

UNIVERSITÀ
DI PAVIA

DIPARTIMENTO DI FISICA

Corso di Laurea in Fisica

Teoria e simulazione di processi di diffusione

Tesi per la Laurea di:
Giuseppe Francesco Conte

Relatore:
Prof. Guido Montagna

Correlatrice:
Dott.ssa Federica De Domenico

A.A. 2021-2022

Indice

Introduzione	3
1 Teoria della diffusione	4
1.1 Moto Browniano	4
1.1.1 Interpretazione di Einstein	5
1.1.2 Interpretazione di Langevin	7
1.2 Processi di Wiener	8
1.3 Diffusione anomala	10
1.3.1 Distribuzione di Lévy	10
1.3.2 Distribuzione q -Gaussiana	11
2 Simulazione di processi diffusivi gaussiani	14
2.1 Processo di Wiener unidimensionale	14
2.2 Test statistici	16
2.3 Equivalenza delle interpretazioni	17
2.4 Moto Browniano in due dimensioni	18
2.4.1 Coefficiente di diffusione	19
3 Diffusione anomala	22
3.1 Random walk di Lévy	22
3.2 Random walk q -Gaussiani	25
3.2.1 Rappresentazione della distribuzione q -Gaussiana	26
3.2.2 Generazione di numeri random distribuiti secondo la distribuzione q -Gaussiana	26
3.2.3 Traiettorie unidimensionale di random walk q -Gaussiani	29
A Codice per la simulazione del coefficiente di Diffusione	32
Bibliografia	35

Introduzione

Il concetto di diffusione è presente in molte discipline, che vanno dalla fisica e la chimica per arrivare alla medicina (diffusione delle epidemie) e alle scienze economiche e sociali (diffusione dei prezzi e delle opinioni).

In fisica, il termine diffusione viene utilizzato in senso lato per descrivere diversi fenomeni, quali la diffusione molecolare, la diffusione del calore e la diffusione (o scattering) di onde e particelle.

In questa tesi, si considerano i processi di diffusione che riguardano il movimento irregolare di particelle di piccole dimensioni in sospensione in un fluido (liquido o gas), noto come moto browniano. Secondo la fisica statistica, il moto browniano è descritto da distribuzioni di probabilità gaussiane caratterizzate da una varianza che dipende in modo lineare dal tempo. Nella formulazione matematica dei processi stocastici, le proprietà del moto browniano gaussiano sono riprodotte dalla teoria dei processi di Wiener.

In anni recenti, questa trattazione è stata generalizzata per modellizzare ulteriori fenomeni in fisica e altre discipline, che non sono adeguatamente descritti da distribuzioni gaussiane. In questi processi, detti di diffusione anomala, compaiono distribuzioni di probabilità con andamento asintotico a legge di potenza, quali le distribuzioni di Lévy e la q -Gaussiana.

La dinamica di tutti questi fenomeni diffusivi può essere studiata numericamente mediante opportune simulazioni di tipo Monte Carlo basate sull'utilizzo di numeri random.

In questa tesi, dopo un'introduzione alla teoria della diffusione, vengono descritte le simulazioni ottenute mediante MATLAB del moto browniano e dei processi di diffusione anomala. Scopo del lavoro è mostrare come le principali proprietà di questi fenomeni possono essere riprodotte e verificate secondo i metodi tipici della fisica computazionale.

Capitolo 1

Teoria della diffusione

L'obiettivo del primo capitolo è illustrare la teoria dei processi diffusivi analizzando il caso gaussiano e in seguito i processi di diffusione anomala. I risultati teorici esposti in questo capitolo saranno quindi simulati e sottoposti a verifica nei capitoli successivi.

1.1 Moto Browniano

Il moto browniano rappresenta il primo esempio di diffusione gaussiana osservato sperimentalmente. I primi risultati riguardo il moto browniano sono ottenuti dal botanico scozzese Robert Brown nella prima metà dell'Ottocento, mediante l'utilizzo di un microscopio. Egli osserva e studia il movimento irregolare e incessante di particelle di polline in un liquido all'equilibrio termico arrivando a sottolineare le seguenti caratteristiche:

1. il moto di ciascuna particella è indipendente dal moto di ciascuna delle altre;
2. la composizione e la densità delle particelle non ha effetto sul loro moto;
3. il moto delle particelle è influenzato dalle loro dimensioni e dalla viscosità del fluido. In particolare il moto è più caotico per piccole particelle e per fluidi meno viscosi;
4. il moto delle particelle aumenta al crescere della temperatura;
5. il moto osservato è statisticamente lo stesso variando il tempo di osservazione e le distanze in gioco: si parla di invarianza di scala.

La corretta interpretazione del fenomeno viene formulata da Einstein, nel 1905, con l'articolo [1]. In questo articolo, egli evidenzia che il moto delle particelle browniane è causato dagli urti delle stesse con le molecole del fluido in agitazione termica.

1.1.1 Interpretazione di Einstein

Come sottolineato in precedenza, Einstein afferma che il moto delle particelle in sospensione è causato dagli urti collettivi tra le molecole del fluido e le particelle browniane. Inoltre, il salto concettualmente più significativo è l'approccio probabilistico allo studio del fenomeno.

Einstein considera il moto unidimensionale di un ensemble di n particelle browniane non interagenti secondo le seguenti ipotesi:

1. il moto di ciascuna particella è indipendente dal moto delle altre particelle;
2. il tempo caratteristico di salto τ è assunto molto minore del tempo di osservazione t , ovvero $\tau \ll t$;
3. il moto della i -esima particella in un dato intervallo di tempo è indipendente dal moto della stessa in un secondo intervallo di tempo, a patto che questi due diversi intervalli non siano troppo piccoli. Ovvero τ è sufficientemente lungo da considerare salti successivi indipendenti (*processo di Markov o privo di memoria*);
4. Definita Δ l'ampiezza del salto della particella, si assume che essa sia descritta da una distribuzione di probabilità $\Phi(\Delta)$, piccata per $\Delta = 0$, tale per cui:

$$\Phi(\Delta) = \Phi(-\Delta) \quad (1.1)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\Delta \Phi(\Delta) = 1. \quad (1.2)$$

Date n particelle, il numero di queste comprese nell'intervallo $[x + \Delta; x + \Delta + d\Delta]$ al tempo t è dato da:

$$dn = n\Phi(\Delta)d\Delta. \quad (1.3)$$

Questa identifica una relazione a tempo fissato.

Einstein è interessato a determinare la distribuzione di probabilità di trovare le particelle in una certa posizione x al tempo t . A questo scopo si introduce una distribuzione di probabilità $p(x, t)$, che rappresenta il numero di particelle per unità di volume in posizione x al tempo t , normalizzata secondo la seguente relazione:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x, t) dx = n. \quad (1.4)$$

Allora il numero di particelle comprese nell'intervallo $[x; x + dx]$ al tempo t è dato da:

$$dn = p(x, t) dx. \quad (1.5)$$

Sfruttando l'ipotesi di indipendenza dei salti, è possibile fattorizzare le distribuzioni di probabilità e descrivere il numero di particelle dn che, partendo dalla posizione $x + \Delta$ all'istante di tempo iniziale $t_{in} = t$, arriva nell'istante $t_{fin} = t + \tau$ in posizione $[x, x + dx]$ mediante:

$$p(x, t + \tau)dx = dx \int_{-\infty}^{\infty} p(x + \Delta, t)\Phi(\Delta)d\Delta. \quad (1.6)$$

Utilizzando l'ipotesi di lavoro 2, si consideri l'espansione di Taylor al primo ordine per $p(x, t + \tau)$:

$$p(x, t + \tau) = p(x, t) + \tau \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} + \mathcal{O}(\tau^2). \quad (1.7)$$

Inoltre, in accordo con l'ipotesi 4, si sviluppi al secondo ordine $p(x + \Delta, t)$:

$$p(x + \Delta, t) = p(x, t) + \Delta \frac{\partial p(x, t)}{\partial x} + \frac{\Delta^2}{2} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\Delta^3). \quad (1.8)$$

Inserendo (1.7) e (1.8) in (1.6) si ottiene la famosa equazione di diffusione di Einstein

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \quad (1.9)$$

nella quale il coefficiente di diffusione di Einstein D è definito da:

$$D \doteq \frac{1}{2\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2 \Phi(\Delta) d\Delta. \quad (1.10)$$

Si osservi che :

- l'equazione (1.9) è formalmente identica all'equazione del calore;
- il coefficiente di diffusione D è definito in termini statistici come secondo momento della distribuzione $\Phi(\Delta)$ ed ha le dimensioni di $[D] = L^2 T^{-1}$. Questa è una caratteristica fondamentale dei processi di diffusione.

