



## **Università degli Studi di Napoli Federico II**

Facoltà di SCUOLA POLITECNICA E DELLE SCIENZE DI BASE AREA DIDATTICA DI SCIENZE  
MATEMATICHE FISICHE E NATURALI  
Corso di Laurea Triennale in Fisica

# **TEORIA DEL RANDOM WALK E SIMULAZIONI NUMERICHE**

Candidato:

**Domenico Tagliaferri Ferrara**

Matricola N85000851

Relatore:

**Prof. Mario Nicodemi**

Correlatore:

**Dr. Mattia Conte**

# Indice

<b>Introduzione</b>	<b>2</b>
<b>1 Teoria della probabilità</b>	<b>3</b>
1.1 Definizione di probabilità . . . . .	3
1.2 Variabili casuali . . . . .	3
1.3 Momenti . . . . .	5
1.4 Funzione caratteristica . . . . .	5
1.5 Distribuzioni di probabilità . . . . .	6
1.5.1 Distribuzione binomiale . . . . .	6
1.5.2 Distribuzione gaussiana . . . . .	7
1.6 Teorema del limite centrale . . . . .	8
<b>2 Teoria del Random Walk (RW)</b>	<b>9</b>
2.1 Modello di Einstein e Langevin . . . . .	9
2.2 Teoria RW su reticolo 1D . . . . .	11
2.2.1 Equazione di diffusione e densità di probabilità del RW	11
2.2.2 Scaling-laws per il valore medio e la varianza del RW	13
2.3 Generalizzazione del RW a 2 e 3 dimensioni . . . . .	15
<b>3 Simulazioni numeriche di modelli discreti RW</b>	<b>17</b>
3.1 Simulazioni numeriche RW nel caso 1D . . . . .	17
3.1.1 Algoritmo per generare RW 1D . . . . .	17
3.1.2 Risultati delle simulazioni numeriche . . . . .	17
3.2 Simulazioni numeriche RW nel caso 2D e 3D . . . . .	23
3.2.1 Algoritmo per generare RW 2D e 3D . . . . .	23
3.2.2 Risultati delle simulazioni numeriche . . . . .	23
3.3 Esempi di traiettorie simulate RW 1D, 2D e 3D . . . . .	27
<b>Conclusione</b>	<b>30</b>
<b>Appendice</b>	<b>31</b>
<b>Bibliografia</b>	<b>35</b>

# Introduzione

L'argomento della presente tesi è lo studio delle proprietà teoriche fondamentali del modello Random Walk (RW) mediante l'implementazione di simulazioni numeriche. Sebbene il modello risalga storicamente al 1905, quando venne utilizzato da Einstein per la descrizione fisica del moto browniano, esso riscontra tuttora molteplici applicazioni, dalla modellizzazione dei mercati azionari in finanza a quella di biomolecole in fisica dei polimeri.

In questo lavoro si espongono e si verificano tramite simulazioni numeriche condotte nell'ambiente Python i principali risultati teorici della teoria del RW, partendo dal RW 1-dimensionale (1D) fino alla sua generalizzazione 3D, quest'ultima nota in fisica dei polimeri come "freely-jointed chain".

La tesi è articolata in 3 capitoli. Nel capitolo 1 si richiamano alcuni aspetti della teoria della probabilità, utili per definire le grandezze statistiche studiate nella tesi, come ad es. le definizioni di variabile casuale, di momenti e di funzione caratteristica; nel capitolo 2 si espongono e dimostrano i principali risultati della teoria del RW in 1, 2 e 3 dimensioni, ovvero le scaling-laws che legano gli osservabili statistici del RW (spostamento medio e varianza, distanza end-to-end e raggio di girazione) alla taglia del sistema; nel capitolo 3 si riportano i risultati delle simulazioni numeriche di modelli discreti RW, da 1 a 3 dimensioni, e si verificano le leggi di scala previste dalla teoria. Segue, infine, un'appendice dove sono riportati gli script realizzati per le simulazioni numeriche.

# Capitolo 1

## Teoria della probabilità

### 1.1 Definizione di probabilità

In matematica si definisce la probabilità a partire dal concetto di spazio campionario. Lo spazio campionario, detto anche insieme universo è l'insieme dei possibili risultati di un esperimento casuale. Un qualsiasi suo sottoinsieme viene detto "evento". Ad esempio, nel lancio di un dado a sei facce lo spazio campionario è l'insieme  $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$  e un possibile evento può essere il suo sottoinsieme  $\{1, 2, 4, 6\}$ . Secondo la definizione "classica", la probabilità di un evento è il rapporto tra il numero dei casi favorevoli e il numero dei casi possibili. Indicando con  $\Omega$  l'insieme di casi possibili e con  $|\Omega|$  la sua cardinalità, con  $A$  un evento e con  $|A|$  la sua cardinalità, ovvero il numero dei casi favorevoli ad  $A$ , si definisce la probabilità:

$$P(A) = \frac{|A|}{|\Omega|}.$$

Da questa definizione si deduce che i valori che  $P(A)$  può assumere sono compresi nell'intervallo  $[0, 1]$ , essendo  $0 \leq |A| \leq |\Omega|$ .

### 1.2 Variabili casuali

Una variabile casuale,  $X$ , è una quantità definita da un set di valori possibili che si verificano con una data distribuzione di probabilità. È possibile introdurre il concetto di variabile stocastica discreta considerando  $X$ , su uno spazio campionario  $S$ , come un insieme numerabile di  $x_i$ , dove  $i = 1, 2, \dots, n$  (con  $n$  intero finito o  $n = \infty$ ). Il modello matematico che collega i valori di una variabile casuale alle probabilità che tali valori possano essere osservati viene detto distribuzione o legge di probabilità. Data una qualsiasi variabile casuale  $X$  è possibile definire la funzione di densità di probabilità come un'applicazione  $P_X(x)$  non negativa integrabile secondo Lebesgue e reale di variabile reale tale che la probabilità dell'insieme  $A$  sia data da:

$$P(X \in A) = \int_A P_X(x) dx,$$

per tutti i sottoinsiemi  $A$  dello spazio campionario  $S$ . Intuitivamente, se una distribuzione di probabilità ha densità  $P_X(x)$ , allora l'intervallo  $[x, x + dx]$  ha probabilità  $P_X(x) dx$ . Da qui il nome di funzione di "densità", in quanto essa rappresenta il rapporto tra una probabilità e un'ampiezza. Per la condizione di normalizzazione l'integrale su tutto lo spazio di  $P_X(x)$  deve essere 1.

Nel caso di una variabile casuale discreta, la distribuzione di probabilità  $p_i$ , su un definito spazio campionario  $S$ , soddisfa  $p_i \geq 0$  e  $\sum_{i=1}^{\infty} p_i = 1$ . La funzione di densità di probabilità  $P_X(x)$ , è definita come:

$$P_X(x) = \sum_{i=1}^n p_i \delta(x - x_i), \quad (1.1)$$

con  $\delta(x - x_i)$  la delta di Dirac.

La funzione di distribuzione  $F_X(x)$  è la probabilità che la variabile stocastica  $X$  esista nell'intervallo  $[-\infty, x]$ :

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^x P_X(y) dy.$$

Poichè la densità di probabilità  $P_X(x)$  è sempre positiva, la funzione di distribuzione  $F_X(x)$  deve essere una funzione monotona crescente di  $x$ . Deve inoltre soddisfare le seguenti condizioni:

$$\begin{aligned} F_X(-\infty) &= 0, \\ F_X(+\infty) &= 1. \end{aligned}$$

Infine per una qualsiasi variabile continua a tratti, è possibile definire la probabilità in un intervallo  $\{a \leq x \leq b\}$  come:

$$Prob\{a \leq x \leq b\} = \int_a^b P_X(x) dx;$$

in tal senso la funzione di distribuzione  $F_X(x)$  rappresenta la probabilità di trovare  $X$  nell'intervallo  $[-\infty, x]$ .

### 1.3 Momenti

In statistica quando non è possibile determinare la densità di probabilità  $P_X(x)$ , si cercano informazioni sui momenti di  $X$ . Essi forniscono informazioni sull'ampiezza e sulla forma della  $P_X(x)$ . Per una variabile discreta  $X$  il momento  $n$ -esimo di origine  $m$  è definito come il valore atteso della  $n$ -esima potenza dei valori:

$$\mu_{m,n} = \sum_{i=1}^n (x_i - m)^m p_i.$$

Nel caso di una variabile casuale continua, per  $m = 0$  si ha:

$$\langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n P_X(x). \quad (1.2)$$

Il momento di ordine - 1,  $\langle x \rangle$ , è detto media o valore atteso. A partire dal momento di ordine - 2,  $\langle x^2 \rangle$ , è possibile definire la varianza:

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2. \quad (1.3)$$

Essa fornisce una misura della variabilità dei valori assunti dalla variabile stessa; nello specifico, la misura di quanto essi si discostino quadraticamente dal valore atteso. Ne segue la definizione di deviazione standard della variabile  $X$ ,  $\sigma_x$  come:

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}.$$

### 1.4 Funzione caratteristica

La funzione caratteristica  $f_X(k)$  corrispondente alla variabile stocastica  $X$ , è definita come:

$$f_X(k) = \langle e^{ikx} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} P_X(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n \langle x^n \rangle}{n!} \quad (1.4)$$

Le funzioni caratteristiche sono funzioni continue di  $k$ , inoltre si ha  $f_X(0) = 1$  e  $|f_X(k)| \leq 1$ . Nota la funzione caratteristica di una distribuzione, è possibile risalire alla densità di probabilità  $P_X(x)$ , tramite la trasformata di Fourier:

$$P_X(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-ikx} f_X(k).$$

Analogamente è possibile ottenere i momenti come:

$$\langle x^n \rangle = \lim_{k \rightarrow 0} (-i)^n \frac{d^n}{dk^n} f_X(k).$$

## 1.5 Distribuzioni di probabilità

Nella seguente sezione consideriamo due distribuzioni di probabilità: la binomiale e la gaussiana, caratterizzandone le proprietà.

