

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;
- $B = \{(s_i, s_j) \in S^2 : s_i \text{ e } s_j \text{ siano primi vicini}\}$ è l'insieme dei legami.

Due siti possono essere considerati primi vicini se, secondo l'ordinamento locale dei siti, hanno distanza uguale a 1. In un reticolo in cui vale questa relazione è possibile descrivere due tipi di percolazione: percolazione di sito e percolazione di legame.

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

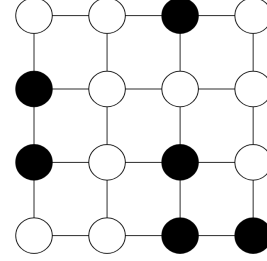


Figura 1: Esempio di reticolo quadrato bidimensionale

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).

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 e verrà approfondito 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 infinita¹. 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} .

¹Con 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*.

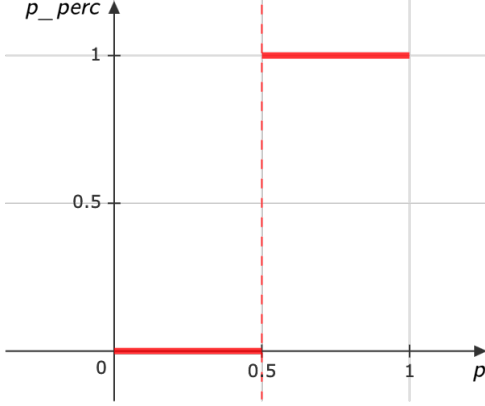


Figura 2: Grafico relativo alla soglia di percolazione ($p_c = 0.5$)

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 computer.

Cluster-finding

Nel modello che opera sui siti, la percolazione viene rilevata in seguito a un processo di *cluster-finding*, che consiste nel

partizionare il reticolo in diverse classi, tramite una relazione di equivalenza.

Definizione 3. Una relazione di equivalenza R su un insieme A è una relazione binaria che gode delle seguenti proprietà:

- $\forall x \in A : xRx$ (riflessività);
- $\forall x, y \in A : xRy \rightarrow yRx$ (simmetria);
- $\forall x, y, z \in A : xRy \wedge yRz \rightarrow xRz$ (transitività).

La relazione utilizzata è strettamente collegata al concetto di primi vicini. La definizione di primi vicini per un sito può variare a seconda della tipologia (forma e dimensioni) del reticolo utilizzato.

Distribuzione binomiale

Per formalizzare in modo completo il modello, è necessario introdurre la nozione di *variabile aleatoria*. Non verrà trattato l'argomento nel dettaglio, per lasciare più spazio alle implementazioni. In questo contesto, si introduce il concetto di variabile aleatoria come una variabile il cui valore dipende da un evento non deterministico. Questo evento è descritto attraverso funzioni di densità specifiche, che seguono leggi di *distribuzione* della probabilità [6]. Esistono diverse tipologie di distribuzioni, tra cui quella binomiale che, riassumendo, descrive un esperimento di prove ripetute. Questo tipo di distribuzione è caratterizzato da una funzione di densità a 2 parametri

$$\mathcal{B}_{n,p}(k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \quad (1)$$

dove n rappresenta il numero di prove e p la probabilità di successo di ciascuna. La variabile k indica il risultato di cui vogliamo verificare la probabilità. L'equazione II rappresenta “la probabilità che si ottengano k successi ripetendo n volte una prova con probabilità di successo p ”.

A. Distribuzione Gaussiana

La distribuzione normale o gaussiana è una delle distribuzioni di probabilità più importanti in statistica e probabilità. La sua funzione di densità probabilistica (PDF) è data da:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (2)$$

dove μ rappresenta la media e σ^2 la varianza. Questa distribuzione emerge naturalmente in numerosi contesti scientifici e tecnici grazie al *Teorema del Limite Centrale*.

B. Legge dei Grandi Numeri in forma di Chebyshev

La *Legge dei Grandi Numeri* afferma che la media aritmetica di una sequenza di variabili aleatorie indipendenti e identicamente distribuite (iid) converge alla loro media attesa quando il numero di osservazioni tende all'infinito. Una formulazione basata sulla disuguaglianza di Chebyshev è la seguente:

$$P\left(\left|\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i - \mathbb{E}[X]\right| \geq \epsilon\right) \leq \frac{\text{Var}(X)}{n\epsilon^2}, \quad \forall \epsilon > 0, \quad (3)$$

dove X_i sono variabili aleatorie iid con media finita $\mathbb{E}[X]$ e varianza finita $\text{Var}(X)$. Questo implica che all'aumentare di n , la probabilità che la media campionaria si discosti dalla media attesa oltre una certa soglia si riduce.

