



**UNIVERSITÀ DEGLI STUDI ROMA TRE**  
Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali  
Dipartimento di Matematica e Fisica

Tesi di Laurea in Fisica Teorica

---

**SVUOTAMENTO DI UN GAS SOVRASSATURO  
AD OPERA DI UN CLUSTER SUPERCRITICO**

---

*Laureando:*  
Leonardo POZZATI

*Relatore:*  
Prof. Elisabetta SCOPPOLA

*Correlatore:*  
Dr. Francesco MANZO



*Ad Aurelia, Maria Luisa, Alessio e Andrea.*



# Indice

<b>Introduzione</b>	<b>iii</b>
<b>1 Preliminari matematici</b>	<b>1</b>
1.1 Introduzione alla probabilità . . . . .	1
1.2 Catene di Markov . . . . .	4
1.2.1 Concetti introduttivi . . . . .	4
1.2.2 Evoluzione temporale . . . . .	4
1.2.3 Irriducibilità e aperiodicità . . . . .	5
1.2.4 Comportamento asintotico per tempi lunghi . . . . .	8
1.2.5 Reversibilità . . . . .	15
1.3 Random walk . . . . .	16
1.3.1 Caso unidimensionale . . . . .	16
1.3.2 Caso multidimensionale . . . . .	19
1.3.3 Distribuzione di un random walk bidimensionale . . . . .	22
1.3.4 Random walk e ricorrenza . . . . .	23
1.3.5 Random walk e local time . . . . .	24
1.4 Random walk ed equazione del calore discreta . . . . .	30
1.4.1 La rovina del giocatore . . . . .	30
1.4.2 Rovina del giocatore in $d$ dimensioni . . . . .	31
1.4.3 Equazione del calore . . . . .	34
<b>2 Metastabilità: analisi di due modelli noti</b>	<b>37</b>
2.1 Caso non conservativo: modello di Ising . . . . .	37
2.1.1 Introduzione al modello . . . . .	37
2.1.2 Descrizione geometrica delle configurazioni . . . . .	39
2.1.3 Transizione di fase del primo ordine nel modello di Ising .	41
Definizione di transizione di fase . . . . .	41
Esistenza per il modello di Ising . . . . .	41
2.1.4 Comportamento metastabile del modello di Ising . . . . .	43
Dinamica di Glauber-Metropolis . . . . .	44
Regime metastabile . . . . .	45
2.2 Caso conservativo: lattice gas . . . . .	47
2.2.1 Introduzione al modello . . . . .	47
2.2.2 Comportamento metastabile del modello a lattice gas . .	48
Dinamica di Kawasaki . . . . .	49
Descrizione locale . . . . .	49
Un modello semplificato . . . . .	50
Crescita supercritica: un problema aperto . . . . .	52

---

<b>3 Due modelli conservativi per la crescita supercritica</b>	<b>53</b>
3.1 Modello particellare . . . . .	53
3.2 Modello con matrice di densità . . . . .	55
3.3 Relazione tra i due modelli . . . . .	56
3.4 Osservabili . . . . .	56
3.4.1 Interesse per le osservabili scelte . . . . .	58
3.4.2 Media sulla distribuzione iniziale . . . . .	58
3.4.3 Semplificazioni dei due modelli . . . . .	59
3.5 Primo confronto numerico tra i due modelli . . . . .	59
3.5.1 Risultati . . . . .	60
<b>4 Crescita supercritica: risultati sperimentali</b>	<b>63</b>
4.1 Particelle intrappolate per tempi piccoli . . . . .	63
4.2 Particelle libere per tempi lunghi . . . . .	65
4.3 Svuotamento delle corone . . . . .	67
4.3.1 Propagazione dell'effetto della trappola . . . . .	67
4.3.2 Fattorizzazione delle densità . . . . .	68
Verifica dell'ipotesi di fattorizzazione . . . . .	70
Ricostruzione dei fattori . . . . .	71
<b>Ringraziamenti</b>	<b>73</b>
<b>A Simulazione numerica di catene di Markov</b>	<b>75</b>
A.1 Algoritmo . . . . .	75
A.2 Generatore di numeri casuali . . . . .	77
<b>B Sorgenti dei codici</b>	<b>79</b>
B.1 Modello particellare . . . . .	79
B.1.1 Namespace MyTypes . . . . .	79
B.1.2 Implementazione del modello . . . . .	81
B.1.3 Classe Grid . . . . .	81
B.1.4 Classe DensManager . . . . .	86
B.1.5 Struttura del main . . . . .	89
B.1.6 Analisi dati per il modello particellare . . . . .	91
B.2 Modello con matrice di densità . . . . .	92
Note legali sul rilascio dei sorgenti . . . . .	93
<b>Bibliografia</b>	<b>94</b>

# Introduzione

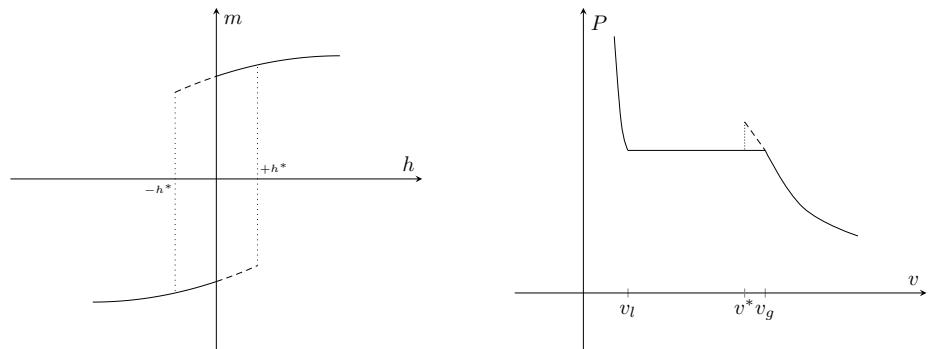
Questo lavoro di tesi è dedicato a un problema relativo al rilassamento all'equilibrio di un sistema termodinamico conservativo metastabile. Più specificamente, nell'ambito della meccanica statistica del non equilibrio, lo studio si concentra sulle interazioni che avvengono tra un gas sovrassaturo e un cluster supercritico della fase stabile, a seguito della nucleazione di quest'ultimo.

Alcuni esempi di sistemi fisici che mostrano un comportamento metastabile sono i liquidi sottoraffreddati, i gas sovrassaturi e i ferromagneti. In termini generici, un sistema termodinamico prossimo a una transizione di fase presenta un comportamento metastabile quando il valore di un suo parametro termodinamico, a cui è associato uno stato di equilibrio  $A$  del sistema, viene cambiato in un valore per il quale il sistema dovrebbe trovarsi in un differente stato di equilibrio  $B$ : sotto condizioni sperimentali controllate, si può evitare che il sistema proceda verso la transizione di fase, facendolo passare per stati di *falso equilibrio* diversi da  $B$  e prossimi allo stato di equilibrio iniziale  $A$ .

Gli stati termodinamici visitati dal sistema sono di falso equilibrio, nel senso che presentano caratteristiche simili all'equilibrio stabile, ma decadono nel tempo. A differenza dall'equilibrio stabile, il sistema mantiene l'equilibrio metastabile fino a che, per perturbazioni esterne o fluttuazioni spontanee del sistema, compaiono uno o più nuclei della fase stabile, da cui parte il rilassamento all'equilibrio.

Nell'immagine in figura 1, sono mostrati gli esempi del comportamento metastabile di due sistemi fisici. Nel grafico sulla sinistra, si ha l'andamento della magnetizzazione  $m$  in funzione del campo esterno  $h$  per un ferromagnete al di sotto della temperatura di Curie. Le due parti tratteggiate corrispondono agli stati metastabili, per i quali la magnetizzazione  $m$  è opposta al campo  $h$ . I due tratti verticali indicano le transizioni di fase che avvengono al raggiungimento del valore coercitivo  $\pm h^*$ . Sulla destra, è mostrato l'andamento della pressione in funzione del volume, per un gas reale al di sotto della temperatura critica. Il tratto di curva per  $v > v_g$  descrive gli stati di puro vapore, per  $v < v_l$  si hanno gli stati di puro liquido e nel tratto intermedio si hanno entrambe le fasi in equilibrio.

In questo secondo caso, il comportamento metastabile è associato alla transizione di fase gas liquido. Si immagini di iniziare una compressione isoterma da un volume specifico  $v$  di poco superiore a quello di condensazione  $v_g$ . Se il campione è ragionevolmente libero di impurezze e si evitano significativi gradienti di pressione, si può ottenere un vapore sovrassaturo, ossia una fase di puro gas per  $v < v_g$ . Proseguendo con la compressione isoterma, si arriva ad un valore del volume specifico  $v^*$ , per il quale il gas diventa instabile e si osserva



**Figura 1:** A sinistra, viene mostrato il comportamento metastabile di un ferromagnete al di sotto della temperatura di Curie. Lungo la linea tratteggiata, la magnetizzazione  $m$  è opposta al campo  $h$  esterno applicato. I tratti verticali corrispondono alle transizioni di fase, che avvengono al raggiungimento del valore coercitivo  $h^*$ . A destra è mostrata l'isoterma di un gas reale al di sotto della temperatura critica. La linea tratteggiata corrisponde agli stati metastabili di vapore sovrassaturo, mentre la linea verticale mostra la transizione di fase che avviene al raggiungimento del volume specifico  $v^*$ .

la formazione e la crescita di nuclei della fase liquida. Al termine di questo processo, si raggiunge un nuovo equilibrio stabile, in cui la fase gassosa coesiste con la frazione del gas iniziale che è diventata liquido.

Storicamente, la presenza di un comportamento metastabile è emersa già nell'ambito dello studio termodinamico delle transizioni di fase. Un esempio, per quanto riguarda i gas perfetti, è dato dall'equazione di van der Waals, introdotta dal fisico olandese con un approccio semifenomenologico in cui viene modificata l'equazione di stato dei gas perfetti, tenendo in considerazione sia l'interazione tra le molecole sia il volume intrinseco occupato da queste ultime. Al di sotto della temperatura critica, nelle isoterme di van der Waals di un gas perfetto compaiono due gobbe, che descrivono stati instabili in quanto, per esempio, in questi tratti si ha una compressibilità isoterma non negativa in disaccordo con le leggi fisiche. In prossimità di  $v_g$ , la gobba è stata interpretata in termini di vapore sovrassaturo, mentre in prossimità di  $v_l$  in termini di liquido sottoraffreddato.

In questo lavoro, per caratterizzare il comportamento metastabile tramite lo studio di caratteristiche quali la vita media di uno stato metastabile o il meccanismo di transizione verso il corrispondente stato stabile del sistema, è stato adottato il punto di vista moderno che vede la metastabilità come un problema dinamico: dato un sistema fisico con il suo spazio delle configurazioni  $\mathcal{X}$  e la sua hamiltoniana  $H$ , si studia la convergenza all'equilibrio di una catena di Markov definita sullo spazio delle configurazioni  $\mathcal{X}$ , tenendo in considerazione che la misura stazionaria, a cui la catena converge, coincide con la misura di Gibbs.

Nel capitolo 2, sono presentati i risultati noti ottenuti seguendo questo schema per studiare e confrontare il comportamento metastabile di un modello non conservativo e uno conservativo. In questa analisi, vengono mostrate le analogie

nel processo di nucleazione della fase stabile, per poi concentrare l'attenzione sulle difficoltà dello studio della crescita supercritica nei sistemi conservativi, a cui è dedicato questo lavoro di tesi.

Per mostrare le caratteristiche del comportamento del modello non conservativo, è stato scelto il modello di Ising con dinamica di Metropolis. Dato un reticolo bidimensionale quadrato  $\Lambda_L \subset \mathbb{Z}^2$  di lato  $L$  e cardinalità  $|\Lambda_L|$ , centrato nell'origine e con condizioni periodiche al contorno, ad ogni suo sito si associa una variabile di spin  $\sigma(\underline{x})$ , che può assumere i valori  $\pm 1$ . L'interazione tra le variabili di spin di una configurazione  $\sigma \in \mathcal{X}_{\Lambda_L} = \{-1, +1\}^{|\Lambda_L|}$  è quindi descritta dall'hamiltoniana

$$H_{\Lambda_L}(\sigma) = -J \sum_{(\underline{x}, \underline{y}) \in \Lambda_L^*} \sigma(\underline{x})\sigma(\underline{y}) - h \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \sigma(\underline{x}),$$

in cui  $\Lambda_L^*$  indica l'insieme delle coppie di primi vicini in  $\Lambda_L$ ,  $J > 0$  caratterizza l'interazione di coppia,  $h$  è il campo magnetico esterno.