Supponendo che le particelle partano tutte dalla posizione $x = 0$, ovvero ponendo come condizione iniziale $p(x, 0) = n\delta(x)$, la soluzione della (1.9) è una distribuzione di probabilità Gaussiana

$$p(x, t) = \frac{n}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \quad (1.11)$$

con varianza lineare in funzione del tempo

$$\sigma^2 = 2Dt. \quad (1.12)$$

Successivamente, Einstein riesce a determinare il coefficiente di diffusione D in funzione di parametri chimico-fisici secondo la relazione

$$D = \frac{k_B T}{6\eta\pi r} \quad (1.13)$$

dove T è la temperatura, k_B è la costante di Boltzmann, η è la viscosità e r è il raggio della particelle browniana. Tale relazione è verificata sperimentalmente da Perrin a dimostrazione della struttura atomistica della materia.

1.1.2 Interpretazione di Langevin

Cronologicamente successiva alla interpretazione di Einstein vi è quella Langevin. Essa porta a un'equazione dalla quale si ricavano le stesse conclusioni della trattazione precedente.

Si lavori nelle stesse ipotesi di partenza del modello di Einstein e si consideri una particella di massa m sulla quale agiscono due forze

1. $F_1 = -6\pi\eta r v(t)$, dove $v(t)$ è la velocità della particella, che rappresenta la forza di Stokes dovuta all'attrito viscoso;
2. $F_2 = \xi(t)$ che rappresenta il contributo dato dalle collisioni casuali delle molecole del liquido sulla particella Browniana.

Si osservi come F_1 è un contributo deterministico mentre F_2 è un contributo di forza stocastica.

Inoltre, F_2 assume valori sia positivi che negativi con uguale probabilità: $\langle \xi(t) \rangle = 0 \forall t$ e ciò può essere interpretato nello stesso modo della condizione 4 del modello di Einstein. Tale contributo, detto *white noise*, garantisce il mantenimento della dinamica della particella nel tempo per mezzo degli urti con le molecole del fluido.

Dal Teorema del Limite Centrale, poiché la combinazione lineare di X_i variabili aleatorie indipendenti aventi varianza finita tende alla distribuzione Gaussiana, la distribuzione tipicamente utilizzata per modellizzare il *white noise* è la distribuzione Gaussiana [3].

Inserendo i due contributi nella seconda legge di Newton, si ottiene

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -6\pi\eta r \frac{dx(t)}{dt} + \xi(t) \quad (1.14)$$

che è il primo esempio di equazione differenziale stocastica: una equazione differenziale ordinaria con un termine di rumore dato dal secondo contributo alla forza. Le soluzioni di tale equazione, risolvibile mediante la teoria sulle equazioni differenziali stocastiche di Ito, sono delle traiettorie casuali.

Risolvendo l'equazione (1.14) in probabilità per un ensemble di n particelle browniane, Langevin arriva alle stesse espressioni (1.12) e (1.13), già ottenute da Einstein.

È importante notare come l'equazione di Langevin tratta delle singole traiettorie microscopiche mentre la descrizione di Einstein è una descrizione macroscopica a livello di distribuzioni di probabilità.

1.2 Processi di Wiener

Si consideri l'equazione (1.9). Essa è un'equazione di diffusione la quale può essere vista come un caso speciale dell'equazione di Fokker-Planck data da:

$$\frac{\partial p(x, t|x_0, t_0)}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 p(x, t|x_0, t_0)}{\partial x^2}. \quad (1.15)$$

Ponendo come condizione iniziale $p(x, t_0|x_0, t_0) = \delta(x - x_0)$ e con il metodo della trasformata di Fourier, si ottiene la soluzione:

$$p(x, t|x_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t - t_0)}} e^{-\frac{(x - x_0)^2}{2(t - t_0)}}. \quad (1.16)$$

Tale distribuzione è una Gaussiana con media $\langle x(t) \rangle = x_0$ e varianza $Var[x(t)] = t - t_0$ (ovvero con coefficiente di diffusione pari a uno) e descrive il processo di Wiener $\{W(t)\}_{t \geq 0}$ [2]. La quantità $x - x_0$ è l'incremento per il processo di Wiener nell'intervallo di tempo $t - t_0$.

Quindi è possibile descrivere la diffusione di una particella browniana mediante un processo di Wiener $\{W(t)\}_{t \geq 0}$ il quale è un *continuous time stochastic process* aventi le seguenti proprietà:

- $W(0) = 0$ quasi certamente, cioè con probabilità 1;
- $W(t)$ ha incrementi indipendenti cioè se presi quattro tempi distinti tali che $t_1 \leq t_2 \leq s_1 \leq s_2$ si ha che $W(t_2) - W(t_1)$ e $W(s_2) - W(s_1)$ sono variabili aleatorie indipendenti;
- il processo ha incrementi gaussiani: scelti due tempi tali per cui $s \leq t$ si ha che $W(t) - W(s) \sim \mathcal{N}(0, t - s)$;
- le traiettorie sono continue quasi certamente ma non differenziabili;
- la covarianza è $\text{Cov}\{W(s)W(t)\} = \langle W(s)W(t) \rangle - \langle W(s) \rangle \langle W(t) \rangle = \min(s, t)$ cioè non dipende dalla differenza dei tempi;¹
- il processo è invariante per trasformazioni di scala: sia $\alpha \in \mathcal{R}$ tale per cui

$$t - s \rightarrow \hat{t} - \hat{s} = \alpha(t - s)$$

$$W(t) - W(s) \rightarrow W(\hat{t}) - W(\hat{s}) = \alpha^{1/2}[W(t) - W(s)]. \quad (1.17)$$

Vista l'equivalenza tra l'interpretazione di Langevin e quella di Einstein, è possibile evidenziare la relazione tra processo di Wiener e il termine di *white noise* introdotto nell'equazione di Langevin.

Infatti, è possibile scrivere l'equazione di Langevin sotto forma di una *Stochastic Differential Equation* (SDE) della forma:

$$\frac{dx}{dt} = a(x, t) + b(x, t)\xi(t) \quad (1.18)$$

dove $a(x, t)$ e $b(x, t)$ sono delle funzioni, x è la variabile di interesse e $\xi(t)$ è il termine di white noise per il quale si richiede $\forall t, t'$ che:

- $\langle \xi(t) \rangle = 0$
- $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t')$.

Interpretando il termine di white noise come derivata generalizzata di un processo di Wiener:

$$\xi(t) = \frac{dW(t)}{dt}$$

è possibile arrivare alla seguente

$$dW(t) = W(t + dt) - W(t) = \xi(t)dt \quad (1.19)$$

nella quale si assume che $\xi(t)$ è un processo stocastico Gaussiano che si distribuisce secondo $\mathcal{N}(0, 1)$ e che quindi $dW(t) \sim \mathcal{N}(0, dt)$.

¹la covarianza ci fornisce un indice della correlazione tra due variabili aleatorie: tanto più essa è diversa da zero, tanto più le variabili sono correlate [4].

Partendo da questa considerazione e andando a discretizzare l'incremento di Wiener:

$$dW(t) = \xi\sqrt{dt} \quad (1.20)$$

con $\xi \sim \mathcal{N}(0, 1)$, è possibile simulare numericamente un processo di Wiener [5].

1.3 Diffusione anomala

Nelle sezioni precedenti sono stati descritti i processi diffusivi standard strettamente legati a densità di probabilità gaussiane. È possibile generalizzare questa trattazione e descrivere processi di diffusione anomala mediante densità di probabilità non gaussiane come la distribuzione di Lévy e la distribuzione q -Gaussiana.

Esse sono utilizzate per studiare e comprendere fenomeni fisici, chimici, biologici e finanziari che non sarebbero adeguatamente descritti utilizzando la distribuzione Gaussiana.[6]

1.3.1 Distribuzione di Lévy

Si consideri il caso della distribuzione stabile di Lévy studiata dal matematico francese Paul Pierre Lévy. Questa gode delle seguenti proprietà:

1. stabilità;
2. invarianza di scala.

Il concetto di *stabilità* sta ad individuare che la somma di variabili aleatorie stabili indipendenti e identicamente distribuite è ancora una variabile aleatoria con la stessa distribuzione, in accordo con il teorema del limite centrale generalizzato.

Inoltre, esse sono invarianti per trasformazioni di scala che generalizzano il comportamento discusso per i processi di Wiener.

La forma funzionale della distribuzione di Lévy è definita in relazione alla funzione caratteristica Φ la cui antitrasformata di Fourier definisce completamente la densità di probabilità. In particolare, la forma della PDF è

$$p(x) = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \exp \left[i\delta k - \gamma |k|^\alpha \left(1 + \beta \frac{k}{|k|} \tan \left(\frac{\alpha\pi}{2} \right) \right) \right] \right\} \quad (1.21)$$

ed è normalizzata dalla condizione $\Phi(0) = 1$.

Si osservi come la distribuzione di probabilità è definita da quattro differenti parametri:

- $\alpha \in [0, 2]$ il quale identifica l'indice di stabilità (o di Lévy) che descrive il “peso” delle code della distribuzione;

- $\beta \in [-1, 1]$ che è un parametro di asimmetria; in particolare la distribuzione è simmetrica se e solo se $\beta = 0$;
- $\gamma > 0$ che gioca il ruolo di parametro di scala;
- δ che individua il parametro di spostamento.