C. Teorema del Limite Centrale

Uno dei risultati fondamentali della teoria della probabilità è il *Teorema del Limite Centrale* (TLC), il quale afferma che, date X_1, X_2, \dots, X_n variabili aleatorie indipendenti e identicamente distribuite con media μ e varianza finita σ^2 , la variabile normalizzata:

$$Z_n = \frac{\sum_{i=1}^n X_i - n\mu}{\sigma\sqrt{n}} \quad (4)$$

converge in distribuzione a una variabile casuale normale standard $\mathcal{N}(0, 1)$ per $n \rightarrow \infty$:

$$Z_n \sim \mathcal{N}(0, 1). \quad (5)$$

Questo risultato giustifica l'uso della distribuzione normale in molte applicazioni pratiche, in particolare nella statistica inferenziale e nella teoria dell'approssimazione.

III. IMPLEMENTAZIONE

Prima soluzione

In questa relazione verranno discusse proprietà e risultati dell'algoritmo Hoshen-Kopelman [7]. Tuttavia, per dimostrarne la correttezza e provarne l'efficienza, verranno effettuati dei confronti con una versione personalizzata, che chiameremo algoritmo *A*, la cui correttezza è ben nota data la sua semplicità. Il Cod. 1 mostra una prima soluzione al problema del partizionamento. È composto da 2 iterazioni principali: una “esterna” per tutti i siti occupati, una “interna” per i siti adiacenti. Quest'ultima si appoggia ad un vettore che funge da *pila*, le cui dimensioni variano in maniera dinamica. Lo scopo della pila è quello di aggiungere, ad ogni iterazione interna, i siti occupati adiacenti al nodo corrente, per essere poi processati singolarmente. Ragionando sul funzionamento del codice, ci si convince piuttosto facilmente della ridondanza causata dalla pila. In altri termini, un sito occupato può essere processato più volte:

- una e una sola volta nell'iterazione esterna;
- una volta per ogni vicino occupato;
- altre volte per eventuali “catene di vicinanze”.

Paradigma Union-Find

Come appena accennato, in questa relazione viene presentato l'algoritmo Hoshen-Kopelman, che fa parte della famiglia di algoritmi *union-find*, utilizzati nel calcolo di componenti connesse e, in questo caso, per il processo di cluster-finding. Questo paradigma prevede l'utilizzo di due procedure principali, che ne compongono il nome:

- *Union*: effettua una fusione tra due insiemi disgiunti quando ci si accorge che appartengono in realtà alla stessa classe di equivalenza;
- *Find*: determina a quale insieme appartiene l'elemento in elaborazione.

Algoritmo 1 Pseudocodice dell'algoritmo *A*

```

1: largest_label  $\leftarrow 1$ 
2: label  $\leftarrow \text{zeros}[n\_columns, n\_rows]$ 
3: for  $[x, y] \leftarrow [0, 0]$  to  $n\_columns, n\_rows$  do
4:   if  $[x, y] = 1 \wedge \text{label}[x, y] = 0$  then
5:     pila  $\leftarrow [x, y]$ 
6:     label $[x, y] \leftarrow \text{largest\_label}$ 
7:     j  $\leftarrow 1$ 
8:     while  $j \leq \text{length}(\text{pila})$  do
9:       elem  $\leftarrow \text{pila}[j]$ 
10:      x  $\leftarrow \text{elem}[1], y \leftarrow \text{elem}[2]$ 
11:      left  $\leftarrow [x - 1, y]$ 
12:      right  $\leftarrow [x + 1, y]$ 
13:      down  $\leftarrow [x, y + 1]$ 
14:      top  $\leftarrow [x, y - 1]$ 
15:      if  $\text{left} = 1 \wedge \text{label}[\text{left}] = 0$  then
16:        append left to pila
17:        label $[\text{left}] \leftarrow \text{largest\_label}$ 
18:      end if
19:      if  $\text{right} = 1 \wedge \text{label}[\text{right}] = 0$  then
20:        append right to pila
21:        label $[\text{right}] \leftarrow \text{largest\_label}$ 
22:      end if
23:      if  $\text{up} = 1 \wedge \text{label}[\text{up}] = 0$  then
24:        append up to pila
25:        label $[\text{up}] \leftarrow \text{largest\_label}$ 
26:      end if
27:      if  $\text{down} = 1 \wedge \text{label}[\text{down}] = 0$  then
28:        append down to pila
29:        label $[\text{down}] \leftarrow \text{largest\_label}$ 
30:      end if
31:      j  $\leftarrow j + 1$ 
32:    end while
33:    largest_label  $\leftarrow \text{largest\_label} + 1$ 
34:  end if
35: end for