Per la dinamica della catena di Markov sullo spazio delle configurazioni  $\mathcal{X}$ , si sceglie l'algoritmo di Glauber-Metropolis

- i) la configurazione  $\sigma$  può avere transizioni solo verso configurazioni  $\sigma^{\underline{x}}$  con  $\underline{x} \in \Lambda_L$  per le quali

$$\sigma^{\underline{x}}(\underline{y}) = \begin{cases} \sigma(\underline{y}), & \text{se } \underline{x} \neq \underline{y}, \\ -\sigma(\underline{y}), & \text{se } \underline{x} = \underline{y}; \end{cases}$$

- ii) la transizione  $\sigma \rightarrow \sigma'$  avviene con probabilità data da

$$\mathbb{P}(\sigma, \sigma') = \begin{cases} \frac{1}{|\Lambda_L|} e^{-\beta[H(\sigma^{\underline{x}}) - H(\sigma)]_+}, & \text{se } \sigma' = \sigma^{\underline{x}} \text{ per } \underline{x} \in \Lambda_L, \\ 1 - \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \frac{1}{|\Lambda_L|} e^{-\beta[H(\sigma^{\underline{x}}) - H(\sigma)]_+}, & \text{se } \sigma' = \sigma, \\ 0, & \text{altrimenti.} \end{cases}$$

in cui  $[a]_+$  è la parte positiva del numero reale  $a$ .

Come sistema conservativo, è stato scelto il lattice gas con dinamica di Kawasaki. Dato un reticolo bidimensionale quadrato finito  $\Lambda_\beta \subset \mathbb{Z}$ , centrato nell'origine e con condizioni periodiche al contorno, a ogni sito  $\underline{x} \in \Lambda$  si associa una variabile di occupazione  $\eta(\underline{x})$ , che può assumere i valori 0 o 1. L'energia associata a una generica configurazione  $\eta$  dello spazio delle configurazioni  $\mathcal{X}_{\Lambda_\beta} = \{0, 1\}^{|\Lambda_\beta|}$  è data da

$$H(\eta) = -U \sum_{(\underline{x}, \underline{y}) \in \Lambda^*} \eta(\underline{x})\eta(\underline{y}),$$

in cui  $U > 0$  è l'energia di legame e la somma è ristretta alle coppie di primi vicini. La dinamica di Kawasaki scelta è a tempo continuo perché, come si approfondirà in seguito, i volumi interessanti nel regime metastabile sono esponenziali in  $\beta$ , per  $\beta \rightarrow \infty$ . Secondo questa dinamica, a ogni legame  $b = (\underline{x}, \underline{y}) \in \Lambda_\beta^*$  si associa una sequenza  $\tau_{b,i}$ , con  $i \in \mathbb{N}$  di tempi casuali, che partono da  $\tau_{b,0} = 0$  e i cui incrementi siano indipendenti e identicamente distribuiti esponenzialmente, con media 1. Dal momento che  $|\Lambda_\beta| < \infty$ , si ha

$$\mathbb{P}(\exists b, b', i, i' : \tau_{b,i} = \tau_{b',i'}) = 0.$$

Se  $t = \tau_{b,i}$ , si definisce

$$\boldsymbol{\eta}_t = \begin{cases} \boldsymbol{\eta}_{t^-} & \text{con probabilità } 1 - e^{-\beta[H(\boldsymbol{\eta}_{t^-}^b) - H(\boldsymbol{\eta}_{t^-})]_+}, \\ \boldsymbol{\eta}_{t^-}^b & \text{con probabilità } e^{-\beta[H(\boldsymbol{\eta}_{t^-}^b) - H(\boldsymbol{\eta}_{t^-})]_+}, \end{cases}$$

in cui  $t^-$  è l'istante immediatamente precedente  $t$ .

Come anticipato, per quanto riguarda la nucleazione della fase stabile i due sistemi presentano alcune similitudini. Una prima analogia si ottiene se consideriamo la forma quadrata della goccia, a cui corrisponde la minima energia a parità di superficie. In questo caso, già un'analisi euristica del panorama di energia di una goccia indica la presenza di una *taglia critica* per i cluster della fase stabile.

Per il modello di Ising, indichiamo con  $\sigma_{l \times l}$  un quadrato di spin positivi di lato  $l \in \mathbb{N}$  e siano

$$\begin{aligned} \oplus : \quad & \boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) = +1 \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L \\ \ominus : \quad & \boldsymbol{\sigma}(\underline{x}) = -1 \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L \end{aligned}$$

le due configurazioni in cui gli spin nel reticolo sono, rispettivamente, tutti positivi e tutti negativi. Si ha

$$\begin{aligned} E(l) &= H(\sigma_{l \times l}) - H(\ominus) \\ &= 4Jl - hl^2. \end{aligned}$$

L'energia  $E(l)$  ha un massimo per  $l = 2J/h$ . Per la taglia critica nel caso del modello di Ising, si ottiene quindi

$$l_c = \left\lceil \frac{2J}{h} \right\rceil,$$

in cui  $\lceil a \rceil$  indica la parte intera superiore di  $a$ .

Anche per il modello a lattice gas, come anticipato, esiste una taglia critica per i cluster della fase stabile. Come spiegato dettagliatamente nel paragrafo 2.2.2, la descrizione del comportamento metastabile nel limite termodinamico in termini dell'ensemble canonico è approssimata da quella grancanonica con l'hamiltoniana

$$H_\lambda(\boldsymbol{\eta}) = H(\boldsymbol{\eta}) - \lambda n,$$

se la densità del gas  $\rho$  e il parametro di attività  $\lambda \in \mathbb{R}$  sono legati dalla relazione  $\rho = e^{\lambda\beta}$ . In questo caso, la densità del regime metastabile è  $\rho = e^{-\Delta\beta}$ , con  $\Delta \in (U, 2U)$ . Sostituendo nell'hamiltoniana grancanonica  $H_\lambda(\boldsymbol{\eta})$  l'espressione di  $\eta$  in termini della variabile di spin  $\sigma$

$$\eta(\underline{x}) = \frac{1 + \sigma(\underline{x})}{2},$$

si ottiene che, se vale anche la condizione  $\lambda = -\Delta$ , si ha una corrispondenza tra i due modelli con  $J = U/2$  e  $h = 2U - \Delta$ . La scelta di  $\Delta \in (U, 2U)$  nel regime metastabile di Kawasaki corrisponde quindi a  $h \in (0, 2J)$  nel regime metastabile per modello di Ising. Per la taglia critica, si ottiene quindi

$$l_c = \left\lceil \frac{U}{2U - \Delta} \right\rceil.$$

Per esaminare più dettagliatamente il comportamento di questi due modelli, prendiamo in considerazione il regime metastabile di Glauber-Metropolis per il modello di Ising

$$\begin{aligned}\Lambda_L &\text{ grande ma finito e indipendente da } \beta, \\ h &\in (0, 2J), \\ \beta &\rightarrow \infty,\end{aligned}$$

e il regime metastabile di Kawasaki

$$\begin{aligned}\Lambda &= \Lambda_\beta, \quad \text{con } |\Lambda_\beta| = e^{\Theta\beta}, \\ \Delta &\in (U, 2U), \\ \beta &\rightarrow \infty, \\ n &= \rho |\Lambda_\beta| = e^{(\Theta-\Delta)\beta} \rightarrow \infty,\end{aligned}$$

per il modello a lattice gas. In questi due regimi, le condizioni  $h \in (0, 2J)$  e  $\Delta \in (U, 2U)$  comportano una taglia critica non banale, rispettivamente, per il modello di Ising e per il lattice gas.

Il principale risultato, per quanto riguarda il modello di Ising nel regime metastabile a volume finito, è dato dal teorema di Neves-Schonmann, a pagina 46. Consideriamo nuovamente le due configurazioni  $\oplus$  e  $\ominus$ , che sono rispettivamente il minimo di energia intorno al quale si concentra la misura grancanonica di Gibbs e il minimo locale a cui corrisponde lo stato metastabile, e definiamo l'*hitting time* dell'insieme  $A$  come

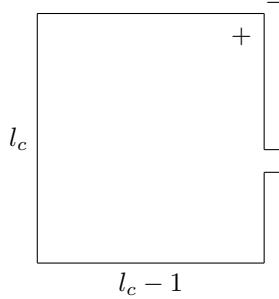
$$\tau_A = \min \{ t \in \mathbb{N}_0 : \sigma_t \in A \}.$$

Il primo risultato del teorema riguarda la crescita di un cluster rettangolare: se il suo lato minore è maggiore della taglia critica  $l_c$ , la probabilità che l'hitting time  $\tau_{\oplus}$  della fase stabile sia minore di quello della fase metastabile  $\tau_{\ominus}$  tende ad 1 per  $\beta$  che va ad infinito; viceversa, se tale lato è minore della taglia critica, al tendere di  $\beta$  all'infinito sarà unitaria la probabilità che  $\tau_{\ominus}$  sia minore di  $\tau_{\oplus}$ . La fase stabile sarà probabilisticamente favorita o sfavorita rispetto a quella metastabile, quindi, a seconda del rapporto tra lato minore del cluster  $l(\sigma)$  e taglia critica  $l_c$ .

Il secondo risultato di questo teorema riguarda la goccia critica, che corrisponde alla configurazione in cui gli spin positivi formano un rettangolo di lati  $l_c \times (l_c - 1)$  con una protuberanza sul lato maggiore, come mostrato nell'immagine in figura 2. Nel limite in cui  $\beta$  va ad infinito, con probabilità 1 la catena di Markov visita una configurazione di tipo critico, prima della formazione di cluster quadrati supercritici.

Il terzo risultato riguarda la crescita supercritica e indica che, una volta superata la configurazione quasi rettangolare, la catena di Markov impiega un tempo dell'ordine di  $e^{\beta(2J-h)}$  per raggiungere la fase stabile, data dalla configurazione  $\oplus$ .

Per il lattice gas nel regime metastabile di Kawasaki, una differenza importante rispetto al caso conservativo è data dal fatto che, per avere almeno una particella, vanno presi in considerazione volumi esponenziali in  $\beta$ . Nonostante questo aspetto, è possibile studiare il comportamento locale di un modello semplificato, come fatto nel lavoro [7].



**Figura 2:** Esempio di cluster quasi rettangolare di spin positivi, in un mare di spin negativi. La regione di spin positivi ha dimensione  $l_c \times (l_c - 1)$  e una protuberanza sul lato più lungo.

Più precisamente, si considera un reticolo finito  $\bar{\Lambda}$ , centrato nell'origine e si rimuove l'interazione all'esterno di  $\bar{\Lambda}_0 = \bar{\Lambda} \setminus \partial^-\bar{\Lambda}$ , in cui  $\partial^-\bar{\Lambda}$  indica la frontiera interna di  $\bar{\Lambda}$ . L'energia di interazione diventa quindi

$$H(\boldsymbol{\eta}) = -U \sum_{(\underline{x}, \underline{y}) \in \bar{\Lambda}_0^*} \eta(\underline{x})\eta(\underline{y}).$$

Il gas esterno a  $\bar{\Lambda}$  viene modellizzato in termini di random walk indipendenti. Nel regime metastabile di Kawasaki che è stato scelto, infatti, l'interesse è rivolto a gas rarefatti, con densità  $\rho = e^{-\Lambda\beta}$ , e la bontà di questa approssimazione è stata studiata e dimostrata nel lavoro [10].

Per questo modello semplificato, si ottiene il teorema a pagina 51, che contiene risultati analoghi a quelli del teorema di Neves e Schonmann per la nucleazione.

Le due configurazioni di riferimento  $\oplus$  e  $\ominus$ , in questo caso, corrispondono a

$$\begin{aligned} \blacksquare &= \{ \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{X} : \eta(\underline{x}) = 1 \quad \forall \underline{x} \in \bar{\Lambda}_0 \}, \\ \square &= \{ \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{X} : \eta(\underline{x}) = 0 \quad \forall \underline{x} \in \bar{\Lambda} \}, \end{aligned}$$

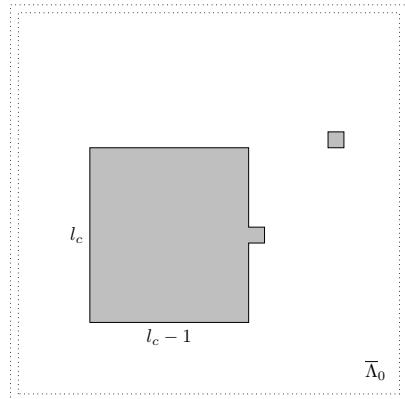
in cui  $\mathcal{X} = \{0, 1\}^{\bar{\Lambda}} \times \mathbb{N}_0^{\Lambda_\beta \setminus \bar{\Lambda}}$ .

L'evoluzione dei cluster della fase stabile, per questo modello, risulta differente da quella del modello di Ising con dinamica di Glauber-Metropolis. Per la dinamica di Kawasaki, è infatti un movimento di particelle lungo il bordo della goccia rettangolare a portare a una goccia quadrata più stabile, in un tempo molto minore di quello che serve per crescere o restringersi, dell'ordine di  $e^{\Delta\beta}$ .