In base a questa definizione, la distribuzione di Lévy ha una forma analitica ben definita solo per alcuni valori dei parametri. In particolare, nel caso in cui $\alpha = 2$ e $\beta = 0$ si ritrova una Gaussiana, nel caso in cui $\alpha = 1$ e $\beta = 0$ si ottiene una distribuzione di Cauchy.

Inoltre è necessario osservare che per $\alpha \leq 2$ la varianza è infinita e per $\alpha \leq 1$ anche la media diverge, in conseguenza del loro comportamento asintotico dato da

$$p(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} \frac{1}{|x|^{1+\alpha}}. \quad (1.22)$$

1.3.2 Distribuzione q -Gaussiana

Tra i fenomeni diffusivi anomali rientrano anche quelli la cui fisica è legata alla distribuzione q -Gaussiana.

Per introdurre tale distribuzione, si rammenti che la meccanica statistica di Boltzmann-Gibbs si basa sulla seguente espressione assiomatica di entropia:

$$S_{BG} = -k_B \sum_{k=1}^W p_i \ln(p_i) \quad (1.23)$$

con $\sum_{k=1}^W p_i = 1$.

Nella (1.23) p_i è la probabilità dell' i -simo microstato e W è il numero di microstati.²

Nel caso di equiprobabilità ($p_i = 1/W \forall i$) la (1.23) diventa:

$$S_{BG} = -k_B \ln W. \quad (1.24)$$

Tale formulazione non è universalmente applicabile. Infatti, già lo stesso Gibbs, nel 1902, sottolinea anomalie legate a sistemi che includessero effetti gravitazionali.

In quest'ottica, partendo dalla seguente definizione di entropia:

$$S_q = \frac{1 - k_B \sum_{k=1}^W p_i^q}{q - 1} \quad (1.25)$$

²Il microstato è una specifica e dettagliata configurazione assunta dal sistema durante le sue fluttuazioni termiche.

con $q \in \mathcal{R}$, si generalizza la meccanica statistica di Boltzmann-Gibbs e si arriva alla così detta meccanica statistica di Tsallis. È possibile mostrare che per $q = 1$ si ottiene che $S_1 = S_{BG}$.

Utilizzando il concetto di equiprobabilità e definendo la funzione q -logaritmo come:

$$\ln_q z \doteq \frac{z^{1-q} - 1}{1 - q}$$

con $z \in \mathcal{R}$, $z > 0$, $\ln_1(z) = \ln(z)$, la (1.25) diventa

$$S_q = \ln_q W. \quad (1.26)$$

Da questa definizione di q -logaritmo, è possibile definire la sua funzione inversa q -esponenziale come:

$$e_q^z \doteq \begin{cases} [1 + (1 - q)z]^{1/(1-q)} & \text{se } 1 + (1 - q)z > 0, \\ 0 & \text{altrimenti.} \end{cases}$$

Sotto particolari vincoli, la distribuzione che estremizza S_q , nota come distribuzione q -Gaussiana, è:

$$p_q(x) = \frac{\sqrt{\beta}}{C_q} e_q^{-\beta x^2}. \quad (1.27)$$

In (1.27), C_q è fattore di normalizzazione dato da:

$$C_q = \begin{cases} \frac{2\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{1}{1-q}\right)}{(3-q)\sqrt{1-q}\Gamma\left(\frac{3-q}{2(1-q)}\right)} & \text{se } -\infty < q < 1, \\ \sqrt{\pi} & \text{se } q = 1, \\ \frac{\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{3-q}{2(q-1)}\right)}{\sqrt{q-1}\Gamma\left(\frac{1}{q-1}\right)} & \text{se } 1 < q < 3. \end{cases}$$

Si osservi che:

1. per $q \rightarrow 1$, la q -Gaussiana riproduce la distribuzione normale;
2. per $q > 1$, il comportamento asintotico è la legge di potenza della forma:

$$p_q(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 1|x|^{-2/(1-q)}; \quad (1.28)$$

3. la distribuzione (1.27) ha media nulla [8];
4. la varianza esiste solo per $q < \frac{5}{3}$.

In figura 1.1 è mostrata la rappresentazione della distribuzione q -Gaussiana, ottenuto con MATLAB, al variare di q .

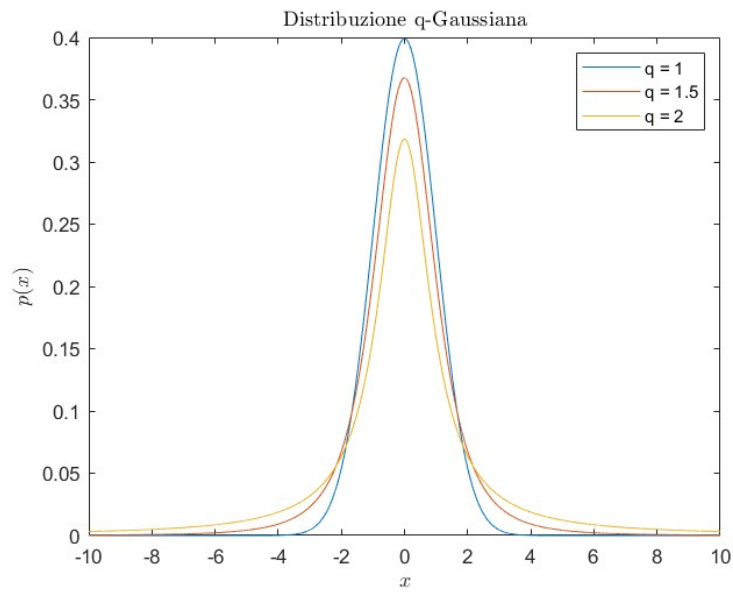


Figura 1.1: Plot della distribuzione q -Gaussiana per $q = 1$ in blu, $q = \frac{1}{2}$ in arancione e $q = 2$ in giallo.

Capitolo 2

Simulazione di processi diffusivi gaussiani

L'obiettivo di questo capitolo è simulare, mediante MATLAB, i concetti teorici introdotti nel primo capitolo, andando ad approfondire la simulazione delle traiettorie di un processo di Wiener e del coefficiente di diffusione di Einstein D . Si noti che quest'ultima corrisponde alla riproduzione numerica della verifica sperimentale di Perrin.

Viene anche dimostrata numericamente l'equivalenza dell'interpretazione di Einstein e Langevin del moto browniano.

2.1 Processo di Wiener unidimensionale

Il primo paragrafo si concentra sulla simulazione del processo di Wiener (1.20) discretizzato, dove $W(t)$ è relativo a un preciso valore discreto del tempo t in modo da descrivere una traiettoria unidimensionale di una particella browniana. A tal scopo, tramite il comando MATLAB *randn*, si generi un vettore di lunghezza T le cui componenti sono gli incrementi di Wiener dW_j a tempo fissato e si discretizzi il tempo in intervalli di lunghezza 1 tramite il comando $[1:1:T]$. Per definizione, ciascun incremento dW_j si ottiene estraendo ad ogni passo numeri random gaussiani (a media zero e varianza uno) mediante il comando *randn*¹. Per riprodurre quindi la traiettoria del processo di Wiener in analisi, si usi il comando di MATLAB *cumsum* che effettua la somma cumulativa del vettore definito in precedenza. In questo modo, si ottiene un nuovo vettore, la cui i -esima componente è data dalla somma della $(i - 1)$ -esima componente con la i -esima componente del vettore degli incrementi. In conclusione, il comando MATLAB *plot* consente

¹MATLAB utilizza algoritmi per generare numeri pseudocasuali e pseudo-indipendenti. Questi numeri non sono strettamente casuali e indipendenti in senso matematico, ma superano vari test statistici di casualità e indipendenza e il loro calcolo può essere ripetuto. A scopo di test è proposta la verifica numerica di alcune proprietà del moto browniano

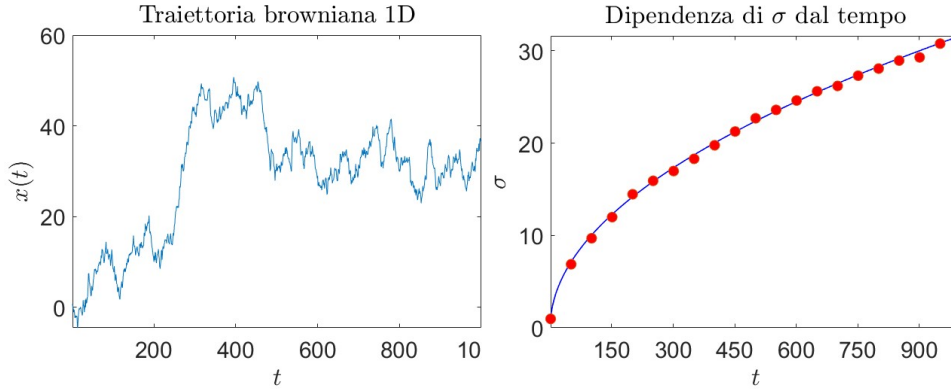


Figura 2.1: A sinistra, il plot della traiettoria monodimensionale di una particella Browniana. A destra, il plot della verifica della dipendenza della deviazione standard dal tempo.

di ottenere il grafico in figura 2.1, che mostra il comportamento irregolare e non differenziale atteso.