```

Nel Cod. 2 vengono mostrati i passaggi per l'implementazione del paradigma nel contesto della percolazione [8]. Rispetto all'algoritmo iniziale, rimane un'iterazione sui siti per verificarne l'occupazione, ma appare diversa la logica applicata. In particolare, scompare l'utilizzo della pila con la conseguente ridondanza e, per ogni sito occupato, vengono considerati solo due primi vicini: sopra (*above*) e a sinistra (*left*). Se nessuno dei due vicini è occupato, al sito viene assegnata una nuova etichetta (*label*), aggiornata tramite un contatore; se soltanto uno dei due vicini è occupato, il sito eredita la sua etichetta; se entrambi i vicini sono occupati e hanno la stessa etichetta, il comportamento è analogo al caso di un vicino occupato; se invece i vicini hanno etichette diverse, il sito eredita quella minore, prestando attenzione al fatto che in realtà le due facciano riferimento allo stesso cluster. Infatti, in questo procedimento si possono avere siti di uno stesso cluster con etichette diverse (provare per credere!). Quest'ultimo punto è cruciale: è necessario tenere conto di questa informazione senza impattare negativamente sul costo computazionale dell'algoritmo; una rinomina totale delle etichette sarebbe infatti troppo costosa e si perderebbe parte del vantaggio ottenuto rispetto all'algoritmo *A*. Per coprire questo aspetto, per ogni cluster si sceglie una etichetta “di rappresentanza”, che chiameremo *good label*. Ogni altra etichetta viene considerata una *bad label* e deve essere in

Algoritmo 2 Pseudocodice dell'algoritmo Hoshen-Kopelman

```

1:  $largest\_label \leftarrow 0$ 
2:  $label \leftarrow \text{zeros}[n\_columns, n\_rows]$ 
3:  $Lofl \leftarrow [0 : n\_columns]$ 
4:
5: for  $[x, y] \leftarrow [0, 0]$  to  $[n\_columns, n\_rows]$  do
6:   if  $[x, y] = 1$  then
7:      $left \leftarrow label[x - 1, y]$ 
8:      $above \leftarrow label[x, y - 1]$ 
9:     if  $(left = 0) \wedge (above = 0)$  then
10:       $largest\_label \leftarrow largest\_label + 1$ 
11:       $tmp \leftarrow largest\_label$ 
12:    else if  $(left = 1) \wedge (above = 0)$  then
13:       $tmp \leftarrow left$ 
14:    else if  $(left = 0) \wedge (above = 1)$  then
15:       $tmp \leftarrow above$ 
16:    else
17:       $tmp \leftarrow \min\{left, above\}$ 
18:       $bad\_label \leftarrow \max\{left, above\}$ 
19:       $UNION(bad\_label, tmp)$ 
20:    end if
21:     $label[x, y] \leftarrow tmp$ 
22:  end if
23: end for
24: procedure  $UNION(x, y)$ 
25:    $Lofl[FIND(x)] \leftarrow FIND(y)$ 
26: end procedure
27: function  $FIND(x)$ 
28:   while  $Lofl[x] \neq x$  do
29:      $x \leftarrow Lofl[x]$ 
30:   end while
31:   return  $x$ 
32: end function

```

qualche modo collegata alla rispettiva *good label*. Il metodo di collegamento scelto consiste nell'utilizzo di un array *Lofl* (Label of label), che viene aggiornato durante l'esecuzione. A questo proposito, entrano in gioco le nuove procedure:

- *Union*: ha il compito di collegare una *bad label* ad una potenziale² *good label* e viene descritta facilmente in termini di *Find*;
- *Find*: viene implementata come iterazione di punto fisso della funzione rappresentata dall'array *Lofl*. In altri termini, si cerca in modo iterativo la condizione di arresto $Lofl[x] = x$.