La configurazione critica per la dinamica di Kawasaki, di cui è mostrato un esempio nell'immagine in figura 3, ha una forma simile a quella del caso non conservativo, ma con un'ulteriore particella libera, la cui presenza indica che è iniziata la crescita supercritica della goccia della fase stabile.

Il comportamento metastabile di questi due modelli prevede due scenari completamente differenti per la crescita supercritica della fase stabile, per la quale si torna a ragionare in termini di volumi esponenziali.

Per quanto riguarda il modello di Ising, i risultati ottenuti da Dehghanpour e Schonmann nel lavoro [5] mostrano che più la goccia cresce e più la sua crescita



**Figura 3:** Esempio di configurazione critica per il modello a lattice gas. La due regioni in grigio rappresentano un cluster di dimensioni  $l_c \times (l_c - 1)$  con una protuberanza sul lato più lungo e una singola particella.

risulta favorita. Questo comportamento risulta qualitativamente comprensibile se si tiene in considerazione che la creazione di nuovi spin positivi al bordo della goccia è favorita, in termini entropici, al crescere della taglia del cluster.

La comprensione del meccanismo di crescita supercritica di un cluster della fase stabile nel modello a lattice gas, invece, risulta molto più ostica e allo stato dell'arte non è chiara neanche da un punto di vista euristico, a causa delle difficoltà aggiuntive legate alla conservatività del modello.

Nel caso conservativo, durante la crescita supercritica la goccia della fase stabile impoverisce sempre di più il gas delle particelle di cui, appunto, necessita per continuare a crescere. Uno degli aspetti problematici, in questo scenario, è dato dal fatto che il gas viene spogliato con un meccanismo che crea un gradiente di densità, in quanto le zone periferiche risentono della presenza della goccia diversamente, rispetto alla porzione di gas prossima alla goccia.

Questo comportamento rende impossibile inquadrare il problema, ad esempio, nell'ambito di una teoria di campo medio e richiede uno studio molto più articolato. In questo lavoro di tesi, sono stati sviluppati due modelli matematici, di cui si forniscono tutti i dettagli nel capitolo 3, proprio con l'obiettivo di fare un primo passo verso la comprensione delle interazioni tra il gas sovrassaturo e un singolo cluster della fase stabile, durante la crescita supercritica che segue la nucleazione di quest'ultimo.

Per poter iniziare ad analizzare la crescita supercritica, sono state fatte alcune approssimazioni. In primo luogo, si è tenuto in considerazione che l'interesse è rivolto a configurazioni in cui il gas è rarefatto. In questo senso, si è scelto di modellizzare il gas in termini di un insieme di random walk indipendenti su reticolo, con condizioni periodiche al contorno. Questa scelta, analogamente a quanto visto per il modello a lattice gas locale semplificato, si fonda sui risultati ottenuti nel lavoro [10], riguardo l'approssimazione in termini di random walk indipendenti per un gas rarefatto con dinamica di Kawasaki.

Per quanto riguarda la fase stabile, è stato deciso di lavorare con un singolo cluster, di cui sono state trascurate sia le proprietà geometriche sia quelle dinamiche. Il cluster della fase stabile viene quindi schematizzato come una trappola puntiforme e fissa nell'origine degli assi. Questa trappola, inoltre, rap-

presenta l'unica interazione tra i random walk: secondo la dinamica scelta, le particelle che passano sopra la trappola restano bloccate e questa, se popolata, ha la possibilità di riemettere particelle in modo equiprobabile su uno dei suoi 4 primi vicini. In questa prima analisi, la probabilità di emissione è stata scelta costante e indipendente dal numero di particelle intrappolate.

Il primo modello sviluppato ha natura stocastica. Nello specifico, dato un reticolo  $\Lambda_L \in \mathbb{Z}$  con condizioni periodiche al contorno, si distribuiscono  $N$  particelle sui suoi siti con probabilità uniforme e uguale a  $|\Lambda_L|^{-1}$ . Una volta disposte sul reticolo, ad ogni turno ogni particella si muove seguendo la dinamica di un random walk bidimensionale semplice e simmetrico con condizioni periodiche al contorno. I random walk sono indipendenti, nel senso che interagiscono solo tramite la trappola presente nell'origine: le particelle che passano sull'origine rimangono bloccate e la trappola, se popolata, ha una probabilità  $p_e \in [0, 1]$  di riemettere una singola particella ad ogni turno della dinamica, in modo equiprobabile su uno dei suoi quattro primi vicini.

Più precisamente, siano  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  due elementi dello spazio delle configurazioni

$$(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N) \quad \underline{x}_i \in \Lambda_L, \forall i = 1, \dots, N,$$

per i quali viene definita una norma  $|\underline{x} - \underline{y}|_L$  che tiene in considerazione la condizione di periodicità al bordo del reticolo  $\Lambda_L$ . Se si indica con  $\mathbf{S}(t)$  la configurazione delle coordinate  $\underline{S}_i(t)$  delle particelle al tempo  $t \in \mathbb{N}_0$ , la dinamica del sistema è una catena di Markov, la cui probabilità di transizione tra le due configurazioni  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  fa distinzione tra i due casi che seguono:

- se la configurazione  $\mathbf{x}$  è tale che  $\underline{x}_i \neq \underline{0} \forall i = 1, \dots, N$ , la trappola è vuota e la probabilità di transizione è data semplicemente da

$$\mathbb{P}\{\mathbf{S}(t+1) = \mathbf{y} \mid \mathbf{S}(t) = \mathbf{x}\} = \left(\frac{1}{4}\right)^N \prod_{i=1}^N \mathbb{1}_{|\underline{x}_i - \underline{y}_i|_L=1};$$

- se invece si ha  $\underline{x}_i = \underline{0}$  per qualche  $i = 1, \dots, N$ , la trappola è popolata e ha una probabilità  $p_e$  di singola emissione. Si può, quindi, definire l'insieme non vuoto  $\mathcal{I} = \{i : \underline{x}_i = \underline{0}\}$  delle particelle intrappolate, la cui cardinalità è  $|\mathcal{I}| = \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{\{\underline{x}_i = \underline{0}\}}$ , e si impone la condizione che, in caso di emissione, viene espulsa dalla trappola la particella associata all'indice più piccolo  $i_e = \min\{i \in \mathcal{I}\}$  tra quelli delle particelle intrappolate.

In questo secondo caso, si ha

$$\mathbb{P}\{\mathbf{S}(t+1) = \mathbf{y} \mid \mathbf{S}(t) = \mathbf{x}\} = \begin{cases} \left(\frac{1}{4}\right)^{(N-|\mathcal{I}|)} \frac{p_e}{4} & \text{se } |\underline{x}_i - \underline{y}_i|_L = 1 \forall i \notin \mathcal{I} \\ & \underline{y}_i = \underline{0} \forall i \in \mathcal{I} \setminus \{i_e\} \\ & \text{e } |\underline{y}_{i_e}|_L = 1, \\ \left(\frac{1}{4}\right)^{(N-|\mathcal{I}|)} (1-p_e) & \text{se } |\underline{x}_i - \underline{y}_i|_L = 1 \forall i \notin \mathcal{I} \\ & \text{e } \underline{y}_i = \underline{0} \forall i \in \mathcal{I}, \\ 0 & \text{altrimenti.} \end{cases}$$

Il modello appena definito è evidentemente conservativo e, per ulteriori dettagli matematici, si rimanda direttamente al paragrafo 3.1.

Per le densità basse a cui si rivolge l'interesse in questo lavoro, la simulazione numerica di questo modello comporta alcune difficoltà di natura tecnica.

Per questo motivo, è stato introdotto un secondo modello, che rivede lo stesso problema in termini dell'evoluzione di una matrice di densità, secondo una dinamica deterministica.

Sul reticolo  $\Lambda_L \in \mathbb{Z}$ , si definisce una funzione  $\rho(\underline{x}, t) : \Lambda_L \times \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}_+$ , che per  $t = 0$  ha un valore uniforme su tutto il reticolo ad eccezione dell'origine

$$\rho(\underline{x}, 0) = \begin{cases} \tilde{\rho}_o & \text{se } \underline{x} = \underline{0}, \\ \tilde{\rho} & \text{altrimenti,} \end{cases}$$

La legge di evoluzione temporale della funzione  $\rho(\underline{x}, t)_{\underline{x} \in \Lambda_L}$  varia a seconda del sito reticolare:

- per  $\underline{x} \neq \underline{0}$ , la funzione  $\rho(\underline{x}, t+1)$  è la media dei valori che la funzione aveva sui primi vicini del sito al tempo  $t$ , con l'unica eccezione che i primi vicini dell'origine vedono il valore fittizio  $\tilde{\rho}_o$  nell'origine, quindi

$$\rho(\underline{x}, t+1) = \begin{cases} \sum_{\substack{\underline{x}' \neq \underline{0} \\ |\underline{x}' - \underline{x}|_L = 1}} \frac{\rho(\underline{x}', t)}{4} + \frac{\tilde{\rho}_o}{4} & \text{se } |\underline{x}|_L = 1, \\ \sum_{|\underline{x}' - \underline{x}|_L = 1} \frac{\rho(\underline{x}', t)}{4} & \text{se } |\underline{x}|_L > 1. \end{cases}$$

- Per  $\underline{x} = \underline{0}$ , si ha

$$\rho(\underline{0}, t+1) = N - \sum_{\underline{x} \neq \underline{0}} \rho(\underline{x}, t+1)$$

in cui  $N = \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \rho(\underline{x}, 0)$ .

Le quantità  $\tilde{\rho}_o$  e  $\tilde{\rho}$  di questo secondo modello devono soddisfare la condizione  $\tilde{\rho}_o < \tilde{\rho}$ , in modo che  $\rho(\underline{x}, t)$  sia definita positiva e possa essere interpretata come il numero di occupazione dei siti del reticolo  $\Lambda_L$ . Se questa condizione sulle densità di inizializzazione è soddisfatta, si può definire il numero di particelle come

$$\sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \rho(\underline{x}, t) = N \quad \forall t \in \mathbb{N}_0$$

e anche questo modello risulta conservativo.

Per lo studio delle interazioni tra il cluster della fase stabile e il gas sovraccarico, una prima osservabile scelta è il numero di particelle  $n_o(t)$  intrappolate in funzione del tempo.

Per quanto riguarda le osservabili utili per studiare del comportamento del gas, si è tenuto in considerazione che questi due modelli sono in stretta relazione tra loro. Come spiegato nel paragrafo 3.3, il valore di aspettazione del numero di particelle  $n(\underline{x}, t)$  del modello a random walk coincide con la quantità  $\rho(\underline{x}, t)$  del modello a matrice di densità.

I due modelli, inoltre, godono di un'approssimativa simmetria per rotazione. Per il modello a matrice di densità, questa proprietà segue dall'equazione del moto. Per il modello a random walk, la simmetria per rotazione segue dal fatto che, sebbene il random walk avvenga su un reticolo discreto, la sua distribuzione di probabilità dipende dalla distanza euclidea, come spiegato dettagliatamente nel paragrafo 1.3.3.

Il reticolo  $\Lambda_L$  di semilato  $L$  è stato, quindi, ricoperto con  $L/\ell$  corone circolari concentriche, centrate nell'origine e il cui passo  $\ell$  è un divisore del semilato  $L$ , date dagli insiemi di punti

$$\Xi_i = \Xi(i, \ell) = \{ \underline{x} \in \Lambda_L : (i-1)\ell < \| \underline{x} \| \leq i\ell \} \quad \text{per } i = 1, \dots, L/\ell.$$

seguendo la procedura illustrata nel paragrafo 3.4. L'informazione locale contenuta nel numero di particelle  $n(\underline{x}, t)$  è stata quindi tralasciata, a favore delle densità medie all'interno di queste corone.

Per quanto riguarda il modello a random walk, è stato deciso di mediare anche sul tempo. Per questo, si è scelto un intervallo di lunghezza  $\Delta \in \mathbb{N}^+$  e l'evoluzione temporale è stata suddivisa negli intervalli disgiunti

$$\Theta_\tau = \Theta(\tau, \Delta) = [1 + (\tau - 1)\Delta, \tau\Delta] \cap \mathbb{N}^+ \quad \forall \tau \in \mathbb{N}^+$$

Le densità medie scelte per studiare il comportamento del gas nel reticolo sono quindi

$$\delta(i, \tau)_{\text{r.w.}} = \frac{1}{|\Xi_i|} \frac{1}{\Delta} \sum_{t \in \Theta_\tau} \sum_{k=1}^N \mathbb{1}_{\{ \underline{S}_k(t) \in \Xi_i \}}$$

per il modello a random walk e

$$\delta(i, \tau)_{\text{m.d.}} = \frac{1}{|\Xi_i|} \sum_{\underline{x} \in \Xi_i} \rho(\underline{x}, \tau\Delta)$$

per il modello a matrice di densità.