Un test interessante, relativo alla teoria del moto browniano unidimensionale, è la verifica della legge lineare per la deviazione standard σ che, nel caso di un processo di Wiener, è data da $\sigma = \sqrt{\text{Var}[x(t)]} = \sqrt{t}$ per $t_0 = 0$. Questo test richiede di simulare varie traiettorie di un processo di Wiener e di calcolare la deviazione standard, secondo la definizione di varianza campionaria, dal campione di dati simulato, usando il comando `std()`.

Altro test interessante è la verifica dell'invarianza di scala dei processi di Wiener data dalla (1.17). A questo scopo, è necessario generare N diverse traiettorie del processo, scegliere un tempo t_1 al quale selezionare gli incrementi e rappresentare, mediante il comando `histogram`, un primo istogramma degli incrementi di Wiener con gli assi opportunamente riscalati. Infatti, dal Teorema del Limite Centrale, la somma di N numeri random distribuiti secondo una gaussiana è distribuita secondo $p_t(x) = \mathcal{N}(0, \sigma^2 t)$. Osservando che:

$$p_t(x) = \frac{1}{\sqrt{t}} p_1(x/\sqrt{t}) \quad (2.1)$$

e invertendo questa relazione, si ottiene la trasformazione utilizzata per riscalare gli assi sopracitata.

La stessa operazione deve essere ripetuta su un secondo istogramma degli incrementi ad un tempo t_2 . Il risultato di questa simulazione è mostrato in figura 2.2. È possibile notare come i punti relativi a incrementi di Wiener si posizionino sulla distribuzione degli incrementi:

$$p_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \quad (2.2)$$

con $\sigma = 1$, a conferma numerica della proprietà di invarianza di scala. Si osservi che la (2.2) corrisponde alla (2.1) valutata per $t = 1$.

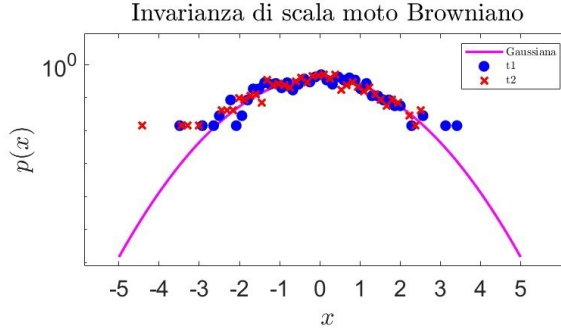


Figura 2.2: Invarianza di scala di un processo di Wiener.

2.2 Test statistici

I risultati descritti nel precedente paragrafo sono stati ottenuti mediante simulazioni Monte Carlo basate sull'estrazione di numeri random. Oltre i test già esposti per verificare le proprietà di un processo di Wiener, è possibile effettuare ulteriori test per stabilire la correttezza delle simulazioni. I test che sono stati svolti sono:

1. Scaling errore Monte Carlo sulla media (noto in letteratura come *standard error of the mean*). È infatti noto che l'errore Monte Carlo dipende dal numero di simulazioni N secondo la legge:

$$\frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (2.3)$$

Nel caso analizzato, il numero N è pari al numero di traiettorie generate.

In figura 2.3 si mostra l'andamento dell'errore rispetto la media in funzione del numero di simulazioni N in scala log-log; si noti come l'errore decresca compatibilmente alla 2.3 al variare di N .

2. Poiché a tempo fissato le realizzazioni X_k sono variabili random distribuite in modo gaussiano con deviazione standard σ_k , allora, la variabile aleatoria definita come

$$Z = \sum_{k=1}^{\nu} \left(\frac{X_k}{\sigma_k} \right)^2 \quad (2.4)$$

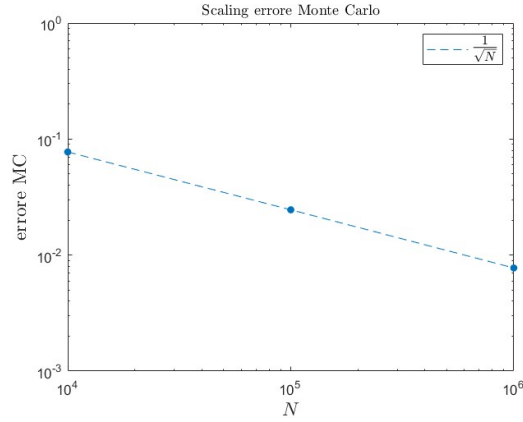


Figura 2.3: Scaling dell'errore Monte Carlo per $N = 10^4$, $N = 10^5$ e $N = 10^6$.

segue la distribuzione $\chi^2(\nu)$ avente ν gradi di libertà (Teorema di Pearson [4]). Nella figura 2.4 si confronta l'istogramma che rappresenta le realizzazioni della variabile aleatoria Z con il plot della distribuzione χ^2 avente ν gradi di libertà.

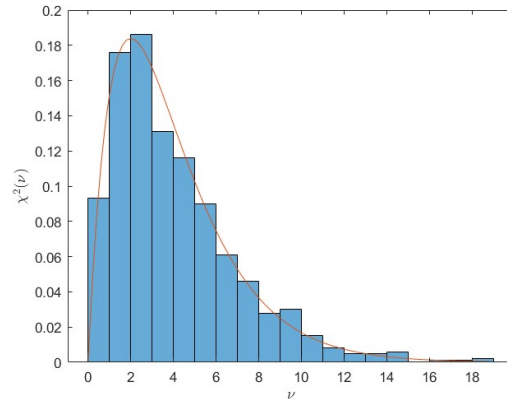


Figura 2.4: Verifica che la variabile aleatoria Z si distribuisce secondo una distribuzione $\chi^2(\nu)$.

2.3 Equivalenza delle interpretazioni

In questa sezione si vuole dimostrare l'equivalenza statistica fra un ensemble di traiettorie microscopiche soluzione di (1.20) e la formulazione macroscopica di Einstein a livello di densità di probabilità Gaussiana come soluzione

dell'equazione di diffusione (1.9). A questo scopo, è innanzitutto necessario simulare N traiettorie di un processo di Wiener secondo l'algoritmo del paragrafo 2.1, come mostrato in figura 2.5.

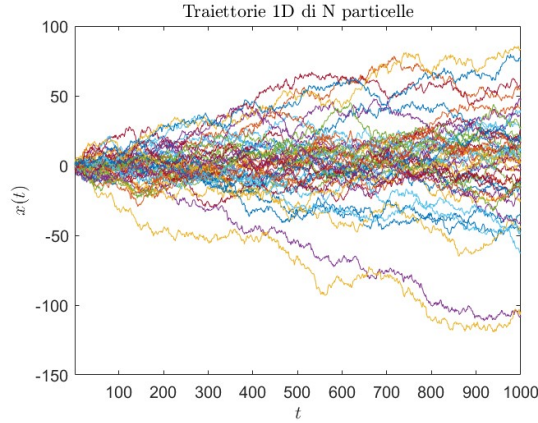


Figura 2.5: Traiettorie 1D di $N = 50$ particelle browniane.

Si consideri quindi un generico tempo fissato t_1 e si rappresentino le realizzazioni del processo di Wiener nella forma di un istogramma. Quest'ultimo può essere confrontato con la soluzione analitica Gaussiana dell'equazione di Einstein $p(x, t_1)$ con varianza pari a t_1 ; questa procedura può essere ripetuta per un successivo tempo t_2 .

Come mostrato in figura 2.6, la soluzione analitica riproduce correttamente la forma degli istogrammi che si allargano in funzione del tempo secondo la dinamica della diffusione Gaussiana.

2.4 Moto Browniano in due dimensioni

È possibile estendere la trattazione di processo di un Wiener unidimensionale al generico caso d -dimensionale secondo la seguente definizione:

Definizione 1 (Processo di Wiener d -dimensionale). *Dati un numero i di processi di Wiener 1-dimensionali indipendenti $\{W^{(i)}(t)\}_{t \geq 0}$;*

$$W = (W^1, W^2, \dots, W^d)$$

è un processo di Wiener d -dimensionale.

Nel caso bidimensionale (ma anche tridimensionale) è possibile simulare la traiettoria di una o più particelle browniane, andando ad estendere naturalmente il codice MATLAB, considerando i contributi in entrambe le dimensioni. In figura (2.4) sono mostrati i risultati delle simulazioni 2-D con coefficiente di diffusione unitario.

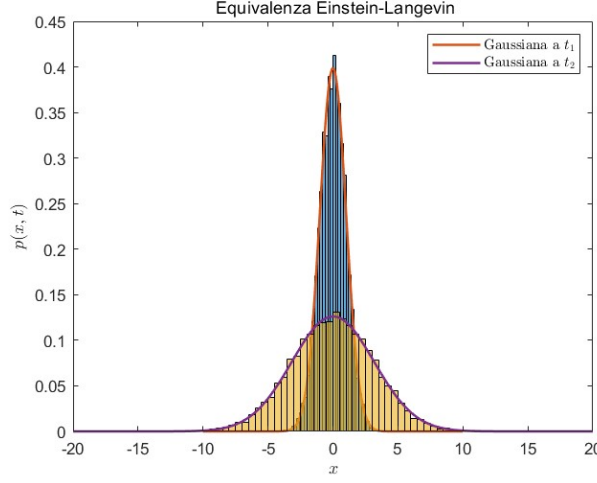


Figura 2.6: Dimostrazione dell'equivalenza dell'interpretazione microscopica di Langevin e macroscopica di Einstein per diffusione Gaussiana.

