(A_{ij} > 0) \quad (2.29)$$

He aquí una gran utilidad de modelar el sistema mediante ensambles. Se puede obtener la probabilidad P_{ij} de que exista un enlace entre dos nodos i, j , y luego utilizarla en la función modularidad descrita en la sección anterior.

2.3. Coarse Grained

Uno de los objetivos que se han mencionado en este marco teórico es el estudio de las interacciones locales y su rol en la transición de fase del sistema granular. Para ello se decidió estudiar el sistema mesoscópicamente. La determinación de comunidades mediante modularidad es la forma de simplificación del sistema que se utilizó en esta investigación, esto es un tipo de coarse graining que se puede realizar en redes complejas. Esta clase de simplificaciones se usa bastante en física, por ejemplo en mecánica de fluidos se puede estudiar la suspensión coloidal (choque entre moléculas en un fluido) de moléculas en el nivel microscópico mediante el Hamiltoniano de todas las partículas [59]:

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{P_i^2}{2M_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{ij}^{SS}(q) + V_{ij}^{SC}(Q, q) + V_{ij}^{CC}(Q)$$

donde m_i es la masa de las partículas del fluido, M_i la masa de las partículas colisionantes y los $V_{ij}^{SS}, V_{ij}^{SC}, V_{ij}^{CC}$ son los potenciales entre partículas. De esta descripción se puede pasar a un nivel mesoscópico, pensando al espacio como pequeñas celdas (C_i) de grosor Δ ubicadas espacialmente en R_{C_i} . Aquí ya no se verá la masa de cada partícula, el momentum, o la energía, sino que se verán las características de la celda en ese espacio, obteniendo densidad de masa, momentum y energía en cada celda.

$$\rho_{C_i} = \sum_{C_i} m_i \frac{R_{C_i}}{\Delta}$$

$$g_{C_i} = \sum_{C_i} p_i \frac{R_{C_i}}{\Delta}$$

$$e_{C_i} = \sum_{C_i} e_i \frac{R_{C_i}}{\Delta}$$

Pasando de trabajar con la velocidad, posición, y masa exacta de cada punto del espacio, a promedios de velocidades, posiciones, y masa en ciertas regiones del espacio.

Esta clase de simplificaciones provoca que la entropía del sistema simplificado sea considerablemente más grande que la del sistema microscópico. Esto es debido a que los promedios realizados para simplificar el problema se pueden realizar de muchísimas formas y además hay una gran pérdida de información [109]. Esta cantidad de formas en que se puede realizar ese promedio deben considerarse en el cálculo de la entropía. Hay que notar que si se simplifica el sistema, hay menos estados posibles que en el sistema microscópico, por lo que la suma en la entropía coarse grained $S_C = \sum_{\mu=meso} -P_\mu \log(p_\mu)$ disminuye en comparación con la microscópica $S_M = \sum_{i=micro} -P_i \log(p_i)$. Pero aquí no se está considerando la entropía misma de cada estado simplificado. Luego la entropía coarse grained, debe considerar el término

clásico de la entropía, más un término que determine todos estos estados degenerados que permiten el mismo sistema s_μ [110]:

$$S_C = - \sum_{\mu} p_{\mu} \log(p_{\mu}) + \sum_{\mu} s_{\mu} p_{\mu} \quad (2.30)$$

Esto mismo se puede realizar para redes complejas agrupando nodos en grupos y luego simplificando el problema (Figura 2.5). Como ya se menciona en la sección inicial de redes, la definición de una comunidad dentro de una red dependía de una probabilidad p_{ij} , la cual a su vez depende del sistema que se esté estudiando. Al tener esta probabilidad se pueden obtener las comunidades del sistema. Luego, si se tienen M comunidades Q_i , con n_i nodos con diferentes enlaces, esta red se podrá ver desde un punto de vista mesoscópico si se transforma la red original en una red donde cada comunidad es un nodo. Esto es bastante útil en sistemas donde la cantidad de nodos es enorme. Por último, como las comunidades detectan grupos de nodos conectados más entre ellos que con el resto de la red, detecta nodos similares entre sí, es decir, las comunidades son un conjunto de nodos similares. Esto se puede utilizar para buscar cuánto debe ser la entropía coarse grained en el caso de una red compleja simplificada.

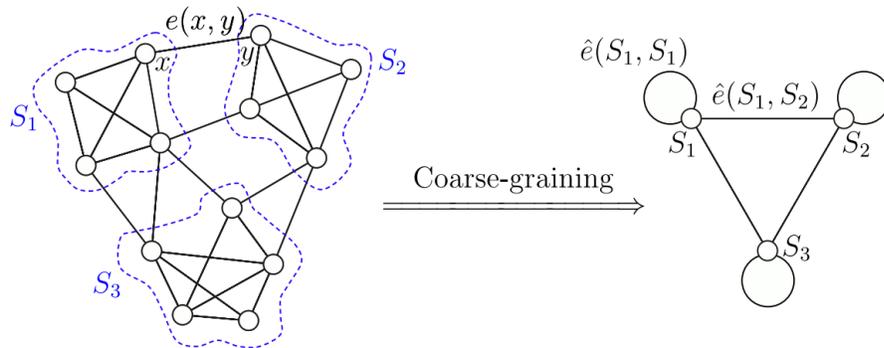


Figura 2.5: Coarse Grained realizado en redes complejas. Desde una red de nodos (izquierda) se simplifica el sistema en 3 grupos de nodos (S_1, S_2, S_3) conectados entre sí (derecha) [70].

Parte II

Metodología

Capítulo 3

Base de Datos

« Hay que abrir de par en par las ventanas y tirar todo a la calle, pero sobre todo hay que tirar también la ventana, y nosotros con ella.»

J. Cortázar [111]

En este capítulo se detallará el cómo se obtuvo la base de datos preliminar para realizar esta investigación. Se explicará la transformación de los datos recibidos a redes complejas, la clusterización mediante modelos nulos y posterior creación de redes de clústeres y, por último, la creación de una medición temporal de los clústeres a través de una red multicapas temporal.

3.1. Datos preliminares

Los datos preliminares utilizados en esta tesis de magíster fueron tomados durante los años 2010-2013 en el marco de la tesis doctoral de Gustavo Castillo en la Universidad de Chile [23]. El sistema estudiado consiste en un conjunto granular de $N = 11504$ partículas de diámetro $d = 1mm$ en una caja cuasi-2d de área cuadrada de largos $L_x = L_y = L$, donde $L^2 = (10^2 d)^2$, la cual es acelerada verticalmente, con una frecuencia $w = 80Hz$, en diferentes aceleraciones, donde se define la aceleración adimensional como $\Gamma = Aw^2/g$. La cobertura superficial, la cual define la porción de área cubierta por granos, se usó como $\phi = N\pi d^2/4L^2$, donde en este caso es $\phi = 0,904$. La caja cuasi-2d consta de dos placas de vidrio recubiertas de ITO de 10 mm de espesor para disipar las cargas electrostáticas, separadas por un marco cuadrado. La caja se encuentra fijada a una base la cual admite una matriz de diodos emisores de luz de alta intensidad. Luego, con la iluminación que viene desde la base, se visualizan las partículas como círculos oscuros sobre un fondo blanco. Por otra parte, un acelerómetro se encuentra sobre la base y mide la amplitud forzada. Imágenes sobre el fondo blanco fueron tomadas con una cámara de alta velocidad (MotionPro X3) a $10fps$ con $1020 \times 1020 \text{ pix}^2$ (un ejemplo de imagen se puede observar en la Figura 3.2). Tras esto, las posiciones de las partículas se determinaron con una precisión de sub píxeles mediante un algoritmo implementado en C++ y CUDA [23]. Éstas fueron archivadas en un archivo .bin, el cual contiene la siguiente

información:

- Posición de cada partícula j (X_j, Y_j)
- Área de Voronoi (A_v^j)
- Parámetro de Orden local cuádruple (Q_4^j) definido en la ecuación 1.4
- Número de Vecinos (N_j)
- Estado de la partícula (Sólido / Líquido)

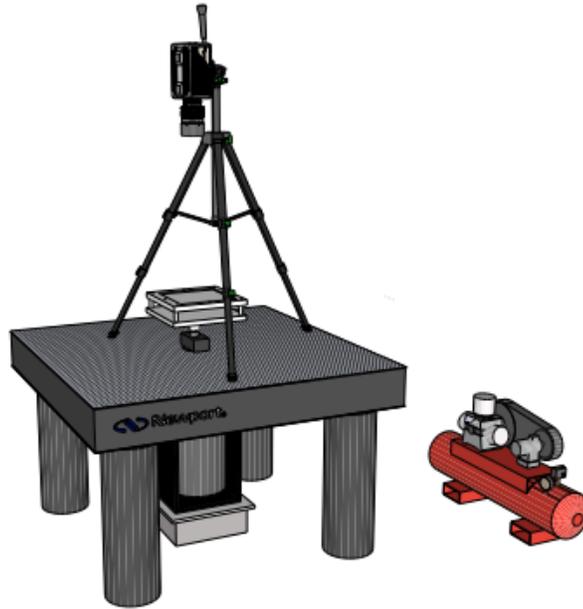


Figura 3.1: *Set-up* del experimento [23]

3.2. Creación de Redes de Orden de Granos (Base de Datos)

Tras recibir los archivos .bin tomados en [23], lo primero que se realizó fue la observación de los datos, con el objetivo de entender cómo trabajar con ellos. Para ello primero se contabilizó cuántos datos fueron recibidos:

- Tres carpetas las cuales cada una representa un día diferente de grabación
- Una suma de 90 vídeos dentro de las tres carpetas.
- Cada vídeo (n) se corresponde a una aceleración Γ_n .

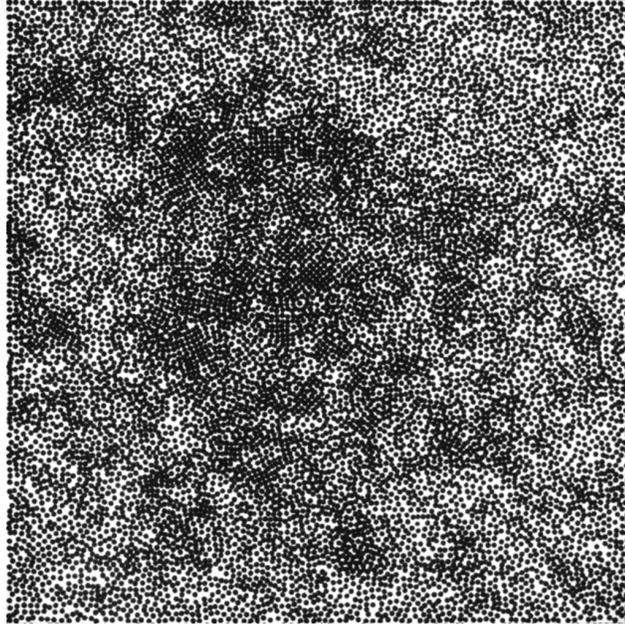


Figura 3.2: Imagen tomada por MotionPro X3

- Cada vídeo se compone de 3272 imágenes (cada imagen de alguna aceleración Γ_n se representará con el símbolo n_p), tomadas con una frecuencia de 10 fps, es decir, por cada 10 imágenes pasa 1 seg.

Cada imagen dentro de cada vídeo fue recibida como un archivo .bin el cual fue leído y transformado en archivos .csv con la siguiente forma:

| N | (X_j, Y_j) | $\text{Re}(Q_4^j)$ | $\text{Im}(Q_4^j)$ | A_v^j | S/L | N_j |
|-----|--------------|--------------------|--------------------|---------|-----|-------|
| 1 | 100, 506 | 1 | 1 | 59 | 1 | 4 |
| 2 | 257, 899 | -0,2 | 0,9 | 52 | 0 | 4 |
| 3 | 9, 1000 | 0,6 | 0,9 | 68 | 1 | 5 |
| ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| N | 300, 709 | 0,8 | -0,2 | 60 | 1 | 4 |

Notar que de los 90 vídeos recibidos, se utilizaron 35. Los vídeos recibidos corresponden a todas las aceleraciones analizadas en [23], pero en esta tesis solo se analizarán las cercanías de la transición (antes de que ocurra). Considerando que la aceleración crítica obtenida en los estudios anteriores fue de $\Gamma_c = 5,1$, el rango escogido de estudio escogido fue las aceleraciones que cumpliesen $4,1 < \Gamma_n < 5,1$. Por último, hacer notar que dentro de cada imagen se encuentran los datos de 11.000 granos. Es decir, la cantidad de datos analizados es del orden de 10^9 .

3.2.1. Red q primer intento y sus defectos

En primera instancia, con los datos en CSV, se crearon redes complejas mediante el módulo *networkx* en Python, que se denominaron *Redes q primarias*, las cuales intentaban representar, cada una, una imagen (n_p) de una aceleración (Γ_n). El método empleado para la creación de redes fue:

- 1) Recorrer cada fila j (la cual representa un grano) del CSV. Obtener el módulo de su parámetro Q_4^j . Donde el módulo desde aquí se denominará por simplicidad $q_j = |Q_4^j|$. Luego se agrega este grano a la red, con 3 atributos: (x_j, y_j) , $Re(Q_4^j)$ y $Im(Q_4^j)$.
- 2) Tras esto, se observa si $q_j > q^*$. Donde se tomó $q^* = 0,8$, ya que este se relaciona directamente con conceder al grano el estar el mismo en estado sólido, respecto a sus vecinos.
- 3) Si lo anterior es cierto. Se crea un enlace sin peso entre el nodo j y todos sus vecinos $i \in N_j$.
- 4) Se itera el proceso para la columna $j + 1$

Es decir, se observa cada grano, y si este esta en estado sólido, se enlaza con sus vecinos. Luego, los elementos de su matriz de adyacencia es:

$$A_{ij}^{(n_p)} = \begin{cases} 1 & \text{Si } q_j \geq q^*, \text{ y } i \in \mathcal{N}_j \\ 0 & \text{caso contrario} \end{cases}, \quad (3.1)$$

Tras realizar esto, se notaron tres defectos en describir al sistema de esta manera. En primer lugar, el límite q^* para la existencia de los enlaces es muy estricto, y es mucho más difícil de lograr en aceleraciones bajas. En segundo lugar, la matriz de adyacencia no es simétrica, y si se le obliga a ser simétrica, produce enlaces entre granos muy ordenados y otros que pueden estar completamente desordenados. Por último, no se coloca peso en los enlaces, provocando que no exista diferencia entre enlaces, cuando en la realidad del sistema, si dos granos son vecinos y ambos están ordenados y conectados, la relación entre ellos es mucho más fuerte que dos granos vecinos que no están tan ordenados, pero que igual están conectados.

3.2.2. Red q definitiva

Tras notar los problemas del primer modelo de red del sistema, se trató de solucionar cada una de estas falencias, así se creó ahora una red simétrica, con peso y aliviando la condición de enlace, con el siguiente algoritmo para la creación de redes:

- 1) Recorrer cada fila j (la cual representa un grano) del CSV. Obtener el módulo $q_j = |Q_4^j|$. Luego se agrega este grano a la red, con 3 atributos: (x_j, y_j) , $Re(Q_4^j)$ y $Im(Q_4^j)$.

- 2) Se identifica quiénes son los N_j vecinos del grano j .
- 3) Para cada vecino $i \in N_j$ se observa si $q_i, q_j > \langle Q_4 \rangle$ (desde ahora se denominará $\langle Q \rangle$ ya que solo se estudiará el ordenamiento cuadrático). Si se cumple esta condición, se enlaza el grano j con el grano i . Esta condición es simétrica.
- 4) Se itera el proceso para la columna $j + 1$

Luego los elementos de la matriz de adyacencia que representa cada red queda descrita como:

$$A_{ij}^{(n_p)} = \begin{cases} q_i q_j & \text{Si } q_i, q_j \geq \langle Q \rangle \text{ y } i \in \mathcal{N}_j, \\ 0 & \text{caso contrario} \end{cases}, \quad (3.2)$$

Con esta matriz de adyacencia se generaron las redes asociadas a cada imagen, esto último se puede observar en la Figura 3.3. Se puede notar que todos los granos con magnitud alta de su parámetro de orden, se encuentran enlazados entre sí con los granos cercanos que a su vez tienen magnitud alta de su parámetro de orden.

Ambos procesos, tanto el primer modelo como el segundo, en un inicio, fueron realizados con un código que demoraba aproximadamente 300 segundos en obtener una sola red, es decir, una sola imagen. Esto hacía imposible la realización de la tesis, ya que los datos son más de 300.000 imágenes. Para ello se recibió a Ayuda de *Alonso Utreras*, estudiante de Magíster en Computación de la Universidad de Chile, optimizando el código vía *cython*, tomando un solo segundo por imagen. Con esto se obtuvo una *Red q* correspondiente para cada imagen como se puede observar en la Figura 3.3.

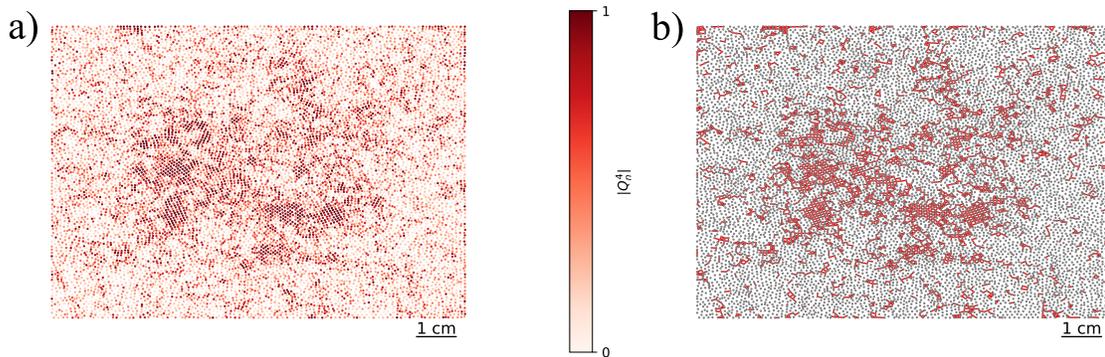


Figura 3.3: En a) un mapa de color del módulo del parámetro de orden para cada grano de un frame de la aceleración $\Gamma = 4,83$, y en b) *Red q* asociada a esa imagen, en negro los nodos (granos), y en rojo los enlaces.

Algo importante de decir, es que quizás la forma más intuitiva de crear la red, hubiese sido conectar cada grano con sus respectivos vecinos, colocando como enlace el término $e^{4i\alpha_i^j}$, el cual aparece en el parámetro de orden Q_4^j , así, si uno sumase sobre cada nodo los enlaces alrededor suyo se cumpliría que $Q_4^j = \sum_i A_{ij}$. Pero esto trae muchos problemas. En primer lugar, la matriz de adyacencia se vuelve antisimétrica, ya que $\alpha_i^j = -\alpha_j^i$. Por otra parte,

la matriz sería una matriz cuyos elementos serían números complejos. Por último, desde esa matriz la única forma de obtener el promedio $\langle Q \rangle$; la cual es la variable que describe al sistema, sería: $\langle Q \rangle = \sum_i \sqrt{\sum_j A_{ij} \sum_k A_{ik}^*}$, lo que se vuelve muy difícil de trabajar en ensamblajes de redes.

3.3. Red de Comunidades

Cada *red q* posee aproximadamente 11.000 granos, pero en esta tesis se busca estudiar el sistema de forma mesoscópica. Para ello se realizó un *coarse-graining* vía detección de comunidades de granos. Para esto, solo se consideró a los granos que están enlazados con otros, ya que el estudio es sobre el ordenamiento de granos, y justamente los que están enlazados, están ordenados (o al menos más ordenados que el promedio).

Las comunidades o clústeres de nodos, se pueden obtener de diferentes maneras, en nuestro caso se realizó de 3 formas diferentes que se explicarán más adelante. Por cada una de estas formas se creó una *red q de comunidades*, las cuales fueron formadas desde una nueva matriz de adyacencia, la cual contiene como elementos:

$$A_{\alpha\beta}^{(C)} = \begin{cases} 1 & \text{Si } \exists A_{ij}^{(n_p)} > 0 \text{ donde } i \in C_\alpha, j \in C_\beta, \\ 0 & \text{Caso contrario.} \end{cases} \quad (3.3)$$

Esto quiere decir, que se enlazan las comunidades de una misma imagen en la *Red q de Comunidades* si existe algún nodo de la comunidad C_α en contacto con algún nodo de la comunidad C_β . Estos enlaces de la red de clústeres no tienen peso. Este proceso de creación desde la *Red q* a la *Red q de Comunidades* se puede visualizar en la Figura 3.4:

Esto se realizó de 3 maneras diferentes, las cuales se nombrarán en la investigación como: *Modelo Newman*[98], *Modelo Geográfico*[96] y *Modelo Geográfico Modificado*. Los dos primeros son modelos existentes en la literatura, mientras que el último fue construido en esta tesis desde un argumento entrópico, el cual se mostrará en el próximo capítulo. La manera de obtener estas comunidades fue para todas igual: maximizando la función modularidad (ecuación 2.14), en la cual se encuentra la variable denominada modelo nulo P_{ij} , y será la diferencia entre cada modelo. Esta variable describe la probabilidad de enlace entre dos nodos y varía obviamente según el fenómeno a modelar.

3.3.1. Modelo Newman-Girvan

Primero se detectaron comunidades mediante el *Modelo Newman*. Este modelo es el más conocido y utilizado en la literatura. Para obtener comunidades, considera que cualquier nodo puede estar conectado con cualquier otro nodo, sin importar la posición ni ningún atributo. La probabilidad P_{ij}^{NG} asociada a este modelo se puede escribir como:

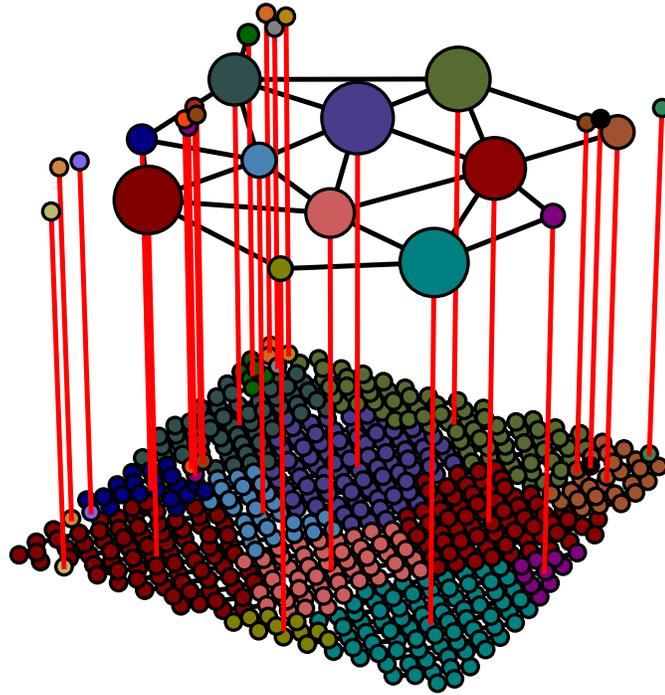


Figura 3.4: Visualización de la creación de las *redes q de comunidades*: Un grupo dado de partículas (en el plano inferior) está representado por un nodo del grupo (en el plano superior) para $\Gamma = 4, 83$. Las líneas rojas muestran la correspondencia entre las dos redes. Las líneas negras (en el plano superior) muestran los bordes de la red de grupos que representan la cantidad de partículas en los bordes entre los grupos de partículas (en el plano inferior).

$$P_{ij}^{NG} = \frac{k_i k_j}{\sqrt{2m}}, \quad (3.4)$$

Donde k_i es el grado del nodo i y m es la cantidad de enlaces totales de la red. Esta probabilidad se puede entender de la siguiente forma: si cada nodo tiene dado como restricción suave una centralidad de grado k_i y se construyen ensambles de redes bajo estas condiciones, la probabilidad de enlace al maximizar la entropía de la red será exactamente la escrita recientemente.

Para detectar comunidades de granos con esa modularidad se utilizó la función del módulo *networkx: greedy modularity communities*, la cual maximiza según el método *Clauset-Newman-Moore* [112]. Este consiste en, primero, asignar a cada nodo en una comunidad de él mismo y luego fusionar repetidamente las parejas de comunidades que generen aumento en la modularidad hasta que ya no sea posible incrementarla más (alcanzar el máximo de la función). Un ejemplo de detección de comunidades mediante este modelo en los datos de esta investigación se puede ver en la Figura 3.5.

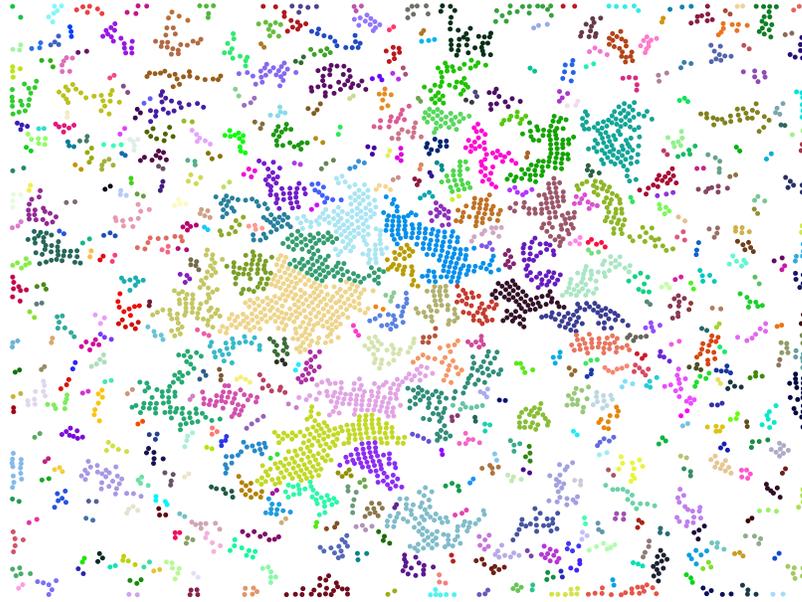


Figura 3.5: Detección de comunidades mediante el Modelo Newman-Girvan. Cada color representa una comunidad detectada y solo se muestran comunidades que contengan más de dos granos. No se muestran los enlaces de la red

Si bien en este modelo se logra detectar comunidades, o clústeres, de granos, mediante la maximización de una función, el problema de esta detección de comunidades es que no usa elementos del problema, sino que solo detecta comunidades comparando la red, con redes aleatorias dada una secuencia de grado de los nodos. Esto se puede notar también en los tamaños de las comunidades que detecta. Por ejemplo, cuando hay un gran clúster que se puede detectar visualmente, este modelo no lo logra encontrar algorítmicamente, sino que lo divide.