Il comportamento di questi due modelli per tempi piccoli e lunghi può essere studiato analiticamente. In questi due regimi, è infatti possibile applicare i risultati ottenuti da Erdős e Taylor riguardo il tempo locale di un random walk semplice e simmetrico in 2 dimensioni, esposti nel paragrafo 1.3, per calcolare il numero di particelle  $n_o(t)$  cadute nella trappola per tempi piccoli e il numero  $n_l(t)$  di quelle ancora libere nel reticolo per tempi grandi. I calcoli dettagliati per queste due quantità sono esposti, rispettivamente, nei paragrafi 4.1 e 4.2.

Per quanto riguarda il regime dei tempi intermedi, c'è invece bisogno di uno studio numerico, per il quale sono stati implementati, in C++, due programmi che simulano il comportamento del modello a random walk e con matrice di densità e alcuni script in Python per l'analisi dei dati prodotti dalle simulazioni numeriche, per i quali si rimanda all'appendice B.

L'analisi numerica del comportamento di questi due modelli ha prodotto i seguenti risultati:

- per tempi piccoli, è stato studiato l'andamento temporale del numero  $n_o(t)$  di particelle intrappolate al tempo  $t$ . Come spiegato dettagliatamente nel paragrafo 4.1, per le particelle intrappolate, teoricamente si ricava la relazione al primo ordine data da  $n_o(t) \simeq \pi \tilde{\rho} t / \ln t$ , in cui  $\tilde{\rho}$  è la densità iniziale del gas di random walk. Invertendo questa relazione, si ottiene che la quantità  $n_o(t) \ln(t)/t$  per tempi piccoli è approssimata dalla costante  $\pi \tilde{\rho}$ . Questo comportamento è stato riscontrato per ognuna delle configurazioni studiate e la costante che approssima l'andamento per tempi brevi è risultata dipendere solo dalla densità iniziale.

- Per quanto riguarda i tempi lunghi, l'attenzione si è concentrata sul numero  $n_l(t)$  di particelle libere nel reticolo  $\Lambda_L$ . Come spiegato in 4.2, teoricamente ci si aspetta l'andamento  $n_l(t) = Ae^{-Bt}$ , in cui  $A$  corrisponde ovviamente al numero di particelle iniziali, mentre per il parametro all'esponente si ha una dipendenza unicamente dal semilato  $L$  secondo la legge  $B = B_o/(L^2 \ln L)$ . L'analisi dati ha mostrato un ottimo accordo con le previsioni teoriche, per

$$B_o = 0,306 \pm 0,002.$$

- Per tempi intermedi, come anticipato, non è possibile fare previsioni teoriche. In questo regime temporale, si è rivolto l'interesse al modo in cui l'effetto dovuto alla presenza di una trappola completamente assorbente si propaga all'interno del reticolo, studiando lo svuotamento delle corone  $\Xi_i$  attraverso gli andamenti temporali delle densità medie al loro interno.

Come spiegato nel dettaglio nel paragrafo 4.3.1, si è osservato che la velocità di propagazione non dipende dalla densità iniziale  $\tilde{\rho}$  del gas di random walk, ma solo da fattori geometrici.

L'analisi della velocità di propagazione dello svuotamento al crescere del semilato  $L$ , di cui si ha un esempio nel grafico in figura 4.4, ha mostrato chiaramente come l'azione di svuotamento della trappola inizi a risentire del bordo, dando utili informazioni sui regimi temporali in cui il reticolo finito  $\Lambda_L$  non approssima più bene il reticolo infinito del modello originale.

Sempre per quanto riguarda i tempi intermedi, in analogia con il caso continuo dell'equazione del calore, ci si aspetta che le densità  $\delta(i, \tau)$  siano fattorizzabili nel prodotto di una parte spaziale e una parte temporale

$$\delta(i, \tau) = g(i)h(\tau)$$

Come spiegato nel paragrafo 4.3.2, questa congettura è stata verificata su ogni configurazione studiata ed è stato anche implementato un programma per ricostruire i due fattori.

Un esempio di questa ricostruzione è mostrato nei grafici in figura 4.5 e 4.6 e, nella ricostruzione del fattore spaziale, si ha un esempio della distribuzione di densità asimmetrica del gas sovrassaturo, sottoposto allo svuotamento ad opera della goccia critica.

Per concludere questa introduzione, è importante illustrare alcune difficoltà relative alla simulazione numerica del modello a random walk nel caso di basse densità e spiegare il modo in cui sono state gestite.

Come già detto, i due modelli sono legati tra di loro nel senso che il valore di aspettazione del numero di particelle  $n(\underline{x}, t)$  del primo modello coincide con la quantità  $\rho(\underline{x}, t)$  del secondo. Per poter confrontare correttamente i valori aspettati delle osservabili del modello stocastico con le omologhe quantità del modello deterministico, si deve però tenere in considerazione che il modello a random walk ha una forte dipendenza dalla distribuzione iniziale delle particelle.

Per gestire questo aspetto, i valori di aspettazione del modello stocastico sono stati calcolati mediando anche sulle possibili realizzazioni della distribuzione iniziale. Questo campionatura ha una natura ambivalente: è stato osservato che

è possibile ottenere un ottimo accordo tra i due modelli, al costo di aumentare in maniera considerevole il numero di singole simulazioni del modello a random walk campionate per ottenere i valori medi.

Per quanto riguarda le basse densità, si è lavorato con dataset contenenti un minimo di 2500 differenti dati iniziali. Il numero molto elevato di simulazioni da mediare e il considerevole peso dei file di output hanno comportato ulteriori difficoltà nella analisi dati, che sono state superate con gli accorgimenti tecnici descritti in appendice B.





# 1 | Preliminari matematici

Per cominciare il percorso che porterà all'analisi dello svuotamento di un gas sovrassatturo da parte di un cluster supercritico, vengono presentati in questo capitolo tutti gli strumenti matematici che saranno abbondantemente impiegati in seguito.

Dopo un breve preambolo introduttivo ad alcuni concetti basilari di teoria della probabilità, si passa a un'introduzione alle catene di Markov e a una disamina dei più importanti risultati teorici che le riguardano.

Successivamente viene illustrato il concetto di random walk in una o più dimensioni, descrivendolo nel formalismo delle catene di Markov e analizzandone le proprietà che si riveleranno utili nel corso di questo lavoro.

Per concludere, si approfondisce il legame che intercorre tra le descrizioni della diffusione del calore nello scenario deterministico dell'equazione del calore discreta e in quello stocastico di un gas di random walk.

## 1.1 Introduzione alla probabilità

Sia  $\Omega$  un generico insieme finito e non vuoto, detto spazio campionario, si indichi con  $\Sigma$  una famiglia di sottoinsiemi di  $\Omega$  e con il nome di eventi gli elementi di  $\Sigma$  e sia, infine,

$$A^c = \{ s \in \Omega : s \notin A \}$$

il complemento in  $\Omega$  di un generico insieme  $A \subseteq \Omega$ .

**Definizione 1.1.** Si definisce ***misura di probabilità*** su  $\Omega$  una funzione  $\mathbb{P}: \Sigma \rightarrow [0, 1]$  che soddisfi le condizioni:

- i)  $\mathbb{P}\{\emptyset\} = 0$ ;
- ii)  $\mathbb{P}\{A^c\} = 1 - \mathbb{P}\{A\}$  per ogni evento  $A \subseteq \Omega$ ;
- iii)  $\mathbb{P}\{A \cup B\} = \mathbb{P}\{A\} + \mathbb{P}\{B\} \quad \forall A, B \subset \Omega: A \cap B = \emptyset$ .

Come diretta conseguenza di i) e ii) si ricava  $\mathbb{P}\{\Omega\} = 1$ .

**Definizione 1.2.** Dati due eventi  $A$  e  $B$ , per i quali sia abbia  $\mathbb{P}\{B\} > 0$ , si definisce ***probabilità condizionata*** di  $A$  rispetto a  $B$  la quantità

$$\mathbb{P}\{A | B\} = \frac{\mathbb{P}\{A \cap B\}}{\mathbb{P}\{B\}}.$$

La quantità appena definita rappresenta la probabilità che si verifichi l'evento  $A$ , noto il verificarsi dell'evento  $B$ .

**Definizione 1.3.** Data una *sequenza finita di eventi*  $A_1, \dots, A_k$ , questi sono detti *indipendenti* se, per ogni  $l \leq k$  e per ogni sequenza  $i_1, \dots, i_l \in \{1, \dots, k\}$  ordinata secondo  $i_1 < i_2 < \dots < i_l$ , si ha

$$\mathbb{P}\{A_{i_1} \cap A_{i_2} \cap \dots \cap A_{i_l}\} = \prod_{n=1}^l \mathbb{P}\{A_{i_n}\}.$$

L'indipendenza di due eventi  $A$  e  $B$ , nel caso in cui  $\mathbb{P}\{B\} \neq 0$ , comporta  $\mathbb{P}\{A | B\} = \mathbb{P}\{A\}$ , come si vede facilmente dalle due definizioni appena date. Se la *sequenza di eventi*  $(A_1, A_2, \dots)$  è *infinita*, questi sono indipendenti se, per ogni intero positivo  $k$ , gli eventi del sottoinsieme finito  $A_1, A_2, \dots, A_k$  risultano indipendenti.

Una variabile casuale può essere vista come una funzione  $X: \Omega \rightarrow S$ , in cui  $S$  sia un generico insieme che per lo scopo di questa introduzione alla probabilità può essere identificato con  $\mathbb{R}$ . Un evento  $A$  è definito in termini di una variabile casuale  $X$  se il suo verificarsi è ricollegabile al valore di  $X$ .

**Definizione 1.4.** Due *variabili casuali*  $X$  e  $Y$  sono *indipendenti* se risulta indipendente qualsiasi coppia di eventi  $A$  e  $B$ , rispettivamente definiti in termini di  $X$  e  $Y$ .

Data una *sequenza finita di variabili casuali*  $X_1, \dots, X_k$ , queste sono indipendenti se sono indipendenti gli eventi di un qualsiasi insieme finito  $A_1, \dots, A_k$ , in cui ogni  $A_i$  sia definito in termini di  $X_i$ . Nel caso di una *sequenza infinita*  $X_1, X_2, \dots$  di variabili, queste sono indipendenti se risultano indipendenti gli eventi di qualsiasi sequenza infinita  $A_1, A_2, \dots$ , in cui ogni  $A_i$  sia definito in termini di  $X_i$ .

**Definizione 1.5.** Se  $X$  è una variabile casuale a valori reali, si definisce la *misura di probabilità*  $\mu_X$  di  $X$  su  $\mathbb{R}$  come

$$\mu_X(A) = \mathbb{P}\{X \in A\}, \quad \forall A \subseteq \mathbb{R}.$$

Si può ora definire la *funzione di distribuzione*  $F_X: \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$  come

$$F_X(x) = \mathbb{P}\{X \leq x\}, \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

Una distribuzione  $\mu$  su un insieme finito  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$  si può comodamente rappresentare in termini di un vettore  $(\mu_1, \dots, \mu_k)$ , le cui componenti  $\mu_i = \mu(s_i)$  soddisfino le condizioni:

- i)  $\mu_i \in [0, 1], \quad \forall i = 1, \dots, k;$
- ii)  $\sum_{i=1}^k \mu_i = 1.$

**Definizione 1.6.**  $X_1, X_2, \dots$  è una sequenza di *variabili casuali indipendenti e identicamente distribuite*<sup>1</sup>, se:

- i) sono indipendenti;
- ii) hanno la stessa funzione di distribuzione

$$\mathbb{P}\{X_i \leq x\} = \mathbb{P}\{X_j \leq x\}, \quad \forall i, j, x.$$

---

<sup>1</sup>Nel seguito si userà la sigla i.i.d., per indicare variabili casuali indipendenti e identicamente distribuite.

Si può definire, ora, il valore di aspettazione e la varianza di una variabile casuale, che per gli scopi di questo lavoro può essere pensata discreta, nel senso che possa assumere solo un numero finito, o un'infinità numerabile, di valori.

**Definizione 1.7.** Data una variabile casuale discreta  $X$ , che possa assumere un'infinità numerabile di valori  $x_1, x_2, \dots$  con distribuzione di probabilità  $\mathbb{P}$ , il *valore di aspettazione* è definito come

$$\mathbb{E}[X] = \sum_{i=1}^{\infty} x_i \mathbb{P}\{X = x_i\}, \quad (1.1)$$

se la serie è assolutamente convergente.

**Definizione 1.8.** Si definisce la *varianza* di una variabile casuale  $X$  come

$$\begin{aligned} \text{Var}[X] &= \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^2] \\ &= \mathbb{E}[X^2] - (\mathbb{E}[X])^2. \end{aligned} \quad (1.2)$$

È importante sottolineare ora, perché sarà spesso ricordato in seguito, che il valore di aspettazione  $\mathbb{E}[X]$  può essere infinito anche se la variabile  $X$  assume solo valori finiti, come avviene nel ben noto paradosso di San Pietroburgo, per i cui dettagli si rimanda per esempio a [11].