2.4.1 Coefficiente di diffusione

Un'importante simulazione relativa al moto browniano bidimensionale riguarda la determinazione numerica del coefficiente di diffusione D secondo la relazione (1.13). Tale simulazione può essere vista come una riproduzione computazionale della verifica sperimentale di Perrin della formula di Einstein (1.13), che rappresenta una delle prime prove della natura atomistica della materia.

Per definizione, il *Mean Squared Displacement (MSD)* λ^2 è pari a:

$$\lambda^2 = \langle |r(t) - r(0)|^2 \rangle = 2dDt \quad (2.5)$$

dove $r(t)$ è la posizione al tempo t generico della particella, d è la dimensione dello spazio e D il coefficiente di diffusione. In figura 2.8 si osservi in nero l'andamento di λ^2 che segue la legge (2.5).

Numericamente, è necessario definire due vettori t -dimensionali:

$$\begin{aligned} X &= [X_1, X_2, \dots, X_t] \\ Y &= [Y_1, Y_2, \dots, Y_t], \end{aligned} \quad (2.6)$$

dove le componenti X_i e Y_i sono distribuite secondo $\mathcal{N}(0, 1)$, e costruire un terzo vettore dS^2 le cui t componenti sono definite come:

$$dS_i^2 = X_i^2 + Y_i^2 \quad (2.7)$$

$\forall i \in \{1, \dots, t\}$. Successivamente, discretizzando il tempo in intervalli di lunghezza 1 tramite il comando `[1 : 1 : T]` ed eseguendo il *plot* del vettore dS^2

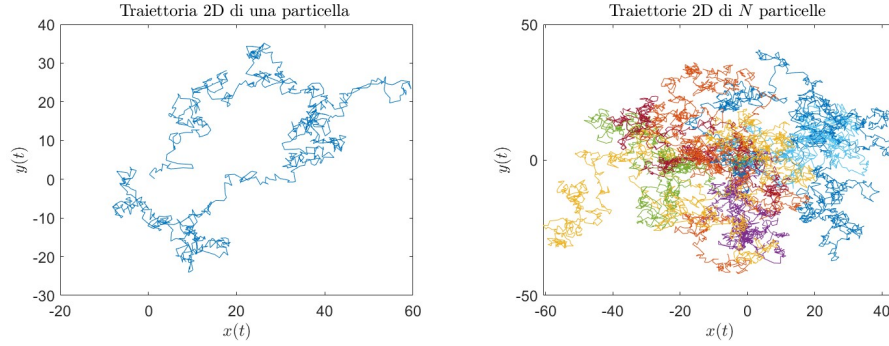


Figura 2.7: A sinistra: plot della traiettoria bidimensionale di una particella browniana con coefficiente di diffusione unitario. A destra: plot della traiettoria bidimensionale di $N = 10$ particelle browniane, sempre con coefficiente di diffusione unitario.

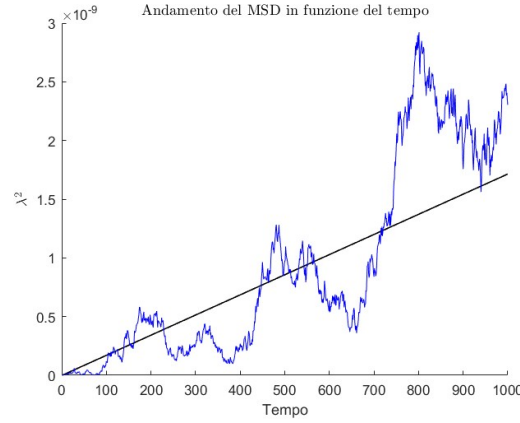


Figura 2.8: Andamento lineare di λ^2 in funzione del tempo secondo la formula 2.5. In nero è rappresentato l'andamento teorico, in blu è rappresentato l'andamento simulato numericamente.

in funzione del tempo, si ottiene la curva spezzata blu in figura 2.8.

Il MSD è il valore medio delle componenti del vettore dS^2 .

Utilizzando il comando `mean()` su quest'ultimo vettore e invertendo la (2.5) si ricava il valore simulato del coefficiente di diffusione D_{sim} con il relativo errore

$$\sigma_{D_{sim}} = \frac{1}{2tD_{sim}} \frac{\sigma_{\lambda^2}}{\sqrt{N}} \quad (2.8)$$

dove σ_{λ^2} è ricavato applicando il comando `std()` al vettore dS^2 sopra definito e $t = 1$ poiché si è discretizzato il tempo in intervalli di tempo di lunghezza pari ad uno. Iterando questa simulazione $N = 10$ volte, otteniamo i valori in figura 2.9, rappresentati dai pallini vuoti rossi, con i rispettivi errori. Sempre in figura 2.9, è rappresentato in blu il valore D_{mean} del coefficiente

di diffusione calcolato come valor medio dei coefficienti di diffusione simulati D_{sim} , in verde l'errore per D_{mean} , ϵ_D , calcolato come errore standard rispetto la media:

$$\epsilon_D = \frac{\sigma_{D_{sim}}}{\sqrt{N}}. \quad (2.9)$$

Utilizzando la (1.11), nel caso di una particelle di raggio $0.5 \mu m$ in acqua ($\eta = 10^{-3} Pa \cdot s$) a temperatura $T = 293 \text{ }^\circ K$, il valore numerico del coefficiente di diffusione è $D = 4.29 \cdot 10^{-13} m^2/s$.

In conclusione, il valore medio, con il suo errore, è in buon accordo con la relazione teorica.

In appendice è riportato il codice MATLAB della simulazione.

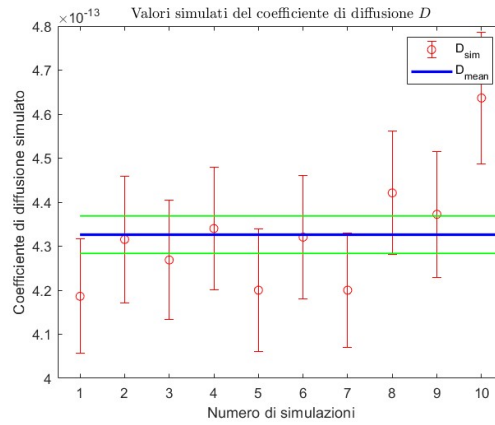


Figura 2.9: Valori simulati del coefficiente di diffusione D_{sim} .

In blu il valore medio di D ottenuto dalle diverse simulazioni con il relativo errore (linee verdi), in rosso i valori di D , relativi ad ognuna delle $N = 10$ iterazioni, con le relative barre di errore.

Capitolo 3

Diffusione anomala

In questo capitolo vengono descritte le simulazioni di processi di diffusione anomala, commentando i risultati.

Si rammenti che una distribuzione si dice stabile se una combinazione lineare di due variabili casuali indipendenti con questa distribuzione ha la stessa distribuzione.

Prima di studiare la simulazione dei random walk di Lévy, è utile fare alcune considerazioni sull'andamento delle distribuzioni α -stabili, in figura 3.1. Essa è stata ottenuta utilizzando il comando MATLAB *makedist(Stable)* settando opportunamente i parametri che definiscono la distribuzione di Lévy. In particolare sono stati settati:

- $\beta = \delta = 0$ affinché la distribuzione di probabilità sia simmetrica rispetto l'origine e centrata su quest'ultimo;
- $\gamma = 1$;
- diversi valori di α .

Poiché la distribuzione di Lévy è una distribuzione *heavy-tailed*¹, quest'ultimo parametro, che nella figura 3.1 assume tre diversi valori, definisce il “peso” della coda. Si osservi che per $\alpha = 2$ si ottiene una gaussiana mentre, per $\alpha = 1$ si ottiene la distribuzione di Cauchy e per $\alpha = 0.5$ si ottiene la distribuzione di Lévy simmetrica.

3.1 Random walk di Lévy

Adattando la stessa strategia operativa realizzata per la simulazione di una traiettoria browniana unidimensionale secondo numeri gaussiani, è possibile simulare un random walk di Lévy a patto di generare gli incrementi

¹le distribuzioni *heavy-tailed* hanno la coda “più pesante” di quella della distribuzione esponenziale $\mathcal{E}(\lambda) = \lambda e^{-\lambda x}$ per $x > 0$.