Stime della soglia ed errori associati

Per stabilire in maniera formale se esista o meno un cluster percolante (ricordiamo: un cluster percolante attraversa l'intero reticolo), va fatto un confronto tra le etichette presenti sui bordi del reticolo: se esiste almeno un'etichetta presente su due bordi opposti, significa che il cluster identificato da esso attraversa il reticolo in quella direzione. Nell'algoritmo *A* è sufficiente confrontare le etichette, mentre per Hoshen-Kopelman occorre confrontare le *good label* dei siti presenti sui bordi. Il processo consiste nel verificare che vi sia una intersezione non nulla

²Il termine "potenziale" fa riferimento al fatto che non sia possibile sapere se l'etichetta minore sia effettivamente una *good label*, perché potrebbe a sua volta far parte di un altro collegamento. Tuttavia, si può dire che tramite una catena di collegamenti è possibile risalire alla *good label*.

tra le etichette presenti sul bordo sinistro e quelle sul bordo destro (left-right) oppure, in maniera analoga, tra il bordo più alto e quello più basso (top-bottom). Un paragone tra le rilevazioni dei due algoritmi mostrerà come i risultati ottenuti nei due casi siano perfettamente coincidenti. Per generare valori significativi ed effettuare confronti tra gli algoritmi, è stato necessario definire valori dei parametri richiesti nella simulazione e iterare su di essi. Si è definito un array $L = [20, 60, 40, 80]$ per le dimensioni. Si è costruito un array p per le probabilità di occupazione, tramite punti non equidistanti:

- 1) $p_a = [0.025 : 0.025 : 0.5]$;
- 2) $p_b = [0.5125 : 0.0125 : 0.7]$;
- 3) $p_c = [0.725 : 0.025 : 1]$;
- 4) $p = [p_a, p_b, p_c]$.

La sintassi utilizzata richiama volontariamente quella del linguaggio Matlab: la scritta $[inf : inc : sup]$ indica una serie di valori che parte da *inf* e arriva a *sup*, tramite un incremento costante *inc*. Si è scelto infine un numero arbitrario N di iterazioni per determinare, fissando i parametri precedenti, la frequenza di percolazione, calcolata banalmente dividendo n_{perc} (numero di esperimenti in cui avviene percolazione) per N , in questo caso uguale a 1000.

$$\forall i \in [1..N] : \begin{cases} t(i) = 1, & \text{se avviene percolazione} \\ t(i) = 0, & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (6)$$

Per ogni test $i \in [1..N]$ vi sono quindi 2 casi: avviene o non avviene percolazione. I risultati dei test sono memorizzati all'interno di un array t tramite valori di verità. Si denota con $t(i) \in \{0, 1\}$ il risultato dell' i -esimo test a parametri fissati. Grazie alla notazione introdotta, si nota facilmente che:

$$\sum_{i=1}^N t(i) = n_{perc} \quad (7)$$

Seguendo questi passaggi, si può valutare $t(i)$ come se fosse una misurazione di una variabile aleatoria T . Si può pensare che T segua una legge di distribuzione binomiale della forma

$$T \sim \mathcal{B}_{n,p}(k)$$

Ma che tipo di binomiale? Si potrebbe attribuire $n = N$ e chiaramente siamo interessati a $k = n_{perc}$. Tuttavia, non si conoscono i valori esatti del parametro p_{perc} sulla probabilità di percolazione e occorre quindi procedere per *stime*. Il fatto che la frequenza di percolazione sia significativa rispetto alla probabilità della stessa è garantito, per input sufficientemente grandi, dalla **Legge dei Grandi Numeri** espressa in forma di Chebyshev [?], [?]. L'affidabilità delle misurazioni effettuate è invece discussa per mezzo del **Teorema del Limite Centrale (TLC)** [?]. Questi strumenti matematici permettono di affermare proprietà statistiche sulle stime del parametro p_{perc} e sull'errore associato. Formalmente, si calcola la media aritmetica sugli esperimenti come

$$f_{perc} = \frac{n_{perc}}{N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N t(i) \quad (8)$$