A conclusione di questa breve introduzione, è appropriato illustrare uno dei lemmi più usati in probabilità, che tornerà utile nella dimostrazione del teorema della ricorrenza 1.8 per  $d \geq 3$ .

**Lemma 1.1** (lemma di Borel-Cantelli). *Data una sequenza infinita di eventi  $E_1, E_2, \dots$  per i quali si ha*

$$\sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}\{E_n\} < \infty,$$

*con probabilità 1 si verifica al massimo un numero finito di eventi.*

*Dimostrazione.* Si indichi con  $A$  l'evento per il quale si verifica un numero infinito di eventi  $E_1, E_2, \dots$

Per ogni intero  $N$  si ha  $A \subset A_N$ , in cui  $A_N$  indica l'evento in cui si verifichi almeno uno degli eventi  $E_N, E_{N+1}, \dots$ , e quindi vale la relazione

$$\mathbb{P}\{A\} \leq \mathbb{P}\{A_N\} = \mathbb{P}\left\{\bigcup_{n=N}^{\infty} E_n\right\} \leq \sum_{n=N}^{\infty} \mathbb{P}\{E_n\}.$$

Considerando che  $\sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}\{E_n\} < \infty$  implica

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=N}^{\infty} \mathbb{P}\{E_n\} = 0,$$

si ottiene

$$\mathbb{P}\{A\} = 0.$$

□

## 1.2 Catene di Markov

Una sequenza di variabili casuali i.i.d.  $X_1, X_2, \dots$  può essere associata all'evoluzione temporale di un processo stocastico: le catene di Markov, che verranno trattate in questo paragrafo, sono un esempio di questa associazione.

A una sequenza di variabili casuali i.i.d.

### 1.2.1 Concetti introduttivi

**Definizione 1.9.** Sia  $\mathbf{P}$  una matrice quadrata di dimensione  $k$  e si indichino i suoi elementi con  $P_{i,j}$  per  $i, j = 1, \dots, k$ . Un processo stocastico  $X_0, X_1, \dots$  con uno spazio degli stati finito  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$  è detto **catena di Markov omogenea** con matrice di transizione  $\mathbf{P}$ , se per ogni  $n$ , per ogni  $i, j \in \{1, \dots, k\}$  e ogni  $i_0, \dots, i_{n-1} \in \{1, \dots, k\}$  si ha

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{X_{n+1} = s_j \mid X_0 = s_{i_0}, X_1 = s_{i_1}, \dots, X_{n-1} = s_{i_{n-1}}, X_n = s_i\} \\ = \mathbb{P}\{X_{n+1} = s_j \mid X_n = s_i\} \\ = P_{i,j}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

La (1.3) è detta proprietà di Markov: l'evoluzione della catena al tempo  $n+1$  è determinata solo dal suo stato al tempo  $n$  e non ha memoria dell'evoluzione precedente.

La matrice  $\mathbf{P}$  è detta matrice di transizione; i suoi elementi  $P_{i,j}$  rappresentano le probabilità condizionate di trovarsi nello stato  $s_j$  al tempo  $n+1$ , sapendo che al tempo  $n$  si è nella posizione  $s_i$  e soddisfano le condizioni:

i)  $P_{i,j} \geq 0 \quad \forall i, j \in \{1, \dots, k\};$

ii)  $\sum_{j=1}^k P_{i,j} = 1 \quad \forall i \in \{1, \dots, k\}.$

Oltre che dalla probabilità di transizione, un'importante informazione su una catena di Markov è veicolata dalla sua **distribuzione iniziale**, che indica come parte la catena di Markov ed è spesso scritta in forma di vettore riga

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}^{(0)} &= (\mu_1^{(0)}, \mu_2^{(0)}, \dots, \mu_k^{(0)}) \\ &= (\mathbb{P}\{X_0 = s_1\}, \mathbb{P}\{X_0 = s_2\}, \dots, \mathbb{P}\{X_0 = s_k\}). \end{aligned}$$

Il vettore  $\boldsymbol{\mu}^{(0)}$  rappresenta una distribuzione di probabilità; le sue coordinate sono non negative e soddisfano la condizione

$$\sum_{i=1}^k \mu_i^{(0)} = 1.$$

### 1.2.2 Evoluzione temporale

Analogamente a quanto visto per la distribuzione iniziale, lo stato della catena di Markov ai tempi  $1, 2, \dots$  si può rappresentare in termini di vettori riga  $\boldsymbol{\mu}^{(1)}, \boldsymbol{\mu}^{(2)}, \dots$ , le cui componenti al tempo  $n$  sono date da

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}^{(n)} &= (\mu_1^{(n)}, \mu_2^{(n)}, \dots, \mu_k^{(n)}) \\ &= (\mathbb{P}\{X_n = s_1\}, \mathbb{P}\{X_n = s_2\}, \dots, \mathbb{P}\{X_n = s_k\}). \end{aligned}$$

Una volta note la distribuzione iniziale  $\mu^{(0)}$  e la matrice di transizione  $\mathbf{P}$ , si possono calcolare le distribuzioni  $\mu^{(1)}, \mu^{(2)}, \dots$  della catena di Markov come semplici prodotti di matrici.

**Teorema 1.1.** *Per una catena di Markov  $X_0, X_1, \dots$  con spazio degli stati  $\{s_1, \dots, s_k\}$ , distribuzione iniziale  $\mu^{(0)}$  e matrice di transizione  $\mathbf{P}$ , si ha*

$$\mu^{(n)} = \mu^{(0)} \mathbf{P}^n \quad \forall n = 1, 2, \dots \quad (1.4)$$

in cui  $\mathbf{P}^n$  è la potenza  $n$ -esima della matrice  $\mathbf{P}$ .

*Dimostrazione.* La dimostrazione procede per induzione. Considerando il caso  $n = 1$ , per  $j = 1, \dots, k$  si ha

$$\begin{aligned} \mu_j^{(1)} &= \mathbb{P}\{X_1 = s_j\} = \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_0 = s_i, X_1 = s_j\} \\ &= \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_0 = s_i\} \mathbb{P}\{X_1 = s_j \mid X_0 = s_i\} \\ &= \sum_{i=1}^k \mu_i^{(0)} P_{i,j} \\ &= (\mu^{(0)} \mathbf{P})_j. \end{aligned}$$

Dal momento che la quantità  $(\mu^{(0)} \mathbf{P})_j$  rappresenta la  $j$ -esima componente del vettore  $\mu^{(0)} \mathbf{P}$ , dalla precedente relazione segue che  $\mu^{(1)} = \mu^{(0)} \mathbf{P}$ .

Se si suppone che la precedente relazione valga anche per  $n = m$ , per  $n = m + 1$  e  $j = 1, \dots, k$  si ricava

$$\begin{aligned} \mu_j^{m+1} &= \mathbb{P}\{X_{m+1} = s_j\} = \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_m = s_i, X_{m+1} = s_j\} \\ &= \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_m = s_i\} \mathbb{P}\{X_{m+1} = s_j \mid X_m = s_i\} \\ &= \sum_{i=1}^k \mu_i^{(m)} P_{i,j} \\ &= (\mu^{(m)} \mathbf{P})_j. \end{aligned}$$

Ragionando ancora per componenti, si è ottenuto che  $\mu^{(m+1)} = \mu^{(m)} \mathbf{P}$ . Considerando inoltre che, per ipotesi, si ha  $\mu^{(m)} = \mu^{(0)} \mathbf{P}^m$ , segue che

$$\mu^{(m+1)} = \mu^{(m)} \mathbf{P} = \mu^{(0)} \mathbf{P}^m \mathbf{P} = \mu^{(0)} \mathbf{P}^{m+1}.$$

□

### 1.2.3 Irriducibilità e aperiodicità

Una classe importante di catene di Markov è quella delle catene irriducibili, contraddistinte dalla proprietà che ogni loro stato sia accessibile da tutti gli altri. Prima di entrare nel dettaglio, è quindi necessario precisare cosa si intenda per accessibilità di uno stato.

**Definizione 1.10.** Sia data una catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$ , con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$  e matrice di transizione  $\mathbf{P}$ . Lo **stato**  $s_j$  è detto **accessibile** dallo stato  $s_i$ , se la probabilità di raggiungere il primo, partendo dal secondo, è strettamente positiva, ossia se esiste un  $n$  per il quale si abbia

$$\mathbb{P}\{X_{m+n} = s_j \mid X_m = s_i\} > 0.$$

Con ragionamenti analoghi alla dimostrazione del teorema 1.1, si può vedere che questa probabilità è indipendente da  $m$ , per via dell'omogeneità della catena di Markov, ed è pari a  $(\mathbf{P}^n)_{i,j}$ .

Si usa indicare che lo stato  $s_j$  è accessibile dallo stato  $s_i$  con la notazione  $s_i \rightarrow s_j$ ; se si ha anche  $s_j \rightarrow s_i$ , si dice che i due stati sono intercomunicanti e lo si indica con  $s_j \leftrightarrow s_i$ .

**Definizione 1.11.** Una catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$  con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$  e matrice di transizione  $\mathbf{P}$  è detta **irriducibile** se per ogni coppia  $s_i, s_j \in S$  si ha  $s_j \leftrightarrow s_i$  e quindi esiste un  $n$  intero per il quale

$$(\mathbf{P}^n)_{i,j} > 0.$$

In caso contrario, la catena è detta riducibile.

Un'altra classe importante è quella delle catene di Markov periodiche.

**Definizione 1.12.** Data una catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$ , con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$  e matrice di transizione  $\mathbf{P}$ , si definisce **periodo di uno stato**  $s_i \in S$  la quantità

$$d(s_i) = \gcd\{n \geq 1 : (\mathbf{P}^n)_{i,i} > 0\}.$$

in cui gcd indica il massimo comun divisore.

Il periodo di uno stato  $s_i$  rappresenta quindi il massimo comun divisore dell'insieme dei tempi in cui la catena ha una probabilità non nulla di ritornare allo stato  $s_i$ . Se  $d(s_i) = 1$ , allora lo stato  $s_i$  è detto aperiodico.

**Definizione 1.13.** Una catena di Markov è detta **aperiodica** se tutti i suoi stati sono aperiodici. In caso contrario è detta periodica.

Uno dei motivi dell'importanza delle catene di Markov periodiche è mostrato nel seguente teorema.

**Teorema 1.2.** *Data una catena di Markov aperiodica  $(X_0, X_1, \dots)$ , con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$  e matrice di transizione  $\mathbf{P}$ , esiste un  $N < \infty$  per il quale*

$$(\mathbf{P}^n)_{i,i} > 0 \quad \forall i \in \{1, \dots, k\}, \forall n \geq N.$$

La dimostrazione di questo teorema si basa sul seguente lemma della teoria dei numeri, per la cui dimostrazione si rimanda per esempio a [2].

**Lemma 1.2.** *Sia  $A = \{a_1, a_2, \dots\}$  un insieme di interi positivi*

- i) *non-lattice, ovvero tale che  $\gcd\{a_1, a_2, \dots\} = 1$ ;*
- ii) *chiuso rispetto all'addizione, ovvero tale che  $(a_i + a_j) \in A$  per ogni  $a_i, a_j \in A$ .*

Esiste un intero  $N < \infty$  tale che  $n \in A$  per ogni  $n \geq N$ .

*Dimostrazione del teorema 1.2.* Dato un generico  $s_i \in S$ , sia

$$A_i = \{ n \geq 1 : (\mathbf{P}^n)_{i,i} > 0 \}$$

l'insieme dei tempi di ritorno in  $s_i$ , partendo da  $s_i$ .

Per ipotesi, la catena di Markov è aperiodica, quindi anche lo stato  $s_i$  è aperiodico e pertanto  $A_i$  è di tipo non-lattice. L'insieme  $A_i$  è inoltre chiuso rispetto alla somma: dati  $a_j, a_k \in A_i$ , si ha

$$\mathbb{P}\{X_{a_j} = s_i \mid X_0 = s_i\} > 0 \implies \mathbb{P}\{X_{a_j+a_k} = s_i \mid X_a = s_i\} > 0.$$

Segue che

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{X_{a_j+a_k} = s_i \mid X_0 = s_i\} &\geq \mathbb{P}\{X_{a_j} = s_i, X_{a_j+a_k} = s_i \mid X_0 = s_i\} \\ &= \mathbb{P}\{X_{a_j} = s_i \mid X_0 = s_i\} \mathbb{P}\{X_{a_j+a_k} = s_i \mid X_{a_j} = s_i\} \\ &> 0. \end{aligned}$$

L'insieme  $A_i$  soddisfa pertanto le due condizioni del lemma 1.2 e quindi esiste un intero  $N_i < \infty$  tale che  $(\mathbf{P}^n)_{i,i} > 0$  per ogni  $n \geq N_i$ . Segue quindi il teorema 1.2, con  $N = \max\{N_1, \dots, N_k\}$ .  $\square$

Combinando quanto appena visto per aperiodicità e irriducibilità, si ottiene un altro importante risultato.