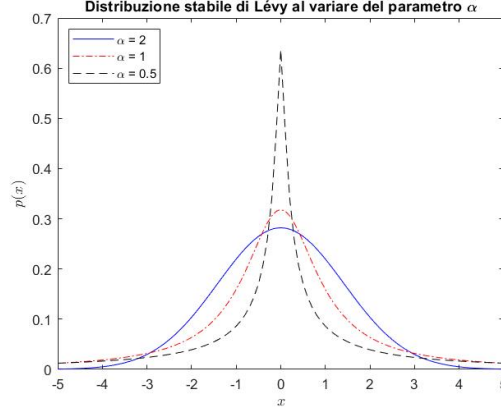


Figura 3.1: Distribuzione di Lévy nel caso di $\alpha = 2$ in blu, $\alpha = 1$ in rosso e $\alpha = 0.5$ in nero.

secondo una distribuzione stabile. A questo scopo, si utilizza il comando MATLAB `random('Stable',alpha,beta,c,mu,[T N])`, che consente di definire il tempo ($T = 1000$) dell'evoluzione dinamica e un vettore (per $N = 1$) i cui incrementi sono distribuiti secondo una distribuzione di Lévy. Il comando `cumsum` permette di ottenere un secondo vettore che rappresenta la traiettoria del processo, come mostrato in figura 3.2.

Nella parte sinistra della figura 3.2 è rappresentata la traiettoria per due valori di α e quindi due pesi differenti della coda. Nella parte destra, si è aggiunto anche il caso in cui $\alpha = 0.5$ che determina delle code più pronunciate rispetto ai casi precedenti, come è possibile vedere nella figura 3.1. Questa caratteristica determina la presenza di incrementi e quindi *jumps* molto più pronunciati. Per evidenziare la presenza di questi eventi anomali rispetto al caso gaussiano (dato da $\alpha = 2$), nella figura 3.2 a destra si è considerato un numero di salti minore dato da $T = 150$.

Estendendo in maniera naturale l'idea precedente al caso bidimensionale, come nel capitolo 2, è possibile ottenere la rappresentazione numerica della traiettoria bidimensionale di un processo diffusivo i cui incrementi seguono la distribuzione di Lévy. Come è possibile notare nelle figure 3.3 e 3.4 anche in questo caso sono presenti dei *jump anomali* completamente differenti dal caso standard, di figura 2.4. Si osservi come tali *jump anomali* siano più pronunciati per valori $\alpha \rightarrow 1$ mentre, per valori di $\alpha \rightarrow 2$, le traiettorie diventano più simili al caso standard di figura 2.4. Infatti, osservando la figura 3.5, la traiettoria bidimensionale, in quest'ultimo caso, è analoga al caso standard.

Oltre a queste simulazioni, è possibile studiare numericamente la varianza σ^2 della distribuzione di Lévy che, dal punto di vista teorico, diverge. Numericamente può risultare difficile mostrare che una data quantità di-

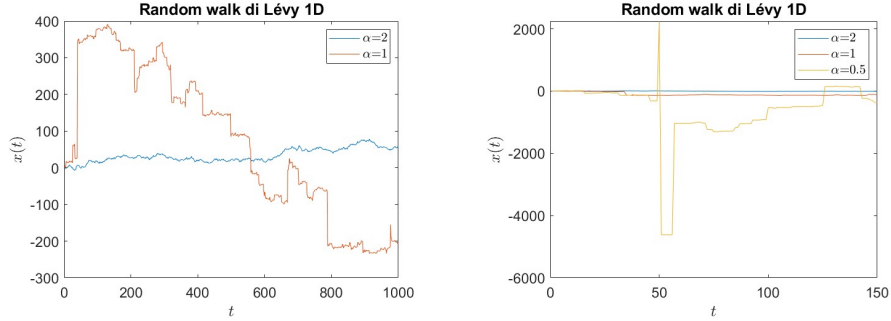


Figura 3.2: A sinistra: plot della traiettoria monodimensionale di un random walk di Lévy per $\alpha = 2$ in blu e $\alpha = 1$ in arancione. A destra: plot della traiettoria monodimensionale di un random walk di Lévy (con $T = 150$) per $\alpha = 2$ in blu e $\alpha = 1$ in arancione e $\alpha = 0.5$ in giallo.

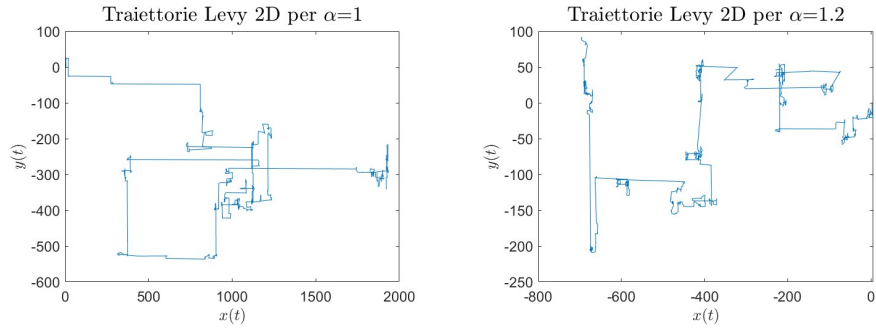


Figura 3.3: Traiettorie bidimensionali di un processo diffusivo anomalo. A destra il caso in cui $\alpha = 1$. A sinistra il caso in cui $\alpha = 1.2$.

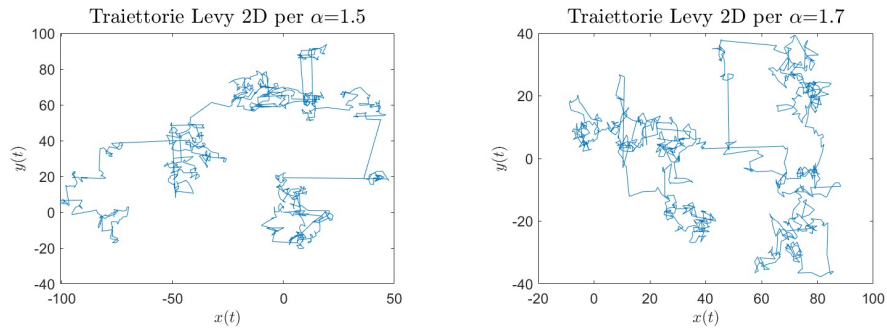


Figura 3.4: Traiettorie bidimensionali di un processo diffusivo anomalo. A destra il caso in cui $\alpha = 1.5$. A sinistra il caso in cui $\alpha = 1.7$.

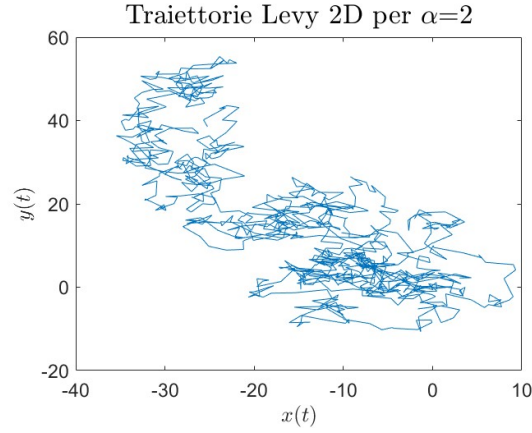


Figura 3.5: Traiettorie bidimensionale di processo di Lévy nel caso in cui $\alpha = 2$ (diffusione gaussiana).

verge ma, come in figura 3.6, si osservi come la deviazione standard della distribuzione di Lévy σ_{Levy} assuma dei valori molto elevati se la si confronta con la deviazione standard nel caso di processi diffusivi gaussiani standard in figura 3.1. Inoltre si osservi anche come i valori della σ_{Levy} differiscono di più ordini di grandezza dai valori analoghi nel caso gaussiano.

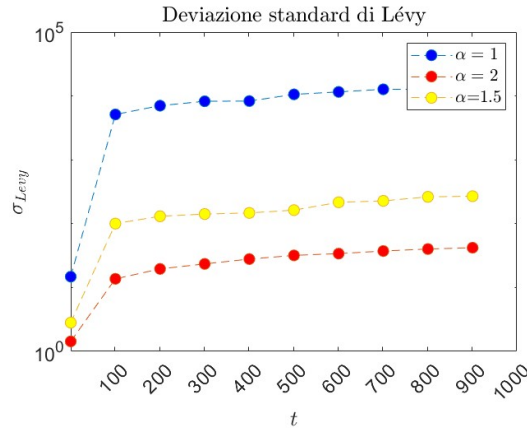


Figura 3.6: Andamento della deviazione standard dei processi di Lévy per diversi valori di α .

3.2 Random walk q -Gaussiani

Prima di studiare le traiettorie di un random walker i cui incrementi sono distribuiti secondo la distribuzione q -Gaussiana, è utile spiegare come

è possibile rappresentare il grafico della distribuzione q -Gaussiana tramite una routine MATLAB. Si descrive anche l'algoritmo necessario per generare numeri random distribuiti secondo una q -Gaussiana.

3.2.1 Rappresentazione della distribuzione q -Gaussiana

Si consideri la forma funzionale (1.27) che descrive la q -Gaussiana; riportando nella routine il valore del coefficiente di normalizzazione C_q e l'espressione della distribuzione per i diversi valori di q , si ottiene la rappresentazione della suddetta distribuzione. Nella figura 1.1 è possibile osservare il grafico della q -Gaussiana per tre diversi valori di q e parametro di scala $\beta = \frac{1}{3-q}$.