3.3.2. Modelo Geográfico

Se buscó en la literatura modelos que usaran parámetros físicos del problema. Tras esto se consideró el *Modelo Geográfico* utilizado en diversos artículos que obtenían mediante la función modularidad cadenas de fuerza en sistemas granulares [96]. Aquí el modelo que utilizan representa una red donde los nodos poseen un atributo: su posición, y los enlaces otro atributo: la fuerza entre los granos F_{ij} , donde no puede existir enlace si dos granos no están en contacto. En esta investigación, no se tiene los datos de fuerza entre granos, por lo que como la red, no es una red de cadenas de fuerza, sino de orden, en vez de utilizar una fuerza,

se utilizó el parámetro de orden, de esta forma se intentó representar mejor el sistema. En este caso, en la función modularidad se colocó, siguiendo la línea de los estudios anteriores:

$$P_{ij}^{Geo} = \langle q_i q_j \rangle \Theta(A_{ij}) \quad (3.5)$$

Donde:

$$\langle q_i q_j \rangle = \frac{1}{m} \sum_{i < j} A_{ij}$$

$$\Theta(A_{ij}) \begin{cases} 1 & \text{Si } A_{ij} > 0 \\ 0 & \text{Caso contrario.} \end{cases}$$

Es decir, aquí debido a la condición, $\Theta(A_{ij})$ la probabilidad de enlace solo existe entre nodos en contacto, y además lo que multiplica esta condición es el promedio de peso, de los enlaces existentes. Este modelo, al igual que el anterior, también tiene una interpretación de ensamblajes, la cual será analizada y demostrada en el Apéndice A.1.

Para implementar este modelo, se modificó el algoritmo utilizado para detectar las comunidades del *Modelo de Newman*, pero con las nuevas variables. Con esto se detectó comunidades bajo el *Modelo Geográfico* como se puede ver en la figura 3.6. El problema de este modelo, es que en el sistema granular estudiado, a diferencia de los sistemas granulares que han usado este modelo, la diferencia entre el promedio de peso de los enlaces existentes $\langle |q_i q_j| \rangle$ y el peso $q_i q_j$ de los enlaces, no es muy grande. Esto último no ocurre en las cadenas de fuerza, donde la fuerza promedio puede ser incluso dos órdenes de magnitud menor que algunas fuerzas entre granos, luego el modelo en este sistema detecta comunidades demasiado pequeñas que no representan al sistema (es demasiado estricta la condición).

3.3.3. Modelo Geográfico Modificado

Por esta razón se intentó perfeccionar el modelo, creando el *Modelo Geográfico Modificado*, suavizando la condición de contacto y tomando una probabilidad de enlace construida entrópicamente mediante las restricciones físicas del sistema, lo que se mostrará más adelante en la sección 4.1:

$$P_{ij} = \frac{\beta \langle |Q^*| \rangle^2}{1 + \beta \langle |Q^*| \rangle^2} \frac{\delta_{ij}}{2}, \quad (3.6)$$

Donde:

$$\langle |Q^*| \rangle = \frac{1}{N} \sum_i q_i \delta(q_i > \langle |Q| \rangle)$$

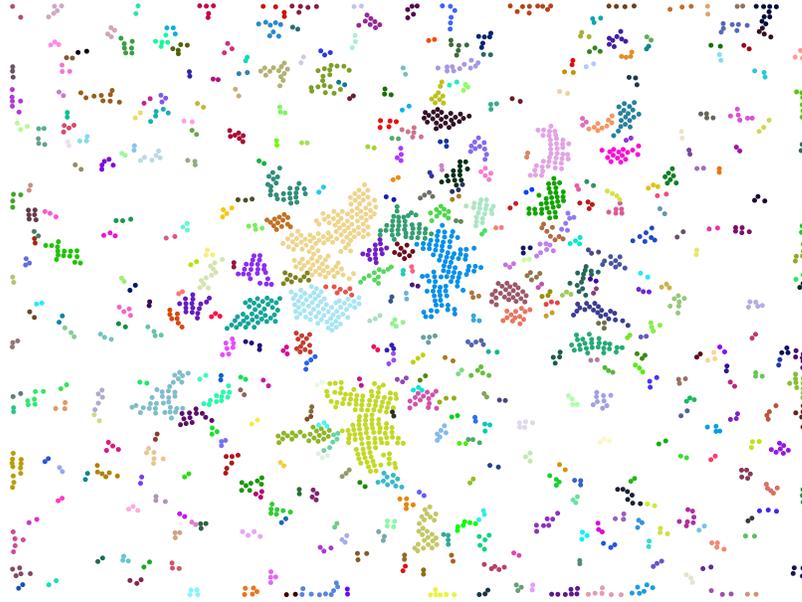


Figura 3.6: Detección de comunidades mediante el Modelo Geográfico. Cada color representa una comunidad detectada y solo se muestran comunidades que contengan más de dos granos. No se muestran los enlaces de la red

$$\delta_{ij} = 1 \text{ si } i, j \text{ son vecinos}$$

$$\beta = \text{fraccion de area ordenada del sistema}$$

Se puede notar, que este modelo es similar al anterior, pero tiene unas sutiles diferencias. En primer lugar, no contiene el término $\langle q_i q_j \rangle$, el cual es muy difícil de obtener a priori, en cambio, tiene el término $\langle |Q^*| \rangle$, el que no es difícil de conseguir, ya que no es más que calcular el promedio del parámetro de orden solo considerando los parámetros más grandes que el promedio. Algo interesante de este modelo es el parámetro β . En algunos artículos el parámetro de resolución γ que se encuentra en la función modularidad, es modificado para obtener comunidades con mayor sentido físico, pero la modificación de este es totalmente arbitraria. La ventaja aquí es que la fracción ordenada, β si se puede modificar y es un parámetro físico del problema, luego se puede usar para obtener comunidades más acordes al sistema que se modele.

Al igual que antes, se modificó el algoritmo utilizado para detectar las comunidades anteriormente, pero con estas nuevas variables. Visualmente, se puede observar en la Figura

3.7 que este modelo determina comunidades más grandes que los dos modelos anteriores y lo realiza, como se demostrará más adelante, con los parámetros reales del problema.

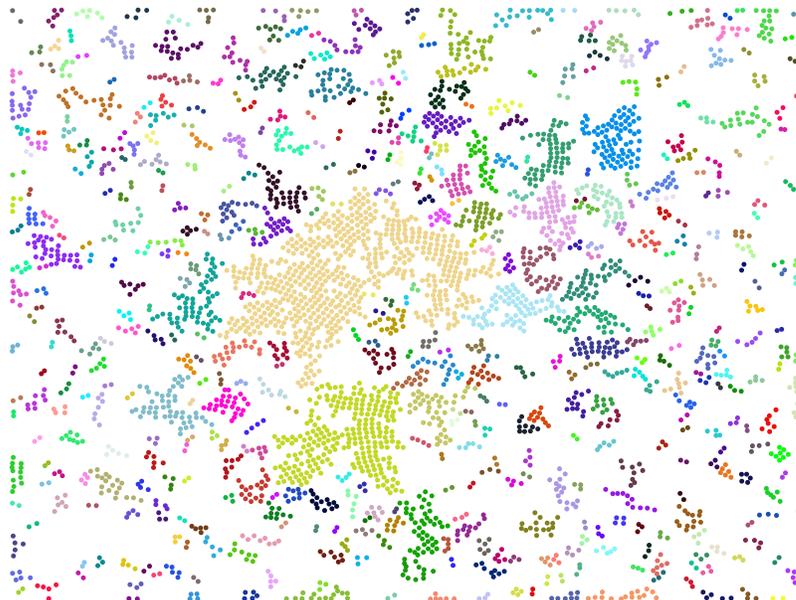


Figura 3.7: Detección de comunidades mediante el Modelo Geográfico Modificado. Cada color representa una comunidad detectada y solo se muestran comunidades que contengan más de dos granos. No se muestran los enlaces de la red

El proceso de prueba de los 3 modelos se realizó en orden cronológico. Realizar el coarse graining con la función modularidad ya estaba estudiado, pero no se tenía conocimiento de la complejidad que podía abarcar el no colocar una probabilidad acorde al sistema. Al realizar el estudio con el primer modelo, se dio a entender, tras obtener resultados, que este no tenía sentido, ya que obtenía clústeres dentro de clústeres que no hacían sentido físico. Luego, en una búsqueda en la literatura, se encontró el segundo modelo, esperando que esto funcionara, pero tampoco fue el caso, debido a que este modelo determina cadenas de fuerza, no grupos de granos ordenados. Ante esto se probaron otros modelos. Siguiendo con la línea mencionada en el marco teórico en la ecuación 2.16. Se intentó $P_{ij} = \frac{q_i q_j}{\sqrt{\langle Q \rangle} r_{ij}}$; donde r_{ij} es la distancia espacial de los dos nodos, encontrando comunidades acordes a lo que se esperaba. El problema fue no poder justificarlo entrópicamente. Tras esto surgió el último modelo, el cual optimiza una entropía y sigue verdaderamente restricciones del sistema de manera sencilla y razonable, como se mostrará en el siguiente capítulo.

3.4. Tiempos de Vida

En las *Redes q* y en las *Redes q de Comunidades* se representa mediante redes imágenes de ciertas aceleraciones, pero otro aspecto importante para analizar en las interacciones locales, es su tiempo de acción, es por esto que se ideó una forma de detectar los tiempos de vida de los grupos de granos ordenados. Para esto se crearon las *Redes q multicapas de Comunidades*, las cuales consisten en *redes multicapas* temporales, formadas por la unión temporal (representando un Γ_n completo) de las comunidades de las *Redes q de comunidades* de un Γ_n , donde los nodos representan comunidades de granos y hay dos tipos de enlaces:

- *intra layers*: Enlaces que las comunidades contienen de las *Redes q de Comunidades*, es decir, qué comunidades de un mismo tiempo t tienen granos en contacto entre sí.
- *inter layers*: Enlaces que representan la evolución temporal de las comunidades, es decir, qué comunidad corresponde a qué otra comunidad cuando pasamos de un tiempo t al tiempo $t + 1$. Para esto hay que realizar una elección de cómo identificar esta correlación de comunidades. Para ello, la elección fue buscar comunidades que tuvieran tanto posición del centro de masa, como cantidad de granos similar. Esto se explicará a continuación en la construcción de la creación de las redes multicapas temporales

Para construir Una *Red q multicapas de Comunidades* se siguieron los siguientes pasos (visualmente en 3.8):

- Se escoge una aceleración Γ_n a la cual representar
- Se abre la *Red q de Comunidades t*
- Todos los nodos son agregados a la *Red q multicapas de Comunidades*. Todos los enlaces que contiene esa red, son también agregados a la *Red q multicapas de Comunidades* como *intra layers*.
- Luego, al analizar la *Red q de Comunidades t*, se abre la *Red q de Comunidades t + 1* (a)
- Por cada comunidad de la *Red q de Comunidades t* c_x^t , se proyecta su área en la *Red q de Comunidades t+1* (b), y se enlaza con todas las comunidades que tengan nodos bajo su área (c). Enlace con un atributo llamado p_{xy} , que será $p_{xy} = \frac{\text{Tamano comunidad } c_x^t}{\text{Tamano comunidad } c_y^{t+1}}$.
- Luego solo se conservan los enlaces hacia las comunidades que su cantidad de granos sea $\pm 50\%$ al de la comunidad de la red t , es decir, se eliminan los p_{xy} que cumplen con $0,5 < /1 - p_{xy}/$ (d).
- Como pueden ser varias las comunidades c_y^{t+1} que tengan un p_{xy} con c_x^t , solo se quedará el máximo de ambas direcciones $\max(p_{xy}) = w_{xy}$, es decir, primero, de todos los enlaces que recibe c_y^{t+1} , solo queda el $\max(p_{xy})$ (e), y luego de todos los enlaces de c_x^t , solo queda el $\max(p_{xy})$ (f). Esto con el propósito de ver qué comunidad c_y^{t+1} de la *Red q de Comunidades t + 1* realmente comparte la gran mayoría de información que trae la comunidad c_x^t , y que una comunidad c_y^{t+1} represente solo a una comunidad c_x^t .

- Tras obtener w_{xy} se enlazan las comunidades c_x^t y c_y^{t+1} con un enlace denominado *inter layer* (g)

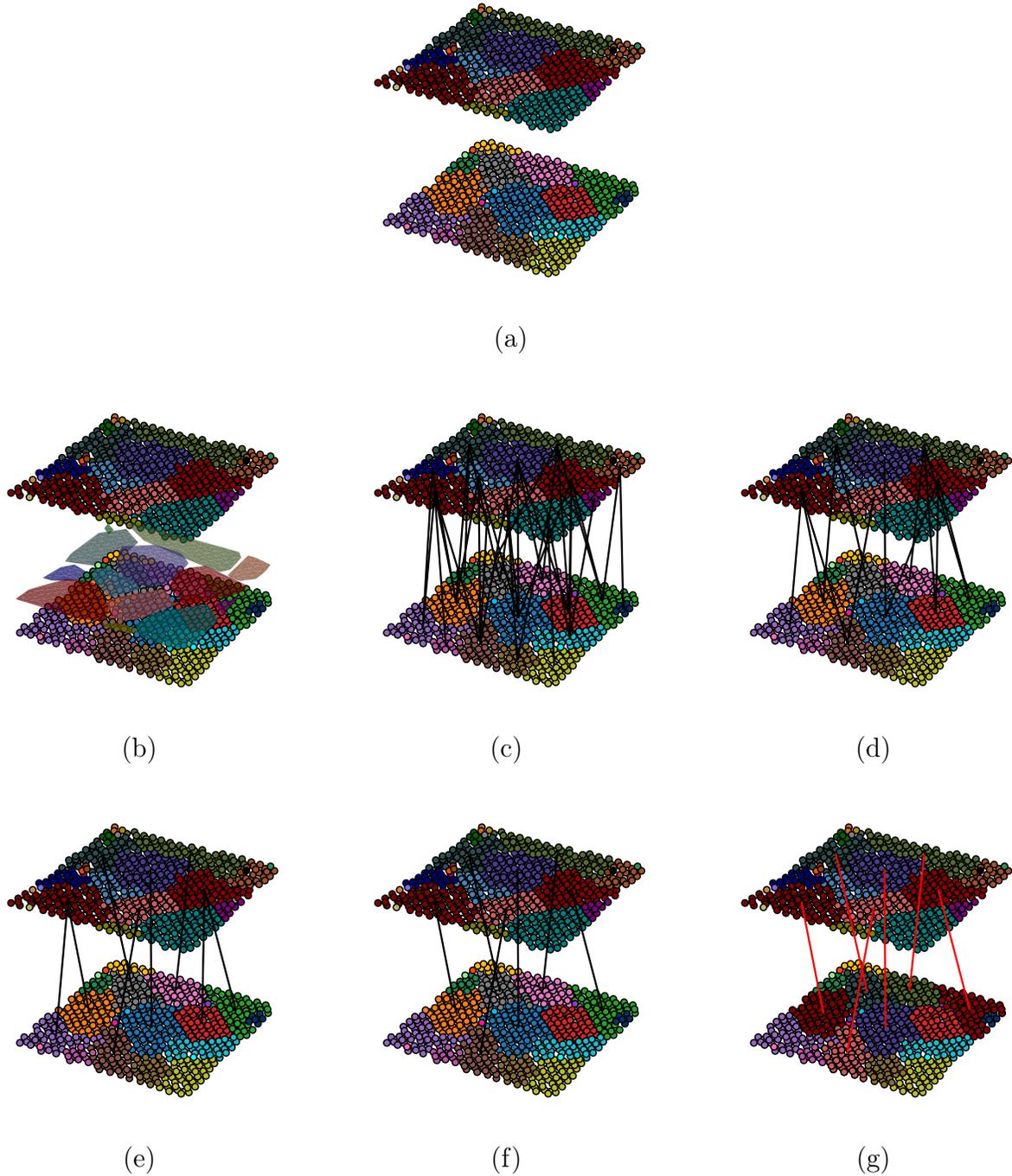


Figura 3.8: Proceso de correlación entre comunidades. (a) Dos *Redes q* de tiempos consecutivos t y $t + 1$. (b) Proyección del área de t en $t + 1$. (c) Enlaces con las comunidades que comparten área. (d) Eliminación enlaces con comunidades de tamaños distintos. (e) Correspondencia hacia t . (f) Correspondencia hacia $t + 1$. (g) Igualación de colores para las comunidades que se corresponden

Es decir, esta red está codificada en los elementos de una matriz de adyacencia:

$$\mathcal{A}_{xy}^n = \begin{cases} A_{xy}^C & \text{si } x, y \in t \text{ (enlaces intra layer)} \\ 1 & \text{si } w_{xy} \neq 0 \text{ con } x \in t, y \in t+1 \text{ (enlaces inter layer)} \\ 0 & \text{caso contrario} \end{cases},$$

Donde el primer término es simplemente los enlaces dentro de un mismo tiempo, es decir, los enlaces de las *Redes q de Comunidades*, mientras que el segundo término son los enlaces entre comunidades correspondientes en tiempos consecutivos, es decir, si la comunidad C_x^t se corresponde a la comunidad C_y^{t+1} . Con esta nueva red, se pueden calcular los tiempos de vida promedio según el tamaño de la comunidad. Para esto basta contar sus enlaces *inter layers* hacia adelante temporalmente de las comunidades recientemente formadas, y así saber cuánto tiempo τ_c promedio viven clústeres de tamaño n_c . Algorítmicamente esto es:

- Se fija como variable $t = 0$ y $\tilde{\rho}(n_c) = 0$.
- Por cada nodo de la red de tamaño n_c se mide si este contiene o no contiene ancestros, esto es, un enlace *inter layer* con el tiempo anterior.
- Si no tiene ancestros se calculan sus descendientes Δ , esto es la cantidad de comunidades consecutivas, las cuales entre ellas tienen un *inter layer* y que el primer enlace corresponde a este nodo.
- Calculado Δ , se suma al tiempo como variable $t+ = \Delta$ y a la densidad de comunidades de tamaño n_c iniciales también $\tilde{\rho}(n_c)+ = 1$
- Por último se normaliza y se obtiene el promedio de tiempo para las comunidades de tamaño n_c : $\tau_c = \frac{t}{\tilde{\rho}(n_c)}$

Para realizar esto existieron problemas de tiempos con los códigos. En relacionar cada red de comunidades, con la del tiempo posterior, demoraba aproximadamente 60 segundos. Esto, considerando la enorme cantidad de imágenes que se relacionaron y teniendo presente, además, los 3 modelos usados, fue un problema para la realización de esta tesis. Para solucionarlo, esta tesis fue parcialmente apoyada por la infraestructura de supercómputo del NLHPC (CCSS210001). Se tomó la decisión de paralelizar códigos y realizar la creación de las *Redes q de Comunidades multicapas* simultáneamente, mediante la ayuda de los servidores del Laboratorio Nacional de Computación de Alto Rendimiento (NLHPC). Esto permitió paralelizar hasta 15 aceleraciones simultáneamente, con los 3 modelos al mismo tiempo de las *Redes q de Comunidades multicapas*.

Parte III

Resultados

Capítulo 4

Entropía

«No se trata de cansancio y un desgaste físico y químico, fruto de las exigencias de la vida (pues para remediarlo bastaría con el reposo), sino más bien de algo espiritual: la conciencia del paso del tiempo, que, ante la monotonía ininterrumpida, corre el riesgo de perderse y que está tan estrechamente emparentada y ligada a la conciencia de vida que, cuando una se debilita, es inevitable que la otra sufra también un considerable debilitamiento.»

T. Mann [113]

En este capítulo se mostrará todo lo logrado en esta investigación vía la teoría mecanoestadística de redes complejas. Se comenzará por la demostración de un modelo nulo asociado al sistema, esto con el objetivo tanto de fundamentar su uso en la obtención de comunidades para la realización del coarse grained, como también para estudiar la entropía del sistema en función de la aceleración adimensional normalizada ε . Luego se mostrará el comportamiento de la entropía del sistema y se obtendrá una posible interpretación del calor específico que permite entender coeficientes obtenidos en las investigaciones anteriores. Tras esto se dará a conocer, en el caso general, cómo es la entropía coarse grained en redes complejas. Por último, se utilizará esta entropía en función de la aceleración para nuevamente entender el proceso de transición de fase y se mostrará que esta concuerda con la entropía del sistema microscópico.

4.1. Demostración Modelo Nulo

Al realizar el coarse grained explicado en la Sección 3.3 se utilizó un modelo nulo $P_{ij} = \frac{\beta(Q^*)}{1+\beta(Q^*)} \delta_{ij}$. Esta probabilidad viene de construir un modelo nulo formulado mediante restricciones en redes que representan dicho sistema. En esta sección se mostrará cómo se obtuvo este modelo, maximizando ensambles en redes multicapas [39] con peso, donde la primera capa contiene la información del orden de los granos, y la segunda contiene la información de los granos vecinos entre sí.

Modelo Nulo Red Multicapa Granular

Se dividirá el problema en dos. En primer lugar, las relaciones de vecinos que existen en los nodos y en segundo lugar las relaciones de orden local que contiene cada nodo. Como los enlaces de la red granular solamente existen cuando dos granos vecinos están ordenados, se dirá que esto es similar al siguiente problema: una red multicapa de dos capas. En la primera los vecinos están conectados entre sí, y en la segunda todos los granos ordenados están conectados entre si. Luego, nuestro sistema está descrito cuando colocamos una sobre la otra y se cumplen las dos condiciones: son vecinos y están ordenados.

Realizando esta separación de dos capas, el sistema estará descrito por una red multicapa \vec{G} :

$$\vec{G} = [G_s, G_o, \mathcal{G}_{so}] \quad (4.1)$$

Donde se tendrán dos redes G_s y G_o . La primera será el grafo que describa las relaciones de vecinos entre los granos del sistema y la segunda la que describa las relaciones de orden entre los granos del sistema. Como en este caso hay una correspondencia de nodos, los términos del conjunto \mathcal{G}_{so} serán triviales y existirán solamente entre nodos correspondientes.