**Corollario 1.1.** *Data una catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$  irriducibile e aperiodica, con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$  e matrice di transizione  $\mathbf{P}$ , allora esiste un intero  $M < \infty$  tale che  $(\mathbf{P}^n)_{i,j} > 0$  per ogni coppia  $i, j \in \{1, \dots, k\}$  e per ogni  $n \geq M$ .*

*Dimostrazione.* Data l'ipotesi di aperiodicità e considerando il teorema 1.2, esiste un intero  $N < \infty$  tale che  $(\mathbf{P}^n)_{i,j} > 0$  per ogni  $i \in \{1, \dots, k\}$  e per ogni  $n \geq N$ .

Dati due stati  $s_i, s_j \in S$ , per via dell'irriducibilità, si può trovare un intero  $n_{i,j}$  tale che  $(\mathbf{P}^{n_{i,j}})_{i,j} > 0$ . Sia  $M_{i,j} = N + n_{i,j}$ .

Per ogni  $n \geq M_{i,j}$ , si ha

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{X_m = s_j \mid X_0 = s_i\} &\geq \mathbb{P}\{X_{m-n_{i,j}} = s_i, X_m = s_j \mid X_0 = s_i\} \\ &= \mathbb{P}\{X_{m-n_{i,j}} = s_i \mid X_0 = s_i\} \mathbb{P}\{X_m = s_j \mid X_{m-n_{i,j}} = s_i\} \\ &> 0. \end{aligned} \tag{1.5}$$

L'ultimo passaggio, nella (1.5), è dovuto al prodotto di due fattori positivi: la prima probabilità è positiva perché  $m - n_{i,j} \geq N$ , la seconda per via della scelta di  $n_{i,j}$ . Il corollario è quindi dimostrato, se si prende

$$M = \max\{M_{1,1}, M_{1,2}, \dots, M_{i,k}, M_{2,1}, \dots, M_{k,k}\}.$$

$\square$

### 1.2.4 Comportamento asintotico per tempi lunghi

Con le nozioni acquisite, è ora possibile affrontare l'aspetto del comportamento asintotico di una catena di Markov non banale, per vedere se sia possibile fare previsioni interessanti sul suo comportamento per  $n \rightarrow \infty$ .

Per arrivare ai risultati relativi al comportamento asintotico, viene prima introdotto il concetto di distribuzione stazionaria per una catena di Markov. Di questa distribuzione è quindi dimostrata l'esistenza, sotto alcune condizioni per la catena, e successivamente analizzato il legame con il comportamento asintotico; infine, ne viene dimostrata l'unicità.

Il risultato che si vuole ottenere è la dimostrazione che una catena di Markov irriducibile e aperiodica ammette una sola distribuzione stazionaria e che, per  $n \rightarrow \infty$ , la catena converge a questa distribuzione, indipendentemente dalla sua condizione iniziale  $\mu^{(0)}$  e secondo il criterio di convergenza chiarito in seguito.

**Definizione 1.14.** Data una catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$  con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$  e matrice di transizione  $P$ ,  $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_k)$  è detta **distribuzione stazionaria** per la catena di Markov se soddisfa le condizioni:

- i)  $\pi_i \geq 0$  per  $i = 1, \dots, k$  e  $\sum_{i=1}^k \pi_i = 1$ ;
- ii)  $\pi P = \pi$ , o per componenti  $\sum_{i=1}^k \pi_i P_{i,j} = \pi_j$  per  $j = 1, \dots, k$ .

In letteratura,  $\pi$  è indicata anche come distribuzione invariante o di equilibrio per la catena di Markov, o per la matrice  $P$ , dal momento che la definizione di distribuzione stazionaria dipende solo dalla matrice di transizione  $P$ .

La proprietà i) indica semplicemente che  $\pi$  descrive una distribuzione di probabilità sullo spazio degli stati  $\{s_1, \dots, s_k\}$ . La proprietà ii) indica invece che se la distribuzione iniziale  $\mu^{(0)}$  è uguale a  $\pi$ , allora

$$\mu^{(1)} = \mu^{(0)} P = \pi P = \pi$$

e in generale  $\mu^{(n)} = \pi$  per ogni  $n$ .

Prima di procedere, occorre introdurre il concetto di hitting time e un lemma che lo riguarda.

**Definizione 1.15.** Data una catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$  con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$ , matrice di transizione  $P$  e stato iniziale  $s_i$ , si definisce **hitting time** la quantità

$$T_{i,j} = \min \{ n \geq 1 : X_n = s_j \text{ per } X_0 = s_i \}.$$

La quantità  $T_{i,j}$  indica il primo tempo in cui la catena di Markov, partita da  $s_i$ , visita  $s_j$ . Per convenzione, si pone  $T_{i,j} = \infty$  se lo stato  $s_j$  non è accessibile dallo stato  $s_i$ . Se  $i = j$ , la quantità  $T_{i,i}$  è il tempo di ritorno per lo stato  $s_i$ .

**Definizione 1.16.** Il *valore aspettato per l'hitting time* è definito come

$$\tau_{i,j} = \mathbb{E}[T_{i,j}].$$

**Lemma 1.3.** *Data una catena di Markov aperiodica e irriducibile, con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$  e matrice di transizione  $\mathbf{P}$ , per ogni coppia di stati  $s_i, s_j \in S$  e con  $X_0 = s_i$  si ha*

$$\mathbb{P}\{T_{i,j} < \infty\} = 1. \quad (1.6)$$

Inoltre per il valore aspettato dell'hitting time si ha

$$\tau_{i,j} < \infty. \quad (1.7)$$

*Dimostrazione.* Come è già stato sottolineato nella definizione 1.7 del valore aspettato, la (1.7) non è una diretta conseguenza della (1.6). La dimostrazione, quindi, si articola in due passi.

Riguardo la (1.6), per via del corollario 1.1 sappiamo che esiste un  $M < \infty$  tale che  $(\mathbf{P}^M)_{i,j} > 0$  per ogni coppia  $i, j \in \{s_1, \dots, s_k\}$ . Fissato questo  $M$ , la quantità

$$\alpha = \min \left\{ (\mathbf{P}^M)_{i,j} : i, j \in \{1, \dots, k\} \right\}$$

risulta positiva. Presi due stati  $s_i, s_j$  con  $X_0 = s_i$ , si ha

$$\mathbb{P}\{T_{i,j} > M\} \leq \mathbb{P}\{X_M \neq s_j\} \leq 1 - \alpha.$$

Data l'evoluzione della catena di Markov fino al tempo  $M$ , la probabilità condizionata di arrivare nello stato  $s_j$  al tempo  $2M$  è minore o uguale ad  $\alpha$ , quindi

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{T_{i,j} > 2M\} &= \mathbb{P}\{T_{i,j} > M\} \mathbb{P}\{T_{i,j} > 2M \mid T_{i,j} > M\} \\ &\leq \mathbb{P}\{T_{i,j} > M\} \mathbb{P}\{X_{2M} \neq s_j \mid T_{i,j} > M\} \\ &\leq (1 - \alpha)^2. \end{aligned}$$

Iterando questo ragionamento per ogni  $l$ , si ottiene

$$\mathbb{P}\{T_{i,j} > lM\} \leq (1 - \alpha)^l. \quad (1.8)$$

La quantità (1.8) tende a 0 per  $l \rightarrow \infty$ , quindi si ha  $\mathbb{P}\{T_{i,j} = \infty\} = 0$  e la (1.6) risulta dimostrata.

Per quanto riguarda la (1.7), basta calcolare direttamente il valore di aspettazione, per il quale si ha

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[T_{i,j}] &= \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}\{T_{i,j} > n\} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{n=lM}^{(l+1)M-1} \mathbb{P}\{T_{i,j} > n\} \\ &\leq \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{n=lM}^{(l+1)M-1} \mathbb{P}\{T_{i,j} > lM\} \\ &= M \sum_{l=0}^{\infty} \mathbb{P}\{T_{i,j} > lM\} \\ &\leq M \sum_{l=0}^{\infty} (1 - \alpha)^l = M \frac{1}{1 - (1 - \alpha)} = \frac{M}{\alpha} \\ &< \infty. \end{aligned}$$

□

Sfruttando il lemma 1.3 appena visto, si può dimostrare il seguente teorema sull'esistenza della distribuzione stazionaria.

**Teorema 1.3.** (*Esistenza della distribuzione stazionaria*) *Per ogni catena di Markov irriducibile e aperiodica esiste almeno una distribuzione stazionaria.*

*Dimostrazione.* Data la catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$ , con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$ , matrice di transizione  $\mathbf{P}$  e stato iniziale  $s_1$ , si definisce

$$\rho_i = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}\{X_n = s_i, T_{1,1} > n\} \quad \text{con } i = 1, \dots, k,$$

in cui  $\rho_i$  rappresenta il valore aspettato del numero di visite allo stato  $s_i$  prima del tempo  $T_{1,1} - 1$ . Dal momento che  $\mathbb{E}[T_{1,1}] = \tau_{1,1}$  è una quantità finita e visto che  $\rho_i < \tau_{1,1}$ , anche  $\rho_i$  sarà una quantità finita.

In base a questo, un buon candidato per la distribuzione stazionaria è dato da

$$\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \dots, \pi_k) = \left( \frac{\rho_1}{\tau_{1,1}}, \frac{\rho_2}{\tau_{1,1}}, \dots, \frac{\rho_k}{\tau_{1,1}} \right),$$

per il quale si deve controllare che siano verificate le due proprietà date con la definizione 1.14.

Per quanto riguarda la seconda proprietà,  $\sum_{i=1}^k \pi_i P_{i,j} = \pi_j$ , nel caso  $j \neq 1$  si ha

$$\begin{aligned} \pi_j &= \frac{\rho_j}{\tau_{1,1}} = \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}\{X_n = s_j, T_{1,1} > n\} \\ &= \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}\{X_n = s_j, T_{1,1} > n\} \end{aligned} \tag{1.9}$$

$$= \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}\{X_n = s_j, T_{1,1} > n - 1\} \tag{1.10}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_{n-1} = s_i, X_n = s_j, T_{1,1} > n - 1\} \\ &= \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_{n-1} = s_i, T_{1,1} > n - 1\} \mathbb{P}\{X_n = s_j \mid X_{n-1} = s_i\} \end{aligned} \tag{1.11}$$

$$= \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^k P_{i,j} \mathbb{P}\{X_{n-1} = s_i, T_{1,1} > n - 1\}$$

$$= \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{i=1}^k P_{i,j} \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}\{X_{n-1} = s_i, T_{1,1} > n - 1\}$$

$$= \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{i=1}^k P_{i,j} \sum_{m=0}^{\infty} \mathbb{P}\{X_m = s_i, T_{1,1} > m\}$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^k \rho_i P_{i,j}}{\tau_{1,1}}$$

$$= \sum_{i=1}^k \pi_i P_{i,j},$$

in cui l'ipotesi  $j \neq 1$  è stata usata nei passaggi (1.9), (1.10) e (1.11).

Nel caso in cui  $j = 1$ , tenendo in considerazione che per definizione si ha  $\rho_1 = 1$ , si ottiene

$$\begin{aligned}
\rho_1 &= 1 = \mathbb{P}\{\mathcal{T}_{1,1} < \infty\} = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}\{\mathcal{T}_{1,1} = n\} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_{n-1} = s_i, \mathcal{T}_{1,1} = n\} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_{n-1} = s_i, \mathcal{T}_{1,1} > n-1\} \mathbb{P}\{X_n = s_1 \mid X_{n-1} = s_i\} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^k P_{i,1} \mathbb{P}\{X_{n-1} = s_i, \mathcal{T}_{1,1} > n-1\} \\
&= \sum_{i=1}^k P_{i,1} \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}\{X_{n-1} = s_i, \mathcal{T}_{1,1} > n-1\} \\
&= \sum_{i=1}^k P_{i,1} \sum_{m=0}^{\infty} \mathbb{P}\{X_m = s_i, \mathcal{T}_{1,1} > m\} \\
&= \sum_{i=1}^k \rho_i P_{i,1}.
\end{aligned}$$

Da quest'ultima relazione si ricava

$$\pi_1 = \frac{\rho_1}{\tau_{1,1}} = \sum_{i=1}^k \frac{\rho_1 P_{i,1}}{\tau_{1,1}} = \sum_{i=1}^k \pi_i P_{i,1}$$

e risulta così soddisfatta la seconda condizione della definizione 1.14 di distribuzione stazionaria.

