Introduzione alla teoria della percolazione

Leonardo Ongari *Università degli studi di Parma*
Cremona, Italia
leonardo.ongari@studenti.unipr.it

***Sommario*—La teoria della percolazione si occupa di sviluppare modelli matematici per descrivere il fenomeno fisico della percolazione, caratterizzato dallo scorrimento di un *fluido* all'interno di un *mezzo*. In questa relazione vengono mostrate le caratteristiche principali dei modelli, le nozioni teoriche associate ed alcune analisi sugli algoritmi utilizzabili per effettuare simulazioni consistenti.**

***Keywords*—Percolazione, Modelli, Simulazioni**

I. INTRODUZIONE

La teoria della percolazione nasce con l'obiettivo di ottenere un modello matematico per descrivere il fenomeno fisico della percolazione. Questo fenomeno descrive lo scorrimento di un fluido all'interno di un materiale tipicamente poroso. È importante specificare che il significato del termine "percolazione" può riferirsi a diversi contesti, a seconda del campo in cui si sta operando. Alcuni esempi sono:

- un soluto che diffonde attraverso un solvente;
- elettroni che migrano attraverso un reticolo atomico;
- molecole che penetrano un solido poroso;
- una malattia che infetta una comunità.

La formalizzazione matematica del problema ha reso possibile la creazione di un *modello*. Un punto chiave molto importante di un modello è il concetto di *astrazione*, caratteristica che permette di operare senza considerare alcune variabili dipendenti dal contesto [1].

II. BACKGROUND

Un metodo efficace per l'astrazione del concetto consiste in una rappresentazione tramite un reticolo, in inglese "lattice".

Definizione 1 (Reticolo)**.** Un reticolo L di dimensione n è una coppia $\langle S, B\rangle$, dove:

- $S = \{s_i : i \in \mathbb{N},\ 0 \leq i < n\}$ è l'insieme dei siti;
- $B = \big\{(s_i, s_j) \in S^2 : s_i \text{ e } s_j \text{ siano primi vicini}\big\}$ è l'insieme dei legami.

In un reticolo in cui vale questa relazione è possibile descrivere due tipi di percolazione:

- percolazione di legame;
- percolazione di sito.

Percolazione di legame

È la prima versione del modello fornita da Broadbent e Hammersley [1]. Ogni legame ha probabilità p di essere "aperto", quindi probabilità $1-p$ di essere "chiuso". Se due siti formano un legame aperto, vi è una connessione diretta tra i due. Al contrario, un legame chiuso elimina la connessione. In questa versione, "avviene percolazione" se esiste un percorso (insieme di connessioni dirette) che attraversa l'intero reticolo. La percolazione può verificarsi sia in verticale (alto-basso) sia in orizzontale (sinistra-destra).

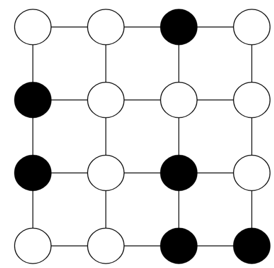

Figura 1: Esempio di reticolo quadrato bidimensionale

Percolazione di sito

In questo modello ogni sito ha una probabilità p di essere occupato, di conseguenza probabilità $1-p$ di essere vuoto. In figura 1 viene mostrato un reticolo bidimensionale quadrato con nodi occupati (neri) e vuoti (bianchi). Questo è il modello che verrà utilizzato per lo studio dell'argomento e dei vari algoritmi, verrà dunque approfondito più in dettaglio nella sezione III.

Soglia di percolazione

I due modelli appena introdotti rappresentano soluzioni valide per lo studio del fenomeno. Nonostante la somiglianza, vi sono differenze concettuali che si riflettono anche nel calcolo di alcuni valori caratteristici [2], [3], [4].

Definizione 2 (Soglia di percolazione)**.** Sia L un reticolo di dimensione infinita[1]. Sia p la probabilità di occupazione di un sito o di apertura di un legame, a seconda del modello scelto. Sia p uguale per ogni elemento del reticolo. La soglia di percolazione per L è definita come la probabilità p_c tale per cui:

- se $p > p_c$, allora vi è percolazione;
- se $p < p_c$, allora non vi è percolazione.