Sappiamo da ?? che, per N sufficientemente grande, f_p converge in probabilità al valore atteso di T . Inoltre, la varianza associata è

$$D_{f_{perc}} = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N D_T = \frac{D_T}{N} \quad (9)$$

dove D_T è la varianza della variabile aleatoria T e può essere stimata in Matlab seguendo le misurazioni del campione:

$$\tilde{D}_T = D_t = \frac{1}{N-1} \sum_i (t(i) - f_{perc})^2 \quad (10)$$

Ci si avvale a questo punto anche dell'equazione ?? e ne consegue che

$$f_{perc} \sim \mathcal{N}(\sigma^2, \mu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (11)$$

o, in altri termini, la frequenza di percolazione rilevata nella simulazione segue una legge di distribuzione gaussiana. Si può dire di più: i parametri della funzione sono proprio le stime effettuate sul campione. Questi passaggi risultano molto importanti perché permettono di ricondurre esperimenti “arbitrari” a casistiche ben note. Sostanzialmente, conoscendo la natura della distribuzione gaussiana, ci è concesso affermare che valori lontani dalla media $\mu = f_{perc}$ per più di 3σ , dove $\sigma = \sqrt{\tilde{D}_T}$, possano essere esclusi dai candidati per il valore esatto p_{perc} . Partendo dai campioni restituiti dalla simulazione, si è quindi arrivati a costruire un *intervallo di confidenza* all'interno del quale il valore ricercato ha probabilità $1 - \alpha$ di apparire, dove α rappresenta l'area sottesa dalla funzione di densità f_{perc} negli intervalli $(-\infty, \mu - 3\sigma)$ e $(\mu + 3\sigma, +\infty)$. In Fig. 3 è mostrato un esempio grafico per capire meglio il concetto.

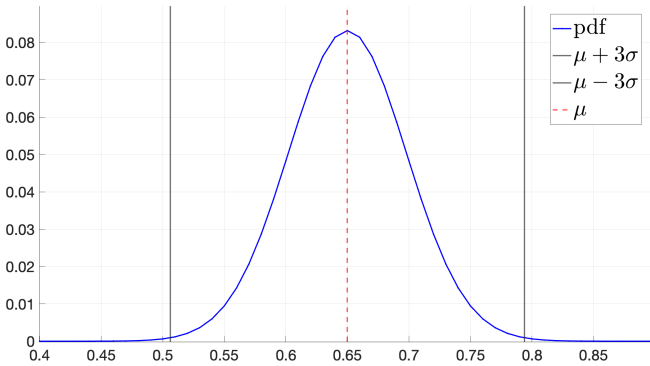


Figura 3: Funzione di densità probabilistica normale per f_{perc} .

Altre osservabili

Si può svolgere il procedimento di stima dei parametri di una distribuzione non conosciuta anche per altre quantità, dette “osservabili”. Ognuna di queste, nel nostro caso, è riconducibile ad una funzione gaussiana per lo stesso motivo descritto nel paragrafo precedente legato a TLC. Anche la correttezza della stima si discute nel senso di convergenza in probabilità, come già mostrato. Di seguito è esposta una panoramica delle osservabili studiate, oltre alla frequenza di percolazione.

P_1 : Rappresenta la probabilità che il cluster più grande trovato (dimensione s_{max}) sia grande quanto l'intero reticolo. È lecito pensare (e si avrà una conferma) che questa quantità sia trascurabile per valori piccoli della probabilità di occupazione p , e avrà andamento crescente fino a $p = 1$, dove sicuramente vi sarà un unico cluster di dimensione s_{max} .

$$P_1 = \frac{s_{max}}{|L|} \quad (12)$$

P_2 : Rappresenta la probabilità che il cluster più grande trovato sia grande quanto il numero medio di siti occupati. Occorre fare una precisazione: I valori di questa quantità potrebbero essere superiori ad 1, poiché il denominatore è soltanto una stima tramite valore medio (numero di siti moltiplicati per la probabilità di occupazione). Anche in questo caso, comunque, ci si aspetta un andamento simile al precedente.

$$P_2 = \frac{s_{max}}{p|L|} \quad (13)$$

P_3 : Rappresenta la probabilità che il cluster più grande trovato sia grande quanto il numero esatto di siti occupati. In questo caso, rispetto a P_2 , al denominatore è presente un valore calcolato analiticamente. Questa differenza elimina la presenza di valori anomali maggiori di 1, ma la quantità calcolata, soprattutto per un numero elevato di tentativi, rimane molto simile.

$$P_3 = \frac{s_{max}}{\sum_s s \cdot n_s} \quad (14)$$

$RACS$: Rappresenta la probabilità che un sito appartenga ad un cluster che non sia quello di dimensione massima. In questo caso, ci si aspetta un andamento “opposto” rispetto alle altre quantità: per probabilità alte di occupazione è più probabile avere un cluster che sia molto più grande degli altri, di conseguenza la probabilità che un sito vi appartenga è più bassa.