La distribuzione q -Gaussiana è anche essa una distribuzione *heavy-tailed* e tale caratteristica sarà significativa quando si andrà a studiare la rappresentazione delle traiettorie q -Gaussiane. Essa è ben visibile nella figura 3.7, dove è confrontata la parte centrale di una Gaussiana standard $\mathcal{N}(0, 1)$ con la parte centrale di una q -Gaussiana avente $q = 1.5$, in scala semi-logaritmica.

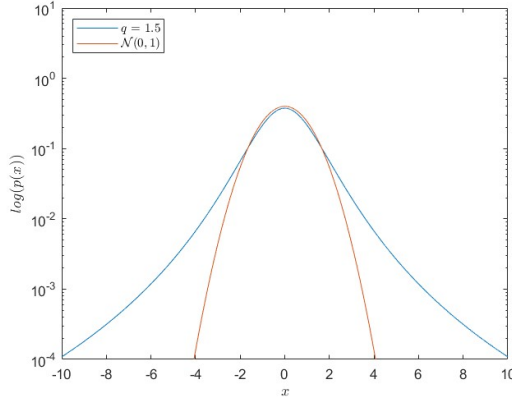


Figura 3.7: Confronto tra q -Gaussiana (in blu) e Gaussiana standard (in rosso) in scala semi-logaritmica

3.2.2 Generazione di numeri random distribuiti secondo la distribuzione q -Gaussiana

Per generare numeri random distribuiti secondo la distribuzione q -Gaussiana è possibile utilizzare l'algoritmo di Box-Müller generalizzato [9].

Prima di descrivere questo algoritmo si rammenti il seguente teorema [4]:

Teorema 1. *Data una variabile aleatoria continua con generica densità di probabilità $p(x)$, la variabile aleatoria cumulativa*

$$C(X) = \int_{-\infty}^X p(x) dx$$

è uniforme in $[0, 1]$.

Quindi, dato $\zeta \in [0, 1]$, è possibile generare variabili aleatorie con densità di probabilità $p(x)$ qualsiasi invertendo la relazione per la cumulativa:

$$x = F^{-1}(\zeta).$$

Prima di continuare con l'algoritmo, si definisca un secondo parametro q_1 , tale per cui

$$q_1 = \frac{3q - 1}{q + 1}. \quad (3.1)$$

A tal punto, si applichi l'algoritmo di Box-Müller al caso in questione: siano U_1 e U_2 due variabili aleatorie indipendenti e identicamente distribuite e siano Z_1 e Z_2 tale per cui

$$Z_1 \doteq \sqrt{-2\log_q U_1} \cos(2\pi U_2) \quad (3.2)$$

e

$$Z_2 \doteq \sqrt{-2\log_q U_1} \sin(2\pi U_2) \quad (3.3)$$

si vuole mostrare che Z_1 e Z_2 sono variabili aleatorie distribuite secondo una q -Gaussiana standard caratterizzata dal parametro in (3.1).

Infatti, elevando al quadrato (3.2) e (3.3) prima e poi sommando e dividendo i due quadrati, si ottengono due espressioni funzioni di U_1 e U_2 . A tal punto, invertendo queste ultime due relazioni si ottiene che

$$U_1 = \exp_q \left(-\frac{1}{2}(Z_1^2 + Z_2^2) \right) \quad (3.4)$$

e

$$U_2 = \frac{1}{2\pi} \arctan \left(\frac{Z_2}{Z_1} \right). \quad (3.5)$$

Quindi, poiché esiste una trasformazione T tra le coppie di variabili aleatorie della forma

$$(Z_1, Z_2) = T(U_1, U_2), \quad (3.6)$$

per il teorema del cambiamento di variabile in funzioni densità (di probabilità)², si arriva a un'espressione analitica per la densità congiunta

$p_{Z_1, Z_2}(z_1, z_2) = p_{U_1, U_2} |J(z_1, z_2)|$ dove $J(z_1, z_2)$ è lo jacobiano della trasformazione. Svolgendo i calcoli nel caso in studio e integrando la densità di probabilità congiunta, si ottiene una q -Gaussiana parametrizzata dal nuovo parametro q_1 . [9]

Dal punto di vista numerico, la funzione MATLAB utilizzata per generare un vettore le cui componenti sono numeri distribuiti secondo la distribuzione q -Gaussiana, è descritta nel seguente riquadro:

²Si veda il Teorema 5.1 di [4]

```

1 function qGaussian = qGaussianDist(nSamples,q1)
2 % si calcola il valore di q
3 q = (1 + q1)/(3 - q1);
4 % si inizializza il vettore
5 qGaussian = zeros(1, nSamples);
6 % si popola il vettore
7 for k = 1:nSamples
8     %si genera due numeri random in [0,1]
9     u1 = rand;
10    u2 = rand;
11    % implementando l'algoritmo di Box-Muller in
12    % questo caso si ricava
13    R = sqrt(-2 * log_q(u1,q));
14    qGaussian(k) = R * sin(2*pi*u2);
15 end
end

```

In seguito è possibile osservare la rappresentazione dell'istogramma del vettore sopra citato per diversi valori di q . In particolare, nelle figure 3.8, 3.9, 3.10 e 3.11, è possibile osservare il confronto tra l'istogramma e il plot della distribuzione esplicito nella sottosezione precedente: è importante notare come dal confronto emerga un buon accordo dei due risultati.

Tali rappresentazioni sono state create utilizzando vettori avente $N = 10^4$ componenti per le prime tre figure, per l'ultima figura, invece, si è utilizzato $N = 10^5$ a causa della forma della distribuzione di probabilità con q maggiori.

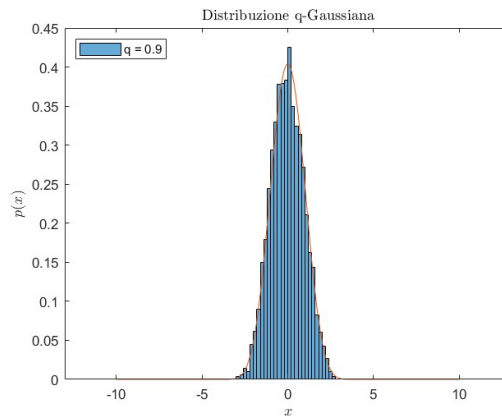


Figura 3.8: Confronto istogramma numerico e grafico della distribuzione per $q = 0.9$.

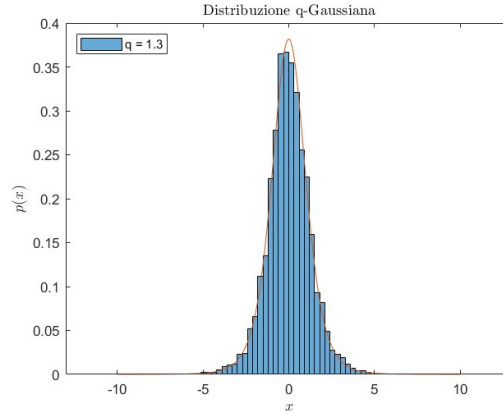


Figura 3.9: Confronto istogramma numerico e grafico della distribuzione per $q = 1.3$.

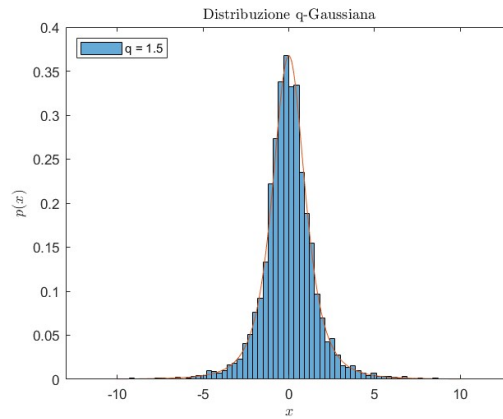


Figura 3.10: Confronto istogramma numerico e grafico della distribuzione per $q = 1.5$.

3.2.3 Traiettorie unidimensionale di random walk q -Gaussiani

Similmente ai casi precedenti, nei quali sono stati considerati incrementi distribuiti secondo una Gaussiana (nel primo caso) o secondo la distribuzione di Lévy (nel secondo caso), in quest'ultima parte sono state riprodotte le rappresentazioni delle traiettorie un *random walker* i cui incrementi si distribuiscono secondo una q -Gaussiana.

Si osservi, in figura 3.12, la traiettoria 1D per $q = 1.3$ e $q = 1.6$; è possibile notare che la traiettoria presenta dei salti più pronunciati per valori maggiori del parametro q .