Comenzando con la red de vecinos (G_s). Esta se definirá como una red donde los elementos de la matriz de adyacencia D_{ij} son simplemente una función de la distancia. Esto con el objetivo de colocar de forma genérica la restricción de vecinos al ensamble de redes:

$$D_{ij} = \begin{cases} f(d_{ij}) & \text{función de distancia } d_{ij} \text{ entre el nodo } i \text{ y el nodo } j \\ 0 & \text{si no hay enlace} \end{cases} \quad (4.2)$$

En esta red de distancias, $P(G_s)$ será la probabilidad de que, dada la restricción que se mencionará a continuación, se encuentre el microestado G_s . La ecuación 2.18 del marco teórico mostraba como escribir una restricción C_μ en ensambles canónicos. En este caso, se colocará la siguiente restricción: *si es que existe enlace entre dos granos solo pueden ser vecinos*:

$$0 = \sum_{G_s} P(G_s) \sum_{i < j} \Theta(D_{ij})(1 - \delta_{ij}) \quad (4.3)$$

Donde Θ es la función Heaviside, y δ_{ij} una delta de vecinos (si i, j son vecinos es 1, caso contrario 0). Es decir, esta restricción entrega ensambles de redes, donde dada una cierta cantidad de granos, solo los que son vecinos pueden estar enlazados. Usando la ecuación 2.22, se puede aplicar esta restricción, para así escribir la función partición Z_s de estos ensambles:

$$Z_s = \sum_{G_\alpha} e^{-\Upsilon \sum_{i < j} \Theta(D_{ij})(1 - \delta_{ij})}$$

$$Z_s = \prod_{i < j} \sum_{D_{ij}} e^{-\Upsilon \Theta(D_{ij})(1 - \delta_{ij})}$$

Con Υ el multiplicador de Lagrange asociado a la restricción mencionada anteriormente. Luego, notando que $\Theta(D_{ij})$ solo puede tener dos valores (0 o 1), se suma sobre todos los valores posibles obteniendo:

$$Z_s = \prod_{i < j} (1 + e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})}) \quad (4.4)$$

La cual, es similar a la función partición del caso de los fermiones. La única diferencia es que aquí se está tratando con relaciones entre nodos y es, por esto mismo, que la suma es sobre dos índices $i < j$. Desde esta función partición es posible obtener toda la información del sistema de relaciones entre vecinos, y como lo que interesa es encontrar las probabilidades de enlace tanto en esta capa de nodos vecinos, como en la otra, se puede obtener la probabilidad de este capa con la ecuación 2.29:

$$P_{ij}^s = \sum_{G_s} P(G_s) \delta(D_{ij} > 0)$$

Escribiendo la probabilidad del grafo $P(G_s)$ usando la ecuación 2.24, se puede escribir lo anterior de la siguiente manera:

$$P_{ij}^s = \sum_{G_s} \frac{1}{Z_s} e^{-\Upsilon \sum_{i < j} \Theta(D_{ij})(1-\delta_{ij})} \delta(D_{ij} > 0)$$

$$P_{ij}^s = 1 - \sum_{D_{ij}} \frac{1}{Z_s} e^{-\Upsilon \sum_{i < j} \Theta(D_{ij})(1-\delta_{ij})} \delta(D_{ij} = 0)$$

Esto se puede desarrollar integrando en la delta de Dirac sobre el elemento de matriz de adyacencia D_{ij} :

$$P_{ij}^s = 1 - \sum_{D_{xy \neq ij}} \frac{1}{Z_s} e^{-\Upsilon \sum_{x < y} \Theta(D_{xy})(1-\delta_{xy})} e^{-\Upsilon \Theta(D_{ij}=0)(1-\delta_{ij})}$$

$$P_{ij}^s = 1 - \sum_{D_{xy \neq ij}} \frac{1}{Z_s} e^{-\Upsilon \sum_{x < y} \Theta(D_{xy})(1-\delta_{xy})}$$

Notando que $Z_s = \sum_{D_{xy \neq ij}} e^{-\Upsilon \sum_{x < y} \Theta(D_{xy})(1-\delta_{xy})} \times \sum_{D_{xy=ij}} e^{-\Upsilon \sum_{x < y} \Theta(D_{xy})(1-\delta_{xy})}$, y que el término derecho es en realidad $1 + e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})}$ (hay que sumar sobre los dos valores posibles 0 y 1). Entonces solo sobrevive de esta división el término ij :

$$P_{ij}^s = 1 - \frac{1}{1 + e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})}}$$

$$P_{ij} = \frac{e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})}}{1 + e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})}} \quad (4.5)$$

Al igual que la función partición de este sistema, la probabilidad encontrada es símil a la probabilidad en distribuciones de fermiones. Esto viene nuevamente del hecho de que solo existen dos valores posibles de estados: o no hay enlace, o, si lo hay, pero sin importar el peso de este. En la siguiente capa se observará que en casos donde sí importa el peso del enlace, la probabilidad es completamente distinta. Ahora, para obtener el valor del multiplicador de Lagrange Υ y encontrar el valor de la probabilidad independiente del multiplicador, se puede usar la restricción que viene de la ecuación 2.21: $0 = -\frac{\partial \log(Z_s)}{\partial \Upsilon}$:

$$0 = \sum_{i < j} \frac{e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})}}{1 + e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})}} (1 - \delta_{ij})$$

Separando la suma entre aquellos que son vecinos y quienes no, se puede desarrollar la ecuación y encontrar una relación que permite despejar Υ :

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{i < j \text{ vecinos}} \frac{e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})}^1}{1 + e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})}^1} (1 - \delta_{ij})^1 + \sum_{i < j \text{ no vecinos}} \frac{e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})}^0}{1 + e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})}^0} (1 - \delta_{ij})^0 \\ 0 &= \sum_{i < j \text{ no vecinos}} \frac{e^{-\Upsilon}}{1 + e^{-\Upsilon}} \\ 0 &= \frac{e^{-\Upsilon}}{1 + e^{-\Upsilon}} \end{aligned}$$

La única forma que puede suceder esto es que $\Upsilon \gg 1$, esto implica que el término $e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})} \rightarrow \delta_{ij}$. Usando esto último en la probabilidad encontrada anteriormente, se puede obtener la probabilidad de enlace que se buscaba:

$$P_{ij}^s = \frac{e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})}}{1 + e^{-\Upsilon(1-\delta_{ij})}} = \frac{\delta_{ij}}{1 + \delta_{ij}}$$

$$P_{ij}^s = \delta_{ij}/2 \quad (4.6)$$

Encontrada esta probabilidad, se debe encontrar la misma pero para la red de orden G_o . De esta forma tendremos ambas probabilidades de enlaces y así se podrá definir correctamente la probabilidad del sistema real. Para ello, primero se debe escribir los elementos de una matriz de adyacencia asociada al sistema de orden:

$$W_{ij} = \begin{cases} q_i q_j & \text{si hay enlace} \\ 0 & \text{si no hay enlace} \end{cases} \quad (4.7)$$

Tras esto, al igual que antes, hay que imponer restricciones asociadas al sistema a estudiar. La restricción más general que se puede escribir del sistema, considerando los resultados obtenidos del estudio anterior, es restringir los valores de las variables q_i . Por lo mismo se puede tomar la siguiente restricción:

$$L = \sum_{G_o} P(G_o) \sum_{i<j} W_{ij} \quad (4.8)$$

Donde L será la suma total de enlaces. Como lo que se busca son ensambles de redes, en las cuales todo nodo ordenado esté conectado con los demás nodos ordenados, entonces L debe cumplir, por otra parte, ser $L = \sum_{i<j} q_i q_j \delta(q_i, q_j > \langle Q \rangle)$. Como no se está considerando en este layer si son vecinos o no, sino que simplemente dos nodos estén ordenados, esta suma de nodos ordenados es descorrelada, por lo que se puede aproximar a:

$$\sum_{i<j} q_i q_j \delta(q_i, q_j > \langle Q \rangle) \simeq \beta \frac{N(N-1)}{2} \langle Q^* \rangle^2$$

Donde $\langle Q^* \rangle$ es el valor del orden promedio de los granos ordenados, β la fracción de pares de granos ordenados respecto del total de pares de granos, y $\frac{N(N-1)}{2}$ el total de pares de granos del sistema. Luego L se escribe de la siguiente manera:

$$L = \beta \frac{N(N-1)}{2} \langle Q^* \rangle^2 \quad (4.9)$$

Esta restricción entrega ensambles de redes, donde dada una cierta cantidad de granos, los que están ordenados están enlazados con todos los otros granos del sistema que también están ordenados. Pero aún más, aquí está incluida la variable física que describe la transición $\langle Q \rangle$, ya que los ensambles deben cumplir que la suma de todos estos enlaces sea en promedio L , y el término $\langle Q^* \rangle^2 \sim \langle Q \rangle^2$, es decir, la restricción, considera directamente el parámetro de orden global del sistema. Con lo anterior se puede escribir la función partición de esta red Z_s :

$$Z_s = \sum_{G_s} e^{-\Lambda \sum_{i<j} W_{ij}}$$

$$Z_s = \prod_{i<j} \sum_{W_{ij}} e^{-\Lambda W_{ij}}$$

Con Λ el multiplicador de Lagrange asociado a nuestra restricción. Luego, sumando sobre todos los posibles valores de W_{ij} se obtiene la función partición. A diferencia del caso anterior, aquí la suma sobre todos los estados posibles es desde 0 hasta ∞ , ya que la restricción es sobre W_{ij} a diferencia de antes, que era sobre $\Theta(D_{ij})$.

$$Z_s = \prod_{i<j} (1 - e^{-\Lambda})^{-1}$$

Lo que da nuevamente un resultado símil de la física estadística. Se comporta como una función partición bosónica. Esto se debe al hecho de que similar a los bosones; los cuales a diferencia de los fermiones pueden tener los mismos números cuánticos, existen muchos estados posibles en los que pueden estar enlazados. Al igual que antes, para obtener la probabilidad de enlace hay que integrar con la ayuda de la delta de Dirac:

$$\begin{aligned}
P_{ij}^o &= \sum_{G_o} P(G_o) \delta(W_{ij} > 0) \\
P_{ij}^o &= \sum_{G_o} \frac{1}{Z_o} e^{-\Lambda \sum_{i < j} W_{ij}} \delta(W_{ij} > 0) \\
P_{ij}^o &= 1 - \sum_{G_o} \frac{1}{Z_o} e^{-\Lambda \sum_{i < j} W_{ij}} \delta(W_{ij} = 0) \\
P_{ij}^o &= 1 - \frac{1}{(1 - e^{-\Lambda})^{-1}} \\
P_{ij}^o &= e^{-\Lambda} \tag{4.10}
\end{aligned}$$

Solo falta despejar el multiplicador de Lagrange y así obtener la probabilidad que se busca. Para encontrar Λ se puede usar al igual que en la red de vecinos $L = -\frac{\partial \log(Z_o)}{\partial \Lambda}$ (ecuación 2.21):

$$L = \sum_{i < j} \frac{e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda}}$$

Notando que la suma es la misma para cada par de nodos, y que la cantidad de pares de nodos es $N(N - 1)/2$:

$$L = N(N - 1)/2 \frac{e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda}}$$

Colocando esto en la ecuación de la probabilidad encontrada recientemente, se puede obtener que P_{ij}^o cumple $P_{ij}^o = e^{-\Lambda} = \frac{\frac{2L}{N(N-1)}}{1 + \frac{2L}{N(N-1)}}$. Luego, reemplazando el valor de L se encuentra finalmente la probabilidad de que dos granos del sistema estén enlazados en la red de orden:

$$P_{ij}^o = \frac{\beta \langle Q^* \rangle^2}{1 + \beta \langle Q^* \rangle^2} \tag{4.11}$$

Ahora que ya se tienen las probabilidades de ambos sistemas, y sabiendo que ambas redes no están correladas debido a que la red de orden toma todos los granos sin importar la

vecindad, se debe cumplir la ecuación 2.26. Luego, la probabilidad de que exista un enlace en ambas redes (probabilidad de que estén ordenados y sean vecinos) debe ser descrita entonces por la multiplicación de ambas:

$$P_{ij} = P_{ij}^s \cdot P_{ij}^o = \frac{\beta \langle Q^* \rangle^2}{1 + \beta \langle Q^* \rangle^2} \delta_{ij} / 2 \quad (4.12)$$

Esta es la probabilidad que se usó en la obtención de comunidades, y con la cual a continuación se calculará la entropía del sistema. Algo importante de mencionar es que las dos restricciones utilizadas fueron restricciones globales del sistema, luego, se pueden utilizar para cualquier sistema que contenga un observable global que describa al fenómeno en términos de interacciones locales, como sucede en sistemas de cadenas de fuerza, modelo ising, entre otros. En el caso de que no sea así, se debe encontrar otro tipo de restricciones que aborden al sistema.

4.2. Entropía Sistema Granular

Con el modelo entrópico demostrado en la sección 4.1 se puede encontrar la entropía microscópica que describe la transición. Esto con el objetivo de poder graficarla y analizarla, y así comparar resultados con las investigaciones anteriores sobre la descripción de esta transición. Para realizar esto, la ecuación 2.20 definía la entropía como:

$$S = \sum_{\mu} \lambda_{\mu} C_{\mu} + \log(Z_C)$$

Obteniendo $\lambda_{\mu} C_{\mu}$ y Z_c se puede obtener directamente la entropía de la red granular que describe al sistema microscópicamente. Para ello, primero se puede notar usando lo desarrollado en la sección anterior que las restricciones $\sum_{\mu} \lambda_{\mu} C_{\mu} = \Upsilon \cdot 0 + \Lambda \cdot L$. Por otra parte, se debe encontrar la función partición global Z_C , pero como el sistema contiene dos capas (orden y espacio) se debe usar la ecuación 2.22. Luego la relación de la función partición total con las de las distintas redes debe ser $Z_C = Z_o \times Z_s$. Esto quiere decir que la entropía entonces cumple que:

$$S = \Upsilon \cdot 0 + \Lambda \cdot L + \log(Z_s) + \log(Z_o) \quad (4.13)$$

Ya con esta ecuación es posible calcular, con los datos de las redes de orden, la entropía del conjunto de redes granulares en función de ε . Donde ε es la aceleración normalizada $\varepsilon = \frac{\Gamma_c - \Gamma}{\Gamma_c}$. Esto último se muestra en la Figura 4.1 a). Donde cada punto del gráfico es el promedio de la entropía para cada aceleración, es decir, a cada una de las 3.272 imágenes dentro de una aceleración se les obtuvo su entropía, y luego el promedio de estas fue colocado como la entropía asociada a esa aceleración. Importante mencionar que se eliminaron 3 datos outliers

correspondientes a las aceleraciones $\Gamma = 4.8155, 4.7381, 4.6548$ (todos datos del segundo día de grabación).

Se puede observar que la entropía tiene un comportamiento totalmente continuo, tal como se describió en el estudio anterior del sistema [22]. Por otra parte, como ε es la aceleración normalizada que inyecta energía en el sistema granular, se puede usar el cálculo de la entropía de la red granular $S(\varepsilon)$ como proxy del calor específico fuera de equilibrio $\frac{dS}{d\varepsilon} \sim C_v(\varepsilon)$. Esto asume varias cosas. En primer lugar, que la entropía de la red está relacionada con la entropía del sistema granular, y, por otra parte, que la aceleración ε es un símil a la temperatura T asociada al sistema. Según el modelo C, el calor específico tiene comportamiento tipo potencia, luego, modelando la entropía como potencia, esta es prácticamente constante (no varía el orden de 10^6 como se puede ver en la Figura 4.1 b)), provocando entonces que su derivada; la cual es proporcional a C_v , sea 0. Entonces en este caso, $C_v = 0$. Esto significa que no muestra divergencia cuando ε se aproxima a cero cerca de la transición de tipo sólido líquido. Esto es completamente consistente y concuerda con el exponente $\alpha = 0$ en el lenguaje de transiciones de fase dinámicas [24] dentro del modelo C utilizado para describir este sistema granular [22], donde este exponente proviene del resultado del calor específico en transiciones continuas $C_v \sim |T - T_c|^\alpha$. Si $\alpha = 0$, significa que el calor específico debe ser una constante en función de ε tal como sucede en este caso.

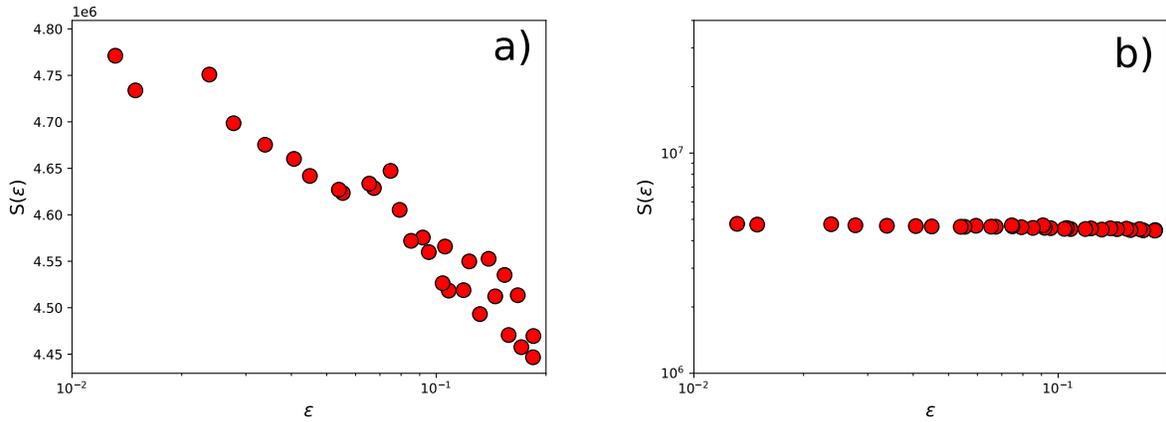


Figura 4.1: a) Entropía sistema microscópico en función de ε . b) Entropía en escala log log.

Algo relevante aquí es interpretar qué significa esta entropía. La entropía definida refiere a la cantidad de configuraciones posibles de las dos capas (orden y vecindad) que representan el sistema. Luego esta aumenta a medida que se acerca la transición debido a que existen más granos ordenados, lo que hace que la cantidad de formas de generar la restricción promedio L aumente, pero no considerablemente, como se observa en la Figura 4.1 b). Por otra parte, este proxy de calor específico se puede entender como una unidad que mide cómo va variando la cantidad de configuraciones posibles que puede tomar el sistema en función de modelarlo mediante ensambles de redes complejas.

4.3. Demostración Entropía Coarse Grained en Redes Complejas

Uno de los ejes de esta tesis es entender al sistema de forma mesoscópica. Ya con la entropía microscópica del sistema demostrada en la sección 4.1 y analizada en la sección 4.2, es interesante compararla con la entropía mesoscópica de este. Esto último es un problema clásico en física y es conocido que se obtiene un aumento en la entropía debido a la pérdida de información que se produce en el coarse-grained. En esta sección se pretende demostrar una forma similar a la entropía coarse grained mostrada en la ecuación 2.30, pero esta vez aplicada a redes complejas. Esto con el objetivo de entender la transición desde una visión mesoscópica y además mostrar un nuevo marco teórico para poder usar coarse graining en sistemas que utilicen redes complejas.

La entropía coarse grained en un sistema termodinámico se define como en la ecuación 2.30:

$$S_c = - \sum_w P(w) \log(P(w)) + \sum_w s_w P(w) \quad (4.14)$$

Siendo s_w la entropía asociada a la degeneración del mesoestado w , y $P(w)$ la probabilidad del mesoestado w . Para calcular la entropía del mesoestado, se debe considerar toda la cantidad (Ω_w) de microestados que pueden representar al mesoestado. Tomando la definición de la entropía tipo Boltzmann:

$$s_w = \log(\Omega_w) \quad (4.15)$$

En el caso de redes se debe tener exactamente lo mismo. La entropía coarse grained se puede definir en función de la probabilidad del grafo simplificado $P(G)$, y la entropía asociada a éste s_G :

$$S_c = - \sum_G P(G) \log(P(G)) + \sum_G s_G P(G) \quad (4.16)$$

Hay que notar que el primer término de la entropía se puede escribir de una forma más simple si se consideran los elementos de la matriz de adyacencia a_{ij} del problema como binarios (sin peso) y se calcula la probabilidad de enlace p_{ij} . Luego, el primer término es equivalente a sumar sobre cada enlace posible, el promedio de que exista enlace $\langle \log(p_{ij}) \rangle$ y de que no exista enlace $\langle \log(1 - p_{ij}) \rangle$:

$$- \sum_G P(G) \log(P(G)) = - \sum_{i < j} p_{ij} \log(p_{ij}) + (1 - p_{ij}) \log(1 - p_{ij})$$

Considerando esto en la entropía coarse grained definida anteriormente, esta se puede reescribir como:

$$S_c = - \sum_{i < j} p_{ij} \log(p_{ij}) + (1 - p_{ij}) \log(1 - p_{ij}) + \sum_G s_G P(G)$$

El término extra: $\sum_G s_G P(G) = \sum_G \log(\Omega_G) P(G)$ se puede calcular. Para ello se debe obtener una expresión para la degeneración del sistema $\Omega_G(G)$. Hay que notar que dado un grafo G , esta degeneración, no es más que la multiplicación de todas las formas C_{ij} de obtener cada enlace existente entre i, j , es decir:

$$\Omega_G = \prod_{i < j} (C_{ij})^{a_{ij}} \quad (4.17)$$

Otra forma de entender este término es la siguiente: Si existe enlace entre dos nodos i, j el valor $(C_{ij})^{a_{ij}} = C_{ij}$, esto es, la cantidad de formas de realizar ese mismo enlace, por otra parte, si no hay enlace $(C_{ij})^{a_{ij}} = 1$, es decir, la cantidad de formas de no realizar un enlace (la única forma de no realizar un enlace, es no realizarlo). Usando esto último, el término extra de la entropía queda:

$$\begin{aligned} \sum_G s_G P(G) &= \sum_G \log\left(\prod_{i < j} (C_{ij})^{a_{ij}}\right) P(G) \\ \sum_G s_G P(G) &= \sum_G P(G) \sum_{i < j} \log(C_{ij}) a_{ij} \end{aligned}$$

Notando que $\sum_G P(G) a_{ij} = p_{ij}$:

$$\sum_G s_G P(G) = \sum_{i < j} \log(C_{ij}) p_{ij}$$

Luego la entropía coarse grained de una red compleja se puede escribir como:

$$S_c = - \sum_{i < j} p_{ij} \log(p_{ij}) + (1 - p_{ij}) \log(1 - p_{ij}) + \sum_{i < j} \log(C_{ij}) p_{ij} \quad (4.18)$$

Algo importante a notar de esta forma de escribir la entropía, es que se debe encontrar de alguna forma la probabilidad p_{ij} de enlace entre dos nodos. Esto puede complicar los cálculos si las redes no son random y hay que buscar un modelo nulo que las represente. Ante esto, otra forma de ver sistemas degenerados en redes, la cual no se abordará en esta tesis, mas si se debiese continuar por ese camino, es lo que se explicará a continuación. La entropía coarse grained por definición, se colocó como:

$$S_c = - \sum_G P(G) \log(P(G)) + \sum_G s_G P(G)$$

Pero el término $\sum_G s_G P(G)$ es en realidad el promedio de la degeneración entrópica $\langle s_G \rangle$, que es lo mismo que $\langle \log(\Omega_G) \rangle$. Este promedio, en realidad, corresponde al valor más probable del grafo degenerado, es decir, al que maximiza la cantidad de formas posibles de enlazar. Si uno encontrase cuál es ese máximo mediante herramientas de combinatoria y grafos, podría evitar los cálculos precisos hechos en el caso de pocos clústeres [114] y encontrar un óptimo, el cual corresponde exactamente al término entrópico buscado. Lo interesante a notar es que este es independiente de la probabilidad de enlace, y si es muy grande, el término se vuelve dominante en la entropía total $S_c \sim \langle s_G \rangle$.

4.4. Entropía Sistema Coarse-Graining

En esta investigación, como se explicó en el Capítulo 3, se realizó un coarse grained vía la maximización de la modularidad. Así se obtuvo grupos de granos ordenados. Con ellos se crearon redes de comunidades, como se explicó en la sección 3.3. Ahora, la pregunta es cómo calcular la entropía de este sistema simplificado. Al simplificar una red compleja mediante algún coarse grained, se asumirá que la red simplificada que se genera es similar a una red random. Esto debido a que la cantidad de simplificaciones y promedios que se realizan, provocan que éstas se comporten como si fueran redes random. Luego, si la red simplificada es similar a una red random, la probabilidad de enlace entre dos grupos de nodos, es sencilla. Simplemente es la probabilidad de Newman-Girvan:

$$P_{ij} = \frac{k_i k_j}{\langle k \rangle N}$$

Si se quiere observar qué sucede con la entropía del sistema, hay que utilizar la ecuación 4.18 demostrada en la sección 4.3:

$$S_c = - \sum_{i < j} p_{ij} \log(p_{ij}) + (1 - p_{ij}) \log(1 - p_{ij}) + \sum_{i < j} \log(C_{ij}) p_{ij}$$

El problema se traduce en contar los estados degenerados de enlace C_{ij} . En nuestro caso, solo es el borde de ambas comunidades los que pueden estar en contacto. Considerando que el borde de una comunidad de tamaño n_c^i tiene una cantidad $b^i = \phi(n_c^i)^{1/2}$ de partículas en el borde, solo se debe contar cuántas formas existen de enlazar dos grupos, uno de b^i partículas y otro de b^j partículas. Esto asume que cualquier grano puede estar conectado con cualquier otro, y que incluso un grano podría estar conectado con todo el otro borde, lo que no es cierto, pero es una primera aproximación. Luego, considerando que cada partícula de cada grupo puede estar conectada con cualquier partícula del otro grupo, la cantidad de formas es:

$$C_{ij} = 2^{b^i b^j} - 1 \tag{4.19}$$

Usando esta cantidad, y el modelo nulo señalado, la entropía del sistema será:

$$S_c = - \sum_{i < j} \frac{k_i k_j}{\langle k \rangle N} \log\left(\frac{k_i k_j}{\langle k \rangle N}\right) + \left(1 - \frac{k_i k_j}{\langle k \rangle N}\right) \log\left(1 - \frac{k_i k_j}{\langle k \rangle N}\right) + \sum_{i < j} \log(2^{b^i b^j} - 1) \frac{k_i k_j}{\langle k \rangle N}$$

$$S_c = - \sum_{i < j} \frac{k_i k_j}{\langle k \rangle N} \left(\log\left(\frac{k_i k_j}{\langle k \rangle N}\right) - b^i b^j \log(2)\right) + \left(1 - \frac{k_i k_j}{\langle k \rangle N}\right) \log\left(1 - \frac{k_i k_j}{\langle k \rangle N}\right) \quad (4.20)$$

Se puede mostrar la entropía al igual como se realizó en la sección 4.2, pero esta vez de forma mesoscópica. Esta entropía se puede visualizar en la figura 4.2 a). Donde cada punto del gráfico es el promedio de la entropía mesoscópica para cada aceleración, es decir, a cada una de las 3.272 imágenes dentro de una aceleración se les obtuvo su red de comunidades y a su vez a cada una de estas redes se les obtuvo su entropía. Luego el promedio de estas fue colocado como la entropía asociada a esa aceleración. Importante mencionar que se eliminaron los mismos 3 datos outliers eliminados anteriormente en la entropía microscópica (correspondientes a las aceleraciones $\Gamma = 4.8155, 4.7381, 4.6548$, todos datos del segundo día de grabación). Al igual que en la sección 4.2 se usó como proxy a un calor específico $C_v \sim \frac{dS}{d\varepsilon}$. Se puede observar en la figura 4.2 b), nuevamente la entropía no varía y es prácticamente constante al modelarla tipo potencia.