$$RACS = \frac{\sum_{s \neq s_{max}} s \cdot n_s}{\sum_t t \cdot n_t} \quad (15)$$

IV. RISULTATI

I risultati ottenuti tramite Matlab sono stati valutati in termini di coerenza con le nozioni teoriche esposte fino ad ora. In particolare, si discuterà a proposito di:

- confronto tra gli output dei due algoritmi descritti;
- confronto tra i tempi di esecuzione dei due algoritmi;
- quantità ottenute nel calcolo delle osservabili, con i rispettivi errori;

Correttezza dell'algoritmo HK

Come anticipato, la correttezza dell'algoritmo implementato è stata definita rispetto all'output dell'algoritmo A , che funge quindi da riferimento. Sono stati eseguiti molti test con vari parametri di input, ma ogni volta “fissando” il reticolo, per avere un confronto sulla stessa struttura. In Fig. 4 viene mostrato un confronto dei valori ottenuti tramite i due algoritmi, variando sia la dimensione del reticolo (ogni linea rappresenta le esecuzioni a dimensione fissata), sia la probabilità di occupazione. Quest'ultima è considerata un parametro di input per una funzione $f(x)$ ed è quindi riscontrabile sull'asse

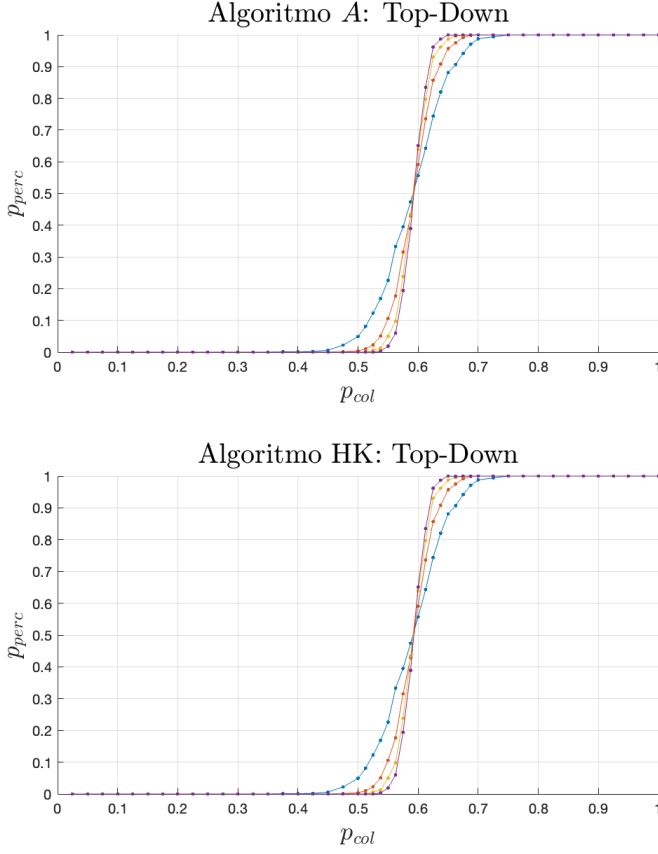


Figura 4: Confronto tra le frequenze di percolazione top-down ottenute nell'esecuzione dei due algoritmi.

delle ascisse. Risulta interessante eseguire un confronto con la Fig. 2 relativa al reticolo di taglia infinita: per dimensioni del reticolo più grandi, ci si avvicina infatti al suddetto grafico. Un'altra caratteristica importante da verificare è che le frequenze di percolazione top-down registrate coincidano con quelle left-right, nel limite dell'errore commesso. Le modalità di svolgimento sono le stesse, con l'aggiunta delle misurazioni dell'errore, calcolato come radice quadrata della quantità $D_{f_{perc}}$ descritta nell'Eq. 9. Nel grafico in Fig. 5 viene mostrato un confronto tra i valori ottenuti nei due casi con l'algoritmo HK. Ciò che balza all'occhio è la superiorità degli errori intorno a 0.6, valore in cui, tra l'altro, si osserva una crescita piuttosto rapida della frequenza di percolazione. Si compone di 3 iterazioni: una per variare la taglia del reticolo, una per variare la probabilità di occupazione e un'ultima per eseguire un numero sufficiente di esperimenti perché i risultati siano significativi. Le frequenze dei due algoritmi sono calcolate con metodi diversi ma equivalenti: nel primo caso si “conta” quante volte la variabile caratteristica ha assunto valore 1 e si divide il totale per il numero di esperimenti N ; nel secondo caso si utilizza la funzione built-in di Matlab `mean(x)`, che svolge gli stessi passaggi. Il Cod. 1 mostra le istruzioni in Matlab per calcolare le quantità mostrate nei due grafici. Si è omessa l'implementazione in codice Matlab delle funzioni `CercaCluster3` e `CercaClusterHK`, del tutto

analoghe all'implementazione mostrata tramite pseudocodice nei Cod. 1 e 2.