### 1.5.1 Distribuzione binomiale

Si considerino  $N$  prove indipendenti, ovvero la variabile aleatoria

$$S_N = X_1 + X_2 + \cdots + X_N$$

e si assuma che ogni prova possa assumere solo due possibili valori di uscita:

- il successo con probabilità  $p$
- il fallimento con probabilità  $q = 1 - p$

La distribuzione di probabilità discreta che descrive il numero  $k$  di successi su  $n$  prove effettuate, viene detta distribuzione binomiale:

$$P(k) = P(X_1 + X_2 + \cdots + X_N = k) = \binom{N}{k} p^k q^{N-k},$$

cioè ogni successione con  $k$  successi e  $n - k$  insuccessi ha probabilità  $p^k q^{N-k}$ , mentre il numero di queste successioni, pari al numero di modi (o combinazioni) in cui possono essere disposti i  $k$  successi negli  $n$  tentativi, è dato dal coefficiente binomiale

$$\binom{N}{k} = \frac{N!}{k!(N-k)!}.$$

Tale distribuzione soddisfa la condizione di normalizzazione:

$$\sum_{k=0}^N P(S_N = k) = \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} p^k q^{N-k} = (p+q)^N = (p+1-p)^N = 1.$$

Applicando la (1.2) è possibile ottenere la media come:

$$\langle k \rangle = pN,$$

e la deviazione standard dalla (1.3) come:

$$\sigma_N = \sqrt{Npq}.$$

Esempi di casi di distribuzione binomiale sono i risultati di una serie di lanci di una stessa moneta o di una serie di estrazioni da un'urna (con reintroduzione). Quando una moneta viene lanciata, la probabilità di avere in uscita "testa" o "croce" è  $p = 0.5$ . Per valutare la probabilità di ottenere  $k$  "teste", avendo lanciato la moneta  $N$  volte, è possibile utilizzare la distribuzione binomiale. Nello specifico con  $k = 3$  ed  $N = 5$  si ha:

$$P(S_5 = 3) = \binom{5}{3} \left(\frac{1}{2}\right)^3 \left(\frac{1}{2}\right)^{5-3} \approx 0.3.$$

### 1.5.2 Distribuzione gaussiana

Nel limite  $N \rightarrow \infty$ , la distribuzione binomiale può essere approssimata alla distribuzione gaussiana, come affermato nel teorema del limite centrale nel successivo paragrafo 1.6.

La distribuzione gaussiana è una distribuzione di probabilità continua, la cui funzione di densità, per una variabile casuale  $y$ , è data dalla formula:

$$P_Y(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_Y^2}} e^{-\frac{(y-\mu)^2}{2\sigma_Y^2}} \quad \text{con } y \in R,$$

dove  $\mu$  è il valore atteso e  $\sigma_Y^2$  la varianza.

Dalla formula, si deduce che il grafico di  $P_Y(y)$ , noto come "Campana di Gauss", è simmetrico attorno al valore medio  $\mu$ . Di seguito si riporta un esempio di distribuzione di probabilità gaussiana, prodotta con Python con valore medio = 0 e deviazione standard = 0.3.

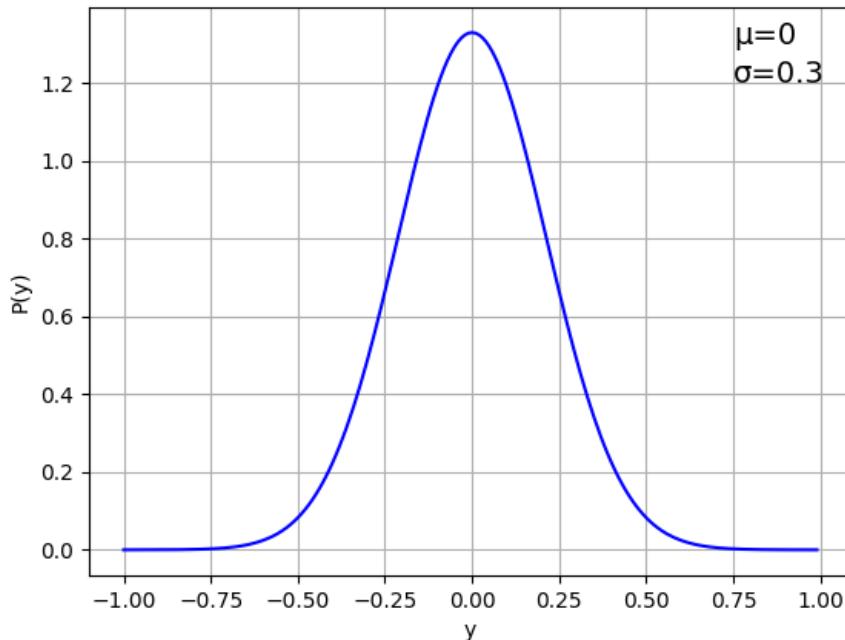


Figura 1.1: Distribuzione di probabilità gaussiana della variabile casuale  $y$ , con valore medio 0 e deviazione standard = 0.3. Il plot è stato prodotto con Python, libreria grafica matplotlib.

## 1.6 Teorema del limite centrale

Il teorema del limite centrale afferma che:

"La somma di una successione di  $N$  variabili aleatorie,  $X_i$ ,  $s$ -indipendenti ed equidistribuite con media  $\mu = \langle x \rangle$  e varianza  $\sigma^2$ , converge in distribuzione alla variabile aleatoria gaussiana con media  $N\mu$  e varianza  $N\sigma^2$ ."

Ciò intuitivamente significa che la somma di un grande numero di variabili stocastiche segue la distribuzione gaussiana, indipendentemente dalla distribuzione di probabilità delle singole variabili stocastiche. Di seguito si fornisce una dimostrazione del teorema.

Si consideri una variabile stocastica  $Y_N$ , così definita:

$$Y_N = \frac{1}{N}(X_1 + X_2 + \cdots + X_N) - \langle x \rangle = Z_1 + Z_2 + \cdots + Z_N,$$

dove  $Z_i = \frac{1}{N}(X_i - \langle x \rangle)$ . La funzione caratteristica per la variabile  $Z_i$ , è:

$$f_{Z_i}(k, N) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ik\frac{N}{N}(x - \langle x \rangle)} P_X(x) = 1 - \frac{1}{2} \frac{k^2}{N^2} \sigma_X^2 + \cdots$$

dove  $\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ .

Considerando la somma di un gran numero di variabili, possiamo trascurare i termini di ordine maggiore nell'espansione. Pertanto la funzione caratteristica per la variabile  $Y_N$  per  $N \rightarrow \infty$ , diventa:

$$\begin{aligned} f_{Y_N}(k, N) &= \left(1 - \frac{1}{2} \frac{k^2}{N^2} \sigma_X^2\right)^N \rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} f_{Y_N}(k, N) = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \left(1 + \frac{1}{\frac{-2N^2}{k^2 \sigma_X^2}}\right)^{\frac{-2N^2}{k^2 \sigma_X^2}} \right)^{\frac{-k^2 \sigma_X^2}{2N}} = e^{\frac{-k^2 \sigma_X^2}{2N}}, \end{aligned}$$

da cui la densità di probabilità:

$$P_{Y_N}(y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-iky} f_{Y_N}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-iky} e^{\frac{-k^2 \sigma_X^2}{2N}} = \sqrt{\frac{N}{2\pi \sigma_X^2}} e^{-\frac{Ny^2}{2\sigma_X^2}}.$$

Se  $P_X(x)$  ha momenti finiti, allora la media del gran numero di misure indipendenti di  $X$  sarà una gaussiana centrata in  $\langle x \rangle$ , con deviazione standard pari a  $\sqrt{\frac{1}{N}}$  volte la deviazione standard della densità di probabilità di  $X$ .

## Capitolo 2

# Teoria del Random Walk (RW)

In questo capitolo esponiamo i maggiori risultati teorici della teoria del RW in 1, 2 e 3 dimensioni.

Segue la definizione di RW:

"Dato un set di  $N$  variabili casuali indipendenti  $S_i$ , ciascuna con una distribuzione di probabilità  $P_i(S_i)$  di media finita  $\mu_i$  e varianza  $(\sigma^2)_i$ , la variabile casuale ottenuta dalla loro somma

$$S(N) = S_1 + S_2 + \cdots + S_N,$$

è chiamata Random Walk di  $N$  elementi".

### 2.1 Modello di Einstein e Langevin

Il Random Walk venne introdotto per la prima volta nel 1905 da Einstein come modello semplificato per spiegare il moto browniano di particelle in un fluido.

Il nome si deve al botanico scozzese Robert Brown, che nel 1827, mentre studiava le particelle di polline della pianta *Clarkia Pulchella* in acqua al microscopio, osservò che esse erano in continuo movimento. Tale moto avveniva in ogni istante in direzioni casuali e senza influenze esterne, come correnti o evaporazione del liquido. Brown sottopose allo stesso esperimento particelle inorganiche come granelli di sabbia e osservò che quest'ultime, se sufficientemente piccole, producevano gli stessi effetti. Brown non seppe fornire spiegazioni ulteriori e la questione restò controversa per molto tempo finché non si comprese che vi era un nesso tra le osservazioni di Brown ed il concetto di molecole in agitazione termica.

L'analisi successiva di Einstein fornì una descrizione quantitativa del fenomeno, ipotizzando che il moto browniano fosse dovuto agli urti casuali dei colloidì (particelle con almeno una dimensione nel range 1-1000 nm) con le molecole del fluido circostante, a loro volta mosse da agitazione termica.

Quantitativamente l'idea di Einstein si basa sulle seguenti considerazioni:

L'energia cinetica di una particella di massa  $m$  che trasla con velocità  $v$  è:

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2. \quad (2.1)$$

Il teorema di equipartizione dell'energia garantisce che in equilibrio termico tutti i componenti di una soluzione hanno la stessa energia cinetica media pari a:

$$\langle E_k \rangle = \frac{3}{2} kT, \quad (2.2)$$

con  $T$  Temperatura fissata e  $k$  la costante di Boltzmann. Dall'espressioni (2.1) e (2.2) si ottiene che la radice della velocità quadratica media di una particella è:

$$\sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}.$$

Sperimentalmente ciò implica che la velocità del moto cresce all'aumentare della temperatura e che fissata quest'ultima, un colloide si muove più lentamente di una molecola, a causa della massa maggiore.