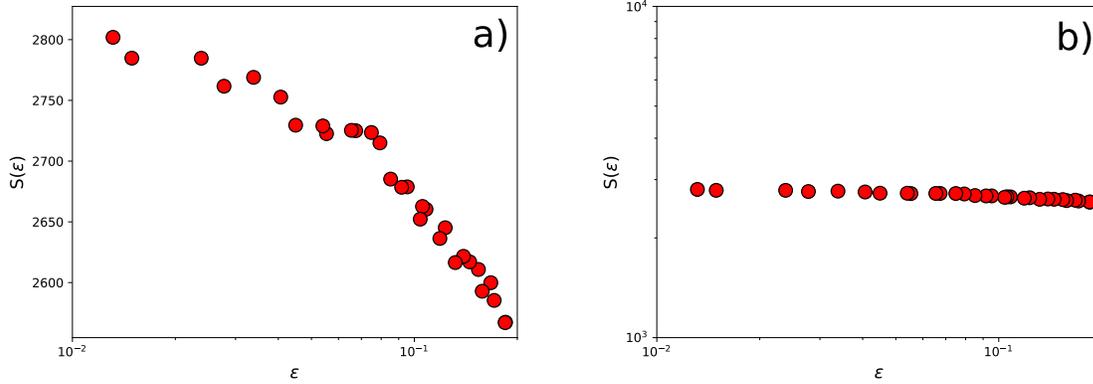


Figura 4.2: a) Entropía sistema mesoscópico en función de ε . b) Entropía en función ε escala log log.

El comportamiento es totalmente similar a lo mostrado en la entropía microscópica, aumentando continuamente a medida que se acerca la transición, lo mismo para el calor específico del sistema que permanece sin divergencia. Lo que llama la atención es el no incremento previsto de la entropía del sistema. Los valores de la entropía mesoscópica son del orden de 10^3 , mientras que en la microscópica de 10^6 . Esto pudo haber ocurrido por varias razones, pero hay tres las cuales explicarían esto: primero, la red microscópica posee enlaces con pesos, mientras que la red de comunidades contiene enlaces binarios, luego la entropía mesoscópica considera muchísimos casos de enlaces que la mesoscópica no considera, segundo, se pasa de aproximadamente 5.000 granos con algún enlace, a 400 grupos de granos que no todos tienen enlaces con otros grupos de granos, es decir, no se está cerca de los límites termodinámicos

de grandes cantidades de enlaces, tercero y último, quizás las redes producidas no siguen probabilidades de redes random, es decir el término $p_{ij} = \frac{k_i k_j}{\langle k \rangle N}$ podría ser otro.

Capítulo 5

Distribuciones

« No dejen de tensar cada vez más los resortes en su interior y no duden en forzarlos cuando haga falta, y repítanse, por más que el exceso de esfuerzo no esté de moda, que el futuro les pertenece a los que se esfuerzan en exceso.»

H. Bergson [115]

En esta sección se presentarán las diferentes distribuciones de las *Redes q de Comunidades* asociadas al sistema granular cercano a la transición. Como informó Castillo [22], el sistema granular muestra un orden de orientación global creciente a medida que $\langle Q \rangle$ crece linealmente con $\Gamma < \Gamma_c$. A medida que esto ocurre, las partículas se organizan en grupos con un número cada vez mayor de partículas que se unen a otros grupos a través de partículas compartidas en sus bordes. Usando la aceleración normalizada $0,02 < \varepsilon < 0,2$ se calculó la distribución de tamaños n_c , el tiempo de vida τ_c de los grupos de estos conjuntos de redes en función de la aceleración normalizada ε . Por otra parte, se analizó tanto la cantidad de enlaces totales de la red, como también en función del tamaño de los grupos de granos, así como el cálculo de 3 histogramas de centralidad: grado, cercanía e intermediación. Esto con el objetivo de caracterizar mesoscópicamente la cercanía de la transición.

5.1. Tamaño

La distribución de tamaños de los grupos de granos $\rho(n_c)$ usando el modelo nulo demostrado en la sección 4.1 se muestra en la Figura 5.1 a) para diferentes valores de la aceleración normalizada ε . Cada color representa la distribución de tamaños para una aceleración. Estas distribuciones muestran un comportamiento de ley de potencia, $\rho(n_c) \sim n_c^\alpha$ durante al menos una década, entre tamaños de 20 y 200 partículas por cúmulo independiente del valor de la aceleración. Los valores de mejor ajuste para α dentro del rango anterior se muestran en la Figura 5.1 a) (recuadro), que muestra un comportamiento límite para aceleraciones ε cercanas a la transición.

El comportamiento de la ley de potencia se satura mostrando un límite para tamaños

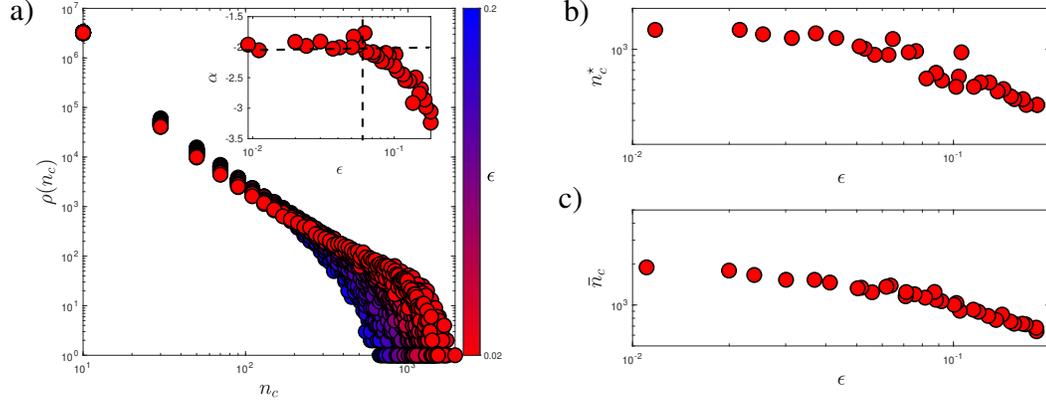


Figura 5.1: a) Distribución de tamaños de los clústeres $\rho(n_c)$ en función de n_c . Recuadro: Mejor fit del exponente de la ley de potencia α como función de ϵ para $N_c \in \{50, 500\}$. La línea discontinua horizontal muestra el valor límite de α en función de ϵ . La línea discontinua vertical muestra el valor más grande de ϵ a partir del cual α se satura. b) Clúster cut-off n_c^* como función de ϵ . c) Tamaño más grande de Cluster \bar{n}_c en función de ϵ .

de cúmulos mayores que un valor dado $n_c^*(\epsilon)$, el cual es cada vez más grande a medida que se acerca la transición líquido-sólido. Usando una corrección exponencial simple $\rho(n_c) \sim n_c^\alpha \times \exp(-n_c/n_c^*)$, se calculó $n_c^* = n_c^*(\epsilon)$, lo que se muestra en la Figura 5.1 b). De manera similar, se puede calcular la distancia de grupo más grande encontrada para cada valor de ϵ , $\bar{n}_c = \langle n_c^2 \rangle$ que se muestra en la Figura 5.1 c). Como en el caso de la saturación n_c^* , \bar{n}_c también disminuye con ϵ (a medida que la aceleración se aleja de la transición). Se puede probar un comportamiento de ley de potencia tanto para n_c^* como para \bar{n}_c en función ϵ en el rango donde α converge hacia -2.0 . Dentro de este rango, $n_c^* \sim \epsilon^{-\zeta^*}$ con $\zeta^* = 0,23 \pm 0,05$ y $\bar{n}_c \sim \epsilon^{-\bar{\zeta}}$ con $\bar{\zeta} = 0,21 \pm 0,05$.

Se podría atribuir este comportamiento de la distribución de tamaños a problemas relacionados con la percolación [116–119], ya que muestra el exponente predicho ($\alpha = -2,0$) para la distribución de conglomerados. Últimamente, se ha descubierto que aparecen un par de transiciones de fase diferentes de segundo orden (una de actividad y otra de orden de orientación) en un sistema de discos granulares cortados bidimensionales en el mismo valor crítico del parámetro de control [120], esto podría ser el caso de los datos analizados en esta tesis, ya que estaríamos encontrando otra transición además de la estructural ya descrita, pero en realidad para estas redes de clústeres no es el caso, ya que ni n_c^* ni \bar{n}_c muestran el comportamiento crítico esperado en problemas relacionados con la percolación en función de ϵ dentro del rango experimental de los datos presentes.

Ahora bien, continuando con lo anterior, se podría observar el comportamiento de las componentes de la red, en vez de las comunidades de esta, y observar si en ese caso pudiese existir una percolación u otro tipo de transición. Las *redes q* cumplen el criterio de la existencia de una componente gigante $\langle k^2 \rangle - 2\langle k \rangle > 0$ [107], por lo que podría ser el caso. Esto da para toda una nueva investigación y sería interesante observar incluso que ocurre con esta componente gigante después de la transición.

Importante notar que este comportamiento de la distribución de tamaños es un compor-

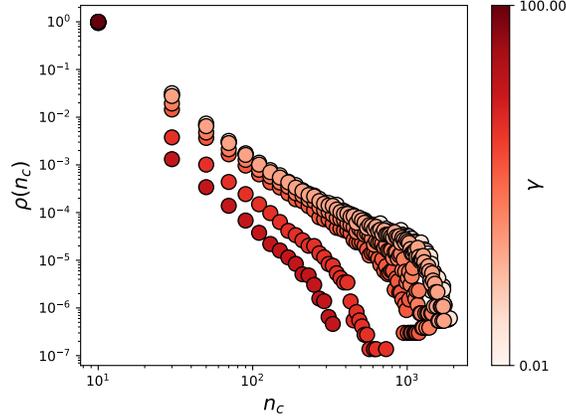


Figura 5.2: Densidad de tamaño en función del parámetro de resolución γ para $\Gamma = 4,68$.

tamiento libre de escala de exponente -2 en el rango entre 20 y 200 partículas. Esto significa que a las diferentes escalas entre el rango, se encuentran los mismos patrones de distribución de tamaños, es decir, la naturaleza de los tamaños de los clústeres es auto-similar. Además, hay una ley tipo potencia en su distancia más grande, como se mencionó al describir \bar{n}_c , la cual permite entender el ritmo de crecimiento de estos, lo mismo para el paso de función potencia a exponencial n_c^* .

Se podría pensar en relacionar estos resultados de correlación mesoscópica obtenidos en esta distribución con la correlación de largo alcance obtenida en el estudio anterior [22, 23]. El comportamiento tipo potencia $\xi_4 \sim \varepsilon^{-1}$ no se relaciona uno a uno con como escala la saturación n_c^* . La explicación de esto es que en este estudio se detectan comunidades de granos. Siempre se va a particionar el gran clúster en algunas comunidades por lo que las estructuras encontradas son diferentes a las correlaciones de largo del estudio anterior. Esta partición del gran clúster ocurre debido a que en los bordes de las comunidades se encuentran granos con un orden similar al promedio global, lo que provoca que los grupos de granos se diferencien también en su orientación, por lo que la correlación detectada mediante las redes de comunidades no es solo de orden, sino también orientacional. Para encontrar una relación entre la correlación y las saturaciones obtenidas en estas distribuciones, se podría, como se mencionó anteriormente, sumar la cantidad de granos de los clústeres entre sí, y considerarlos un gran clúster, de esta forma, la escala observada sería mucho más similar a la de las longitudes de onda observadas en el estudio anterior de este sistema.

Por otra parte, las distribuciones de tamaño $\rho(n_c)$, fueron obtenidas para distintos parámetros de resolución γ (parámetro que aparece en la función modularidad y que afecta en el tamaño de las comunidades detectadas) para así observar si este influía o no en el tipo de distribución de los grupos de granos. Esto se puede ver en la Figura 5.2, donde se probó con una serie de valores: $\gamma = [0,01; 0,05; 0,1; 0,5; 1; 5; 10; 50; 100]$ para una aceleración en particular $\Gamma = 4,68$. No se obtuvieron mayores diferencias en el exponente de la potencia $\alpha \sim -2,0$, mas sí en la saturación. Mientras más grande es el parámetro de resolución, más pequeñas son las comunidades, produciendo una saturación en tamaños más pequeños, por el contrario, mientras más pequeño se toma el parámetro de resolución, más grandes se hacen las comunidades, retrasando el *cutt-off*. Para valores pequeños del parámetro de resolución

($\gamma < 0,05$) ya no surgen diferencias con números menores, ya que no hay comunidades más grandes que se puedan obtener.

Por último, estas distribuciones; como se mencionó al inicio, fueron obtenidas para el caso de la detección de comunidades con el modelo nulo $P_{ij} = \frac{\beta(Q^*)^2}{1+\beta(Q^*)^2} \delta_{ij}/2$. En un inicio de esta tesis, se realizó lo mismo, pero detectando comunidades con el modelo nulo random $P_{ij} = \frac{k_i k_j}{\langle k \rangle N}$, mostrando distribuciones exponenciales, tipo cadenas de Márkov, que incluso colapsaban entre sí cumpliendo que $\rho(n_c) \sim \varepsilon^{1/2} e^{-n_c \varepsilon^{1/4} \Delta}$. Estas distribuciones evidentemente no representan al sistema. Igualmente, han sido obtenidas y analizadas en estudios de grupos de partículas, que no usan un apropiado modelo nulo [61]. Lo que muestra la importancia de la correcta detección de grupos de partículas.

5.2. Tiempos de Vida

A partir del procedimiento descrito en la sección 3.4 se calculó la vida promedio $\tau_c = \tau(n_c)$ de los clústeres en función de su tamaño n_c , como se muestra en la Figura 5.3 a). Los tiempos de vida, al igual que en la distribución de tamaño, se agrupan en intervalos $(n_c - \Delta n_c, n_c + \Delta n_c)$ usando $\Delta n_c = 10$, que es el tamaño promedio de los pequeños grupos que se encuentran alrededor de los bordes de las imágenes. Para una aceleración ε fija, el tiempo τ_c crece monótonamente con $n_c \in \{50, 500\}$ como una ley de potencia tipo $\tau_c \sim n_c^\eta$ con exponente $\eta = 0,24 \pm 0,05$ como pendiente de mejor ajuste. Los grupos con n_c más grandes se sostienen con un τ_c más grande, mostrando una gran dispersión cuando n_c es del orden de 1000 partículas, esto para todos los valores de ε como se muestra en la Figura 5.3 a).

Por otra parte, las fluctuaciones del tiempo de vida $\sigma(\tau_c)$ se representan en la Figura 5.3 b) en función de τ_c . Se puede observar que crecen (en promedio) de forma monótona con τ_c . Una ley de potencia se puede ajustar en este caso como $\sigma(\tau_c) \sim \tau_c^\mu$, con $\mu = 0,55 \pm 0,05$ como la pendiente de mejor ajuste. Esto muestra que a medida que los grupos crecen en tamaño y, por lo tanto, τ_c aumenta, la razón entre la fluctuación de los tiempos y los tiempos de vida promedio $\sigma(\tau_c)/\tau_c \sim \tau_c^{-1/2}$ disminuye, lo que significa que τ_c puede ser una escala de tiempo adecuada para describir la lenta dinámica de la evolución de los grupos granulares. Es importante tener en cuenta que estos hallazgos también se observan cuando la restricción de correspondencia explicada en la sección 3.4 se reduce de 50 % a 10 %, aunque con fluctuaciones mucho mayores.

Importante es notar que en artículos sobre este sistema, se llega a la conclusión de que el tiempo de relajación es $t_4 \sim \varepsilon^{-2}$ [22]. Se podría pensar que aquí se debería reproducir este mismo resultado, pero no es así. Ese tiempo de relajación es el tiempo en que dada una perturbación al sistema; en cierto número de onda, este vuelve a algún equilibrio. En este caso, se está midiendo la vida media de los clústeres de granos, lo que es completamente distinto. Es el tiempo promedio que vive un conjunto de granos de cierto tamaño. Mencionar también, que al realizar este mismo proceso, pero mediante la obtención de comunidades utilizando el modelo nulo random, $P_{ij} = \frac{k_i k_j}{\langle k \rangle N}$ se obtienen distribuciones gaussianas del tiempo, lo cual no tiene ningún sentido físico, lo que es otra prueba de la importancia de usar un modelo nulo

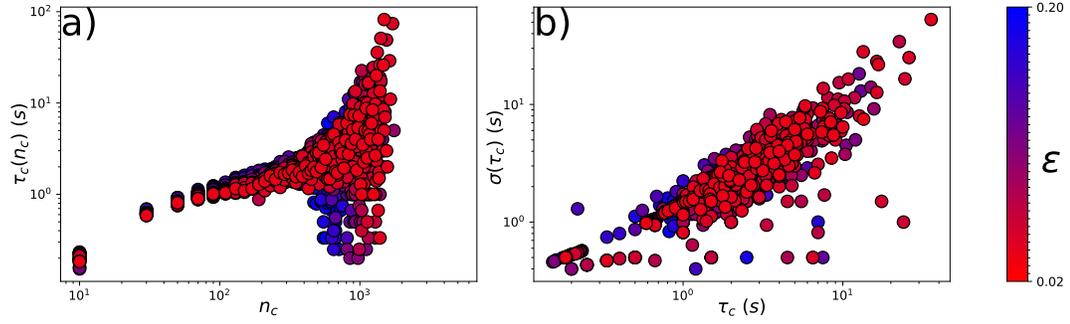


Figura 5.3: a) Tiempo de vida promedio τ_c en función de los tamaños de los clusters n_c en función de la aceleración normalizada ε . b) Desviación estándar de la vida promedio $\sigma(\tau_c)$.

adecuado al problema.

5.3. Cantidad de Enlaces

En la Figura 5.4 a) se representa la distribución de la suma total de enlaces m producida en las redes de clústeres en función de ε . Estas tienen una distribución gaussiana $\rho(m) \sim e^{-\frac{(m-\langle m \rangle)^2}{2\sigma^2}}$, donde el número medio de conexiones m disminuye linealmente como $\varepsilon^{-\nu}$ con $\nu = 0,05 \pm 0,005$, mientras que la desviación de los datos $\sigma^2 = 90$ es independiente de ε . Lo primero es bastante esperable físicamente, ya que a medida que los grupos más pequeños se fusionan en otros más grandes, la cantidad de enlaces posibles de la red disminuye. Por otra parte, que la desviación de los datos no dependa de ε habla de que el coarse grained realizado produce redes con un promedio de enlaces bien definido.

Se calculó, a su vez, la cantidad de conexiones en función del tamaño de los grupos de granos n_c , como se observa en la figura 5.4 b). La cantidad de conexiones por tamaño $k = k(n_c)$ crece como una ley de potencia con n_c como $n_c^{\zeta_\kappa}$ con $\zeta_\kappa = 0,55 \pm 0,05$ y es independiente de ε . Esta escala, que se muestra en la Figura 5.4 b), es de esperar, ya que las conexiones entre los grupos dependen del número de partículas en los bordes de los grupos y la cantidad de partículas en el borde es proporcional a la raíz del total de partículas, por lo tanto, $\kappa \sim n_c^{1/2}$.

5.4. Centralidades y Distribución de Grado

Tras el cálculo de la densidad, tiempo y cantidad de enlaces, se realizó el estudio de dos centralidades y el grado de los nodos, y sus cambios en función a la cercanía de la transición. Estas se pueden visualizar en la Figura 5.5.

En primer lugar, tanto la centralidad de cercanía (Figura 5.5 a)) como la centralidad de intermediación (Figura 5.5 b)) poseen un comportamiento con peaks para valores pequeños

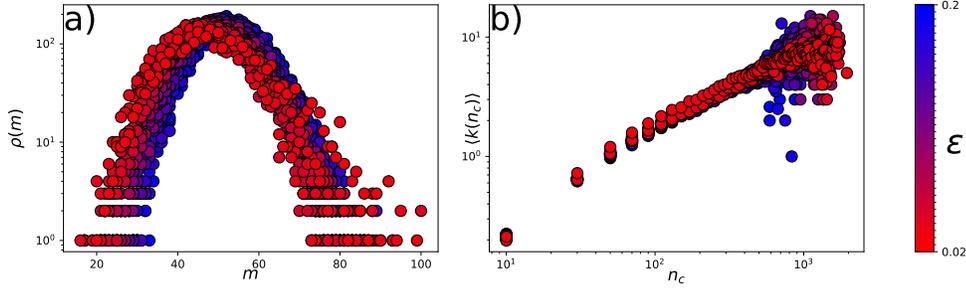


Figura 5.4: a) Densidad de la cantidad de enlaces m en función de ε . b) Cantidad promedio de conexiones en función del tamaño n_c de las comunidades de granos

de centralidad. Estos son causados meramente por las fluctuaciones generadas por el tipo de binnedo para identificar los valores de B y C . Esto es un problema muy común en los histogramas de las diversas centralidades cuando son descritas por un eje logarítmico. Ante esto, Newman [98] propone que se puede mejorar el entendimiento de estas centralidades realizando una distribución acumulativa (es decir $\Phi(x) = \rho(X > x)$ [98], así como se ve en la figura 5.6. En esta, se visualiza primero, una depresión en la función acumulativa en ambas centralidades, esto quiere decir, que muchos clústeres poseen su valor de centralidad en ese rango, lo que es producido por la gran cantidad de clústeres pequeños que no están conectados a ningún otro clúster y que, por lo tanto, no poseen una gran centralidad. Hay, además, un comportamiento exponencial decreciente en ambas, aumentando la pendiente en función de ε . Esto significa, en ambos casos, que la probabilidad de encontrar nodos con centralidad x o más, disminuye exponencialmente. Por otra parte, la pendiente de decrecimiento disminuye a medida que nos acercamos a la transición, esto significa, en el caso de la centralidad de cercanía, que mientras más cerca se encuentra el sistema de la transición, los grupos de granos están más cerca entre sí. Este aumento en la cercanía explica que a medida que se acerca la aceleración, más clústeres se acercan entre sí, produciendo clústeres cada vez más grandes. En el caso de la centralidad de intermediación, comunica que a medida que aumenta la aceleración, se puede lograr para los nodos una importancia mayor en la conexión entre nodos, incluso cambiando un orden de magnitud. Es decir, aumenta la importancia de algunos clústeres en conectar la red.

El grado, por su parte (Figura 5.5 c)), puede ajustarse con una función potencia para $\kappa < 5$ tipo $\rho(\kappa, \varepsilon) \sim \kappa^{-\psi}$, donde la pendiente es $\psi = 3,15 \pm 0,05$. Es un rango muy pequeño, no alcanza a ser una década como para asociarlo a un comportamiento libre de escala. Si bien la mayoría de los fenómenos naturales que se modelan mediante redes siguen leyes tipo potencia, se podría observar; con mejor precisión, si efectivamente sigue ese comportamiento, si se aumentara considerablemente la cantidad de granos que tiene el sistema (debido a que la red de clústeres no contiene tantos nodos ni enlaces).

Tras esto para $\kappa > 5$ se puede ajustar una función exponencial tipo $\rho(\kappa, \varepsilon) = e^{-\Delta\kappa\varepsilon^{1/5}}\varepsilon^{2/5}$, donde la pendiente es $\Delta = 1,15 \pm 0,05$ permitiendo valores mayores para κ a medida que nos acercamos a la transición. Esto es bastante razonable, pensando que mientras más cerca se encuentra el sistema de la transición se producen clústeres más grandes y, mientras más grande son, más conexiones pueden llegar a tener debido al aumento del perímetro cubierto por su borde, como se ve también en el gráfico de enlaces en función del tamaño en la Figura

5.4 b).

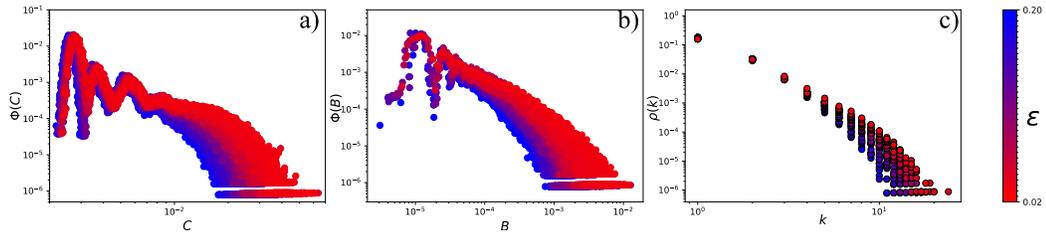


Figura 5.5: a) Centralidad de Cercanía. b) Centralidad de Intermediación. c) Distribución de Grado

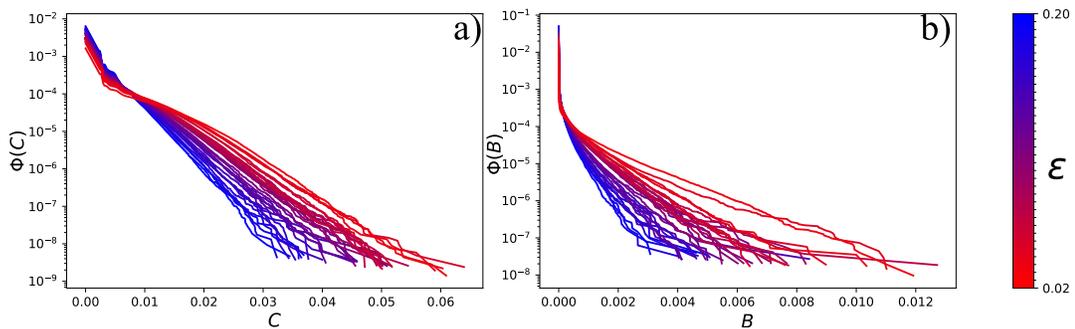


Figura 5.6: a) Distribución acumulativa de la centralidad de cercanía. b) Distribución acumulativa de la centralidad de Intermediación.

Resumiendo la información que estas centralidades y el grado comunican sobre cómo se comportan los clústeres de granos, se puede decir que mientras más cerca se está del cambio de fase: i) más cerca están los clústeres de granos entre sí, ii) la relevancia; en términos de conectar la red; de los clústeres, logra aumentar en un orden de magnitud, iii) por último, la posibilidad de encontrar clústeres con gran cantidad de enlaces (entre 10 y 20 enlaces) aumenta en función de ε . Esto último no significa que aumenten la cantidad de enlaces totales de la red, ya que fue observado en la figura 5.4 que disminuyen, por lo tanto, lo que se observa aquí es en realidad un aumento de la cantidad de enlaces que poseen los grandes clústeres generados. Luego todo tiene bastante sentido, Los clústeres cada vez más grandes, aumentan cada vez su cantidad de enlaces, lo que produce que exista menor distancia entre los distintos clústeres de la red, conectándolos a todos, lo que implica a su vez un aumento de un orden de magnitud en la centralidad de intermediación.