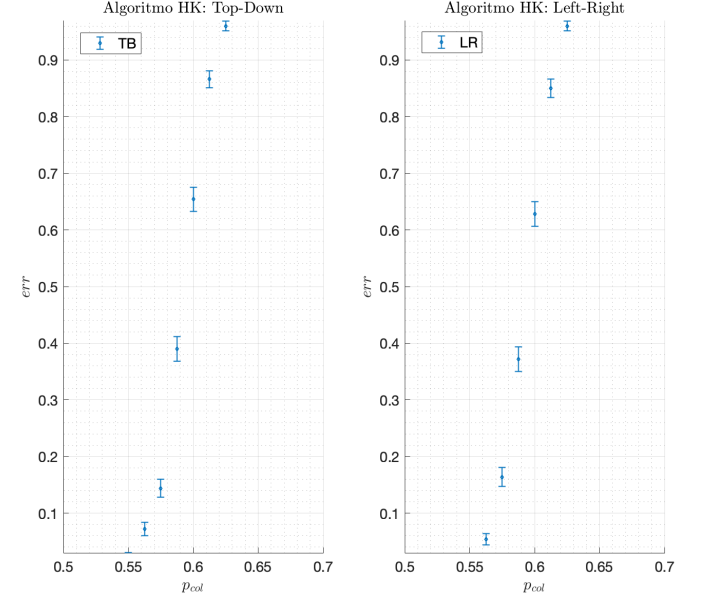


Figura 5: Confronto tra le frequenze di percolazione top-down e left-right, con rispettivi errori.

```

1 for ij = 1:length(L)
2   for ii = 1:length(p)
3     pp = p(ii);
4     s3TB = 0;
5     s3LR = 0;
6     sHKTb = 0;
7     sHKLr = 0;
8     espTB = zeros(N,1);
9     espLR = zeros(N,1);
10    for j = 1:N
11      ret = rand(L(ij))<pp;
12      res3 = CercaCluster3(ret);
13      resHK = CercaClusterHK(ret);
14
15      s3TB = s3TB + res3.percolazioneTB;
16      s3LR = s3LR + res3.percolazioneLR;
17      espTB(j) = resHK.percolazioneTB;
18      espLR(j) = resHK.percolazioneLR;
19    end
20
21    probPercTB3(ij,ii) = s3TB / N;
22    probPercLR3(ij,ii) = s3LR / N;
23    probPercTBHK(ij,ii) = mean(espTB);
24    probPercLRHK(ij,ii) = mean(espLR);
25    erroreTB(ij,ii) = std(espTB) / sqrt(N);
26    erroreLR(ij,ii) = std(espLR) / sqrt(N);
27  end
28 end

```

Codice 1: Porzione di codice relativa al confronto tra algoritmi e alla frequenza di percolazione top-down e left-right.

Calcolo delle osservabili

Lo stesso procedimento necessario per calcolare la frequenza di percolazione è stato svolto per le altre osservabili. In Fig. 6 si possono riscontrare i comportamenti attesi, descritti nella sezione precedente. Anche in questo caso, viene acclusa l'implementazione in Matlab nel Cod. 2. Insieme alle quantità, vengono calcolati anche i rispettivi errori, con tecniche

analoghe a quanto visto fin ora. Per queste quantità valgono le stesse considerazioni fatte sulla natura di f_{perc} , legate alla validità della media e varianza garantita per mezzo di TLC e Legge dei Grandi Numeri.