Sul piano teorico, il lavoro di Einstein venne elaborato da M. Smoluchowski e P. Langevin. Quest'ultimo in particolare, sviluppò l'equazione del moto per una particella browniana a partire dalle seguenti considerazioni:

Si consideri una particella immersa in un fluido e si assuma che tale particella sia libera di muoversi in esso. Considerando che il fluido si oppone al moto con una forza di attrito viscoso proporzionale alla velocità, e una forza random  $F(t)$ , dovuta alle fluttuazioni casuali, possiamo scrivere l'equazione del moto per tale particella come:

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \gamma \frac{dx(t)}{dt} = \frac{F(t)}{m},$$

dove  $\frac{dx(t)}{dt}$  e  $x(t)$  sono rispettivamente la velocità e la posizione, mentre  $\gamma$  è il coefficiente di attrito.

La forza random  $F(t)$  è una variabile stocastica dovuta a fluttuazioni causate dal fluido, sulla particella browniana. Formalmente ciò si traduce assumendo che  $F(t)$  abbia una distribuzione gaussiana, con media nulla, tale che

$$\langle F(t) \rangle = 0$$

e sia

$$\langle F(t_1)F(t_2) \rangle = 2\pi K_0 \delta(t_1 - t_2),$$

dove  $K_0$  è una costante e  $\delta(t_1 - t_2)$  è la delta di Dirac.

Moltiplicando entrambi i membri dell'equazione di Langevin per  $x$  e considerando la media risulta:

$$\langle x \frac{d^2x}{dt^2} \rangle + \gamma \langle x \frac{dx}{dt} \rangle = 0,$$

dove si è usato  $\langle xF(t) \rangle = 0$ .

Se consideriamo che:

$$x \frac{dx}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dx^2}{dt},$$

sostituendo otteniamo:

$$x \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d}{dt} \left( x \frac{dx}{dt} \right) - \left( \frac{dx}{dt} \frac{dx}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \left( x \frac{dx}{dt} \right) - \langle v^2 \rangle =$$

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left( x \frac{dx^2}{dt} \right) - \langle v^2 \rangle,$$

da cui in definitiva:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle \frac{dx^2}{dt} \rangle - \langle v^2 \rangle + \frac{\gamma}{2} \langle \frac{dx^2}{dt} \rangle = 0.$$

Ponendo  $\langle v^2 \rangle = u$  per  $t \rightarrow \infty$  si ha:

$$\langle \frac{dx^2}{dt} \rangle = \frac{2u}{\gamma} = \frac{K_0}{m^2 \gamma^2}$$

o più propriamente la soluzione:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{K_0}{m^2 \gamma^2} t,$$

dove definendo mediante

$$D = \frac{K_0}{2m^2 \gamma^2}$$

il coefficiente di diffusione, si ottiene:

$$\langle x^2 \rangle = 2Dt.$$

Questa relazione, che verificheremo nel capitolo 3 con simulazioni numeriche su reticolo, afferma che  $\langle x^2 \rangle$  è proporzionale al tempo ed è caratteristica del RW. Infatti, da un punto di vista sperimentale, si osserva che lo spostamento quadratico della posizione dei colloidì varia linearmente nel tempo in proporzione ad un coefficiente  $D$  che dipende dal fluido.

L'analisi matematica di questo fenomeno cambiò il modo di vedere i fenomeni fisici statistici portando alla nascita delle cosiddette "equazioni differenziali stocastiche".

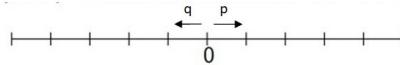
## 2.2 Teoria RW su reticolo 1D

In questa sezione esponiamo i risultati della teoria del RW su un reticolo 1D. Questa versione discreta del modello è anche nota come "binomial tree" in letteratura.

### 2.2.1 Equazione di diffusione e densità di probabilità del RW

Consideriamo una particella che compie  $N$  spostamenti di passo  $l$  lungo l'asse  $x$ , partendo dalla posizione  $x = 0$ .

Supponiamo che essa abbia una probabilità  $p$  di muoversi a destra (nella direzione positiva delle  $x$ ) e una probabilità  $q = 1 - p$  di muoversi a sinistra (nella direzione negativa delle  $x$ ). Tenendo conto che ogni spostamento è indipendente, per lo spostamento  $i$ -esimo, la variabile stocastica  $X_i$  avrà  $x = +l$  per spostamenti verso destra, mentre  $x = -l$  per spostamenti verso sinistra.



Se consideriamo  $p = q = 1/2$  la densità di probabilità per lo spostamento  $i$ -esimo è per la (1.1):

$$P_{X_i}(x) = \frac{1}{2} (\delta(x + l) + \delta(x - l)),$$

mentre la funzione caratteristica per  $X_i$  è data da:

$$f_{X_i}(k) = \cos(kl).$$

Infatti dalla (1.4) si ha:

$$f_{X_i}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ikx} P_{X_i}(x) = \frac{1}{2}(e^{ikl} + e^{-ikl}) = \cos(kl).$$

Lo spostamento netto,  $Y_N$ , della particella dopo  $N$  spostamenti è dato da:  $Y_N = X_1 + X_2 + \dots + X_N$  e la funzione caratteristica corrispondente è:

$$f_{Y_N}(k) = (\cos(kl))^N = \left(1 - \frac{k^2 l^2}{2!} + \dots\right)^N \approx 1 - \frac{N k^2 l^2}{2!}.$$

Se consideriamo un tempo  $\tau$  infinitesimalmente piccolo tra due spostamenti consecutivi possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} f_Y(k, (N+1)\tau) - f_Y(k, N\tau) &= (\cos(kl) - 1)f_Y(k, N\tau) = \\ &= \left(1 - \frac{k^2 l^2}{2!} + \dots - 1\right)f_Y(k, N\tau) = -\frac{k^2 l^2}{2}f_Y(k, N\tau). \end{aligned}$$

Nel limite  $N \rightarrow \infty$  e  $\tau, l \rightarrow 0$ , si nota che:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{f_Y(k, (N+1)\tau) - f_Y(k, N\tau)}{\tau} = \frac{\partial f(x, t)}{\partial t},$$

con  $t = N\tau$ . D'altra parte però,

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\tau \rightarrow 0} \lim_{l \rightarrow 0} \frac{f_Y(k, (N+1)\tau) - f_Y(k, N\tau)}{\tau} &= \left(-\frac{k^2 l^2}{2\tau} \dots\right) f_Y(k, N\tau) = \\ &= -Dk^2 f(x, t). \end{aligned}$$

dove  $D = \frac{l^2}{2\tau}$  viene detto coefficiente di diffusione del Random Walk.  
Da ciò si ottiene l'equazione:

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = -Dk^2 f(x, t),$$

la cui soluzione per la condizione iniziale  $f(x, 0) = 1$  è:

$$f(x, t) = e^{-Dk^2 t}.$$

La distribuzione di probabilità risulta essere pertanto:

$$P(y, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{iky} e^{-Dk^2 t} = \sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}} e^{-\frac{y^2}{4Dt}}. \quad (2.3)$$

Quindi la densità di probabilità per un random walker è una gaussiana, la cui deviazione standard è  $\sigma = \sqrt{2Dt}$ .

Un altro modo per ottenere questo risultato è considerare anziché la funzione caratteristica  $f(x, t)$ , la corrispondente probabilità  $P(x, t)$  che la particella si trovi nella posizione  $x$  al tempo  $t$ . Appare chiaro che risulta:

$$P(x, t) = \frac{1}{2}(P(x + l, t - \tau) + P(x - l, t + \tau)).$$

Se consideriamo nuovamente la differenza tra due spostamenti in un tempo infinitesimo  $\tau$  otteniamo:

$$\frac{P(x, t) - P(x, t - \tau)}{\tau} = \frac{P(x + l, t - \tau) + P(x - l, t + \tau) - 2P(x, t - \tau)}{2\tau} \quad (2.4).$$

Sviluppando in serie di Taylor i termini:

$$\begin{aligned} P(x, t - \tau) &\approx P(x, t) - \frac{\partial P(x, t)}{\partial t}\tau \\ P(x \pm l, t - \tau) &\approx P(x, t) \pm \frac{\partial P(x, t)}{\partial x}l + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}l^2 - \frac{\partial P(x, t)}{\partial t}\tau \end{aligned}$$

e sostituendo nella (2.4), otteniamo dopo ovvie cancellazioni l'equazione:

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}, \quad (2.5)$$

ossia la cosiddetta Equazione di Diffusione, la cui soluzione è proprio una gaussiana nella forma (2.3).

### 2.2.2 Scaling-laws per il valore medio e la varianza del RW

In questo paragrafo analizziamo le leggi di scala che legano i momenti statistici del RW (media e varianza) alla taglia del cammino simulato.

Consideriamo come prima il caso in cui una particella abbia la stessa probabilità di muoversi a destra o a sinistra lungo l'asse  $x$ . Questo caso si può realizzare immaginando che prima di ogni passo di lunghezza  $l$ , la particella lanci una moneta e a seconda del risultato faccia la sua scelta. Dopo  $N$  passi la particella avrà raggiunto la posizione:

$$x(N) = \sum_{i=1}^N s_i,$$

con

$$\begin{cases} s_i = +l & \text{se TESTA} \\ s_i = -l & \text{se CROCE.} \end{cases}$$

Pensiamo ora a quale sia la distanza media percorsa dalla particella. È immediatamente ovvio che a parità di probabilità di andare a destra e a sinistra risulti:

$$\langle x(N) \rangle = 0,$$

ovvero, la posizione media sarà sempre all'origine. Ma questo ovviamente non significa che la particella è sempre a zero. Significa che la probabilità di trovare la particella da qualche parte è centrata in  $x = 0$ , ma naturalmente la distribuzione di probabilità

si allarga con l'aumentare del numero di passi  $N$ .