Dos cosas importantes de señalar en estos resultados antes de presentar las conclusiones son, cómo influyen las condiciones de borde de este sistema, y cómo afectan las fluctuaciones en estos resultados, ante la poca cantidad tanto de nodos como de enlaces en estas redes de comunidades de granos.

Respecto a las condiciones de borde, los granos encontrados en los bordes tienden a quedarse en estos, lo que podría afectar de alguna manera los resultados de las distribuciones que fueron mostrados en este capítulo. Sin embargo, los clústeres formados en los bordes siempre son pequeños de no más de 10 granos, por lo que no afectan en como se distribuyen

los tamaños en todo el resto del espacio. Por otra parte, en las distribuciones, las cuales abordan análisis de los enlaces de la red, tampoco afectan. Generalmente, no se enlazan entre sí estos clústeres de borde. Luego eliminando el borde del sistema en $5mm$ se generarían los mismos resultados.

Acerca de las fluctuaciones de las redes de comunidades, no afectan tampoco los resultados. Si bien son redes pequeñas, representan un fenómeno más grande, por lo que son bastante estables en sus distribuciones, lo que se puede observar en la poca fluctuación que existe en todas las distribuciones. Si bien en los tiempos de vida se observa bastante dispersión, esto no es debido a la red en sí, sino a la forma de generar la correlación entre comunidades, lo que puede ser mejorable.

Capítulo 6

Conclusión

En esta tesis se ha estudiado mediante herramientas de redes complejas un sistema granular en su transición líquido-sólido. Esto se realizó tanto desde una visión entrópica, cómo también desde una visión mesoscópica que utiliza la visión mencionada anteriormente. Fundado en resultados de investigaciones precedentes, se modeló el sistema en función de relaciones de orden y se obtuvieron resultados que aportan mayor entendimiento de esta transición continua de segundo orden.

En el capítulo 3 se mostró que se puede modelar un sistema granular mediante redes complejas. Dada una base de datos, se creó tanto una red granular del sistema, como también una red simplificada vía coarse grained. Esto último es una forma sistemática y genérica que permite realizar coarse-grained en sistemas físicos fuera del equilibrio, los cuales sean modelados mediante redes complejas, es decir, en función de las relaciones entre nodos.

En el capítulo 4 se demostró un modelo entrópico que permite modelar el sistema mediante redes complejas. En este, se pudo observar cómo varía la entropía a medida que se acerca la transición, logrando obtener un proxy de calor específico que necesitaba la investigación para entender con más profundidad coeficientes del marco teórico del modelo C, usado para describir este sistema en investigaciones anteriores. A su vez, se mostró una forma de analizar la entropía en sistemas coarse grained en redes. Si bien, en este caso no se logró mostrar el aumento de entropía en la comparación microscópica y mesoscópica, se hace interesante continuar este tipo de investigaciones y, en particular, entender el término de degeneración del sistema, ya que en fenómenos donde este sea muy grande, puede tener toda la información necesaria para la descripción dinámica.

En el capítulo 5 se caracterizó al sistema mesoscópicamente. Así se entendió el cómo se van generando los clústeres de partículas, cómo van creciendo en función de la aceleración, cómo se van acercando entre sí y cuánto sobreviven en el tiempo. Se puede concluir, que mediante este enfoque de redes y coarse grained, sí es posible obtener más información sobre lo que sucede en el sistema cerca de la transición. Por otra parte, las diversas centralidades describen el cambio en las distancias de clústeres, interconexión y en el aumento de importancia de los clústeres que se van generando en el sistema, lo que explica bastante sobre cómo se van ordenando los granos.

En esta tesis, queda mostrada una forma de abordar problemas fuera del equilibrio, más allá del sistema particular que se analizó. La gran dificultad de encontrar la entropía en sistemas termodinámicos complejos, se puede solucionar intentando entenderlos mediante relaciones, creando alguna red que los represente. Luego, la caracterización del sistema físico mediante restricciones en las relaciones es fundamental para poder abordarlo y que efectivamente sea de utilidad el enfoque de redes complejas. Este análisis sistemático para la agrupación en sistemas granulares puede servir para estudiar y comprender la evolución espacio-temporal de estructuras de mesoescala en sistemas que muestran transiciones de fase fuera de equilibrio.

Esta clase de investigación debiese continuar. En primera instancia, estudiando este mismo sistema, pero mediante *simplicial complexes* [121], esto debido a que el orden que toman los granos es no lineal y depende de los 4 vecinos. Este enfoque permitiría entender aún más cómo es que se forman y evolucionan esta clase de sistemas. Además, en los estudios anteriores [22], se detectó una transición de primer orden, la cual aparece si el área cubierta por los granos disminuye a un 77%. Luego, sería interesante estudiar esa transición, usando esta misma herramienta entrópica. Otros sistemas similares a este, pero que agregan otras variables, como por ejemplo, el campo magnético [122], serían atractivos de estudiar mesoscópica y entrópicamente mediante redes, ya que, en esos casos, el orden local producido entre los granos es de repulsión y no de atracción, lo que expandiría la validez de usar esta mecánica estadística de grafos en sistemas granulares que transiten. En esa misma línea, se debe insistir en abordar, con redes complejas, nuevos sistemas fuera del equilibrio, permitiendo así entender el rol de las estructuras mesoscópicas en las distintas transiciones, como también obtener una entropía bien definida, y ver si esta coincide con transiciones de fase ya conocidas. El método de coarse grained vía modularidad realizado, sería interesante seguir desarrollándolo tanto en sistemas físicos, como también fuera de la física, ya que permite identificar cuáles son las redes simplificadas más probables, y así, enfocar investigaciones en solamente analizar estas para entender los diferentes problemas que se aborden. A su vez, la entropía coarse grained, es algo que puede ser muy útil en cualquier clase de problema que codifique la información en términos de relaciones. Si bien el problema de obtener el degeneramiento no está resuelto de manera exacta, se puede obtener aproximaciones en límites termodinámicos de muchos nodos y enlaces y, así, entender el sistema meramente por la degeneración, sin enfocarse en obtener la probabilidad de los enlaces. Esto último es muy importante, ya que permite, que una herramienta nacida en la física, como la mecánica estadística, pueda expandirse y utilizarse como una forma de entender fenómenos más allá de la física, adaptándose por sus propias características a cada problema que se pueda entender mediante relaciones.

Bibliografía

- [1] R. Feynman. *Feynman Lectures On Gravitation*. CRC Press, 2018.
- [2] A.S. Eddington. *The Internal Constitution of the Stars*. Cambridge Science Classics. Cambridge University Press, 1988.
- [3] D. Kondepudi and I. Prigogine. *Modern Thermodynamics: From Heat Engines to Dissipative Structures*. CourseSmart Series. Wiley, 2014.
- [4] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Statistical Physics: Volume 5*. Elsevier Science, 2013.
- [5] S. Blundell, S.J. Blundell, and K.M. Blundell. *Concepts in Thermal Physics*. Comprehensive Assessment of Water Management in Agriculture. Oxford University Press, 2006.
- [6] Rudolf Clausius. Ueber verschiedene für die anwendung bequeme formen der hauptgleichungen der mechanischen wärmetheorie. *Annalen der Physik*, 201:353–400, 1865.
- [7] Wikipedia. Difusión (física) — Wikipedia, the free encyclopedia. [http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Difusi%C3%B3n%20\(f%C3%ADsica\)&oldid=154666630](http://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Difusi%C3%B3n%20(f%C3%ADsica)&oldid=154666630), 2024. [Online; accessed 09-January-2024].
- [8] Ludwig Boltzmann. *Über die Beziehung zwischen dem zweiten Hauptsatze der mechanischen Wärmetheorie und der Wahrscheinlichkeitsrechnung resp. den Sätzen über das Wärmegleichgewicht*, volume 2 of *Cambridge Library Collection - Physical Sciences*, page 164–223. Cambridge University Press, 2012.
- [9] J.W. Gibbs. *Elementary Principles in Statistical Mechanics*. Dover Books on Physics. Dover Publications, 2014.
- [10] Max Planck. On the Law of Distribution of Energy in the Normal Spectrum. *Annalen Phys.*, 4:553, 1901.
- [11] Albert Einstein. Über die von der molekularkinetischen theorie der wärme geforderte bewegung von in ruhenden flüssigkeiten suspendierten teilchen» [investigations on the theory of brownian movement. *Annalen der Physik*, 1905.
- [12] E. T. Jaynes. Information theory and statistical mechanics. *Phys. Rev.*, 106:620–630, May 1957.
- [13] Ilya Prigogine and Isabel Stengers. *Entre el Tiempo y la Eternidad*. Alianza, 1991.

- [14] Borís Pávlovich Belósov. A periodically acting reaction and its mechanism (in russian). *Collection of Articles on Radiation Medicine. Moscow: Medgiz, 1959.*
- [15] Anatol Zhabotinsky. Periodic progress of oxidation of malonic acid in solution (investigation of the kinetics of the reaction of belousov) (in russian). *Biophysics, 1964.*
- [16] Henri Bénard. Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide. *Revue Générale des Sciences Pures et Appliquées, 1900.*
- [17] Lord Rayleigh. On the convective currents in a horizontal layer of fluid when the higher temperature is on the under side. *Philosophical Magazine, 1916.*
- [18] M. Henkel, Haye Hinrichsen, and Sophie Lübeck. Non-equilibrium phase transitions. volume 1: Absorbing phase transitions. *Theoretical and Mathematical Physics, 2008, 01 2009.*
- [19] flickr. Belousov zhabotinsky reaction, 2009. [Online; accessed 09-January-2023].
- [20] Andrej Korenic, Slobodan Perović, Milan Cirkovic, and Miquel paul antoine. Symmetry breaking and functional incompleteness in biological systems. 2019.
- [21] SVEN LÜBECK. Universal scaling behavior of non-equilibrium phase transitions. *International Journal of Modern Physics B, 18(31n32):3977–4118, December 2004.*
- [22] Gustavo Castillo, Nicolás Mujica, and Rodrigo Soto. Fluctuations and criticality of a granular solid-liquid-like phase transition. *Physical Review Letters, 109(9):095701, 2012.*
- [23] Gustavo Castillo. *Order and density fluctuations in the vicinity of a granular solid-liquid-like phase transition.* PhD thesis, Universidad de Chile, 2013.
- [24] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin. Theory of dynamic critical phenomena. *Rev. Mod. Phys., 49:435–479, Jul 1977.*
- [25] D.R. Nelson and K.J. Strandburg. *Bond-Orientational Order in Condensed Matter Systems.* Partially Ordered Systems. Springer New York, 2012.
- [26] Heinrich M. Jaeger, Sidney R. Nagel, and Robert P. Behringer. Granular solids, liquids, and gases. *Rev. Mod. Phys., 68:1259–1273, Oct 1996.*
- [27] K. Kesava Rao. Statics and kinematics of granular materials. by r. m. nedderman. cambridge university press, 1992. 352 pp. £50. *Journal of Fluid Mechanics, 286:405–405, 1995.*
- [28] C. Goldenberg and I. Goldhirsch. Force chains, microelasticity, and macroelasticity. *Phys. Rev. Lett., 89:084302, Aug 2002.*
- [29] Jacco H. Snoeijer, Thijs J. H. Vlugt, Martin van Hecke, and Wim van Saarloos. Force network ensemble: A new approach to static granular matter. *Phys. Rev. Lett., 92:054302, Feb 2004.*

- [30] S. DOUADY S. FAUVE and C. LAROCHE. Collective behaviours of granular masses under vertical vibrations. *Europhys. Lett.*, 8:621–627, 1989.
- [31] Francisco Melo, Paul B. Umbanhowar, and Harry L. Swinney. Hexagons, kinks, and disorder in oscillated granular layers. *Phys. Rev. Lett.*, 75:3838–3841, Nov 1995.
- [32] Keiji Watanabe and Hajime Tanaka. Direct observation of medium-range crystalline order in granular liquids near the glass transition. *Phys. Rev. Lett.*, 100:158002, Apr 2008.
- [33] Thomas Schindler and Sebastian C. Kapfer. Nonequilibrium steady states, coexistence, and criticality in driven quasi-two-dimensional granular matter. *Phys. Rev. E*, 99:022902, Feb 2019.
- [34] Jennifer Galanis, Ralph Nossal, Wolfgang Losert, and Daniel Harries. Nematic order in small systems: Measuring the elastic and wall-anchoring constants in vibrofluidized granular rods. *Phys. Rev. Lett.*, 105:168001, Oct 2010.
- [35] M. González-Pinto, F. Borondo, Y. Martínez-Ratón, and E. Velasco. Clustering in vibrated monolayers of granular rods. *Soft Matter*, 13:2571–2582, 2017.
- [36] Miguel González-Pinto, Johannes Renner, Daniel De las Heras, Yuri Martínez-Ratón, and Enrique Velasco. Defects in vertically vibrated monolayers of cylinders. *New Journal of Physics*, 21(3):033002, 2019.
- [37] Eduardo Basurto, Péter Gurin, Szabolcs Varga, and Gerardo Odriozola. Ordering, clustering, and wetting of hard rods in extreme confinement. *Phys. Rev. Res.*, 2:013356, Mar 2020.
- [38] Ariel Díaz-De Armas, Martín Maza-Cuello, Yuri Martínez-Ratón, and Enrique Velasco. Domain walls in vertically vibrated monolayers of cylinders confined in annuli. *Phys. Rev. Res.*, 2:033436, Sep 2020.
- [39] Ginestra Bianconi. Statistical mechanics of multiplex networks: Entropy and overlap. *Physical Review E*, 87(6), jun 2013.
- [40] Ginestra Bianconi. Entropy of network ensembles. *Phys. Rev. E*, 79:036114, Mar 2009.
- [41] Mark Newman. *Networks: An Introduction*. Oxford University Press, 03 2010.
- [42] Tzula B. Propp and S. J. van Enk. Quantum networks for single photon detection. *Phys. Rev. A*, 100:033836, Sep 2019.
- [43] Xinzhu Li, Mark C. Kuzyk, and Hailin Wang. Honeycomblike phononic networks of spins with closed mechanical subsystems. *Phys. Rev. Appl.*, 11:064037, Jun 2019.
- [44] Lia Papadopoulos, James G. Puckett, Karen E. Daniels, and Danielle S. Bassett. Evolution of network architecture in a granular material under compression. *Phys. Rev. E*, 94:032908, Sep 2016.

- [45] Kuang Liu, Jonathan E. Kollmer, Karen E. Daniels, J. M. Schwarz, and Silke Henkes. Spongelike rigid structures in frictional granular packings. *Phys. Rev. Lett.*, 126:088002, Feb 2021.
- [46] L. Meyers, Babak Pourbohloul, Mark E. J. Newman, Danuta M. Skowronski, and Robert C. Brunham. Network theory and sars: predicting outbreak diversity. *Journal of Theoretical Biology*, 232:71 – 81, 2004.
- [47] Anna Saumell-Mendiola, M. Ángeles Serrano, and Marián Boguñá. Epidemic spreading on interconnected networks. *Physical Review E*, 86(2), aug 2012.
- [48] Romualdo Pastor-Satorras, Claudio Castellano, Piet Van Mieghem, and Alessandro Vespignani. Epidemic processes in complex networks. *Rev. Mod. Phys.*, 87:925–979, Aug 2015.
- [49] Ming Xu, Brad R. Allenby, and John C. Crittenden. Interconnectedness And Resilience Of The U.S. Economy. *Advances in Complex Systems (ACS)*, 14(05):649–672, 2011.
- [50] Shigang Wen, Yu Tan, Mengge Li, Yunke Deng, and Chuangxia Huang. Analysis of global remittance based on complex networks *. *Frontiers in Physics*, 8:85, April 2020.
- [51] Marco Bardoscia, Giacomo Livan, and Matteo Marsili. Statistical mechanics of complex economies. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2017(4):043401, apr 2017.
- [52] Slobodan Maletić, Danijela Horak, and Milan Rajković. Cooperation, Conflict And Higher-Order Structures Of Social Networks. *Advances in Complex Systems (ACS)*, 15(supp0):1–29, 2012.
- [53] Bingo Wing-Kuen Ling, Charlotte Yuk-Fan Ho, Lidong Wang, Kok-Lay Teo, Chi K. Tse, and Qingyun Dai. Near consensus complex linear and nonlinear social networks. *Modern Physics Letters B*, 28(13):1450106, May 2014.
- [54] Marián Boguñá, Romualdo Pastor-Satorras, Albert Díaz-Guilera, and Alex Arenas. Models of social networks based on social distance attachment. *Phys. Rev. E*, 70:056122, Nov 2004.
- [55] Andreea Esanu and Cristian Hatu. The significance of prior knowledge in physics learning. In *International Scientific Conference Learning and software for Education-Bucharest, April 25-26, 2015*, 04 2015.
- [56] Ismo T. Koponen. Systemic view of learning scientific concepts: A description in terms of directed graph model. *Complexity*, 19(3):27–37, 2014.
- [57] Ismo T. Koponen and Maija Nousiainen. Concept networks in learning: finding key concepts in learners’ representations of the interlinked structure of scientific knowledge. *Journal of Complex Networks*, 2(2):187–202, 02 2014.
- [58] I. Koponen and Maija Nousiainen. Concept networks in learning and the epistemic support of their key concepts. In *International Conference on Complex Networks and their Applications*, pages 759–769, 01 2018.

- [59] Pep Español. *Statistical Mechanics of Coarse-Graining*, volume 640, pages 2256–2256. Springer Novel Methods in Soft Matter Simulations, 02 2004.
- [60] Martial Noirhomme, François Ludewig, Nicolas Vandewalle, and Eric Opsomer. Cluster growth in driven granular gases. *Phys. Rev. E*, 95:022905, Feb 2017.
- [61] Daniel L. Blair and A. Kudrolli. Clustering transitions in vibrofluidized magnetized granular materials. *Phys. Rev. E*, 67:021302, Feb 2003.
- [62] Charles S. Campbell. Clusters in dense-inertial granular flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 687:341–359, 2011.
- [63] M. Ausloos, R. Lambiotte, K. Trojan, Z. Koza, and M. Pełkala. Granular matter: A wonderful world of clusters in far-from-equilibrium systems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 357(2):337–349, 2005. Diffusion and Soft Matter Physics.
- [64] Melody X Lim, Anton Souslov, Vincenzo Vitelli, and Heinrich M. Jaeger. Cluster formation by acoustic forces and active fluctuations in levitated granular matter. *Nature Physics*, 15(5):460–464, 2019.
- [65] Beom Jun Kim. Geographical coarse graining of complex networks. *Phys. Rev. Lett.*, 93:168701, Oct 2004.
- [66] Minggang Wang and Lixin Tian. From time series to complex networks: The phase space coarse graining. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 461:456–468, 2016.
- [67] Yong-Shang Long, Zhen Jia, and Ying-Ying Wang. Coarse graining method based on generalized degree in complex network. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 505:655–665, 2018.
- [68] Qing-Lin Yang, Li-Fu Wang, Guo-Tao Zhao, and Ge Guo. A coarse graining algorithm based on m-order degree in complex network. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 558:124879, 2020.
- [69] Ashish Kumar, Anindya S. Chakrabarti, Anirban Chakraborti, and Tushar Nandi. Distress propagation on production networks: Coarse-graining and modularity of linkages. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 568:125714, 2021.
- [70] Jian Liu and Tingzhan Liu. Coarse-grained diffusion distance for community structure detection in complex networks. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2010(12):12030, December 2010.
- [71] Shalev Itzkovitz, Reuven Levitt, Nadav Kashtan, Ron Milo, Michael Itzkovitz, and Uri Alon. Coarse-graining and self-dissimilarity of complex networks. *Phys. Rev. E*, 71:016127, Jan 2005.
- [72] P. G. de Gennes. Granular matter: a tentative view. *Rev. Mod. Phys.*, 71:S374–S382, Mar 1999.
- [73] B. Andreotti, Y. Forterre, and O. Pouliquen. *Granular Media: Between Fluid and Solid*. Cambridge University Press, 2013.

- [74] H. Hinrichsen and D.E. Wolf. *The Physics of Granular Media*. Wiley, 2006.
- [75] I. Aranson and L. Tsimring. *Granular Patterns*. OUP Oxford, 2009.
- [76] Osborne Reynolds. On the dilatancy of media composed of rigid particles in contact, with experimental illustrations. *Philosophical Magazine.*, 1885.
- [77] Yixin Cao, Bandan Chakraborty, G. Barker, Anita Mehta, and Yujie Wang. Bridges in three-dimensional granular packings: Experiments and simulations. *EPL (Europhysics Letters)*, 102:24004, 05 2013.
- [78] M. Möbius, Benjamin Lauderdale, Sidney Nagel, and Heinrich Jaeger. Brazil-nut effect: Size separation of granular particles. *Nature*, 414:270–, 11 2001.
- [79] Matthias Schröter, Stephan Ulrich, Jennifer Kreft, Jack B. Swift, and Harry L. Swinney. Mechanisms in the size segregation of a binary granular mixture. *Phys. Rev. E*, 74:011307, Jul 2006.
- [80] Arshad Kudrolli. Size separation in vibrated granular matter. *Reports on Progress in Physics*, 67(3):209, feb 2004.
- [81] Francisco Melo, Paul B. Umbanhowar, and Harry L. Swinney. Hexagons, kinks, and disorder in oscillated granular layers. *Phys. Rev. Lett.*, 75:3838–3841, Nov 1995.
- [82] Yonggun Jun, Kipom Kim, and Hyuk Kyu Pak. Dynamics of spiral patterns in vertically vibrated thin granular layer system. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 281(1):93–98, 2000.
- [83] Paul B. Umbanhowar, Francisco Melo, and Harry L. Swinney. Localized excitations in a vertically vibrated granular layer. *Nature*, 382:793–796, 1996.
- [84] R.A. Bagnold. *The Physics of Blown Sand and Desert Dunes*. Dover Earth Science. Dover Publications, 2005.
- [85] P. M. Reis, R. A. Ingale, and M. D. Shattuck. Crystallization of a quasi-two-dimensional granular fluid. *Phys. Rev. Lett.*, 96:258001, Jun 2006.
- [86] I. S. Aranson, D. Blair, V. A. Kalatsky, G. W. Crabtree, W.-K. Kwok, V. M. Vinokur, and U. Welp. Electrostatically driven granular media: Phase transitions and coarsening. *Physical Review Letters*, 84(15):3306–3309, April 2000.
- [87] Yesim Igci, Arthur IV, Sankaran Sundaresan, Sreekanth Pannala, and Thomas O’Brien. Filtered two-fluid models for fluidized gas-particle suspensions. *AIChE Journal*, 54:1431 – 1448, 06 2008.
- [88] S. Benyahia, H. Arastoopour, T.M. Knowlton, and H. Massah. Simulation of particles and gas flow behavior in the riser section of a circulating fluidized bed using the kinetic theory approach for the particulate phase. *Powder Technology*, 112(1):24–33, 2000.
- [89] M.J.V. Goldschmidt, J.A.M. Kuipers, and W.P.M. van Swaaij. Hydrodynamic modelling of dense gas-fluidised beds using the kinetic theory of granular flow: effect of coefficient of restitution on bed dynamics. *Chemical Engineering Science*, 56(2):571–578, 2001. 16th International Conference on Chemical Reactor Engineering.

- [90] J. Javier Brey, James W. Dufty, Chang Sub Kim, and Andrés Santos. Hydrodynamics for granular flow at low density. *Phys. Rev. E*, 58:4638–4653, Oct 1998.
- [91] Vicente Garzó and James W. Dufty. Hydrodynamics for a granular binary mixture at low density. *Physics of Fluids*, 14(4):1476–1490, 03 2002.
- [92] Jonathan Dawes. Localized pattern formation with a large-scale mode: Slanted snaking. *SIAM J. Applied Dynamical Systems*, 7:186–206, 01 2008.
- [93] John Burke, Arik Yochelis, and Edgar Knobloch. Classification of spatially localized oscillations in periodically forced dissipative systems. *SIAM J. Applied Dynamical Systems*, 7:651–711, 01 2008.
- [94] S. S. Manna and D. V. Khakhar. Internal avalanches in a granular medium. *Phys. Rev. E*, 58:R6935–R6938, Dec 1998.
- [95] Toshiyuki Koyama and Hidehiro Onodera. Modeling of microstructure changes in fept nano-granular thin films using the phase-field method. *Materials transactions*, 44:1523–1528, 08 2003.
- [96] Danielle S. Bassett, Eli T. Owens, Eli T. Owens, Mason A. Porter, M. Lisa Manning, and Karen E. Daniels. Extraction of force-chain network architecture in granular materials using community detection. *Soft matter*, 11 14:2731–44, 2014.
- [97] Lia Papadopoulos, Mason A Porter, Karen E Daniels, and Danielle S Bassett. Network analysis of particles and grains. *Journal of Complex Networks*, 6(4):485–565, 04 2018.
- [98] Markus Brede. Networks—an introduction. mark e. j. newman. (2010, oxford university press.) \$65.38, £35.96 (hardcover), 772 pages. isbn-978-0-19-920665-0. *Artificial Life*, 18:241–242, 2012.
- [99] Jonathan E. Kollmer and Karen E. Daniels. Betweenness centrality as predictor for forces in granular packings. *Soft Matter*, 15:1793–1798, 2019.
- [100] Standford. Introduction to statistical mechanics 6. phase transitions, 2014. [Online; accessed 09-January-2023].
- [101] Minoru Fujimoto. *The Physics of Structural Phase Transitions*. Springer, 1997.
- [102] V. E. Schneider and E. E. Tornau. On the theory of isostructural phase transitions in crystals. *physica status solidi (b)*, 111(2):565–574, 1982.
- [103] math24.net. Van der waals equation, 2023. [Online; accessed 15-December-2023].
- [104] Alfred North Whitehead. *El Concepto Naturaleza*. Editorial Cactus, 2019.
- [105] Ginestra Bianconi. *Multilayer Networks: Structure and Function*. Oxford University Press, 06 2018.
- [106] Fereshteh Asgari, Alexis Sultan, Haoyi Xiong, Vincent Gauthier, and Mounim El Yacoubi. Ct-mapper: Mapping sparse multimodal cellular trajectories using a multilayer transportation network. *Computer Communications*, 95, 04 2016.