Per quanto riguarda la prima condizione data nella definizione 1.14, per come è stato definito si ha  $\pi_i \geq 0$  per  $i = 1, \dots, k$ . Considerando inoltre

$$\begin{aligned}
\tau_{1,1} &= \mathbb{E}[\mathcal{T}_{1,1}] = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}\{\mathcal{T}_{1,1} > n\} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_n = s_i, \mathcal{T}_{1,1} > n\} \\
&= \sum_{i=1}^k \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}\{X_n = s_i, \mathcal{T}_{1,1} > n\} = \sum_{i=1}^k \rho_i,
\end{aligned}$$

si ricava

$$\sum_{i=1}^k \pi_i = \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{i=1}^k \rho_i = 1$$

e anche la prima condizione risulta soddisfatta.  $\square$

Prima di affrontare la dimostrazione dell'unicità della distribuzione stazionaria, come anticipato, si analizza il suo rapporto con la convergenza della catena di Markov. Per questa analisi, occorre quindi definire una metrica sulle distribuzioni di probabilità e chiarire cosa si intende per convergenza.

**Definizione 1.17.** Date due distribuzioni di probabilità  $\boldsymbol{\nu}^{(1)} = (\nu_1^{(1)}, \dots, \nu_k^{(1)})$  e  $\boldsymbol{\nu}^{(2)} = (\nu_1^{(2)}, \dots, \nu_k^{(2)})$  sullo spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$ , si definisce **distanza in variazione totale** la quantità

$$d_{\text{VT}}(\boldsymbol{\nu}^{(1)}, \boldsymbol{\nu}^{(2)}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k |\nu_i^{(1)} - \nu_i^{(2)}|,$$

in cui il fattore  $1/2$  è presente affinché  $d_{\text{VT}}$  sia compresa tra 0 e 1.

La distanza in variazione totale rappresenta la massima differenza tra le probabilità che le due distribuzioni attribuiscono a ciascun evento in  $S$ .

**Definizione 1.18.** Date le distribuzioni di probabilità  $\boldsymbol{\nu}^{(1)}, \boldsymbol{\nu}^{(2)}, \dots$  e  $\boldsymbol{\nu}$  su  $S$ , si dice che  $\boldsymbol{\nu}^{(n)}$  **converge in variazione totale** a  $\boldsymbol{\nu}$ , se

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d_{\text{VT}}(\boldsymbol{\nu}^{(n)}, \boldsymbol{\nu}) = 0.$$

Si può ora enunciare uno dei risultati più importanti sulla convergenza di catene di Markov.

**Teorema 1.4** (Teorema di convergenza per una catena di Markov). *Data una catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$  irriducibile e aperiodica con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$ , matrice di transizione  $\mathbf{P}$ , distribuzione iniziale  $\boldsymbol{\mu}^{(0)}$  e distribuzione stazionaria  $\boldsymbol{\pi}$ , si ha che*

$$\boldsymbol{\mu}^{(n)} \xrightarrow{\text{VT}} \boldsymbol{\pi}. \quad (1.12)$$

Il teorema 1.4 afferma che, se una catena di Markov evolve per un tempo  $n$  sufficientemente lungo, la distribuzione di probabilità  $\boldsymbol{\mu}^{(n)}$  sarà vicina a quella stazionaria  $\boldsymbol{\pi}$ , in termini di distanza a variazione totale e indipendentemente dalla sua distribuzione iniziale.

*Dimostrazione.* Nello studio del comportamento di  $\boldsymbol{\mu}^{(n)}$ , possiamo assumere che la catena di Markov sia generata come spiegato in appendice A e quindi

$$\begin{aligned} X_0 &= \psi_{\boldsymbol{\mu}^{(0)}}(U_0) \\ X_1 &= \phi(X_0, U_1) \\ X_2 &= \phi(X_1, U_2) \\ &\vdots \end{aligned}$$

in cui  $\psi_{\boldsymbol{\mu}^{(0)}}$  è una opportuna funzione di inizializzazione per  $\boldsymbol{\mu}^{(0)}$ ,  $\phi$  è una funzione di aggiornamento valida per  $\mathbf{P}$  e  $(U_0, U_1, \dots)$  è una sequenza di variabili i.i.d. uniformemente su  $[0, 1]$ .

Per la dimostrazione, si può usare il metodo dell'accoppiamento, per i cui dettagli si rimanda per esempio a [6], introducendo una seconda catena di Markov  $(X'_0, X'_1, \dots)$

$$\begin{aligned} X'_0 &= \psi_{\boldsymbol{\pi}}(U'_0) \\ X'_1 &= \phi(X'_0, U'_1) \\ X'_2 &= \phi(X'_1, U'_2) \\ &\vdots \end{aligned}$$

in cui, di nuovo,  $\psi_{\pi}$  è una opportuna funzione di inizializzazione per la distribuzione  $\pi$  e  $(U'_0, U'_1, \dots)$  è un'altra sequenza di variabili i.i.d. uniformemente su  $[0, 1]$ , indipendente dalla precedente.

Dal momento che  $\pi$  è la distribuzione stazionaria,  $X'_n$  avrà questa come distribuzione per ogni  $n$ . Le due catene di Markov sono inoltre indipendenti per costruzione, poiché sono indipendenti le due sequenze  $(U_0, U_1, \dots)$  e  $(U'_0, U'_1, \dots)$ .

Si può ora dimostrare che, con probabilità 1, le due catene si incontrano, nel senso che esiste un intero  $n$  per il quale  $X_n = X'_n$ . Prima di procedere, occorre definire la seguente quantità.

**Definizione 1.19.** Si definisce il *primo tempo di incontro* come

$$T = \min \{ n : X_n = X'_n \},$$

con la convenzione che  $T = \infty$  se le due catene non si incontrano mai.

La catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$  è irriducibile e aperiodica, quindi per il corollario 1.1 esiste un intero  $M < \infty$  per il quale

$$(\mathbf{P}^M)_{i,j} > 0 \quad \forall i, j \in \{1, \dots, k\}.$$

Definendo la quantità

$$\alpha = \min \left\{ (\mathbf{P}^M)_{i,j} : i, j \in \{1, \dots, k\} \right\} > 0,$$

si ottiene

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{T \leq M\} &\geq \mathbb{P}\{X_M = X'_M\} \geq \mathbb{P}\{X_M = s_1, X'_M = s_1\} \\ &= \mathbb{P}\{X_M = s_1\} \mathbb{P}\{X'_M = s_1\} \\ &= \left( \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_0 = s_i, X_M = s_1\} \right) \left( \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X'_0 = s_i, X'_M = s_1\} \right) \\ &= \left( \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_0 = s_i\} \mathbb{P}\{X_M = s_1 \mid X_0 = s_i\} \right) \\ &\quad \times \left( \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X'_0 = s_i\} \mathbb{P}\{X'_M = s_1 \mid X'_0 = s_i\} \right) \\ &\geq \left( \alpha \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_0 = s_i\} \right) \left( \alpha \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X'_0 = s_i\} \right) = \\ &= \alpha^2, \end{aligned}$$

da cui segue

$$\mathbb{P}\{T > M\} \leq 1 - \alpha^2.$$

In modo simile, data l'evoluzione fino al tempo  $M$ , si ha una probabilità al più pari ad  $\alpha$  di avere  $X_{2M} = X'_{2M} = s_1$  e quindi

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\{T > 2M\} &\leq \mathbb{P}\{T > M\}\mathbb{P}\{T > 2M \mid T > M\} \\ &\leq (1 - \alpha^2)\mathbb{P}\{T > 2M \mid T > M\} \\ &\leq (1 - \alpha^2)\mathbb{P}\{X_{2M} \neq X'_{2M} \mid T > M\} \\ &= (1 - \alpha^2)(1 - \mathbb{P}\{X_{2M} = X'_{2M} \mid T > M\}) \\ &\leq (1 - \alpha^2)^2.\end{aligned}$$

Iterando il ragionamento si ottiene

$$\mathbb{P}\{T > lM\} \leq (1 - \alpha^2)^l,$$

per cui

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}\{T > n\} = 0.$$

Risulta quindi dimostrato che le due catene si incontrano, nel senso spiegato precedentemente, con probabilità pari ad 1.

Si può ora costruire una terza catena di Markov  $(X''_0, X''_1, \dots)$ , per la quale si abbia

$$X''_0 = X_0 \tag{1.13}$$

e

$$X''_{n+1} = \begin{cases} \phi(X''_n, U_{n+1}), & \text{se } X''_n \neq X'_n, \\ \phi(X''_n, U'_{n+1}), & \text{se } X''_n = X'_n. \end{cases}$$

La catena  $(X''_0, X''_1, \dots)$

- evolve esattamente come  $(X_0, X_1, \dots)$  fino al primo tempo di incontro  $T$  definito in 1.19;
- per tempi successivi a  $T$  evolve come  $(X'_0, X'_1, \dots)$ ;
- grazie all'indipendenza tra  $(U_0, U_1, \dots)$  e  $(U'_0, U'_1, \dots)$ , è una catena di Markov.

Per via della condizione di inizializzazione (1.13),  $X''_0$  ha distribuzione iniziale  $\mu^{(0)}$  e distribuzione  $\mu^{(n)}$  per  $n \leq T$ . Per ogni  $i \in \{1, \dots, k\}$  si ha

$$\begin{aligned}\mu_i^{(n)} - \pi_i &= \mathbb{P}\{X''_n = s_i\}\mathbb{P}\{X'_n = s_i\} \\ &\leq \mathbb{P}\{X''_n = s_i, X'_n \neq s_i\} \\ &\leq \mathbb{P}\{X''_n \neq X'_n\} \\ &= \mathbb{P}\{T > n\},\end{aligned}$$

quindi

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_i^{(n)} - \pi_i = 0.$$

Con un'argomentazione analoga, si ottiene facilmente anche

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \pi_i - \mu_i^{(n)} = 0.$$

Unendo questi ultimi due risultati, si ricava

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\mu_i^{(n)} - \pi_i| = 0,$$

da cui segue

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} d_{\text{VT}} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k |\mu_i^{(n)} - \pi_i| \right) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Anche la (1.12) risulta quindi soddisfatta e il teorema 1.4 è così dimostrato.  $\square$

Come anticipato, l'unicità della distribuzione stazionaria rappresenta l'ultimo risultato interessante, riguardo la convergenza di una catena di Markov irriducibile e aperiodica, che verrà trattato prima di passare all'approfondimento relativo ai random walk.

**Teorema 1.5** (Unicità della distribuzione stazionaria). *Ogni catena di Markov irriducibile e aperiodica ha esattamente una distribuzione stazionaria.*

*Dimostrazione.* Data la catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$  irriducibile e aperiodica, con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$  e matrice di transizione  $\mathbf{P}$ , per il teorema 1.3 si ha l'esistenza di almeno una distribuzione stazionaria per  $\mathbf{P}$ .

Si indichino con  $\boldsymbol{\pi}$  e  $\boldsymbol{\pi}'$  due possibili distribuzioni stazionarie per  $\mathbf{P}$ , a priori differenti.

Supponiamo che la catena di Markov abbia una distribuzione iniziale  $\boldsymbol{\mu}^{(0)} = \boldsymbol{\pi}'$  e, quindi, si abbia  $\boldsymbol{\mu}^{(n)} = \boldsymbol{\pi}'$  per ogni  $n$ , visto che per ipotesi  $\boldsymbol{\pi}'$  è stazionaria.

D'altra parte, anche  $\boldsymbol{\pi}$  è stazionaria per ipotesi e per il teorema 1.4 si ha  $\boldsymbol{\mu}^{(n)} \xrightarrow{\text{VT}} \boldsymbol{\pi}$ , ovvero

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d_{\text{VT}}(\boldsymbol{\mu}^{(n)}, \boldsymbol{\pi}) = 0.$$

La relazione precedente, insieme al fatto che  $\boldsymbol{\mu}^{(n)} = \boldsymbol{\pi}'$ , comporta

$$\lim_{n \rightarrow \infty} d_{\text{VT}}(\boldsymbol{\pi}', \boldsymbol{\pi}) = 0.$$

L'indipendenza di  $d_{\text{VT}}(\boldsymbol{\pi}', \boldsymbol{\pi})$  da  $n$  implica quindi  $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi}'$  e il teorema 1.5 è dimostrato.  $\square$

Concludendo, quindi, una catena di Markov irriducibile e aperiodica ha una sola distribuzione stazionaria  $\boldsymbol{\pi}$  e  $\boldsymbol{\mu}^{(n)} \xrightarrow{\text{VT}} \boldsymbol{\pi}$  per  $n \rightarrow \infty$  indipendentemente dalla distribuzione iniziale  $\boldsymbol{\mu}^{(0)}$ .

### 1.2.5 Reversibilità

**Definizione 1.20.** Sia  $(X_0, X_1, \dots)$  una catena di Markov con spazio degli stati  $\{s_1, \dots, s_k\}$  e matrice di transizione  $\mathbf{P}$ . Una **distribuzione di probabilità** è detta **reversibile** per la catena di Markov (o per la matrice  $\mathbf{P}$ ), se soddisfa la condizione

$$\pi_i P_{i,j} = \pi_j P_{j,i} \quad \forall i, j \in \{1, \dots, k\}. \quad (1.14)$$

La catena di Markov è detta reversibile se ammette una distribuzione reversibile.