Per avere un controllo sull'allargamento, consideriamo invece lo spostamento al quadrato. Possiamo riscrivere questo come:

$$x(N)^2 = \left( \sum_{i=1}^N s_i \right)^2 = \sum_{i=1}^N s_i \sum_{j=1}^N s_j = \sum_{i=1}^N s_i^2 = \sum_{i=1}^N \sum_{i \neq j} s_i s_j$$

Se consideriamo una coppia  $s_i s_j$  per una data coppia  $i, j, j \neq i$  questa quantità sarà:

$$\begin{cases} s_i = +l^2 & \text{con 50\% di probabilità} \\ s_i = -l^2 & \text{con 50\% di probabilità} \end{cases}$$

quindi, in media la somma su  $s_i s_j$  sarà zero! Ma d'altra parte:

$$s_i^2 = +l^2,$$

indipendentemente dal fatto che  $s_i$  sia  $+l$  o  $-l$ . Quindi la media dopo  $N$  passi sarà:

$$\langle x^2(N) \rangle = l^2 N. \quad (2.6)$$

Quest'ultima equazione, ricavata nel caso discreto di un reticolo, coincide con la varianza associata alla distribuzione gaussiana continua del Random Walk:

$$\sigma^2 = 2Dt. \quad (2.7)$$

Infatti essendo il coefficiente di diffusione  $D = \frac{l^2}{2\tau}$  ed  $t = N\tau$  si ottiene proprio la (2.6).

In generale, è possibile rinunciare al requisito che un passo in tutte le direzioni venga compiuto con uguale probabilità. Supponiamo ad esempio, come detto, che la probabilità di spostarsi a destra sia  $p$  e a sinistra  $q = 1 - p$ .

Ciò introdurrà un cosiddetto "drift" nel sistema e avremo:

$$\langle x(N) \rangle = (p - q)lN, \quad (2.8)$$

che è uguale a 0 solo se  $p = q$ .

Questo è chiamato "Random Walk polarizzato" e corrisponde alla macroscopica equazione di diffusione con un termine aggiuntivo che può essere interpretato come velocità:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} - v \frac{\partial P(x,t)}{\partial x}.$$

L'interpretazione fisica può ad es. essere una goccia di pioggia che cade in una brezza vorticosa.

Per quanto riguarda la varianza dello spostamento invece, per  $p \neq q$  si ha in generale:

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \langle \langle x^2(N) \rangle - \langle x(N) \rangle^2 \rangle = 4pqNl^2 \quad (2.9)$$

Questa relazione sarà verificata, come vedremo, tramite simulazioni numeriche nel Capitolo 3. Essa fa parte della più generale scaling-law che lega la media dello spostamento quadratico di un cammino aleatorio al numero  $N$  di passi effettuati, del tipo:

$$\langle \Delta x^2 \rangle \propto N^{2\nu},$$

dove  $\nu$  è un esponente che caratterizza il cammino scelto. Nel caso del RW,  $\nu = \frac{1}{2}$ , da cui segue la (2.9).

### 2.3 Generalizzazione del RW a 2 e 3 dimensioni

Le considerazione fatte finora sul modello Random Walk 1D si possono facilmente estendere al caso 2D e 3D. Nello specifico, il caso 3D risulta particolarmente interessante in quanto presenta applicazioni pratiche in ambito biofisico. Infatti è possibile descrivere la struttura di alcuni semplici polimeri utilizzando il cosiddetto modello del "freely-jointed chain", che non è altro che un modello di RW tridimensionale.

In un Random Walk 3D si studia il moto di una particella vincolata a muoversi nello spazio spostandosi casualmente ad ogni passo di una certa quantità  $l$ . Stesso ragionamento vale nel caso 2D, vincolando la particella però, a muoversi nel piano. Se immaginiamo di unire ciascun punto individuato dalla particella dopo  $N$  passi e supponendo che  $l$  sia unitario possiamo interpretare la catena formatasi come un polimero e ciascun segmento tra due punti consecutivi come un monomero. In questo senso dopo  $N$  passi la lunghezza totale dispiegata del polimero è:

$$L = Nl.$$

Un osservabile fondamentale della fisica dei polimeri è il vettore end-to-end, ossia quel vettore che unisce le due estremità del polimero. Nel modello considerato esso collega la posizione iniziale della particella alla posizione  $N$ -esima.

Se indichiamo con  $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$  i vettori corrispondenti ai singoli monomeri, e quindi che individuano la posizione della particella al passo  $j$ -esimo rispetto al passo precedente, il vettore end-to-end risulta essere:

$$\vec{R} = \sum_{i=1}^N \vec{r}_i.$$

La norma del vettore end-to-end è chiamata distanza end-to-end.

Se presumiamo che il numero di monomeri  $N$  sia grande, ossia per  $N \rightarrow \infty$ , è possibile applicare il teorema del limite centrale, dal quale risulta:

$$\langle \vec{R} \rangle = \sum_{i=1}^N \langle \vec{r}_i \rangle = \vec{0}$$

ossia, le due estremità della catena non sono coincidenti, ma fluttuano l'una attorno all'altra.

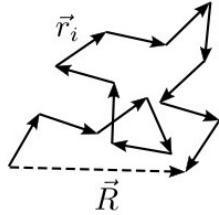


Figura 2.1: Esempio di RW, con  $\vec{r}_i$  i vettori corrispondente ai singoli monomeri ed  $\vec{R}$  il vettore end-to-end del polimero.

Analogamente al caso 1D è possibile dimostrare che nell'ipotesi di  $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$  indipendenti ed  $N \rightarrow \infty$ , il vettore end-to-end della catena si distribuisce secondo una gaussiana della forma:

$$P(\vec{R}) = \left( \frac{3}{2\pi N l^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{3\vec{R}^2}{2Nl^2}},$$

con varianza:

$$\langle \vec{R}^2 \rangle = Nl^2 = Ll. \quad (2.10)$$

Quest'ultima relazione ci conferma la scaling-law tra  $R$  ed  $N$  con esponente  $1/2$ , la quale sarà verificata nel capitolo 3 per via numerica.

Un'altra quantità usata frequentemente nella fisica dei polimeri è il raggio di girazione  $R_g$ , il quale fornisce una stima dell'estensione spaziale del polimero. Fissato il centro di massa del polimero esso è definito come la distanza radiale da un punto che avrebbe un momento di inerzia uguale all'effettiva distribuzione della massa del corpo, se la massa totale del corpo fosse concentrata lì.

In altri termini deve valere:

$$MR_g^2 = M(r_1^2 + r_2^2 + \dots + r_N^2)/N,$$

dove  $m$  indica la massa di ciascun monomero ed  $M = Nm$  la massa del polimero. Da ciò si ottiene:

$$R_g^2 = (r_1^2 + r_2^2 + \dots + r_N^2)/N.$$

La media quadratica della distanza end-to-end può essere correlata alla media quadratica del raggio di girazione di un polimero dalla relazione:

$$\langle R_g^2 \rangle = \frac{\langle R^2 \rangle}{6}. \quad (2.11)$$

Da questa equazione si deduce che anche  $R_g$  scala come  $N$ , come verificheremo numericamente nel capitolo 3.

# Capitolo 3

## Simulazioni numeriche di modelli discreti RW

In questo capitolo implementiamo simulazioni numeriche di modelli discreti RW in 1, 2 e 3 dimensioni e verifichiamo le principali relazioni teoriche dei capitoli precedenti della teoria RW. Le simulazioni e l'analisi dati sono state realizzate usando il linguaggio di programmazione Python.

### 3.1 Simulazioni numeriche RW nel caso 1D

#### 3.1.1 Algoritmo per generare RW 1D

Nel caso 1D è stato sviluppato un algoritmo per la verifica delle relazioni (2.8) e (2.9). Esso simula il moto casuale di una particella lungo un reticolo (asse  $x$ ), che parte dalla posizione iniziale  $x = 0$ .

Lo script utilizza una funzione random che genera un numero casuale  $p1$  compreso nell'intervallo  $[0,9]$  e che stabilisce ad ogni passo la probabilità con la quale la particella può muoversi a destra o a sinistra. Nel caso in esame si è considerato il passo  $l$  del reticolo di lunghezza unitaria. Lo script utilizzato è riportato per intero in Appendice.

#### 3.1.2 Risultati delle simulazioni numeriche

In questa sezione si presentano i risultati delle simulazioni numeriche RW su reticolo 1D (noto anche come "Binomial tree"). In particolare, verifichiamo la relazione (2.8) e la scaling-law (2.9) studiate nel capitolo 2, ovvero:

$$\begin{aligned} \langle x(N) \rangle &= (p - q)N \\ \langle \Delta x^2 \rangle &= 4pqN. \end{aligned}$$

Per prima cosa, abbiamo verificato queste leggi di scala fissando il numero di passi  $N$ . Operativamente, abbiamo scelto  $N = 10$  e tre valori di riferimento per le probabilità:  $p = 0.2, 0.5, 0.7$ . Per ogni  $p$  abbiamo prodotto un ensemble statistico di  $Np = 1000$

RW; è stata poi calcolata la media di ensemble  $\langle x(10) \rangle$  e  $\langle \Delta x^2(10) \rangle$ . I dati analizzati sono stati plottati tramite istogrammi in modo da poter osservare la frequenza dei risultati ottenuti e confrontare quest'ultimi con i valori attesi.

Nel grafico in alto di fig. 3.1 mostriamo la distribuzione di  $\langle x \rangle$  per i suddetti parametri. Come atteso dalla teoria, abbiamo tre gaussiane centrate su 0 (blu,  $p = 0.5$ ), -6 (rosso,  $p = 0.2$ ), 4 (arancione,  $p = 0.7$ ).