- [107] M. E. J. Newman. Modularity and community structure in networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 103(23):8577–8582, June 2006.
- [108] Marta Sarzynska, Elizabeth A. Leicht, Gerardo Chowell, and Mason A. Porter. Null models for community detection in spatially-embedded, temporal networks. *bioRxiv*, 2014.
- [109] T.M. Cover and J.A. Thomas. *Elements of Information Theory*. Wiley, 2012.
- [110] Massimiliano Esposito. Stochastic thermodynamics under coarse graining. *Phys. Rev. E*, 85:041125, Apr 2012.
- [111] Cortázar. *Rayuela*. Bolsillo, 2019.
- [112] Aaron Clauset, M. E. J. Newman, and Christopher Moore. Finding community structure in very large networks. *Phys. Rev. E*, 70:066111, Dec 2004.
- [113] Thomas Mann. *La montaña mágica*. Bolsillo, 2020.
- [114] Anita Liebenau and Nick Wormald. Asymptotic enumeration of digraphs and bipartite graphs by degree sequence. *Random Structures & Algorithms*, 62(2):259–286, 2023.
- [115] Henri Bergson. *Inteligencia*. Interzona, 2016.
- [116] D. Stauffer. Scaling theory of percolation clusters. *Physics Reports*, 54(1):1–74, 1979.
- [117] M. B. Isichenko. Percolation, statistical topography, and transport in random media. *Rev. Mod. Phys.*, 64:961–1043, Oct 1992.
- [118] Abbas Ali Saberi. Recent advances in percolation theory and its applications. *Physics Reports*, 578:1–32, 2015. Recent advances in percolation theory and its applications.
- [119] Ming Li, Run-Ran Liu, Linyuan Lü, Mao-Bin Hu, Shuqi Xu, and Yi-Cheng Zhang. Percolation on complex networks: Theory and application. *Physics Reports*, 907:1–68, 2021. Percolation on complex networks: Theory and application.
- [120] Akash Ghosh, Jaikumar Radhakrishnan, Paul M. Chaikin, Dov Levine, and Shankar Ghosh. Coupled dynamical phase transitions in driven disk packings. *Phys. Rev. Lett.*, 129:188002, Oct 2022.
- [121] Federico Battiston, Enrico Amico, Alain Barrat, Ginestra Bianconi, Guilherme Ferraz de Arruda, Benedetta Franceschiello, Iacopo Iacopini, Sonia Kéfi, Vito Latora, Yamir Moreno, Micah M. Murray, Tiago P. Peixoto, Francesco Vaccarino, and Giovanni Petri. The physics of higher-order interactions in complex systems. *Nature Physics*, 17(10):1093–1098, oct 2021.
- [122] S. Merminod, M. Berhanu, and E. Falcon. Transition from a dissipative to a quasi-elastic system of particles with tunable repulsive interactions. *Europhysics Letters*, 106(4):44005, may 2014.
- [123] Teófilo Cid. *Linea Recta*. DSCNTEXT EDITORES, 2021.

Anexos

Anexo A

Demostraciones

« Mirad la línea recta, ella no es dulce como el puente que une las miradas, no sigue raíces de los árboles, la curva de los cielos, ni el alma vertical de los espejos. »

T. Cid [123]

En este Anexo, se demostrarán dos modelos nulos mediante las herramientas de la mecánica estadística de redes complejas. En primer lugar, se demostrará en A.1 un modelo utilizado ampliamente y con mucho éxito en la obtención de cadenas de fuerza en sistemas granulares. Tras esto, en A.2 se demostrará un modelo que caracteriza una clusterización en comunidades, pero sin pérdida de información, es decir, conociendo igualmente los nodos dentro de las comunidades.

A.1. Demostración Modelo Geográfico

Aquí se mostrará la demostración entrópica del *Modelo Geográfico* utilizado en [96]. Para esto, la matriz de adyacencia a la cual queremos realizar ensambles debe ser una matriz con peso W_{ij} , la cual contenga dos restricciones. Las mismas que se usaron en el modelo demostrado en la sección 4.1, pero esta vez no se separarán los enlaces en dos capas. La primera restricción será que solo pueden existir enlaces entre vecinos, y la segunda, que existe un enlace promedio bien definido. Esto puede funcionar para modelar cualquier problema en el cual solo existan conexiones locales, y donde el promedio se pueda controlar (como es el caso de esta investigación, o el caso de modelamientos que usan el modelo geográfico).

Escribiendo las restricciones:

$$0 = \sum_G P(G) \sum_{i < j} \Theta(W_{ij})(1 - \delta_{ij}) \quad (\text{A.1})$$

$$\tilde{L} = \sum_G P(G) \sum_{i<j} W_{ij} \quad (\text{A.2})$$

Donde \tilde{L} cumple que $\tilde{L} = m \langle w_{ij}^* \rangle$, con m la cantidad de enlaces promedio, y $\langle w_{ij}^* \rangle$ es el promedio de los pesos de los enlaces existentes, es decir, solo considerando cuando $W_{ij} \neq 0$. Luego, con estas dos restricciones se puede escribir la función partición del problema:

$$Z = \sum_G e^{-\Lambda \sum_{i<j} W_{ij} - \Gamma \sum_{i<j} \Theta(W_{ij})(1-\delta_{ij})}$$

$$Z = \prod_{i<j} \sum_{W_{ij}} e^{-\Lambda W_{ij} - \Gamma \Theta(W_{ij})(1-\delta_{ij})}$$

Sumando sobre todos los valores que puede tener la matriz de adyacencia W_{ij} , es decir, desde 0 hasta ∞ , se puede obtener de manera simplificada la función partición que describe el problema:

$$Z = \prod_{i<j} \left(1 + e^{-\Gamma(1-\delta_{ij})} \frac{e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda}} \right) \quad (\text{A.3})$$

Lo que interesa obtener desde la función partición es la probabilidad P_{ij} de que exista un enlace. Para obtenerla, se abordará de manera distinta a lo realizado en secciones anteriores. Primero se obtendrá la probabilidad $\pi_{ij}(w)$ de que exista un enlace de peso $W_{ij} = w$. Luego, a partir de esta se obtendrá P_{ij} , el cual será la suma de las probabilidades $\pi_{ij}(w)$ donde $w > 0$. La probabilidad $\pi_{ij}(w)$ por definición se debe escribir como $\pi_{ij}(w) = \sum_G P(G) \delta(W_{ij} = w)$. Integrando con la delta de Dirac sobre w se puede obtener rápidamente que esta probabilidad debe cumplir que:

$$\begin{aligned} \pi_{ij}(w) &= e^{-\Lambda w - \Gamma \Theta(w)(1-\delta_{ij})} \frac{1}{1 + \frac{e^{-\Gamma(1-\delta_{ij})-\Lambda}}{1-e^{-\Lambda}}} \\ \pi_{ij}(w) &= \frac{e^{-\Lambda w - \Gamma \Theta(w)(1-\delta_{ij})} (1 - e^{-\Lambda})}{1 - e^{-\Lambda} + e^{-\Gamma(1-\delta_{ij})-\Lambda}} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Ya con esta probabilidad obtenida se puede obtener la probabilidad P_{ij} . Para esto basta notar que $P_{ij} = 1 - \pi_{ij}(w=0)$, luego se tiene el valor de la probabilidad que se buscaba:

$$P_{ij} = \frac{e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda} + e^{-\Gamma(1-\delta_{ij})-\Lambda}} e^{-\Gamma(1-\delta_{ij})} \quad (\text{A.5})$$

Escrita en función de los multiplicadores de Lagrange, se deben encontrar estos mediante las restricciones, y así obtener el valor real de P_{ij} . La primera restricción es:

$$0 = -\frac{\partial \log(Z)}{\partial \Gamma} = \sum_{i < j} \frac{e^{-\Gamma(1-\delta_{ij})-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda} + e^{-\Gamma(1-\delta_{ij})-\Lambda}} (1 - \delta_{ij})$$

Para encontrar valores desde esta sumatoria, se puede dividir la suma entre los nodos que son vecinos entre sí, y los que no son vecinos entre sí, obteniendo:

$$0 = \sum_{\text{vecinos}} \frac{e^{-\Gamma(1-\delta_{ij})-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda} + e^{-\Gamma(1-\delta_{ij})-\Lambda}} (1 - \delta_{ij}) + \sum_{\text{no vecinos}} \frac{e^{-\Gamma(1-\delta_{ij})-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda} + e^{-\Gamma(1-\delta_{ij})-\Lambda}} (1 - \delta_{ij})$$

$$0 = \sum_{\text{no vecinos}} \frac{e^{-\Gamma-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda} + e^{-\Gamma-\Lambda}}$$

Para que se cumpla esta restricción, como no depende de i, j cada valor de la sumatoria, debe cada uno de estos ser exactamente igual a 0. Luego se debe cumplir que $e^{-\Lambda-\Gamma} = 0$. Por otra parte, se puede obtener otra relación desarrollando la segunda restricción $\tilde{L} = -\frac{\partial \log(Z)}{\partial \Lambda}$:

$$\tilde{L} = \sum_{i < j} \frac{-e^{-\Lambda} + e^{-\Lambda-\Gamma(1-\delta_{ij})}}{1 - e^{-\Lambda} + e^{-\Lambda-\Gamma(1-\delta_{ij})}} + \frac{e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda}}$$

Al igual que en la anterior, el primer término de la sumatoria, se puede separar en una suma de vecinos y otra de no vecinos utilizando δ_{ij} . El segundo término como es independiente de i, j simplemente se puede separar en una suma independiente.

$$\tilde{L} = \sum_{\text{vecinos}} \frac{-e^{-\Lambda} + e^{-\Lambda-\Gamma(1-\delta_{ij})}}{1 - e^{-\Lambda} + e^{-\Lambda-\Gamma(1-\delta_{ij})}} + \sum_{\text{no vecinos}} \frac{-e^{-\Lambda} + e^{-\Lambda-\Gamma(1-\delta_{ij})}}{1 - e^{-\Lambda} + e^{-\Lambda-\Gamma(1-\delta_{ij})}} + \sum_{i < j} \frac{e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda}}$$

$$\tilde{L} = \sum_{\text{vecinos}} \frac{-e^{-\Lambda} + e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda} + e^{-\Lambda}} + \sum_{\text{no vecinos}} \frac{-e^{-\Lambda} + e^{-\Lambda-\Gamma}}{1 - e^{-\Lambda} + e^{-\Lambda-\Gamma}} + \sum_{i < j} \frac{e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda}}$$

La suma de *vecinos* es 0, debido a que el numerador es siempre 0. Por otra parte, se puede separar en dos sumas el término de la suma de *no vecinos*, y notar que uno de estos, ya fue detectado en la restricción anterior como 0:

$$\tilde{L} = \sum_{\text{no vecinos}} \frac{e^{-\Lambda-\Gamma}}{1 - e^{-\Lambda} + e^{-\Lambda-\Gamma}} + \sum_{\text{no vecinos}} \frac{-e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda} + e^{-\Lambda-\Gamma}} + \sum_{i < j} \frac{e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda}}$$

$$\tilde{L} = \sum_{\text{no vecinos}} \frac{-e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda}} + \sum_{i < j} \frac{e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda}}$$

Notando que es el mismo término, pero el primero, sumando negativamente sobre todos los pares de nodos que no son vecinos y, el segundo, sumando positivamente sobre todo par de nodos, el resultado es la suma solamente sobre los vecinos del término común:

$$\tilde{L} = \sum_{\text{vecinos}} \frac{e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda}}$$

Como la cantidad de enlaces es m , la suma sobre vecinos debe ser $\tilde{L} = m \frac{e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda}}$. Luego, despejando desde esta ecuación el término que contiene al multiplicador de Lagrange $e^{-\Lambda}$, se tiene el valor del multiplicador asociado al promedio de enlaces:

$$e^{-\Lambda} = \frac{\tilde{L}}{1 + \frac{\tilde{L}}{m}} \quad (\text{A.6})$$

Solo falta obtener el valor del multiplicador asociado a que los enlaces solo sean entre vecinos. Para eso se puede usar el valor obtenido $e^{-\Gamma - \Lambda = 0}$ y utilizar el valor recién encontrado de $e^{-\Lambda}$ para concluir que entonces $\Gamma \gg 1$. Esto implica que $e^{-\Gamma(1 - \delta_{ij})} = \delta_{ij}$. Luego se puede escribir finalmente el valor de P_{ij}

$$P_{ij} = \frac{\frac{\tilde{L}}{m} \delta_{ij}}{1 + \delta_{ij} \frac{\tilde{L}}{m}}$$

$$P_{ij} = \frac{\langle w_{ij}^* \rangle}{1 + \langle w_{ij}^* \rangle} \delta_{ij} \quad (\text{A.7})$$

El cual es el mismo modelo usado en [96], basta cambiar $\langle w_{ij}^* \rangle \rightarrow \langle f_{ij} \rangle$.

Cabe destacar que ese modelo se construye desde una matriz de adyacencia que considera todos los granos conectados con sus vecinos. A la hora de detectar comunidades considerando esa matriz de adyacencia, se encuentran comunidades similares a las obtenidas con el otro modelo nulo demostrado en esta tesis (el cual solo considera enlaces cuando ambos granos están ordenados).

A.2. Modelo Nulo de Comunidades sin pérdida de información

Con el objetivo de analizar la entropía de sistemas mesoscópicos, se intentó de diversas formas obtener alguna aproximación a esta. Cronológicamente, esta fue el primer intento de representar vía ensambles un sistema mesoscópico. La idea es la siguiente: una red tras un coarse grained, es un conjunto de M comunidades formadas a través de N nodos, por las cuales salen hacia otras comunidades cierta cantidad de enlaces, y poseen dentro de sí mismas una cierta cantidad de enlaces. Luego esto se puede modelar con esas dos restricciones:

1) Enlaces que salen de cada comunidad q

$$k_q^{out} = \sum_G P(G) \sum_{i<j} A_{ij} \delta(q_i = q) \delta(q_j \neq q) \quad (\text{A.8})$$

2) Enlaces dentro de cada comunidad q

$$k_q^{in} = \sum_G P(G) \sum_{i<j} A_{ij} \delta(q_i = q) \delta(q_j = q) \quad (\text{A.9})$$

Donde q_i es la comunidad a la cual pertenece el nodo i . Luego, con estas dos restricciones se puede escribir la función partición, la cual contendrá M multiplicadores de Lagrange λ_q asociados a la restricción de la cantidad de enlaces que salen de cada comunidad, y otros M multiplicadores γ_q asociados a la cantidad de enlaces que contiene dentro de sí misma cada comunidad:

$$Z = \sum_{A_{ij}} e^{-\sum_q \lambda_q \sum_{i<j} A_{ij} \delta(q_i=q) \delta(q_j \neq q) - \sum_q \gamma_q \sum_{i<j} A_{ij} \delta(q_i=q) \delta(q_j=q)}$$

Notando que:

$$\sum_q \lambda_q \sum_{i<j} A_{ij} \delta(q_i = q) \delta(q_j \neq q) = \sum_{i<j} A_{ij} (\lambda_{q_i} + \lambda_{q_j}) \delta(q_i \neq q_j)$$

y

$$\sum_q \gamma_q \sum_{i<j} A_{ij} \delta(q_i = q) \delta(q_j = q) = \sum_{i<j} A_{ij} (\gamma_{q_i} + \gamma_{q_j}) \delta(q_i = q_j)$$

Se puede reescribir la función partición como:

$$Z = \sum_{A_{ij}} e^{-\sum_{i<j} A_{ij} (\lambda_{q_i} + \lambda_{q_j}) \delta(q_i \neq q_j) - \sum_{i<j} A_{ij} (\gamma_{q_i} + \gamma_{q_j}) \delta(q_i = q_j)}$$

$$Z = \prod_{i < j} \sum_{A_{ij}} e^{-(\lambda_{q_i} + \lambda_{q_j})\delta(q_i \neq q_j)A_{ij} - (\gamma_{q_i} + \gamma_{q_j})\delta(q_i = q_j)A_{ij}}$$

Sumando ahora sobre todos los valores posibles de A_{ij} , donde solo se tomo 0 o 1, es decir, existe o no enlace entre los nodos i, j , se obtiene la función partición en función de los multiplicadores de Lagrange:

$$Z = \prod_{i < j} (1 + e^{-(\lambda_{q_i} + \lambda_{q_j})\delta(q_i \neq q_j) - (\gamma_{q_i} + \gamma_{q_j})\delta(q_i = q_j)}) \quad (\text{A.10})$$

Observando esta función partición se puede notar que existirán dos probabilidades de enlaces distintas. Una que es entre miembros de la misma comunidad, y otra que es entre miembros de distintas comunidades. Calculando primero entre miembros de la misma comunidad (aquí se cumple que $q_i = q_j = q$ luego se suma dos veces el mismo γ):

$$P_{ij}^{in} = \sum_G P(G)\delta(A_{ij} = 1)\delta(q_j = q_i = q)$$

$$P_{ij}^{in} = \frac{e^{-2\gamma_q}}{1 + e^{-2\gamma_q}} \quad (\text{A.11})$$

En cambio, en el caso de miembros de distintas comunidades:

$$P_{ij}^{out} = \sum_G P(G)\delta(A_{ij} = 1)\delta(q_j \neq q_i)$$

$$P_{ij}^{out} = \frac{e^{-\lambda_{q_i} - \lambda_{q_j}}}{1 + e^{-\lambda_{q_i} - \lambda_{q_j}}} \quad (\text{A.12})$$

Para encontrar los multiplicadores se deben aplicar de forma independiente los dos conjuntos de restricciones:

$$k_q^{in} = \frac{-\partial \log(Z)}{\partial \gamma_q} \quad \wedge \quad k_q^{out} = \frac{-\partial \log(Z)}{\partial \lambda_q}$$

Dando respectivamente:

$$k_q^{in} = \sum_{i < j / i, j \in q} 2 \frac{e^{-2\gamma_q}}{1 + e^{-2\gamma_q}} \quad \wedge \quad k_q^{out} = \sum_{i < j / i \in q, j \notin q} \frac{e^{-\lambda_{q_i} - \lambda_{q_j}}}{1 + e^{-\lambda_{q_i} - \lambda_{q_j}}} \quad (\text{A.13})$$

Desarrollando primero el término k_q^{in} para así obtener luego la probabilidad P_{ij}^{in} , se puede sumar sobre todos los pares de nodos que pertenecen a la comunidad q , los cuales si se toma

que en cada comunidad existen N_q nodos, son $\frac{(N_q)(N_q-1)}{2}$. Como cada término de la suma es igual, se puede encontrar que la cantidad k_q^{in} es:

$$k_q^{in} = 2 \frac{(N_q)(N_q-1)}{2} \frac{e^{-2\gamma_q}}{1+e^{-2\gamma_q}}$$

Colocando esto en la ecuación A.11 se encuentra directamente la probabilidad de enlace entre dos nodos de una misma comunidad.

$$P_{ij}^{in} = \frac{k_q^{in}}{(N_q)(N_q-1)} = P^{in} \quad (\text{A.14})$$

Continuando con la probabilidad de enlace entre dos nodos de distintas comunidades, se debe desarrollar la restricción al igual que en el caso anterior:

$$k_q^{out} = \sum_{i < j / i \in q, j \notin q} \frac{e^{-\lambda_{q_i} - \lambda_{q_j}}}{1 + e^{-\lambda_{q_i} - \lambda_{q_j}}}$$

Sumando sobre i , se puede notar que por cada comunidad q existirán N_q sumas iguales, es decir, la suma se puede simplificar por:

$$k_q^{out} = \sum_{j \notin q} N_q \frac{e^{-\lambda_q - \lambda_{q_j}}}{1 + e^{-\lambda_q - \lambda_{q_j}}}$$

Ahora se puede decir lo mismo para el caso de los nodos que no pertenecen a la comunidad q , quedando finalmente que el total de enlaces que salen de la comunidad q cumple:

$$k_q^{out} = \sum_{q'} N_q N_{q'} \frac{e^{-\lambda_q - \lambda_{q'}}}{1 + e^{-\lambda_q - \lambda_{q'}}}$$

Para seguir desarrollando este resultado, hay que notar que como k_q^{out} son números grandes, pero del orden de $N_q N_{q'}$. Luego se puede aproximar a primer orden la suma a:

$$k_q^{out} = \sum_{q'} N_q N_{q'} e^{-\lambda_q - \lambda_{q'}}$$

Donde si se suma sobre todas las comunidades q :

$$\langle k_q^{out} \rangle N = \left(\sum_q N_q e^{-\lambda_q} \right)^2$$

Logrando encontrar $e^\lambda = e^{-\lambda_q} = \frac{k_q^{out}/N_q}{\sqrt{\langle k_q^{out} \rangle N}}$, y así obteniendo que la probabilidad de enlace entre nodos de distintas comunidades será:

$$P_{ij}^{out} = \frac{k_q^{out} k_{q'}^{out}}{N_q N_{q'} \langle k_q^{out} \rangle N} = P_{qq'} \quad (\text{A.15})$$

Ya con estas dos probabilidades, se puede encontrar la entropía del sistema:

$$S = - \sum_{i < j} p_{ij} \log(p_{ij}) + (1 - p_{ij}) \log(1 - p_{ij})$$

La cual se puede separar entre enlaces dentro de comunidades y fuera de ellas:

$$S = - \sum_{i < j} \sum_{i, j \in q} p_{ij}^{in} \log(p_{ij}^{in}) + (1 - p_{ij}^{in}) \log(1 - p_{ij}^{in}) - \sum_{i < j} \sum_{i \in q, j \notin q} p_{ij}^{out} \log(p_{ij}^{out}) + (1 - p_{ij}^{out}) \log(1 - p_{ij}^{out})$$

Considerando que entre nodos de una misma comunidad existen $\frac{N_q(N_q-1)}{2}$ valores de la primera suma, los cuales son iguales, y lo mismo, pero $N_q N_{q'}$ en el caso de la suma sobre enlaces entre distintas comunidades, esto queda:

$$S = - \sum_q \frac{N_q(N_q-1)}{2} (P^{in} \log(P^{in}) + (1 - P^{in}) \log(1 - P^{in})) - \sum_{q < q'} N_q N_{q'} P_{qq'} \log(P_{qq'}) + (1 - P_{qq'}) \log(1 - P_{qq'})$$

Desarrollándolo, el resultado es exactamente:

$$\begin{aligned} S = & \frac{1}{2} \sum_q N_q(N_q-1) \log(N_q(N_q-1)) - (N_q(N_q-1) - k_q^{in}) \log(N_q(N_q-1) - k_q^{in}) - k_q^{in} \log(k_q^{in}) \\ & + \sum_{q < q'} N_q N_{q'} \log(N_q N_{q'}) - (N_q N_{q'} - \frac{k_q^{out} k_{q'}^{out}}{\langle k \rangle N}) \log(N_q N_{q'} - \frac{k_q^{out} k_{q'}^{out}}{\langle k \rangle N}) - (\frac{k_q^{out} k_{q'}^{out}}{\langle k \rangle N}) \log(\frac{k_q^{out} k_{q'}^{out}}{\langle k \rangle N}) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Lo que puede ser aproximando vía stirling, quedando de una forma más sencilla como:

$$S = \frac{1}{2} \prod_q \binom{N_q(N_q-1)}{k_q^{in}} \prod_{q < q'} \binom{N_q N_{q'}}{\frac{k_q^{out} k_{q'}^{out}}{\langle k \rangle N}} \quad (\text{A.17})$$

Llegado a este resultado, se intentó observar si la entropía efectivamente era mayor que la entropía del sistema granular, no lográndolo. Las razones son las mismas consideradas en

la sección 4.4, pero además, esto que pareciera abordar al sistema de forma coarse grained, realmente no lo hace. En este modelo, no hay ninguna pérdida de información, por lo que no aborda ningún degeneramiento del sistema mesoscópico, es más, se necesita saber la matriz A_{ij} , la cual en un sistema simplificado por coarse grained no existe, sino que solamente se sabe que dos comunidades están o no enlazadas. Luego, esta forma de abordar el problema no es una simplificación vía coarse grained, sino que modela alguna situación especial entre comunidades formadas en alguna red random.

Anexo B

Publicación

En este Anexo, se adjuntará un artículo enviado durante esta tesis a la revista *Physical Review E*. Este es una síntesis de todo el trabajo de construcción de redes realizado, e incluye la demostración del Modelo Geográfico Modificado el cual fue utilizado para la obtención de comunidades.