Un confronto tra traiettoria con incrementi puramente Gaussiani standard e q -Gaussiani è osservabile in figura 3.13. Si noti come, ancora una volta,

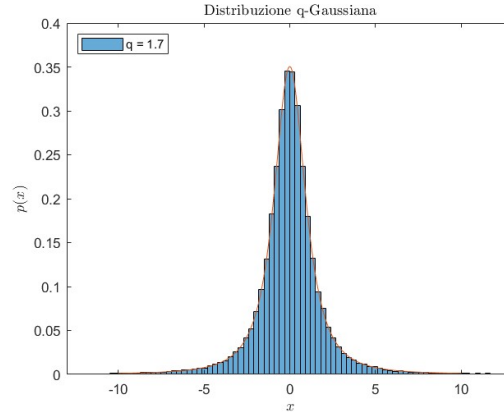


Figura 3.11: Confronto istogramma numerico e grafico della distribuzione per $q = 1.7$.

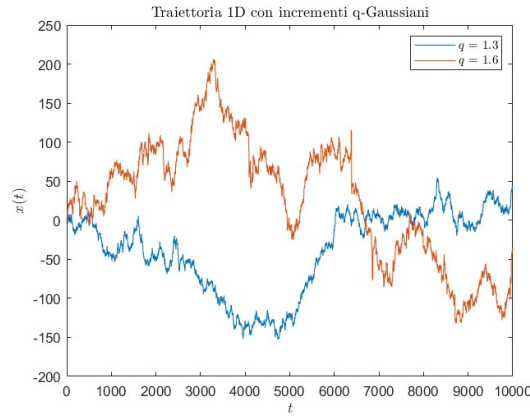


Figura 3.12: Confronto tra traiettorie 1D con incrementi q -Gaussiani per $q = 1.6$ (in arancione) e per $q = 1.3$ (in azzurro).

alcuni incrementi presentino dei valori *anomali* rispetto al caso gaussiano che determinano una maggiore *dispersione* della traiettoria.

Anche in questo caso, come nel caso di incrementi distribuiti secondo la distribuzione di Lévy, si presentano alcuni incrementi particolarmente pronunciati. Questa caratteristica è riconducibile alla divergenza dalla varianza della distribuzione.

Infine, in figura 3.14, è mostrata la traiettoria 2D di un processo diffusivo q -Gaussiano nel caso in cui $q = 1.5$. Anche in questo caso è possibile notare alcuni *jump* anomali derivanti dal fatto che si è considerato degli incrementi distribuiti secondo una distribuzione *heavy-tailed*.

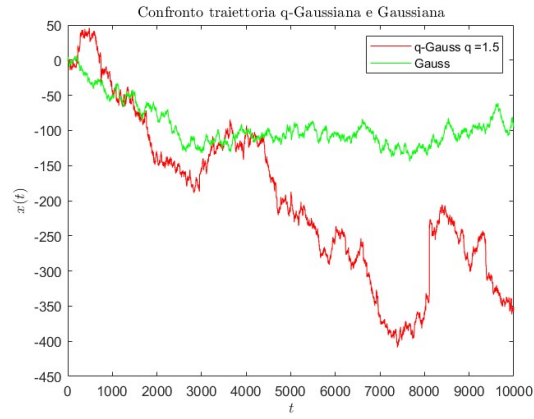


Figura 3.13: Confronto tra traiettorie 1D con incrementi Gaussiani (in verde) e incrementi q -Gaussiani con $q = 1.5$ (in rosso).

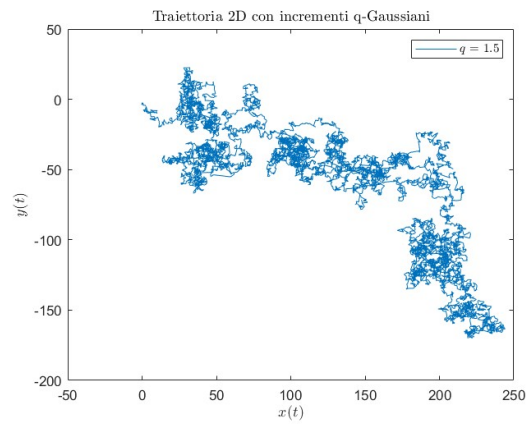


Figura 3.14: Traiettorie 2D di un processo diffusivo q -Gaussiano per $q = 1.5$

Appendice A

Codice per la simulazione del coefficiente di Diffusione

Si riporta in questa Appendice il codice realizzato per la simulazione numerica del coefficiente di diffusione nel moto browniano bidimensionale, come discusso nel Capitolo 2.

```
1  %%% Nelle linee di codice seguenti si definiscono  
   gli strumenti necessari per la simulazione$$$$\  
2  
3  tot_sim = 10; %numero totale di particelle  
4  vec_tot_particles = []; % si inizializza il vettore  
5  delle particelle  
6  N = 1; %numero di simulazioni  
7  T = 1000; % tempo  
8  dimensions = 2; %dimensioni dello spazio fisico  
9  della simulazione  
10 d = 1.0e-6; % diametro in metri  
11 eta = 1.0e-3; % viscosit in Pascal*secondi  
12 kB = 1.38e-23; % costante di Boltzmann  
13 Temp = 293; % temperatura in kelvin  
14 D = kB * Temp / (3 * pi * eta * d); %valore del  
15 coefficiente fisico per i parametri sopra definiti  
16  
17 tau = 1; % intervallo di temp in secondi  
18 time = tau.*[1:1:T]; % si discretizza il tempo in  
   intervalli da 1 secondo  
19 k = sqrt(2*D*tau);  
20  
21 vec_simulatedD = []; % si inizializza il vettore dei  
   coefficienti di diffusione per ogni particella
```



```

22 vec_standardErrorD = []; %si inizializza il vettore
   degli errori
23
24 for i = 1:tot_sim
25
26     dx_i= k * randn(T,N);
27     dy_i= k * randn(T,N);
28     x_i = cumsum(dx_i);
29     y_i = cumsum(dy_i);
30     dSquaredDisplacement_i = (dx_i.^ 2) + (dy_i .^ 2);
31     squaredDisplacement_i= ( x_i .^ 2) + ( y_i .^ 2);
32
33     simulatedD_i = mean( dSquaredDisplacement_i ) / (
        2 * dimensions * tau );
34     standardError_i = std( dSquaredDisplacement_i ) /
        ( 2 * dimensions * tau *sqrt(T));
35
36
37     vec_simulatedD = [ vec_simulatedD simulatedD_i];
38     vec_standardErrorD = [vec_standardErrorD
        standardError_i];
39     vec_tot_particles = [vec_tot_particles i];
40
41 end
42
43 averagedD = mean(vec_simulatedD); %valor medio dei
44 risultati delle singole simulazioni per ognuna delle
   particelle
45 uncertainty = std(vec_simulatedD) / sqrt(tot_sim);%
   errore rispetto la media
46
47 %%%%% Da qui in poi sono elencati comandi per la
   creazione del plot%%%%%%%%
48
49 errorbar(vec_simulatedD,vec_standardErrorD,'ro')
50 hold on
51
52 xlim([0.5 max(vec_tot_particles) + 0.5 ])
53 plot(averagedD * ones(1,tot_sim+1), 'b', 'linewidth',
    2);
54 % plot upper error bar
55 hold on
56 plot((averagedD + uncertainty) * ones(1,tot_sim+1), '
    g-', 'linewidth', 1);

```

```
57 % plot lower error bar
58 hold on
59 plot((averagedD - uncertainty) * ones(1,tot_sim+1), '
    g-', 'linewidth', 1);
60 hold on
61 xlabel('Numero di simulazioni');
62 ylabel('Coefficiente di diffusione simulato');
63 title('Valori simulati del coefficiente di
    diffusione  $D$ ','$','Interpreter', 'latex')
64 legend('D_{sim}','D_{mean}', 'location', 'NorthEast'
    );
```

Bibliografia

- [1] Albert Einstein, On the motion of small particles suspended in liquids at rest required by the molecular-kinetic theory of heat, *Annalen der Physik*, 17(1905), pp. 549-560 .
- [2] C. Gardiner, *Stochastic Methods: A Handbook for the Natural and Social Sciences*, Springer (2009).
- [3] Federica De Domenico, *Modelling and Simulation of Non-Gaussian Financial Returns*, Laurea Magistrale in Scienze Fisiche, A.A. 2021-2022.
- [4] A. Rotondi, P. Pedroni, A. Pievatolo, *Probabilità, Statistica e Simulazione*, Springer (2021).
- [5] Desmond Higham, An algorithmic introduction to numerical simulation of stochastic differential equations, *SIAM*, review 43 (3), pp. 525-546.
- [6] A. Chechkin, R. Metzler, J. Klafter, V. Y. Gonchar, *Introduction to the Theory of Lévy Flights*, Settembre 2008.
- [7] <https://it.mathworks.com/help/matlab/math/create-arrays-of-random-numbers.html>
- [8] Sabir Umarov, Constantino Tsallis, Stanly Steinberg, On a q-Central Limit Theorem Consistent with Nonextensive Statistical Mechanics, *Milan j. math.* 76 (2008), 307–328, published online 14.3.2008, DOI 10.1007/s00032-008-0087-y
- [9] William J. Thistleton, John A. Marsh, Member, Kenric Nelson, Constantino Tsallis, Generalized Box–Müller Method for Generating q-Gaussian Random Deviates, *IEEE transaction of information theort*, vol. 53, no. 12, Ddicembre 2007