Infatti:

$$\begin{aligned} p = 0.2 \quad q = 0.8 \quad & \langle x(10) \rangle = (0.2 - 0.8)10 = -6 \\ p = q = 0.5 \quad & \langle x(10) \rangle = (0.5 - 0.5)10 = 0 \\ p = 0.7 \quad q = 0.3 \quad & \langle x(10) \rangle = (0.7 - 0.3)10 = 4 \end{aligned}$$

Nel grafico in basso invece, consideriamo un bar plot dove confrontiamo la media degli istogrammi  $\langle x(10) \rangle$  con i valori attesi dalla teoria. Gli errori statistici sulla media, stimati come errore standard, sono dell'ordine di  $10^{-3}$  e per questo non visibili graficamente. Osserviamo complessivamente un accordo significativo tra le nostre simulazioni e i risultati teorici attesi.

Nel grafico in alto di fig. 3.2 mostriamo la distribuzione delle varianze del RW. Come atteso, l'istogramma con  $p = 0.5$  (blu) è centrato su  $\langle \Delta x^2 \rangle = 10$ , quello con  $p = 0.2$  (rosso) è centrato su  $\langle \Delta x^2 \rangle = 6.4$  e quello con  $p = 0.7$  (arancione) è centrato su  $\langle \Delta x^2 \rangle = 8.4$ .

Infatti:

$$\begin{aligned} p = 0.2 \quad q = 0.8 \quad & \langle \Delta x^2(10) \rangle = 4 * 0.2 * 0.8 * 10 = 6.4 \\ p = q = 0.5 \quad & \langle \Delta x^2(10) \rangle = 4 * 0.5 * 0.5 * 10 = 10 \\ p = 0.7 \quad q = 0.3 \quad & \langle \Delta x^2(10) \rangle = 4 * 0.7 * 0.3 * 10 = 8.4 \end{aligned}$$

Nel grafico in basso invece, consideriamo un bar plot dove confrontiamo la media degli istogrammi  $\langle \Delta x^2(10) \rangle$  con i valori attesi dalla teoria. Gli errori statistici sulla media, stimati come errore standard, sono dell'ordine di  $10^{-3}$  e per questo non visibili graficamente. Osserviamo complessivamente un accordo significativo tra le nostre simulazioni e i risultati teorici attesi.

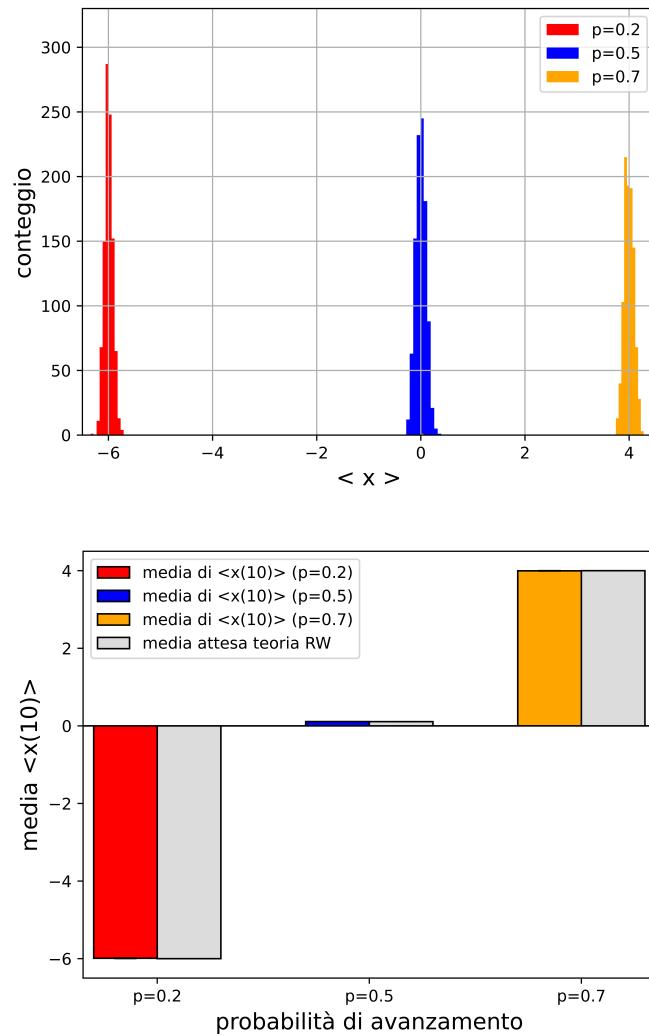


Figura 3.1: In alto è raffigurato un istogramma della posizione media di  $Np=1000$  particelle dopo  $N = 10$  passi, per tre diverse probabilità di avanzamento:  $p=0.2, 0.5, 0.7$ . I valori della posizione media stimati si distribuiscono attorno ai valori previsti dalla teoria. Nel grafico in basso, i valori medi delle distribuzioni  $\langle x \rangle$  sono in accordo con le previsioni teoriche per  $N = 10$ .

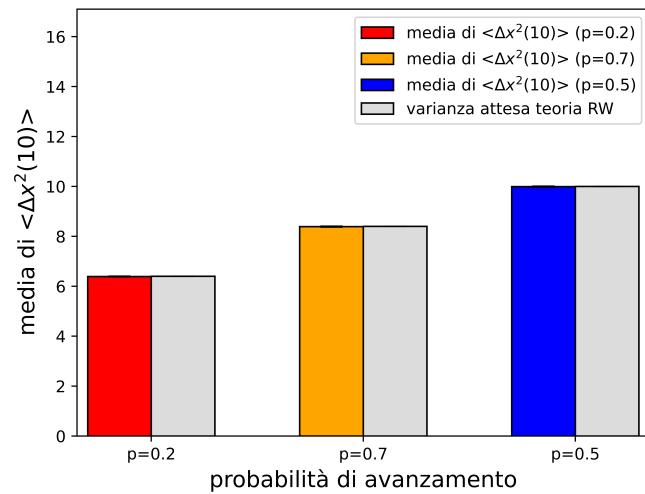
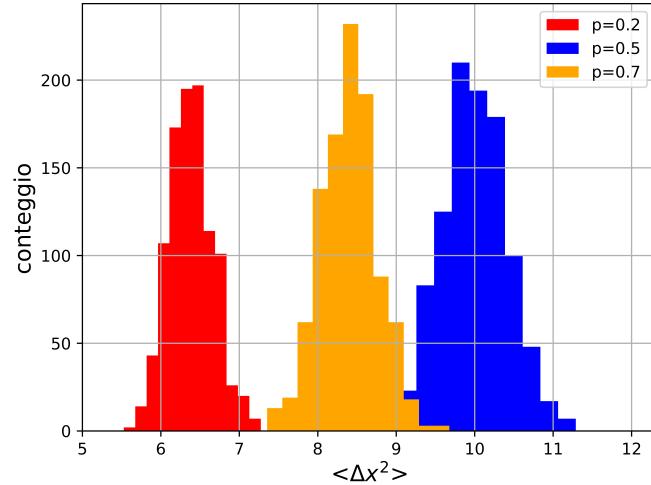


Figura 3.2: In alto è raffigurato un istogramma della varianza della posizione di  $Np=1000$  particelle dopo  $N = 10$  passi corrispondenti alle tre diverse probabilità di avanzamento di Fig. 3.1. I valori dello spostamento quadratico medio ottenuti si distribuiscono attorno ai valori previsti teoria. Nel grafico in basso, i valori medi delle distribuzioni  $\langle \Delta x^2 \rangle$  sono in accordo con le previsioni teoriche per  $N = 10$ .

Il passo successivo è verificare le leggi di scala (2.8) e (2.9) come funzioni di  $N$ . A tal fine, generiamo RW di taglia variabile, scegliendo  $N=100, 200, 500, 1000, 2000$  e  $5000$  e producendo  $500$  configurazioni RW per ogni  $N$ .

In fig. 3.3 mostriamo la media di ensemble dello spostamento  $\langle x \rangle$  come funzione di  $N$  (cioè ogni punto del grafico è la media su  $500$  conformazioni a  $N$  fissato). Come atteso dalla teoria, ovvero dalla (2.8),  $\langle x(N) \rangle = (p - q)N$ , osserviamo che i valori plottati approssimano le rette:

$$\begin{aligned} y &= -0.6x && \text{per } p = 0.2 \\ y &= 0 && \text{per } p = 0.5 \\ y &= 0.4x && \text{per } p = 0.7 \end{aligned}$$

dove con  $y$  abbiamo indicato  $\langle x(N) \rangle$  ed  $x$  il numero di passi  $N$ .

Gli errori statistici per ciascun punto, stimati come errore standard sono inferiore al 2% e pertanto contenuti nella taglia dei pallini rappresentati.

Il fit è statisticamente robusto, come quantificato dal coefficiente di determinazione  $r^2$ :

$$\begin{aligned} r^2 &= 0.991 && \text{per } p = 0.2 \\ r^2 &= 0.981 && \text{per } p = 0.5 \\ r^2 &= 0.980 && \text{per } p = 0.7 \end{aligned}$$

Analogamente, in fig. 3.4 plottiamo la media di ensemble della varianza  $\langle \Delta x^2 \rangle$  in funzione di  $N$  in un grafico log-log.

Osserviamo che le rette presentano la stessa pendenza  $2\nu$  pari ad 1 e vi è uno shift tra di esse dovuto al termine  $\log(4pq)$  in accordo con la (2.9).

Anche in questo caso gli errori statistici per ciascun punto, stimati come errore standard, sono inferiore al 2% e pertanto contenuti nella taglia dei pallini rappresentati.

I fit mostrano un accordo significativo con le rette previste dalla teoria:

$$\begin{aligned} y &= x - 0.19 && \text{con } r^2 = 0.987 && \text{per } p = 0.2 \\ y &= x && \text{con } r^2 = 0.993 && \text{per } p = 0.5 \\ y &= x - 0.07 && \text{con } r^2 = 0.987 && \text{per } p = 0.7. \end{aligned}$$

In sintesi le simulazioni numeriche condotte su reticolo 1D forniscono risultati che sono statisticamente consistenti con la teoria RW.