B.1. Statistical evolution of a granular cluster ensemble at a liquid-solid-like phase transition

Enrique Navarro y Claudio Falcón

We report on the construction of a granular network of particles to study the formation, evolution and statistical properties of clusters of particles developing at the vicinity of a liquid-solid-like phase transition within a vertically vibrated quasi two-dimensional granular system. Using the data of particle positions and local order from Castillo *et al* [Phys. Rev. Lett. 109, 095701 (2012)], we extract granular clusters taken as communities of the granular network via modularity optimization. Each one of these communities is a patch of particles with a very well defined local orientational order embedded within an array of other patches forming a complex cluster network. The distribution of cluster sizes and life-spans for the cluster network depend on the distance to the liquid-solid-like phase transition of the quasi two-dimensional granular system. Specifically, the cluster size distribution displays a scale-invariant behavior for at least a decade in cluster sizes, while cluster lifespans grows monotonically with each cluster size. We believe this systematic community analysis for clustering in granular systems can serve to study and understand the spatio-temporal evolution of mesoscale structures in systems displaying out-of-equilibrium phase transitions.

Statistics of a granular cluster ensemble at a liquid-solid-like phase transition

Enrique Navarro* and Claudio Falcón†

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas,
Universidad de Chile, Casilla 487-3, Santiago, Chile*

(Dated: October 25, 2023)

We report on the construction of a granular network of particles to study the formation, evolution and statistical properties of clusters of particles developing at the vicinity of a liquid-solid-like phase transition within a vertically vibrated quasi two-dimensional granular system. Using the data of particle positions and local order from Castillo *et al* [Phys. Rev. Lett. **109**, 095701 (2012)], we extract granular clusters taken as communities of the granular network via modularity optimization. Each one of these communities is a patch of particles with a very well defined local orientational order embedded within an array of other patches forming a complex cluster network. The distribution of cluster sizes and life-spans for the cluster network depend on the distance to the liquid-solid-like phase transition of the quasi two-dimensional granular system. Specifically, the cluster size distribution displays a scale-invariant behavior for at least a decade in cluster sizes, while cluster lifespans grows monotonically with each cluster size. We believe this systematic community analysis for clustering in granular systems can serve to study and understand the spatio-temporal evolution of mesoscale structures in systems displaying out-of-equilibrium phase transitions.

I. INTRODUCTION

Dry granular matter, *i.e.* a large collection of macroscopic particles interacting via dissipative collisions, can be driven into different phases (such as solid, liquid and gas-like ones) which depend on the energy injection-dissipation balance occurring within the system [1–4]. These out-of-equilibrium equilibrium phases display interesting transitions, which have been studied using very well-known theoretical tools relying on symmetry, dimensionality and conservation arguments [5–7]. These arguments allow a generic and universal way to characterize, in particular, the granular system’s macroscopic evolution and properties usually linked to the large scale, slow modes that dominate the dynamics of the system. In this regard, the locality of interactions between grains are smeared out on the large scale dynamics. Thus, the local granular information (such as local force fluctuations and/or particle agglomerations) is lost within this modeling. Nevertheless, this local information is of paramount importance for the mechanical stability of granular matter when force chains are present [2, 8–10], as well as for the description of defects in vibrated granular matter [11–14], specially in the case of structured granular systems (such as the case of nonisometric grains [15–20]).

Recently, network science methodologies and techniques have been implemented in the study of granular systems [21–29] in order to understand the effect and importance of the local information (encoded into a granular network of forces, positions or bond orientational order) on the overall dynamics of the system. Quasi-two dimensional granular systems have been the main subject of study in this approach due to the direct accessibility

to the information of each particle (such as position, velocity and force). It must be noticed that this feature has already been exploited extensively to track out-of-equilibrium two-dimensional phase transitions [30–36]. From the local information, different types of networks can be constructed, defined solely by the definition of nodes and their connections. In this paradigm, encoding the complex relations of the granular system’s particles in a rather simple networks can be extremely useful in the study of the granular system’s static and/or dynamical properties, particularly the way it creates mesoscopic structures such as force chains [37, 38] or clusters [39, 40].

In this work, we study the formation, evolution and statistics of clusters of particles at the vicinity of a liquid-solid-like phase transition via community detection by optimizing a quality function called modularity [41]. Experimental data of particle orientational and spatial order taken from Ref. [33] is used to construct a network which encodes within its links the local orientational order of the granular system, enabling the use of the tools of network science within the framework of non-equilibrium phase transitions. To wit, we relate clusters of ordered particles of the non-equilibrium granular system to hard partitions of its respective network, which are computed using a null model for granular matter, validated via an entropic argument.

II. BOND-ORIENTATIONAL NETWORK

A set of bond-orientational networks were constructed from data sets used in Ref. [33], where $\mathcal{N} = 11504$ stainless steel spherical particles of diameter $d = 1$ mm are confined in a box of lateral dimensions $100d \times 100d$ and a vertical dimension of $1.94d$. The box is vibrated vertically with in a sinusoidal acceleration $a(t) = \Gamma g \cos(\omega t)$, where g is gravity, $1 < \Gamma < 6$ and $\omega = 200\pi$ rad/s. 3000 images of the in-plane motion of the particle ensemble

* enrique.navarro@ug.uchile.cl

† cfalcon@uchile.cl

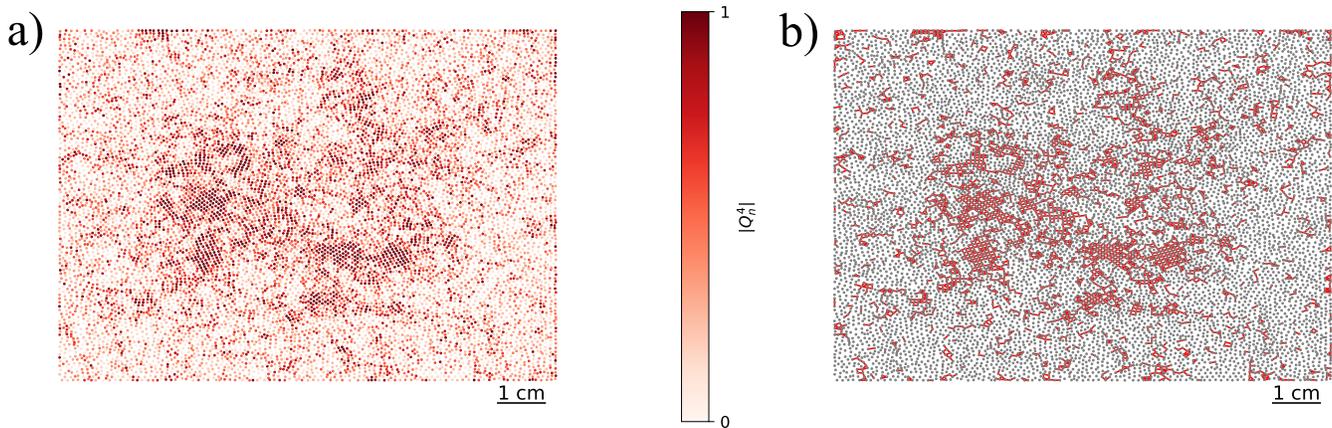


FIG. 1. Image of steel particles (1 mm in diameter) used to construct our clusters for $\Gamma = 4.95$. a) $|Q_n^4|$ of each particle. Color bar shows available values of $|Q_n^4|$. b) Links between particles used to construct the order network (in red) following Eq. (2).

were acquired at 10 fps and used to detect them with sub-pixel accuracy using a particle tracking algorithm. From each image, the position of each particle in the horizontal plane \vec{r}_n and the fourfold bond-orientational order parameter per particle

$$Q_n^4 = \frac{1}{\mathcal{M}_n} \sum_{m \in \mathcal{M}_n} e^{i4\alpha_{nm}} \quad (1)$$

were calculated. Here \mathcal{M}_n is set of nearest neighbors of particle n computed via a Voronoi partition and α_{nm} is the angle between the neighbor m of particle n and a given axis. From this point on, we will set $Q_n^4 \equiv Q_n$, as we will only consider four-fold orientational order.

For a given Γ , a (simple) network represented by an adjacency matrix

$$A_{nm}^{(p)} = \begin{cases} 1 & \text{if } |Q_n|, |Q_m| \geq \langle |Q| \rangle \text{ and } m \in \mathcal{M}_n, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (2)$$

is computed for each image using $\langle |Q| \rangle$ as a threshold for the solid-liquid transition [33]. The results presented here display no change when $\langle |Q| \rangle$ is varied within $\pm 10\%$. Non-directionality for the network connections is enforced by the symmetric nature of $A_{nm}^{(p)}$. Tadpoles are directly removed from the adjacency matrix as no self-links are available ($A_{nn} \equiv 0$ for all n) [42].

The binary adjacency matrix computed above encodes the connections (edges) between particles (nodes) n and m with a large local orientational order. In Fig 1a) a snapshot of particles at a given Γ is presented displaying the local value of $|Q_4|$ as a color map over each particle, showing that they arrange themselves in cluster of similar $|Q_4|$ values. Using Eq.(2), the connections given by the adjacency matrix are shown with red lines between particles in Fig. 1b) We relate the particle clusters displayed in Fig 1a) via the array of connections displayed in Fig 1b) to the network's communities [42], which are

indivisible subgroups within the network (what is called a hard partition). In a similar fashion one can encode the strength of the connections between nodes via a weighted adjacency matrix $W_{nm}^{(p)}$ between nodes n and m , which in our case can be readily defined as $W_{nm}^{(p)} = |Q_n||Q_m|A_{nm}^{(p)}$.

In our work, the clusters are found by maximizing a certain quality function, the network's *modularity* \mathcal{Q} ,

$$\mathcal{Q} = \sum_{n,n \in \mathcal{N}} (W_{nm}^{(p)} - \gamma P_{nm}) \delta_{C_n, C_m} \quad (3)$$

where node n resides in community C_n and node m resides in community C_m , γ is called the resolution parameter, P_{nm} is a matrix term stemming from a null model [43] for the edge distribution within the network, and $\delta_{x,y}$ is Kronecker's delta function. Modularity has been proposed as a direct way to measure and quantify the community structure within large networks [41], where communities (or modules) are nodes that have a larger amount of non-zero connections among themselves than with the rest of the network's nodes [44]. One can understand γ as the ratio between the spatial densities of two communities in an optimal hard partition following the null model selection. When $\gamma < 1$ the hard partition tends to favor the selection of larger communities rather than smaller ones, and vice versa [43]. We have set $\gamma=1$ as we try to find the cluster dynamics at the solid-liquid-like transition where the system tends to agglomerate into clusters with a large span in scales (ideally, in a scale invariant way).

We have tested 3 different null models to track the structure of particle clusters: the Newman-Girvan null model [45], the geographic null model [28] and a modification of the former one, adapted to the observed data. The Newman-Girvan null model, which has been extensively used in community detection [43] is based on edges which are placed at random on each node. The randomness of this edge configuration is quantified by the degree k_n of each of the network's nodes (*i.e.* the number of

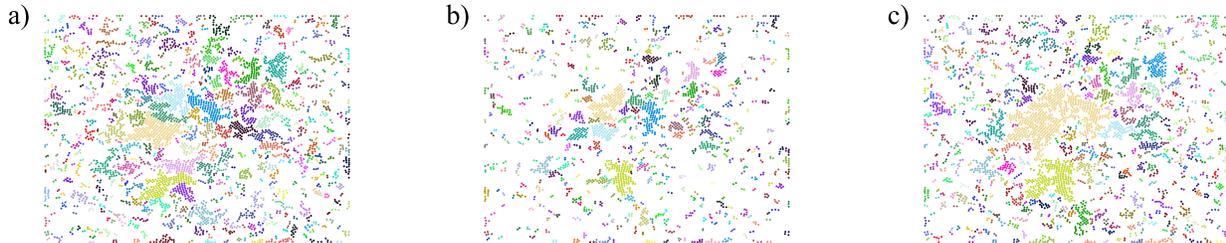


FIG. 2. Examples of communities found from optimizing \mathcal{Q} using (a) the Newman-Girvan, (b) the geographic, and (c) our modified null model for $\gamma = 1$ and $\Gamma = 4.95$. Patches of particles with the same color represent communities. Particles with no connections (edges) as well as singleton clusters are not shown as they do not contribute to the adjacency matrix.

edges connecting it) [42]. To wit, $P_{nm} = k_n k_m / \kappa$ where $\kappa = 2 \sum_n k_n = 2\mathcal{N}\langle k \rangle$ is the total number of edges of the network and $\langle k \rangle$ is the average number of edges per node on the network. For granular matter, the hypothesis of random connections for each and every node does not correspond to the reality of the local granular network connectivity. To correct this hypothesis, Daniels and co-workers [28] proposed a geographic null model, where nodes represent particles and edges represent, for instance, forces between them, which are encoded into $P_{nm} = \langle f \rangle A_{nm}^{(p)}$ with $\langle f \rangle$ the mean inter-particle force. This null model displays communities which follow the local force chains of the granular material.

These two null models display very different community structures when we maximize \mathcal{Q} for a given Γ and $\gamma = 1$, as shown in Fig. 2. Here only connected particles are depicted, which contribute to non-zero terms to the adjacency matrix. Using the Newman-Girvan null model, (cf. Fig. 2a)) the cluster array found from the \mathcal{Q} optimization displays clusters with sizes that are exponentially distributed with several inter-cluster connections, much more than the ones found using the geographic null model (cf. Fig. 2b)). A particular characteristic of the cluster array arising from the use of the geographic model is the appearance of single particle clusters within clusters of 4 to 10 particles, which develop as a consequence of the nature of a model constructed to follow force chains in compacted granular matter [28]. Following this feature, we propose a modified model to take into account the quality of the ordering between neighboring particles. We propose the null model $P_{nm} = \beta \langle |Q| \rangle^2 A_{nm}^{(p)} / 2$ following the geographic model approach, where β is the fraction of ordered particles within the system (see the Appendix for an entropic justification of this null model). To find algorithmically these communities we optimize the community partition by maximizing \mathcal{Q} using a local greedy maximization algorithm [46, 47] in such a way that the total edge weight within the communities is as large as possible with respect to a chosen null model [43]. The optimally computed community partition is then recomputed a number

of times (chosen heuristically [48]) in order to assure a certain convergence as the maximization process is NP-hard [49]. In our maximization process we have repeated the calculation at least 20 times per images by permuting the nodes, finding the same clusters.

III. CLUSTER NETWORK

After the above optimization process, we find a set of communities (clusters) C_α of particles which are con-

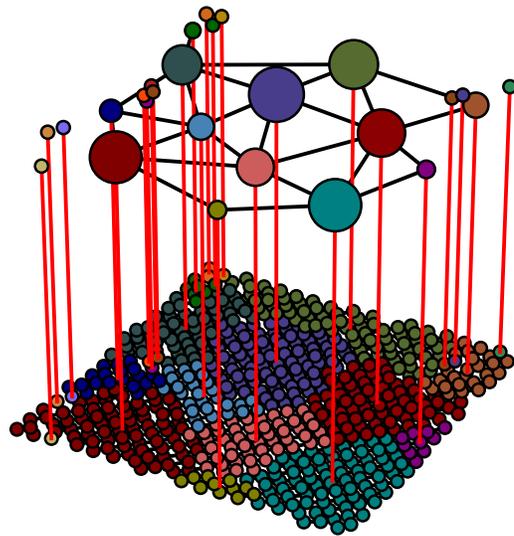


FIG. 3. A given cluster of particles (in the bottom plane) is represented by a cluster node (in the upper plane) for $\Gamma = 4.83$. The red lines show the correspondence between the two networks. The black lines (in the upper plane) show the edges of the cluster network which represent the amount of particles at the edges between particle clusters (in the bottom plane).

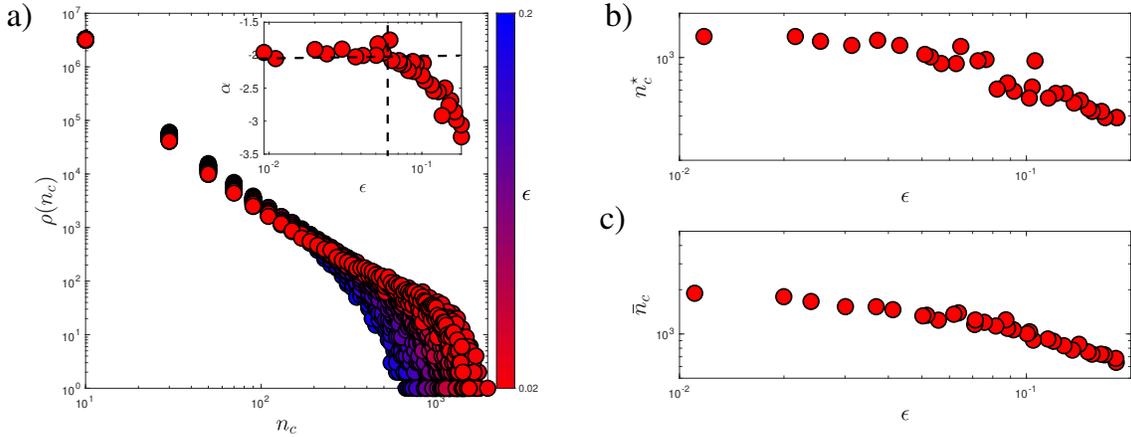


FIG. 4. a) Distribution of cluster sizes $\rho(n_c)$ vs n_c for $0.02 < \epsilon < 0.2$. Inset: Best fit power-law exponent α as a function of ϵ for $N_c \in \{50, 500\}$. Horizontal dashed line shows the limiting value of α as a function of ϵ . Vertical dashed line shows the largest value of ϵ from which α saturates. Color bar shows values of ϵ . b) Cluster cut-off n_c^* as a function of ϵ . c) the Largest cluster distance \bar{n}_c as a function of ϵ .

nected by intra-communal edges ($A_{nm}^{(p)}$ for $n, m \in C_\alpha$). These clusters are also connected between them via inter-communal edges ($A_{nm}^{(p)}$ for $n \in C_\alpha, m \in C_\beta$ and $\alpha \neq \beta$) thus forming a new coarse-grained network. We construct a new adjacency matrix for the (much smaller) cluster network

$$A_{\alpha\beta}^{(C)} = \begin{cases} 1 & \text{if } A_{nm}^{(p)} = 1 \text{ for any } n \in C_\alpha, m \in C_\beta, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (4)$$

which is used to describe the cluster evolution as a function of Γ near the solid-liquid transition occurring at $\Gamma_c = 5.09 \pm 0.07$ [33]. This means that the inter-communal edge between two clusters is nonzero if there is at least one particle shared at the edges of these clusters. A representation of this clusterisation process is shown in Fig. 3 using a small region of an image at $\Gamma = 4.95$. The detected clusters of particles, represented by large nodes with sizes scaling with the number of particles per cluster, display inter-cluster connections (black lines) which represents that there are particles at the edges between clusters. As reported by Castillo [33], the granular system displays an increasing global orientational order as $\langle |Q| \rangle$ grows linearly with $\Gamma < \Gamma_c$. As this occurs, particles arrange themselves into clusters with a larger and larger number of particles that adjoin other clusters via shared particles at their edges. Using the normalized acceleration $0.02 < \epsilon = (\Gamma_c - \Gamma)/\Gamma_c < 0.2$, we compute the distribution of sizes n_c , and lifespan τ_c of the clusters from these network sets as a function of ϵ .

A. Size and lifespan properties of the cluster network

The distribution of cluster sizes $\rho(n_c)$ using our modified null model is shown in Fig. 4 for different values

of ϵ . It displays a power-law behavior for $\rho(n_c)$ as a function of n_c , $\rho(n_c) \sim n_c^\alpha$ for at least a decade in cluster sizes between 20 to 200 particles per cluster. The best fit values for α within the above range are depicted in Fig. 4 a) (inset), showing a limiting behavior for low ϵ . This power law behavior saturates displaying a cut-off for cluster sizes larger than a given value $n_c^*(\epsilon)$ which is larger and larger as we approach the liquid-solid-like transition. Using a simple exponential correction $\rho(n_c) \sim n_c^\alpha \times \exp(-n_c/n_c^*)$, we compute $n_c^* = n_c^*(\epsilon)$ which is displayed in Fig. 4 b). Similarly, one can compute the largest cluster distance found for each value of ϵ , $\bar{n}_c = \langle n_c^2 \rangle$ which is shown in Fig. 4 c). As in the case of n_c^* , \bar{n}_c decreases with ϵ . One can probe a power-law behavior for both n_c^* and \bar{n}_c in ϵ in the range where α converges towards -2.0, as it is depicted in Fig. 4 a) (inset). Within this range, $n_c^* \sim \epsilon^{\zeta^*}$ with $\zeta^* = 0.23 + 0.05$ and $\bar{n}_c \sim \epsilon^{\bar{\zeta}}$ with $\bar{\zeta} = 0.21 + 0.05$. One might ascribe the above power-law behavior for cluster size distribution to percolation-related problems [50–53] as it displays the predicted exponent for our cluster distribution. Recently, a couple of different second-order phase transitions (one of activity and one of orientational order) have been found to appear in a system of two-dimensional sheared granular discs at the same critical value of the control parameter [35], which might be the case of the data from Ref. [33]. We have checked that for our cluster network, this is not the case, as neither n_c^* nor \bar{n}_c display the critical behavior expected in percolation-related problems as a function of ϵ within the experimental range of the present data.

Using these cluster network sets, we track the temporal cluster evolution for a given ϵ to compute the average lifespan of clusters of size n_c . The way we track the cluster temporal evolution is depicted in Fig. 5. The process starts by tracking the cluster networks within

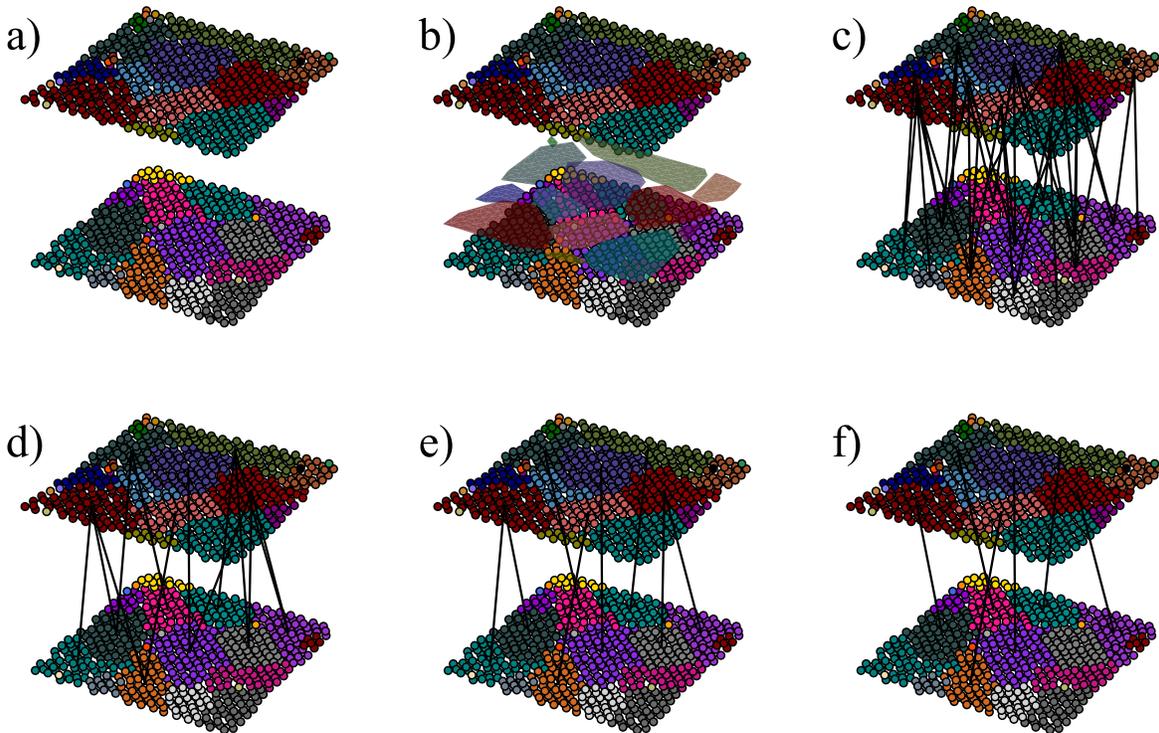


FIG. 5. Temporal cluster evolution procedure for two consecutive images. (a) Cluster network detection for both images. (b) Area projection of one cluster network onto the other. (c) Link creation between clusters. (d) Link trimming by weight. (e) Backward link trimming. (f) Forward link trimming.

two consecutive images j and $j + 1$ (Fig. 5a)). The area of each cluster from image j is projected onto image $j + 1$ (Fig. 5b)) and a link is created between a cluster C_n^j of image j and a cluster C_m^{j+1} of image $j + 1$ if nodes from C_m^{j+1} correspond to the projected area of C_n^j (Fig. 5c)). This link has a directed weight $p_{nm}^{(f)}$ equal to the ratio of the number of nodes of C_n^j and C_m^{j+1} . In the same fashion there is a directed weight $p_{mn}^{(b)}$ equal to the ratio of the number of nodes of C_m^{j+1} and C_n^j . We keep only the links with $(p_{nm}^{(b)}, p_{nm}^{(f)}) > 0.5$, which means that both clusters share at least half of the nodes (Fig. 5d)). As C_m^{j+1} can be linked with more than one cluster C_n^j , we restrict the linkage between clusters by keeping the one with the largest $p_{mn}^{(b)}$ (Fig. 5e)). The same procedure is done then forwards in time with $p_{nm}^{(f)}$, to link only one cluster C_n^j to only cluster C_m^{j+1} (Fig. 5f)). Following this link path for each cluster from image $j = 1$ to $j = \mathcal{N}$ we can track its lifespan as the number of links it holds until the cluster is no longer traceable.