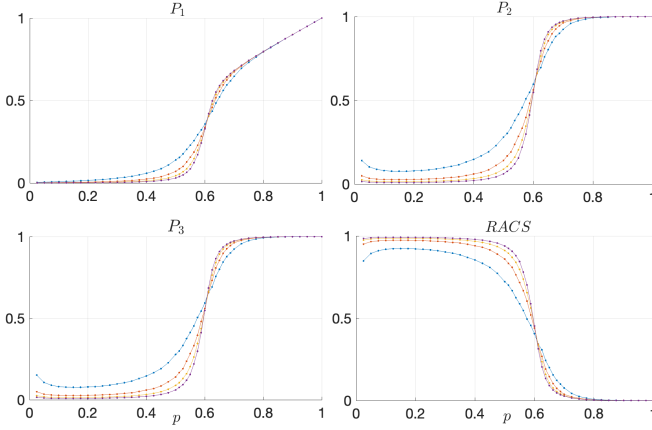


Figura 6: Distribuzioni delle osservabili calcolate in $N = 1000$ esperimenti al variare dei parametri.

```

1 for ij = 1:length(L)
2   for ii = 1:length(p)
3     pp = p(ii);
4     for j = 1:N
5       ret = rand(L(ij))<pp;
6       resHK = CercaClusterHK(ret);
7
8       MYsz(ij,j,ii) = mean(resHK.cluSz);
9       MYmaxSz(ij,j,ii) = max(resHK.cluSz);
10      MYnumCLU(ij,j,ii) = length(resHK.cluSz);
11      MYnumCol(ij,j,ii) = sum(resHK.cluSz);
12    end
13  end
14
15  sMax=squeeze(MYmaxSz(ij,:,:));
16  P1=sMax./L(ij)^2;
17  errore1=std(P1)./sqrt(length(P1));
18  P1=mean(P1);
19
20  P2=sMax./(p*L(ij)^2);
21  errore2=std(P2)./sqrt(length(P2));
22  P2=mean(P2);
23
24  occupied=squeeze(MYnumCol(ij,:,:));
25  P3=sMax./occupied;
26  P3=squeeze(P3);
27  errore3=std(P3)./sqrt(size(P3,2));
28  P3=mean(P3);
29
30  occupiedReduced =
31    squeeze(MYnumCol(ij,:,:)-MYmaxSz(ij,:,:));
32  racs=occupiedReduced./occupied;
33  erroreRacs=std(racs)/sqrt(length(racs));
34  racs=mean(racs);
35 end

```

Codice 2: Porzione di codice per il calcolo delle osservabili.

Per completezza, si aggiunge anche il grafico in Fig. 7 che confronta i vari errori ottenuti nel calcolo di ciascuna osservabile. Occorre prestare attenzione alla scala sugli assi dei grafici: per questioni pratiche di visualizzazione, si è preferito avere risultati più chiari, ma su scale leggermente diverse.

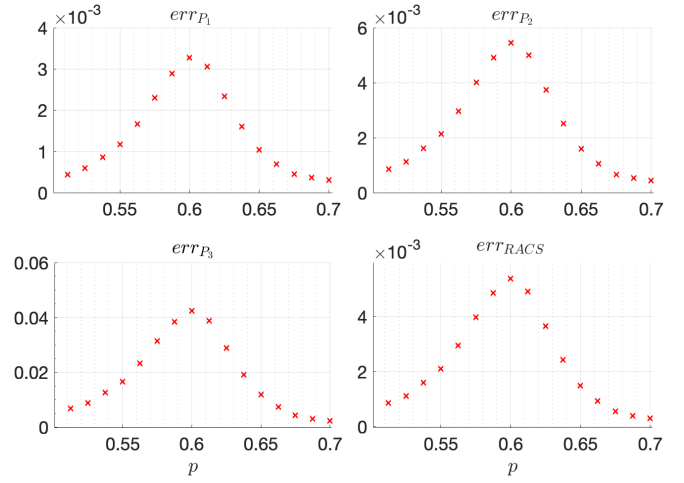


Figura 7: Errori ottenuti nel calcolo delle osservabili.

Tempi di esecuzione

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] —, "Percolation threshold," from *Wolfram MathWorld*, 2002. [Online]. Available: <https://mathworld.wolfram.com/>
- [5] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to percolation theory*. Taylor & Francis, 2018.
- [6] F. Edition, A. Papoulis, and S. U. Pillai, *Probability, random variables, and stochastic processes*. McGraw-Hill Europe: New York, NY, USA, 2002.
- [7] J. Hoshen and R. Kopelman, "Percolation and cluster distribution. i. cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm," *Phys. Rev. B*, vol. 14, pp. 3438-3445, Oct 1976. [Online]. Available: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.14.3438>
- [8] T. Fricke, "The hoshen-kopelman algorithm," URL: <http://www.ocf.berkeley.edu/~fricke/projects/hoshenkopelman/hoshenkopelman.html>, 2004.