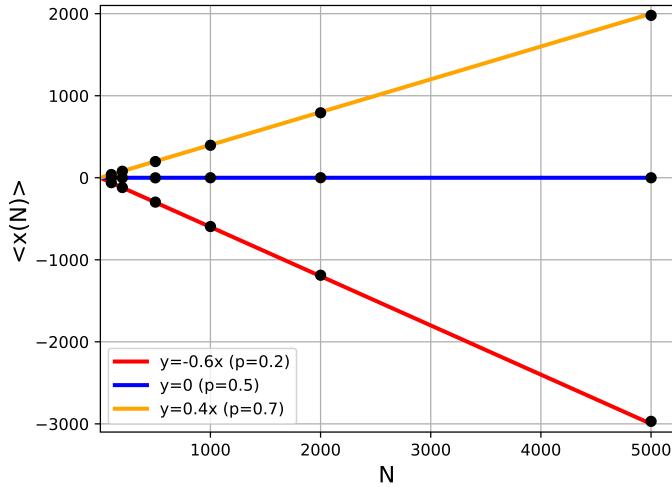


Figura 3.3: Grafico  $\langle x(N) \rangle$  vs  $N$  di un cammino RW su reticolo 1D per diverse probabilità  $p$  di avanzamento. I punti raffigurati corrispondono a  $N=100, 200, 500, 1000, 2000$  e  $5000$ . I valori  $\langle x(N) \rangle$  ottenuti dalle simulazioni sono fittati dagli andamenti previsti dalla teoria.

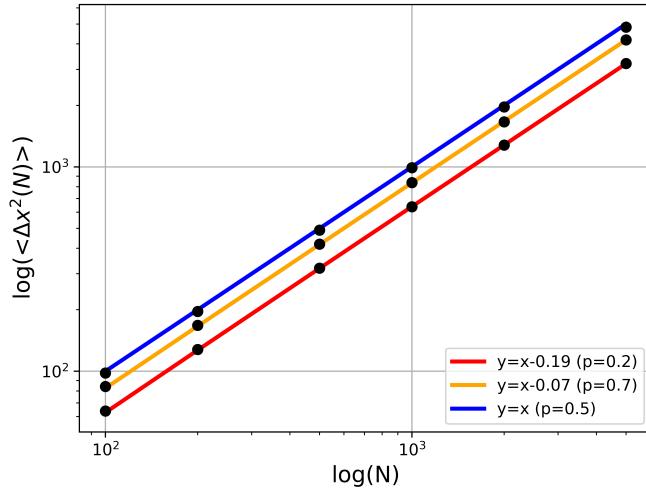


Figura 3.4: Grafico  $\log(\langle \Delta x^2(N) \rangle)$  vs  $\log(N)$  per un RW 1D con diverse probabilità  $p$  di avanzamento e per  $N=100, 200, 500, 1000, 2000$  e  $5000$ . Le rette plottate confermano la scaling-law prevista dalla teoria.

## 3.2 Simulazioni numeriche RW nel caso 2D e 3D

Il RW in 2 e 3 dimensioni consiste nel moto di una particella vincolata a muoversi in maniera casuale rispettivamente nel piano e nello spazio. Nel seguito discuteremo i risultati delle simulazioni numeriche principalmente nel caso 3D, essendo la descrizione 2D una banale conseguenza di quest'ultimo.

### 3.2.1 Algoritmo per generare RW 2D e 3D

Lo script realizzato per generare RW genera una direzione casuale a partire dall'origine (0,0,0). Su questa direzione casuale fissa un punto  $P_1$  a distanza  $l = 0.97$  dall'origine. Centrando su  $P_1$ , si genera una seconda direzione casuale sulla quale si fissa un punto  $P_2$  che dista  $l = 0.97$  da  $P_1$ . E così via...

La catena RW che si forma in tal modo può immaginarsi come un polimero nello spazio, i cui monomeri sono i punti di coordinate  $x, y, z$  generati dall'algoritmo. Tale algoritmo vale anche nel caso 2D, a patto di considerare vettori nel piano. Gli script completi per il caso 2D e 3D si trovano in Appendice.

### 3.2.2 Risultati delle simulazioni numeriche

In questa sezione analizziamo le leggi di scala previste dalla teoria del RW 3D riguardanti il vettore end-to-end  $R$  e il raggio di girazione  $R_g$  (equazioni (2.10) e (2.11) del capitolo 2), ovvero:

$$\begin{aligned} \langle R^2(N) \rangle &\propto N^{2\nu} \\ \langle R_g^2(N) \rangle &\propto N^{2\nu} \\ \langle R_g^2(N) \rangle &= \frac{\langle R^2(N) \rangle}{6}. \end{aligned}$$

A tal fine consideriamo RW di lunghezza  $N=100, 200, 500, 1000, 2000$ , e 5000. Per ogni  $N$ , è stato prodotto un ensemble statistico di 500 polimeri.

Per verificare le leggi di scala (2.10) e (2.11) conviene plottare gli osservabili in gioco, cioè  $\langle R \rangle$  (o  $\langle R_g \rangle$ ) e  $N$ , su assi log-log. Infatti, in tal modo, l'esponente  $\nu$  si può estrapolare semplicemente come pendenza della retta

$$\log(\langle R \rangle) = 2\nu \log(N).$$

Usando questo approccio, mostriamo in fig. 3.5 l'andamento di  $\langle R^2 \rangle$  in funzione di  $N$ . Ogni punto del grafico è la media di ensemble di  $\langle R^2 \rangle$  realizzata su 500 conformazioni RW. I punti sono fittati dalla retta:

$$y = x,$$

come previsto dalla teoria con un coefficiente di determinazione  $r^2 = 0.94$ .

Gli errori statistici su ciascun punto, stimati come errore standard sono inferiore al 3% e pertanto la loro raffigurazione è contenuta nella taglia dei punti rappresentati.

Analogamente, in fig. 3.6 si mostra  $\langle R_g^2 \rangle$  vs  $N$  su assi log-log. Ogni punto

del grafico è la media di ensemble di  $\langle R_g^2 \rangle$  realizzata su 500 conformazioni RW. I punti sono fittati dalla retta:

$$y = x - 1.79,$$

con un coefficiente di determinazione  $r^2 = 0.96$ . Anche in questo caso gli errori statistici dell'ordine di  $10^{-3}$  sono contenuti nella taglia dei punti rappresentati.

Questo risultato conferma la previsione teorica. Infatti dal momento che  $\langle R^2 \rangle$  scala con  $N$  per mezzo di un fattore  $\nu = 0.5$  e che  $\langle R_g^2 \rangle$  è legato al vettore end-to-end per mezzo di un fattore  $1/6$ , ci aspettiamo che anche il raggio di girazione scali con lo stesso esponente  $\nu$  moltiplicato per 6.

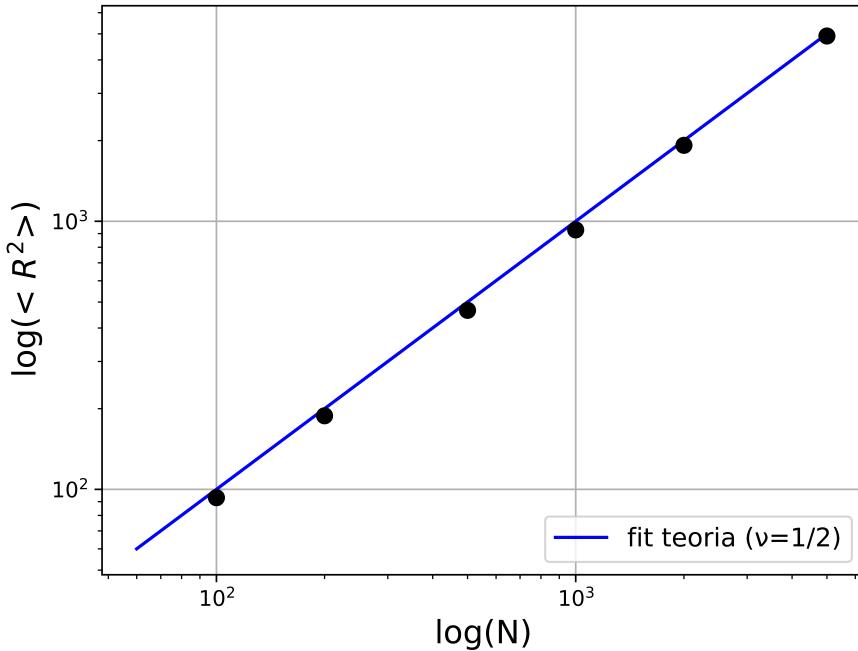


Figura 3.5: Grafico  $\langle R^2 \rangle$  vs  $N$  in scala logaritmica. I punti raffigurati indicano il valore assunto dal logaritmo della media  $\langle R^2(N) \rangle$  per i valori di  $N=100, 200, 500, 1000, 2000$  e  $5000$ . I valori di  $\langle R^2 \rangle$  calcolati dalle nostre simulazioni sono fittati dall'andamento teorico atteso.

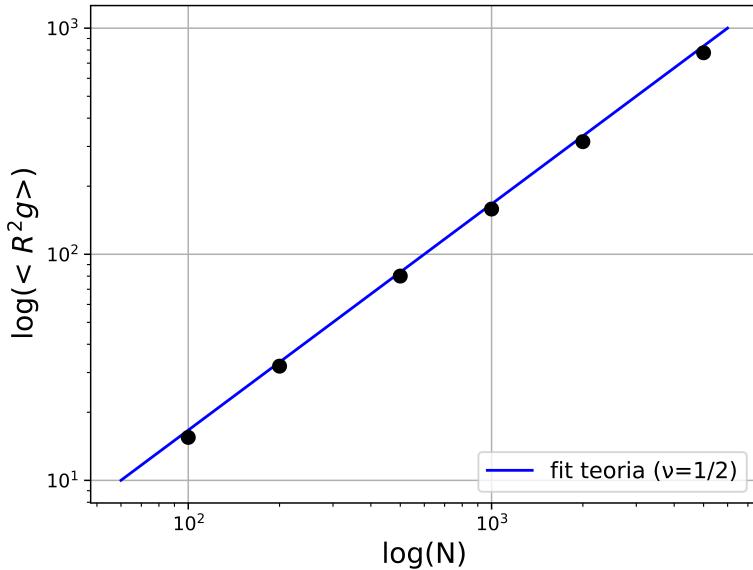


Figura 3.6: Grafico  $\langle R_g^2 \rangle$  vs  $N$  in scala logaritmica. I punti raffigurati indicano il valore assunto dal logaritmo della media  $\langle R_g^2(N) \rangle$  per i valori di  $N=100, 200, 500, 1000, 2000$  e  $5000$ . I risultati delle nostre simulazioni sono fittati dall'andamento teorico atteso.