From the above procedure, the average lifespan $\tau_c = \tau(n_c)$ as a function of n_c is shown in Fig. 6 using the experimental sample frequency of 10 Hz. Clusters with sizes in $(n_c - \Delta n_c, n_c + \Delta n_c)$ are binned together using $\Delta n_c = 20$ which is the average size of the small clusters found around the edges of the images (see Fig. 1). For

a fixed ϵ , τ_c grows monotonically with $n_c \in \{50, 500\}$ as a power law with exponent $\eta = 0.24 \pm 0.05$ as a best fit slope. Clusters with larger n_c are sustained with a larger τ_c , displaying a large dispersion as n_c is of the order of 1000 particles for all values of ϵ as shown in Fig. 6a). Lifespan fluctuations $\sigma(\tau_c)$ are depicted in Fig. 6b) as a function of n_c , which grow (on average) monotonically with τ_c . A power law can be fitted as $\sigma(\tau_c) \sim \tau_c^\mu$, with $\mu = 0.55 \pm 0.05$ as the best fit slope. This shows that as clusters grow in size and thus τ_c increases, $\sigma(\tau_c)/\tau_c \sim \tau_c^{-1/2}$ decreases, which means that τ_c can be used a proper time scale to describe the slow dynamics of granular cluster evolution. It is important to notice that this findings are also observed when $(p_{nm}^{(f)}, p_{nm}^{(b)})$ are reduced from 0.5 to 0.1, albeit larger larger fluctuations in τ_c are found.

IV. CONCLUSIONS

The results presented above display a community detection scheme via a \mathcal{Q} optimization which allows the computation of a cluster ensemble of ordered particles in a quasi-two dimensional vibrated granular system close to a solid-to-liquid-like phase transition. These clusters

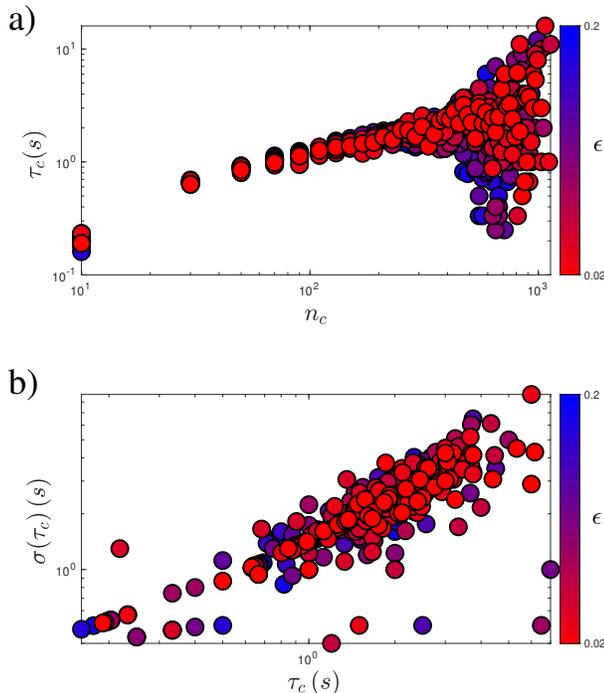


FIG. 6. a) Average lifespan τ_c as a function of N_c as a function ϵ . b) Standard deviation of the average lifespan $\sigma(\tau_c)$ vs the average lifespan τ_c .

are constructed as hard partitions using an entropic null model in \mathcal{Q} which takes into account both the bond-orientational and the spatial order of the granular system. From the computed cluster ensemble as we increase the normalized acceleration $\epsilon = (\Gamma_c - \Gamma)/\Gamma_c$, we track the cluster size distribution $\rho(n_c)$ and the cluster mean lifespan τ_c . The cluster size distribution displays a power-law dependence on n_c with an exponent close to -2.0 which is independent of ϵ in the range $n_c \in \{50, 500\}$, and an exponential cut-off with a slope equal to $1/n_c^*(\epsilon)$ which increases with ϵ . The mean lifespan τ_c of clusters with size n_c increases with a power-law as a function n_c with an exponent close to $1/4$ for $n_c \in \{50, 500\}$. For larger values of n_c , large fluctuations of τ_c are observed.

We believe that this community analysis via \mathcal{Q} optimization for cluster detection in granular systems can be of use to study and understand the spatio-temporal evolution of mesoscale structures in systems, specially ones displaying out-of-equilibrium phase transitions. Furthermore, the application of an entropic null model in the \mathcal{Q} optimization scheme enables a systematic computation of mesoscale structures in out-of-equilibrium granular systems and their dynamics without the necessity of defining ad-hoc parameter values [28]. It is our hope that this scheme will be used on other quasi-two dimensional granular systems to study, compare and contrast the dynamics of their mesoscale structures as phase transitions

develop in such systems.

V. ACKNOWLEDGEMENTS

The authors wish to thank G. Castillo, N. Mujica and R. Soto for kindly allowing access to the database used in Ref. [33]. This work was partially supported by FONDECYT Regular Grants 1190005 and 1210656.

Appendix A: A Null model for ordered phases in granular matter

The null model presented in the present work to find communities was found by an entropic maximization scheme. We start by considering a multiplex network [54–56], which means that two nodes within one network can belong also to a different one at the same time. In our case we will consider a multiplex formed by N labeled nodes from $n = 1, \dots, N$ and M layers represented by a $\vec{G} = (G^{(1)}, \dots, G^{(M)})$, where $G^{(\alpha)}$ indicates the set of all possible networks at layer $\alpha = 1, \dots, M$ of the multiplex. Nodes can be connected by specifying an adjacency matrix $A_{n,m}^\alpha$ (as defined in the text) which can be weighted, depending on the type of network under study.

With this in mind, we task ourselves to find the ensemble properties of the multiplex by specifying the probability $P(\vec{G})$ for every possible multiplex. For a given set of multiplex probabilities $P(\vec{G})$ we can compute the entropy of the multiplex ensemble

$$\mathcal{S} = - \sum_{\vec{G}} P(\vec{G}) \log(P(\vec{G})), \quad (\text{A1})$$

which is proportional to logarithm of the number of possible multiplexes of the ensemble. As in statistical mechanics, we can find an ensemble of multiplexes that maximize \mathcal{S} , subjected to a given set of restrictions (a Gibbs probability ensemble). If we assume that the layers of the multiplex are uncorrelated, the probability of the multiplex can be written as

$$P(\vec{G}) = \prod_{\alpha=1}^M P(G^\alpha) \quad (\text{A2})$$

which simplifies greatly our task.

We now specify our problem within this framework. First we will set $M = 2$ and $\alpha = o, s$. One layer, called the orientational layer (o), connects pairs of nodes (n, m) with intralayer weights $w_{n,m}^{(o)} = |Q_n||Q_m|$ as long as $|Q_n|, |Q_m| > \langle |Q| \rangle$. A second layer, called the spatial layer (s), connects pairs of nodes (k, l) with intralayer weights $w_{k,l}^{(s)} = f(d_{k,l})$ where $d_{k,l} = |\vec{r}_n - \vec{r}_m|$ is the spatial distance (measured in number of diameters d) between nodes and $f(x)$ is a scalar function that goes to zero with increasing x . Note that in the orientational layer

any pair of nodes (n, m) that satisfy the thresholding scheme for $|Q_n|$ and $|Q_m|$ is connected. In this approximation, local orientational order does not couple directly with spatial order [33], we will assume for simplicity that $\langle w_{n,m}^{(o)} w_{n,m}^{(s)} \rangle = \langle w_{n,m}^{(o)} \rangle \langle w_{n,m}^{(s)} \rangle$, *i.e.*, we neglect the overlap between layers [56]. This means that the probability of finding a link between nodes (n, m) in both layers of the multiplex is simply the multiplication of the intralayer link probabilities for these nodes, following Eq.(A2).

In a canonical multiplex ensemble for our data, the set of multiplexes $\vec{G} = (G^{(o)}, G^{(s)})$ satisfy constraints on average, informed by the dynamics of the granular layer both in the orientational layer and in the spatial one. In this case, for the orientational layer we set the global constrain

$$\begin{aligned} L^{(o)} &= \sum_{\vec{G}} P(\vec{G}) \sum_{n < m}^N w_{n,m}^{(o)} \\ &= \beta \frac{N(N-1)}{2} \langle |Q^*| \rangle^2 \end{aligned} \quad (\text{A3})$$

which can be understood as setting on average a fraction β of nodes (particles) within the system with a fourfold bond-orientational order parameter per particle $\langle |Q^*| \rangle$. For the spatial layer the constraint

$$0 = \sum_{\vec{G}} P(\vec{G}) \sum_{n < m}^N \Theta(w_{n,m}^{(s)}) (\Theta(d_{nm} - d)) \quad (\text{A4})$$

sets in average the spatial interaction of particles only the nearest neighbors for each particle. Here $\Theta(x)$ is the Heaviside function [57]. Thus, maximizing \mathcal{S} from Eq.(A1) constraint to Eqs.(A4)-(A4) gives

$$P(\vec{G}) = \frac{e^{\sum_{n < m}^N -\Lambda w_{n,m}^{(o)} - \Delta \Theta(w_{n,m}^{(s)}) (\Theta(d_{nm} - d))}}{\mathcal{Z}} \quad (\text{A5})$$

where \mathcal{Z} is the partition function of our system and (Λ, Δ) are Lagrange multiplier enforcing the orientational (Λ) and spatial (Δ) constraints of the system, respectively. As the layers are assumed to be uncorrelated, we calculate $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}^{(o)} \times \mathcal{Z}^{(s)}$ with

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}^{(o)} &= \sum_{G^{(o)}} e^{-\Lambda \sum_{n < m}^N w_{n,m}^{(o)}} \\ &= \prod_{n < m} \sum_{\{w_{n,m}^{(o)}\}} e^{-\Lambda w_{n,m}^{(o)}} \\ &= \prod_{n < m} (1 - e^{-\Lambda})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{A6})$$

and

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}^{(s)} &= \sum_{G^{(s)}} e^{-\Delta \sum_{n < m}^N \Theta(w_{n,m}^{(s)}) (\Theta(d_{nm} - d))} \\ &= \prod_{n < m} \sum_{\{\Theta(w_{n,m}^{(s)})\}=0,1} e^{-\Delta \Theta(w_{n,m}^{(s)}) (\Theta(d_{nm} - d))} \\ &= \prod_{n < m} (1 + e^{-\Delta (\Theta(d_{nm} - d))}). \end{aligned} \quad (\text{A7})$$

It is now straightforward to compute the link probability (*i.e.*, the null model) for our multiplex between nodes (n, m) from the product partition function P_{nm} . The link probability between two nodes $P_{nm}^{(o)}$ for the orientational layer can be computed from the weight probability $\pi_{nm}(w)$ of the link for a given weight $w_{nm}^{(s)} = w$

$$\begin{aligned} \pi_{nm}(w) &= \sum_{\vec{G}} P(\vec{G}) \delta(w_{nm}^{(o)} = w) \\ &= e^{-\Lambda w} \times (1 - e^{-\Lambda}), \end{aligned} \quad (\text{A8})$$

as $P_{nm}^{(o)} = 1 - \pi_{nm}(w = 0) = e^{-\Lambda}$. Using Eq.(A4) and Eq.(A6), we link Λ and the restriction via

$$\begin{aligned} L^{(o)} &= -\frac{\partial \log(\mathcal{Z}^{(o)})}{\partial \Lambda} = \sum_{n < m} \frac{e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda}} \\ &= \frac{N(N-1)}{2} \frac{e^{-\Lambda}}{1 - e^{-\Lambda}} \\ &= \beta \frac{N(N-1)}{2} \langle |Q^*| \rangle^2, \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

which sets $e^{-\Lambda} = \beta \langle |Q^*| \rangle^2 / (1 + \beta \langle |Q^*| \rangle^2) = P_{nm}^{(o)}$. The link probability between two nodes $p_{nm}^{(s)}$ in the spatial layer can be computed similarly imposing that the weight of the link is larger than zero, *i.e.*,

$$P_{nm}^{(s)} = \sum_{\vec{G}} P(\vec{G}) \delta(w_{nm}^{(s)} > 0) = \frac{e^{-\Delta (\Theta(d_{nm} - d))}}{1 + e^{-\Delta (\Theta(d_{nm} - d))}}. \quad (\text{A10})$$

Similarly as before, we link Δ with the restriction via

$$\begin{aligned} 0 &= -\frac{\partial \log(\mathcal{Z}^{(s)})}{\partial \Delta} \\ &= \sum_{n < m} \frac{e^{-\Delta (\Theta(d_{nm} - d))}}{1 + e^{-\Delta (\Theta(d_{nm} - d))}} (\Theta(d_{nm} - d)), \end{aligned} \quad (\text{A11})$$

which is fulfilled only if $\Delta \rightarrow \infty$ as it needs that the sum over all non-neighbors yields zero. In that case, $P_{nm}^{(s)} = \frac{1}{2} (1 - \Theta(d_{nm} - d))$ for every neighboring pair (n, m) in the layer and $P_{nm}^{(s)} = 0$ otherwise. Following Eq.(A2), the link probability for our multiplex (and thus our null model for the granular network) is

$$\begin{aligned} P_{nm}^{(p)} &= P_{nm}^{(s)} \times P_{nm}^{(o)} \\ &= \frac{\beta \langle |Q^*| \rangle^2}{1 + \beta \langle |Q^*| \rangle^2} \frac{(1 - \Theta(d_{nm} - d))}{2}, \end{aligned} \quad (\text{A12})$$

which can be approximated to $\beta \langle |Q^*| \rangle^2 (1 - \Theta(d_{nm} - d)) / 2$ for $\beta \ll 1$. In this expression the term $(1 - \Theta(d_{nm} - d))$ can be understood as the spatial adjacency matrix $A_{nm}^{(s)}$ for particles that are in contact (nearest neighbors). An important consequence of this approach is the entropic justification for the use of a geographic model proposed in Ref. [28] to find community structure in a granular system subjected to simple local and global restrictions.

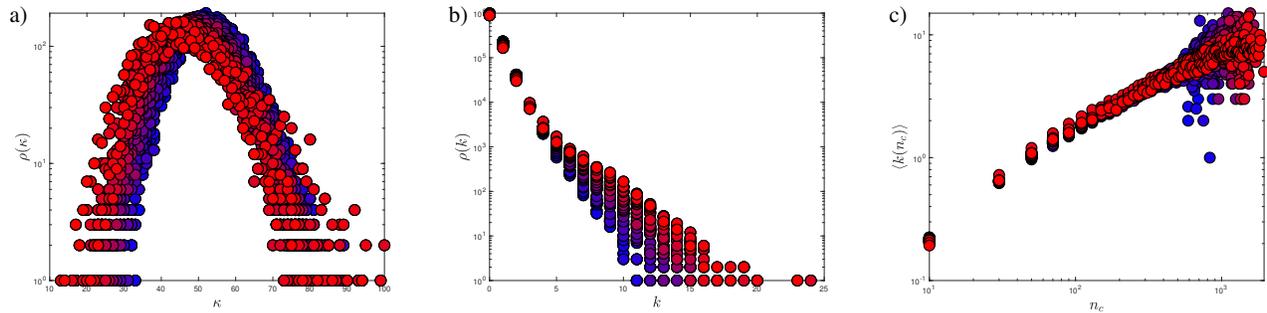


FIG. 7. Cluster network connection statistics. a) Distribution of the number of connections for the entire network $\rho(\kappa)$ versus κ as a function of ϵ . b) Distribution of connections per node $\rho(k)$ versus k as a function of ϵ . c) Mean value of the number of connections per node $\langle k(n_c) \rangle$ versus n_c as a function of ϵ . Same colorbar as in previous figures.

Furthermore, using these techniques, one can compute directly the entropy of the granular network via the application Eq.(A1) to the problem at hand. As the partition function for the problem in the limit of negligible overlap is $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}^{(o)} \times \mathcal{Z}^{(s)}$, $\mathcal{S} = \mathcal{S}(\epsilon) = \mathcal{S}^{(o)} + \mathcal{S}^{(e)} = -\Lambda L^{(o)} + \log(\mathcal{Z}^{(o)}) + \log(\mathcal{Z}^{(e)})$, which can be used to compute the entropy for the ensemble of granular networks as a function of ϵ , which is depicted in Fig. 8. As ϵ is the normalized acceleration which injects energy into the granular system, one could use the calculation of the granular network entropy $\mathcal{S}(\epsilon)$ as a proxy to the an out-of-equilibrium specific heat $\frac{d\mathcal{S}}{d\epsilon} \simeq C_V(\epsilon)$ which shows no divergence as ϵ approaches zero close to the solid-liquid type transition. This is consistent with the $\alpha=0$ exponent (cf. Fig. 8b)) in the language of dynamical phase transitions [6] within the C -model used to describe this granular system [33].

Appendix B: Cluster network properties

In this Appendix, we will focus on the statistical properties of the cluster network constructed above. We characterize these networks as a function of the normalized acceleration $\epsilon = (\Gamma_c - \Gamma)/\Gamma_c$. We will first deal with the statistics of the edges within the network. In Fig. 7a) we depict the distribution of the number of connections κ as a function of ϵ . The mean number of connections $\langle \kappa \rangle$ decreases linearly with ϵ , which is expected as smaller clusters merge into larger ones, and thus less connections are formed within the network. The distribution can be reasonable fitted by a chi-squared distribution where the number of degrees of freedom χ increases with decreasing ϵ . For the case of connections per node k (cf. Fig. 7b)), the distribution can be reasonable fitted with an exponential function for $k > 4$, with a slope which decreases with ϵ , allowing larger values for k as we approach the

solid-liquid transition. We also computed the amount of connections as a function of n_c , $k = k(n_c)$ grows as a power law with n_c as $n_c^{\zeta_k}$ with $\zeta_k = 0.55 \pm 0.05$ and is independent of ϵ . This scaling, shown in Fig. 7c), is to be expected as the connections between clusters depends

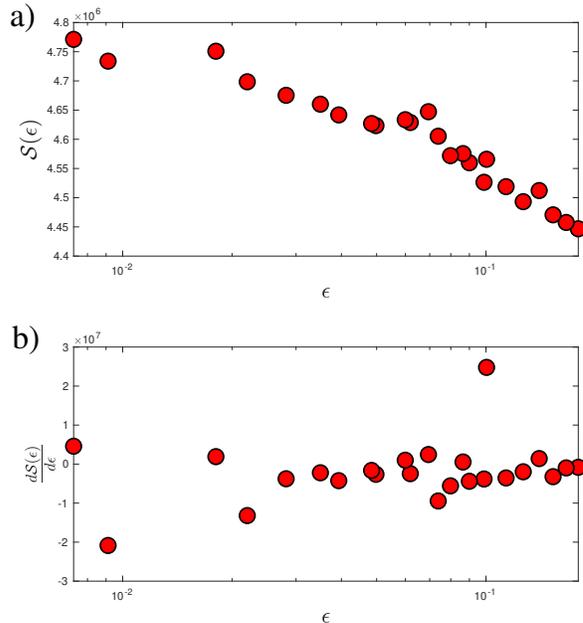


FIG. 8. a) Semilogarithmic horizontal plot of $\mathcal{S}(\epsilon)$ vs ϵ for the granular network. b) Semilogarithmic horizontal plot of $\frac{d\mathcal{S}(\epsilon)}{d\epsilon}$ vs ϵ for the granular network.

on the number of particles at the edges of the clusters, and thus $k \sim n_c^{1/2}$.

[1] I. Aranson, L. Tsimring, *Granular Patterns*, (Oxford University Press; 2nd edition, 2014).

[2] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, and R. P. Behringer, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 1259–1273 (1996).

- [3] P. -G. de Gennes, *Rev. Mod. Phys.* **71**,374–382 (1999).
- [4] I. Aranson, and L. S. Tsimring, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 641–692 (2006).
- [5] M. Henkel, H. Hinrichsen, and S. Lübeck, *Non-Equilibrium Phase Transitions: Volume 1: Absorbing Phase Transitions* (Theoretical and Mathematical Physics) (Springer Dordrecht, First Edition, 2009).
- [6] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin, *Rev. Mod. Phys.* **49**, 435 (1977).
- [7] J. D. Brock, *Bond-Orientational Order in Condensed Matter Systems*, pp. 1-29 (edktd by K. J. Strandburg, Springer-Verlag, New York, 1992).
- [8] R.M. Nedderman, *Statics and Kinematics of Granular Materials* (Cambridge University, Cambridge, UK, 1992).
- [9] C. Goldenberg and I. Goldhirsch, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 084302 (2002).
- [10] J. H. Snoeijer, T. J. H. Vlugt, M. van Hecke, and W. van Saarloos, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 054302 (2004).
- [11] S. Douady, S. Fauve, and C. Laroche, *Europhys. Lett.* **8**, 621–627 (1989).
- [12] F. Melo, P. Umbanhowar, and H. L. Swinney, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3838–3841 (1995).
- [13] K. Watanabe, and H. Tanaka, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 158002 (2008).
- [14] T. Schindler and S. C. Kapferm, *Phys. Rev. E* **99**, 022902 (2019).
- [15] J. Galanis, R. Nossal, W. Losert, and D. Harries, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 168001 (2010).
- [16] M. González-Pinto, F. Borondo, Y. Martínez-Ratón, and E. Velasco, *Soft Matter* **13**,2571-2582 (2017).
- [17] M. González-Pinto, F. Borondo, Y. Martínez-Ratón, and E. Velasco, *Soft Matter*, **13**, 2571-2582, (2017).
- [18] M. González-Pinto *et al*, *New J. Phys.* **21**, 033002 (2019).
- [19] E. Basurto, P. Gurin, S. Varga, and G. Odriozola, *Phys. Rev. Res.* **2**, 013356 (2020).
- [20] A. Díaz-De Armas, M. Maza-Cuello, Y. Martínez-Ratón, and E. Velasco, *Phys. Rev. Res.* **2**, 033436 (2020).
- [21] P. R. *et al*, *Granul. Matter* **1**, 203–211 (1999).
- [22] J. S. Andrade, H. J. Herrmann, R. F. S. Andrade and L. R. da Silva, *Phys. Rev. Lett.* **94** 18702 (2005).
- [23] A. Smart, P. Umbanhowar and J. Ottino, *EPL* **79**, 24002 (2007).
- [24] D. M. Walker, and A. Tordesillas, *Int. J. Solids Struct.* **47** 624–639 (2010).
- [25] S. Ardanza-Trevijano, I. Zuriguel, R. Arévalo, and D. Maza, *Phys. Rev. E* **89**, 052212 (2014).
- [26] D.M. Walker, A. Tordesillas, M. Small, R. P. Behringer, and C. K. Tse, *Chaos*, **24**, 013132 (2014).
- [27] J. A. Dijksman, *et al*, *Phys. Rev. E* **97**, 042903 (2018).
- [28] L. Papadopoulos, M. A. Porter, K. E. Daniels, and D. S. Bassett, *J. Compl. Net.* **6**, 485–565 (2018).
- [29] S. Nauer, L. Böttcher, and M. A. Porter, *J. Comp. Net.* **8** 1–27 (2019).
- [30] J. S. Olafsen, and J. S. Urbach, *Phys. Rev. Lett* **81**,4369–4372 (1998).
- [31] A. Prevost, P. Melby, D. A. Egolf, and J. S. Urbach, *Phys. Rev. E* **70**, 050301 (2004).
- [32] P. M. Reis, R. A. Ingale, and M. D. Shattuck, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 258001 (2006).
- [33] G. Castillo, N. Mujica, and R. Soto, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 095701 (2012).
- [34] X. Sun, Y. Li, Y. Ma. and Z. Zhang, *Sci. Rep.* **6**, 24056 (2016).
- [35] A. Ghosh *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 188002 (2022).
- [36] L. Galliano, M. E. Cates, and L. Berthier, *Phys. Rev. Lett.* **131**, 047101 (2023).
- [37] D. S. Bassett *et al*, *Soft Matter* **11**, 2731-2744 (2015).
- [38] L. Papadopoulos, J. Puckett, K. E. Daniels, and D. S. Bassett, *Phys. Rev. E* **94**, 032908 (2016); Y. Huang and K. E. Daniels, *Granul. Matter* **18** 85 (2016).
- [39] B. Kou *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 018002 (2018).
- [40] Yi. Sun *et al*, *Granul. Matter* **22**, 70 (2020).
- [41] M.E.J. Newman, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **103**(23), 8577-82 (2006).
- [42] M. E. J. Newman, *Networks: An Introduction* (Oxford University Press, 1st Ed., 2010).
- [43] M. Sarzynska, E. A. Leicht, G. Chowell and M. A. Porter, *J. Comp.x Net.* **4**, 363–406 (2016).
- [44] M. Barthélemy, *Phys. Rep.* **499** 1–101 (2011).
- [45] M. E. J. Newman and M. Girvan, *Phys. Rev. E.* **69**, 026113 (2004).
- [46] A. Clauset, M. E. J. Newman, and C. Moore, *Phys. Rev. E* **70**(6) (2004).
- [47] V. D. Blondel *et al*, *J. Stat. Mech.* P10008 (2008).
- [48] L. G. S. Jeub, O. Sporns and S. Fortunato, *Sci Rep.* **8**, 3259 (2018).
- [49] U. Brandes *et al*, *IEEE Trans. Knowl. Data Eng.* **20**, 172-188 (2008).
- [50] D. Stauffer, *Phys. Rep.* **54**, 1-74 (1979).
- [51] M. B. Isichenko, *Rev. Mod. Phys.* **64** 961-1043 (1992).
- [52] A. A. Saberi, *Phys. Rep.* **578**, 1-32 (2015)
- [53] M. Li, *et al*, *Phys. Rep.* **907**, 1-68 (2021).
- [54] G. Bianconi, *Multilayer Networks: Structure and Function* (Oxford University Press, 2023).
- [55] G. Bianconi, *Phys. Rev. E* **87**, 062806 (2013).
- [56] G. Menichetti, D. Remondini, and G. Bianconi, *Phys. Rev. E* **90**, 062817 (2014).
- [57] G. B. Arfken, H. J. Weber and F. E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists: A Comprehensive Guide* (Academic Press; 7th edition, 2012).