È possibile visualizzare il concetto di soglia nel grafico mostrato in figura 2, in cui l'asse delle ascisse è associato alla probabilità p, mentre l'asse delle ordinate è associato alla probabilità che avvenga percolazione p_{perc}.

[1]Con il termine "infinito" si fa riferimento all'estensione intuitiva delle varie proprietà della struttura, come avviene in matematica per il concetto di *limite all'infinito*.

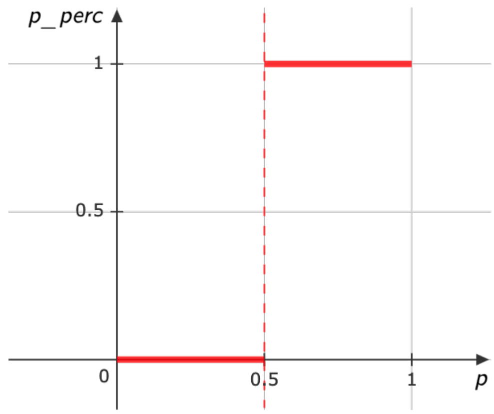

Figura 2: Grafico relativo alla soglia di percolazione ($p_c = 0.5$)

Nei casi reali, ovvero per reticoli di taglia finita, non è possibile stabilire un'affermazione così forte. Ciò che è possibile preservare dalla definizione è che esiste un **punto critico** p_c relativo alla probabilità p, oltre al quale è più probabile che avvenga percolazione e, al contrario, al di sotto del quale è meno probabile che questo si verifichi.

Lattice	p_c **(Site)**	p_c **(Bond)**
Cubic (body-centered)	0.246	0.1803
Cubic (face-centered)	0.198	0.119
Cubic (simple)	0.3116	0.2488
Diamond	0.43	0.388
Honeycomb	0.6962	0.65271*
4-Hypercubic	0.197	0.1601
5-Hypercubic	0.141	0.1182
6-Hypercubic	0.107	0.0942
7-Hypercubic	0.089	0.0787
Square	0.592746	0.50000*
Triangular	0.50000*	0.34729*

Tabella I: Punti critici (p_c) per reticoli regolari.

In letteratura sono presenti diversi studi sulle caratteristiche di vari reticoli e i rispettivi valori di soglia. La tabella I mostra i punti critici per diversi reticoli regolari, ovvero composti da elementi ripetuti della stessa forma. La colonna **Lattice** indica la forma del reticolo, mentre le colonne **Site** e **Bond** distinguono i valori in percolazione di sito e di legame, rispettivamente [5]. Vi è una lieve, ma evidente, discrepanza tra i valori nelle due colonne. In generale, la rappresentazione tramite occupazione dei siti è considerata più generica rispetto alla sua controparte, questo perché la percolazione di legame può essere riformulata in termini di percolazione di sito, ma non si può affermare il contrario. I valori affiancati da un asterisco possono essere trovati tramite calcoli analitici, grazie ad alcune caratteristiche della forma del reticolo, sono quindi considerati *conosciuti*. È interessante notare che la tabella è composta per lo più da valori non conosciuti, cioè valori ottenuti da simulazioni al calcolatore.

III. Implementazione

Riferimenti bibliografici

[1] S. R. Broadbent and J. M. Hammersley, "Percolation processes: I. crystals and mazes," *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, vol. 53, no. 3, pp. 629-641, 1957.

[2] C. Stover and E. W. Weisstein, "Bond percolation." [Online]. Available: https://mathworld.wolfram.com/BondPercolation.html

[3] ——, "Site percolation." [Online]. Available: https://mathworld.wolfram.com/SitePercolation.html

[4] E. W. Weisstein, "Percolation threshold," *https://mathworld. wolfram.com/*, 2002.

[5] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to percolation theory*. Taylor & Francis, 2018.