Infine, abbiamo verificato la relazione (2.11) che lega  $\langle R^2 \rangle$  e  $\langle R_g^2 \rangle$  nella teoria del RW. A tal scopo, in figura 3.7 mostriamo l'istogramma dei valori  $\frac{\langle R^2 \rangle}{\langle R_g^2 \rangle}$  nel caso  $N=100$ .

Come predetto dalla teoria, il valore medio dell'istogramma è  $\mu = 5.98$ , con un errore standard pari a 0.03. La deviazione standard è  $\sigma = 1.02$ . Quindi, il rapporto  $\frac{\langle R^2 \rangle}{\langle R_g^2 \rangle}$  che emerge dalle nostre simulazioni è statisticamente consistente con il valore previsto dalla teoria (ovvero 6).

Per dimostrare che tale rapporto non dipende da  $N$ , in fig. 3.8 mostriamo un ulteriore esempio di distribuzione  $\frac{\langle R^2 \rangle}{\langle R_g^2 \rangle}$  con  $N=1000$ . Il valore medio dell'istogramma è  $\mu = 5.97$ , con un errore standard pari a 0.03. La deviazione standard è  $\sigma = 1.04$ .

Pertanto, i risultati delle nostre simulazioni mostrano, entro gli errori statistici, un accordo significativo con la teoria del RW.

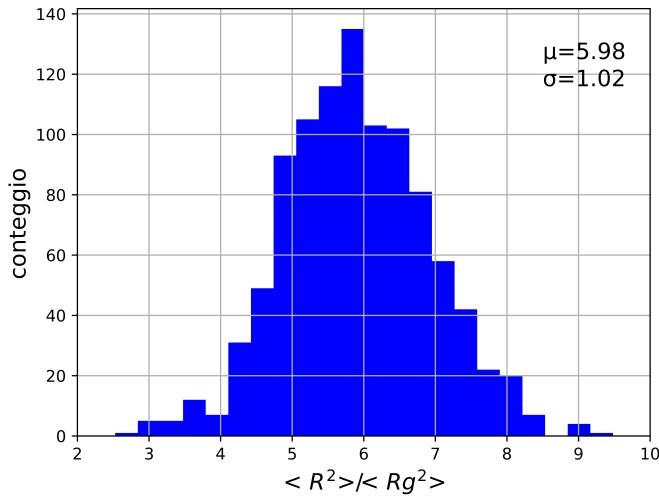


Figura 3.7: Istogramma rapporto  $\frac{\langle R^2(N) \rangle}{\langle R_g^2(N) \rangle}$  per  $N = 100$ . I valori ottenuti si distribuiscono come una gaussiana attorno al valore medio 5.98. La deviazione standard è  $\sigma = 1.02$ .

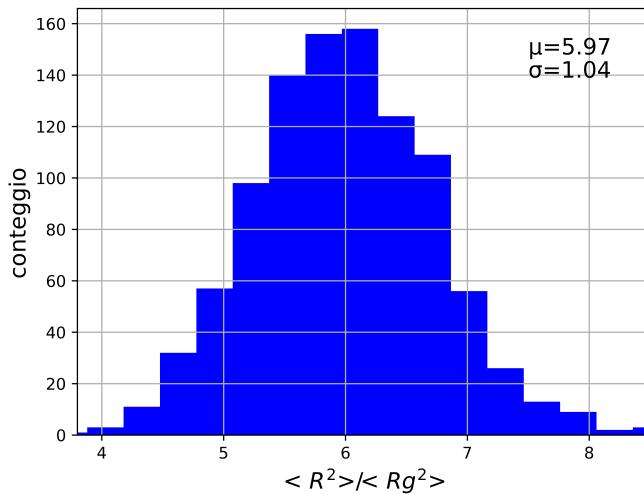


Figura 3.8: Istogramma rapporto  $\frac{\langle R^2(N) \rangle}{\langle R_g^2(N) \rangle}$  per  $N = 1000$ . I valori ottenuti si distribuiscono come una gaussiana attorno al valore medio 5.97. La deviazione standard è  $\sigma = 1.04$ . Il rapporto  $\frac{\langle R^2(N) \rangle}{\langle R_g^2(N) \rangle} = \frac{1}{6}$  è indipendente da  $N$ .

### 3.3 Esempi di traiettorie simulate RW 1D, 2D e 3D

Di seguito si riportano alcuni esempi di traiettorie RW simulate nel caso 1D, 2D e 3D.

#### Traiettorie RW 1D

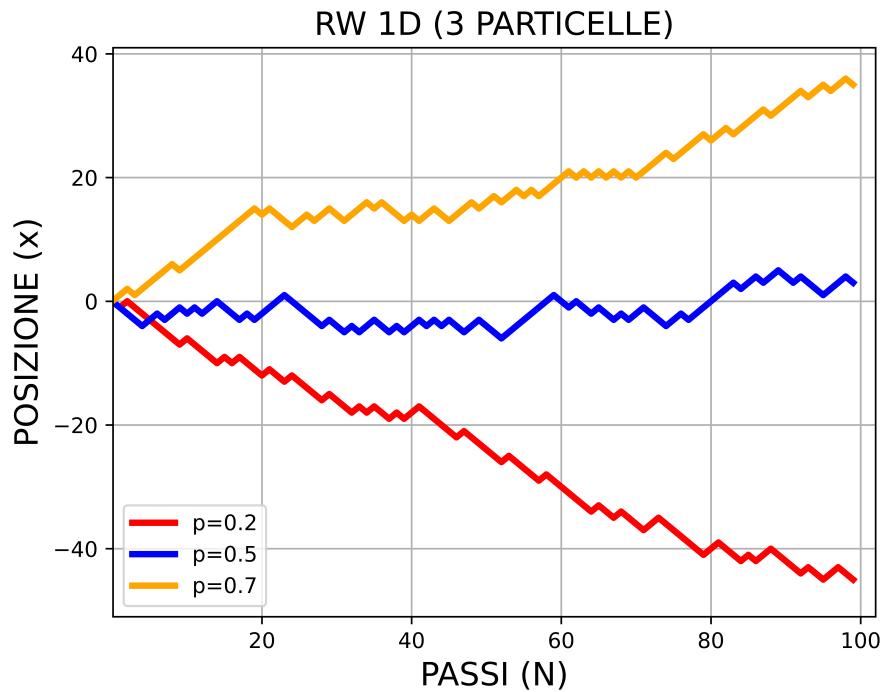


Figura 3.9: Simulazione traiettorie RW 1D per 3 diverse probabilità di avanzamento:  $p=0.2, 0.5, 0.7$ . Il cammino individua la posizione raggiunta da un random walker dopo 100 passi, a partire dalla posizione iniziale  $x = 0$ .

## Traiettorie RW 2D

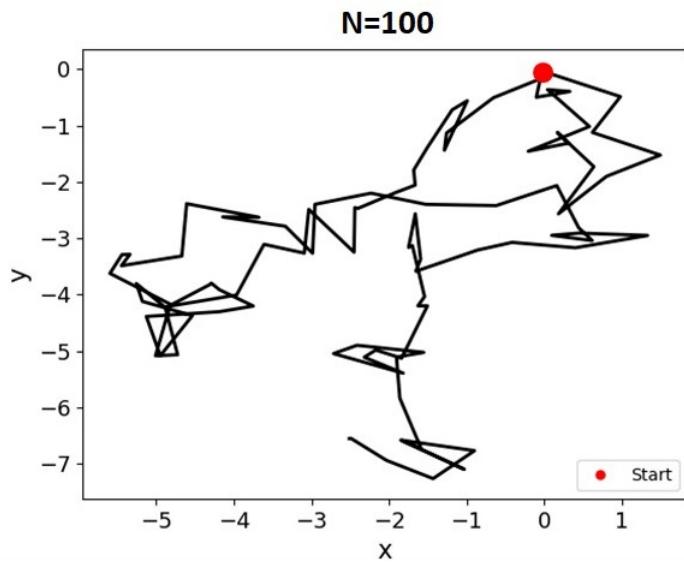


Figura 3.10: Simulazione traiettoria RW 2D di una particella per  $N = 100$ . La posizione iniziale è indicata dal pallino rosso corrispondente allo "start".

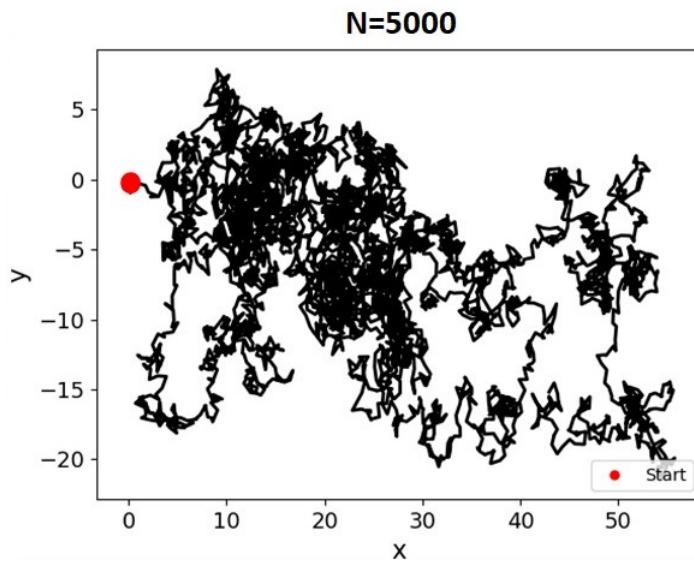


Figura 3.11: Simulazione traiettoria RW 2D di una particella per  $N = 5000$ . La posizione iniziale è indicata dal pallino rosso corrispondente allo "start". Si osservi la complessità del cammino rispetto alla Fig. 3.10.

## Traiettorie RW 3D

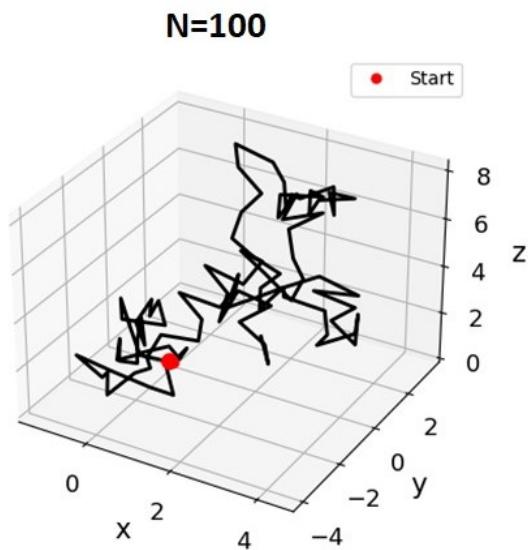


Figura 3.12: Simulazione traiettoria RW 3D di una particella per  $N = 100$ . La posizione iniziale è indicata dal pallino rosso corrispondente allo "start".

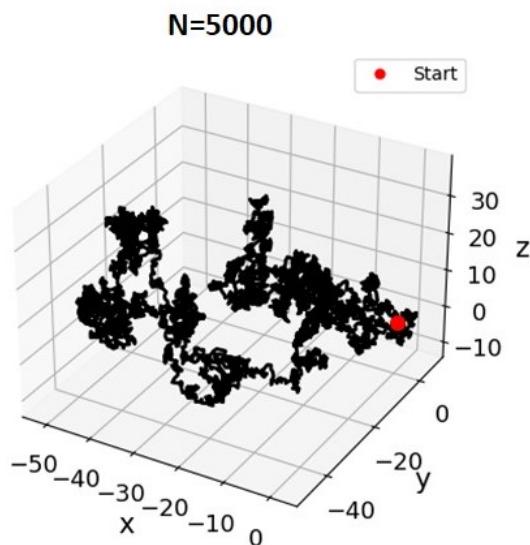


Figura 3.13: Simulazione traiettoria RW 3D di una particella per  $N = 5000$ . La posizione iniziale è indicata dal pallino rosso corrispondente allo "start". Il cammino si infittisce e diventa più complesso al crescere della taglia  $N$  del sistema.

# Conclusione

In questo lavoro di tesi abbiamo verificato i principali risultati della teoria del RW tramite un approccio computazionale. A tal fine sono state implementate simulazioni di RW in 1, 2 e 3 dimensioni, considerando cammini di taglia  $N$  variabile.

Nel caso 1D, la teoria RW afferma che lo spostamento medio e la varianza associata scalano linearmente con  $N$ , tramite le relazioni:

$$\langle x(N) \rangle = (p - q)N \quad \langle \Delta x^2(N) \rangle = 4pqN,$$

dove  $p$  e  $q = 1 - p$  indicano la probabilità di avanzamento del walker rispettivamente verso destra e verso sinistra.

Abbiamo anzitutto verificato queste due leggi a fissato  $N$  e per diversi valori di  $p$ , ottenendo dalle nostre simulazioni risultati consistenti con la teoria. Successivamente, abbiamo testato le suddette relazioni teoriche come funzioni di  $N$ , simulando RW di taglia variabile da  $N=100$  fino a  $N=5000$ . Come atteso dalla teoria, le nostre simulazioni hanno restituito l'andamento lineare atteso per  $\langle x(N) \rangle$  e  $\langle \Delta x^2(N) \rangle$ .

Abbiamo poi generalizzato le simulazioni RW al caso 2D e 3D, misurando la norma del vettore end-to-end  $\langle R^2 \rangle$ , e il raggio di girazione  $\langle R_g^2 \rangle$ . La teoria afferma che entrambi gli osservabili scalano linearmente con la taglia  $N$  del RW e sono legati tra loro da un semplice fattore di proporzionalità.

In formule:

$$\langle R^2(N) \rangle \propto N \quad \langle R_g^2(N) \rangle \propto N \quad \frac{\langle R^2 \rangle}{\langle R_g^2 \rangle} = 6.$$

Le nostre simulazioni hanno verificato queste relazioni teoriche, fornendo, entro gli errori statistici, risultati consistenti con la teoria.

Notiamo, infine, che tutte le precedenti relazioni che legano gli osservabili statistici del RW alla taglia  $N$  del sistema possono condensarsi sinteticamente in una dipendenza da  $N$  del tipo  $N^{2\nu}$ , dove l'esponente  $\nu$  nel caso del RW è uguale ad  $1/2$ . È interessante osservare che questa dipendenza da  $N$  continua a valere anche per cammini aleatori più complessi, come il self-avoiding walk (SAW) sebbene l'esponente sia diverso. Ad esempio, nel modello SAW, si verifica che  $\nu=0.588$ . L'esponente  $\nu$  è in questo senso un esponente statistico universale, in quanto assume lo stesso valore per tutti i modelli matematici appartenenti alla stessa classe. Pertanto, nel caso del RW qui oggetto di studio l'esponente  $\nu=1/2$ , che abbiamo misurato tramite simulazioni numeriche, riunisce tutti i modelli RW sotto un'unica classe di universalità.

# Appendice

## Script realizzati per generare cammini RW

### \*Random Walk 1D

```
#librerie
from random import randint
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import math
#array posizione della particella j-esima
x=np.zeros((1000,1000))
#array media delle posizioni di Np particelle
media=np.zeros(1000)
#array media quadratica delle posizioni di Np particelle
mediaq=np.zeros(1000)
print("RANDOM WALK 1D")
Np=int(input("\nNumero di particelle: "))
n=int(input("\nNumero di passi: "))
a=float(input("\nInserisci la lunghezza di ciascun passo: "))
p=float(input("\nInserisci la probabilità di avanzamento in %: "))

p1=p/10
var=pow(a,2)*n
Nsim=1000 #Numero di simulazioni
for k in range(0,Nsim):
    sum=0
    cont=0
    for j in range(0,Nsim):

        for i in range(1,n+1):
            x[0][j]=0 #Posizione iniziale particella

            Num=randint(0,9) #Numero casuale tra 0 e 9 (10 numeri)
            if Num >=p1:
                x[i][j]=x[i-1][j]+a
            else:
                x[i][j]=x[i-1][j]-a
```

```

        sum=sum+x[n][j]
m=sum/Np
for j in range(0,Nsim):
    X=pow((x[n][j]-m),2)
    cont=cont+X
mq=cont/Np
media[k]=m
mediaq[k]=mq
print("Media:",media[k]," Varianza:",mediaq[k])

```

### \*Random Walk 2D

```

from numpy import *
import random
import matplotlib.pyplot as plt
import os

# --- Parametri della configurazione Random Walk 2D--- #

N_sim = 500      #Numero di simulazioni da fare
#Numero di beads
N_bead=int(input('Inserire Numero di beads del RW... \n'))
os.makedirs("RW2D_%d" %N_bead)

# ____ Generazione della configurazione Random-Walk con centro l'origine
r = 0.97          # Fissato il passo della catena (distanza media FENE)

for k in range(0, N_sim):

    print("Generazione della configurazione %d" %(k+1))

    x = zeros(N_bead)    #
    y = zeros(N_bead)    # > Coordinate per i bead

    # Si fissa la distanza r e si estraggono gli angoli theta e phi
    for i in range(0,N_bead-1):

        theta = random.random()*2*pi
        phi = random.random()*pi
        x[i+1]= x[i]+r*sin(phi)*cos(theta);
        y[i+1]= y[i]+r*sin(phi)*sin(theta);

    # Stampa dei risultati su file esterni

```

```

nome_file = './RW2D_%d/S._RW_config_Nbeads=%d_%d.txt' % (N_bead, N_bead, k+1)
documento = open(nome_file, 'w')

# Stampa delle coordinate relative ai bead e alle proteine

for i in range(0, N_bead):
    documento.write('%g %g \n' % (x[i], y[i]));

documento.write('\n')
documento.close()

*Random Walk 3D

from numpy import *
import random
import matplotlib.pyplot as plt
import os

#Parametri della configurazione

N_sim = 500#Numero di simulazioni
#Numero di beads
N_bead=int(input('Inserire Numero di beads del RW... \n'))
os.makedirs("RW%d" %N_bead)

#Generazione della configurazione Random-Walk con centro l'origine
r = 0.97 # Fissato il passo della catena (distanza media FENE)
for k in range(0, N_sim):

    print("Generazione della configurazione %d" %(k+1))

    x = zeros(N_bead)      #
    y = zeros(N_bead)      # > Coordinate per i bead
    z = zeros(N_bead)      #

    # Si fissa la distanza r e si estraggono gli angoli theta e phi

    for i in range(0, N_bead-1):

        theta = random.random()*2*pi
        phi = random.random()*pi
        x[i+1]= x[i]+r*sin(phi)*cos(theta);
        y[i+1]= y[i]+r*sin(phi)*sin(theta);
        z[i+1]= z[i]+r*cos(phi);

    # Stampa dei risultati su file esterni

```

```
nome_file = './RW%d/S_RW_config_Nbeads=%d%d.txt' % (N_bead, N_bead, k+1)
documento = open(nome_file, 'w')

# Stampa delle coordinate relative ai bead e alle proteine

for i in range(0,N_bead):
    documento.write('%g %g %g \n' %(x[i], y[i], z[i]));

documento.write('\n')

documento.close()
```

# Bibliografia

- [1] N. G. Van Kampen (2007), Stochastic processes in Physics and Chemistry.
- [2] De Groot and Schervish (2010), Probability and Statistics, IV ed.
- [3] J. R. Taylor (1982), An Introduction to Error Analysis.
- [4] M. Doi and S.F. Edwards (1988), The theory of polymer dynamics.
- [5] M.P. Allen and D.J. Tildesley (1989), Computer simulations of liquids.
- [6] C. Holm, K. Kremer et al. (2005), Advanced computer simulation approaches for soft matter sciences (in Advances in Polymer Science, 173)