La distribuzione reversibile è chiamata in questo modo, perché in un certo senso ha lo stesso comportamento indipendentemente dal fatto che il tempo sia fatto scorrere in avanti o indietro.

La condizione (1.14) è interpretabile in termini di distribuzione stazionaria, con il teorema che segue.

**Teorema 1.6.** *Data una catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$ , con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$  e matrice di transizione  $\mathbf{P}$ , se  $\boldsymbol{\pi}$  è una distribuzione reversibile per la catena di Markov, allora sarà anche una distribuzione stazionaria per la stessa catena.*

*Dimostrazione.* La proprietà i) della definizione 1.14 di distribuzione stazionaria è immediata. Per quanto riguarda la ii) basta osservare che per ogni  $j \in \{1, \dots, k\}$  si ha

$$\pi_j = \pi_j \sum_{i=1}^k P_{j,i} = \sum_{i=1}^k \pi_j P_{j,i} = \sum_{i=1}^k \pi_i P_{i,j},$$

in cui è stata usata la condizione (1.14), per l'ultimo passaggio.  $\square$

## 1.3 Random walk

### 1.3.1 Caso unidimensionale

Per un'introduzione al concetto di random walk si può partire dal caso unidimensionale: un punto materiale viene inizialmente posizionato, per semplicità, nell'origine della retta reale e si associano i suoi spostamenti per tempi discreti al lancio di una moneta bilanciata, nel senso che, a ogni turno, il punto si muove di una unità spaziale verso destra o verso sinistra, a seconda che il risultato del lancio sia testa o croce.

La dinamica appena introdotta produce quello che viene chiamato random walk semplice e simmetrico unidimensionale: il random walker, ad intervalli di tempo discreti, si sposterà con probabilità uguale, e pari ad  $1/2$ , a destra o a sinistra a seconda dell'esito del lancio della moneta e indipendentemente dal punto in cui si trova nel momento in cui la moneta viene lanciata.

Si consideri, più precisamente, una successione  $X_1, X_2, \dots, X_n$  di variabili casuali i.i.d., per le quali si abbia

$$\mathbb{P}\{X_i = 1\} = \mathbb{P}\{X_i = -1\} = 1/2 \quad \forall i = 1, 2, \dots, n.$$

Indicando con  $S_n$  la posizione raggiunta dopo  $n$  passi da una particella che ha iniziato il suo random walk in  $S_0 = 0$ , si può identificare il random walk con una successione  $\{S_n\}$ , il cui termine  $n$ -esimo è dato da

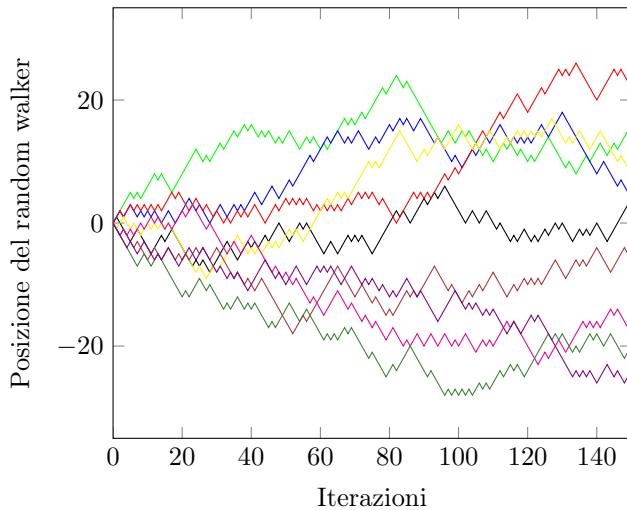
$$S_n = X_1 + X_2 + \dots + X_n.$$

Per il random walk semplice e simmetrico unidimensionale, come anticipato, vale la proprietà di Markov: la probabilità associata alla posizione al passo  $n+1$  dipende dalla sola posizione al passo  $n$  e non ha memoria del percorso seguito per arrivarci

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{S_{n+1} = i_{n+1} \mid S_n = i_n, S_{n-1} = i_{n-1}, \dots, S_0 = i_0\} &= \mathbb{P}\{S_{n+1} = i_{n+1} \mid S_n = i_n\} \\ &= 1/2, \end{aligned}$$

in cui, per  $k = 1, 2, \dots, n + 1$ , valgono le condizioni  $|i_k - i_{k-1}| = 1$  e  $i_0 = 0$  per ipotesi.

Nell'immagine in figura 1.1 si possono vedere le evoluzioni temporali di differenti realizzazioni di un random walk semplice e simmetrico, che parte dall'origine della retta reale ed evolve per 150 iterazioni.



**Figura 1.1:** Esempio di differenti realizzazioni di un random walk unidimensionale, che parte dall'origine della retta reale  $S_0 = 0$  ed evolve per  $n = 150$  iterazioni.

Alcune domande interessanti, che nascono in modo naturale quando si affronta l'evoluzione temporale di un random walk, sono:

- Quanto può arrivare lontano dal punto di partenza dopo  $n$  passi, in media, un random walk?
- Quale è, più in generale, la distribuzione di probabilità per la posizione di un random walk?
- Quale è la probabilità che, dopo  $n$  passi, un random walk torni al punto di partenza?
- Il random walk tornerà più volte al punto di partenza o se ne allontanerà inesorabilmente all'aumentare del numero di passi?

Per rispondere alla prima di queste domande, si ricorre al seguente lemma.

**Lemma 1.4.** *Per un random walk semplice e simmetrico unidimensionale, si hanno i valori aspettati:*

$$\mathbb{E}[S_n] = 0, \quad \mathbb{E}[S_n^2] = n. \quad (1.15)$$

*Dimostrazione.* Si può facilmente vedere che il valore aspettato delle variabili causali i.i.d.  $X_1, X_2, \dots, X_n$  è nullo

$$\mathbb{E}[X_j] = 0 \quad \forall j = 1, \dots, n.$$

Da questo, segue la prima relazione in (1.15), in quanto

$$\mathbb{E}[S_n] = \mathbb{E}[(X_1 + \cdots + X_n)] = \sum_{j=1}^n \mathbb{E}[X_i] = 0.$$

Per il valore aspettato di  $S_n^2$ , basta considerare che per la definizione (1.2) di varianza si ha

$$\text{Var}[S_n] = \mathbb{E}[S_n^2].$$

e che la relazione

$$\text{Var}[X_j] = \mathbb{E}[X_j^2] = 1 \quad \forall j = 1, \dots, n,$$

insieme all'indipendenza delle variabili  $X_1, \dots, X_n$ , comporta

$$\text{Var}[S_n] = \text{Var}[X_1 + \cdots + X_n] = \sum_{j=1}^n \text{Var}[X_j] = n.$$

□

A questo punto, è possibile introdurre qualitativamente la risposta alla terza domanda. La relazione  $\mathbb{E}[S_n^2] = n$  comporta che, dopo  $n$  passi, la distanza aspettata dall'origine sia dell'ordine di  $\sqrt{n}$ , mentre il numero di interi della retta reale contenuti in tale intervallo è dell'ordine di  $\sqrt{n}$ . Si può ragionevolmente ipotizzare, quindi, che la probabilità che il random walk si trovi su uno di questi punti decada proprio come  $\sqrt{n}$ .

Per avere una risposta rigorosa, invece, occorre prima introdurre la seguente distribuzione esatta e rispondere alla domanda del secondo punto, riguardo la distribuzione di probabilità per un random walk.

**Teorema 1.7.** *Per il random walk semplice e simmetrico unidimensionale, vale la distribuzione esatta*

$$\mathbb{P}\{S_n = k\} = \begin{cases} \binom{n}{\frac{n-k}{2}} 2^{-n}, & \text{se } k \equiv n \pmod{2} \text{ e } n \geq k, \\ 0, & \text{altrimenti.} \end{cases}$$

*Dimostrazione.* Il teorema 1.7 fornisce la probabilità che il punto materiale si trovi nella posizione  $x = k$  dopo  $n$  passi. Nell'ipotesi  $n \geq k$ , con  $k \equiv n \pmod{2}$  e  $k > 0$ , se si indica con  $n_s$  i passi a sinistra e con  $n_d$  quelli a destra, si ottiene il sistema

$$\begin{cases} n_d - n_s = k \\ n_s + n_d = n. \end{cases}$$

La soluzione di questo sistema indica che  $(n-k)/2$  passi sono stati fatti a sinistra e  $(n+k)/2$  sono stati fatti a destra, quindi

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{S_n = k\} &= \mathbb{P}\{\text{su } n \text{ salti, } (n-k)/2 \text{ sono a sinistra}\} \\ &= \binom{n}{\frac{n-k}{2}} \frac{1}{2^n}. \end{aligned}$$

Analogamente, per  $k < 0$ , con  $k \equiv n \pmod{2}$ , si ottiene

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\{S_n = k\} &= \mathbb{P}\{\text{su } n \text{ salti, } (n-k)/2 \text{ sono a destra}\} \\ &= \binom{n}{\frac{n-k}{2}} \frac{1}{2^n}.\end{aligned}$$

Lo stesso discorso si può fare nel caso in cui si abbia  $k = 0$ , con la differenza che il punto materiale si sposta  $n/2$  volte a sinistra e altrettante a destra. Nel caso in cui la congruenza tra  $k$  e  $n$  non sia invece soddisfatta, si ottiene un evento impossibile, cui è associata probabilità nulla.  $\square$

Siamo ora in grado di rispondere quantitativamente alla terza domanda, relativa alla probabilità di ritorno nell'origine per un random walk unidimensionale semplice e simmetrico.

**Lemma 1.5.** *Per un random walk semplice e simmetrico unidimensionale, si ha la distribuzione limite*

$$\mathbb{P}\{S_{2n} = 0\} \simeq \frac{1}{\sqrt{n\pi}}, \quad \text{per } n \rightarrow \infty.$$

*Dimostrazione.* Approssimando il fattoriale di  $n$  con la formula di Stirling

$$n! \sim \sqrt{2\pi n} (n/e)^n, \quad \text{per } n \rightarrow \infty, \tag{1.16}$$

si può scrivere il coefficiente binomiale come

$$\binom{2n}{n} = \frac{(2n)!}{n!n!} \simeq \frac{\sqrt{(2n)2\pi}(2n)^{2n}e^{-2n}}{2n\pi n^{2n}e^{-2n}} = \frac{2^{2n}}{\sqrt{n\pi}}. \tag{1.17}$$

Con l'uso combinato della (1.17) e del teorema 1.7, si ottiene

$$\mathbb{P}\{S_{2n} = 0\} = \binom{2n}{n} \frac{1}{2^{2n}} \simeq \frac{1}{\sqrt{n\pi}}.$$

$\square$

Quanto appena ottenuto per la distribuzione limite torna con la risposta qualitativa data in precedenza alla terza domanda.

Prima di procedere con la risposta all'ultima delle domande, riguardante la ricorrenza del random walk, è utile generalizzare il discorso appena fatto al caso multidimensionale e rivedere in più dimensioni le risposte alle prime tre domande.

### 1.3.2 Caso multidimensionale

Si consideri il caso in cui il random walker non si muova più sulla retta reale, ma in  $\mathbb{Z}^d$ , su cui è definita l'usuale norma euclidea

$$\|\underline{x}\| = \left[ \sum_{i=1}^d (x_i)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$

dato  $\underline{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d) \in \mathbb{Z}^d$ .

Se al tempo  $n$  il random walker si trova nel punto  $\underline{x}_n$ , la posizione  $\underline{x}_{n+1}$  che andrà ad occupare al tempo successivo  $n + 1$  viene scelta con probabilità uguale e pari a  $1/2d$  tra uno dei suoi primi vicini, ovvero tra uno dei  $2d$  punti che soddisfino la relazione

$$\|\underline{x}_n - \underline{x}_{n+1}\| = 1.$$

Facendo di nuovo l'ipotesi che la particella parta dall'origine di  $\mathbb{Z}^d$  e quindi si abbia  $\underline{S}_0 = \underline{0}$ , la posizione dopo  $n$  passi può essere indicata con

$$\underline{S}_n = \underline{S}(n) = \underline{X}_1 + \underline{X}_2 + \cdots + \underline{X}_n.$$

I primi vicini di un punto  $\underline{x} \in \mathbb{Z}^d$  sono tali da condividerne  $d - 1$  coordinate, mentre hanno uno scarto di  $\pm 1$  sulla rimanente coordinata; indicando con  $\underline{e}_1, \underline{e}_2, \dots, \underline{e}_d$  i  $d$  versori ortogonali di  $\mathbb{Z}^d$ , gli incrementi  $\underline{X}_1, \underline{X}_2, \dots, \underline{X}_n$  sono quindi una sequenza di  $n$  vettori casuali i.i.d., le cui probabilità sono date da

$$\mathbb{P}\{\underline{X}_k = \underline{e}_i\} = \mathbb{P}\{\underline{X}_k = -\underline{e}_i\} = \frac{1}{2d},$$

per  $k = 1, 2, \dots, n$  e  $i = 1, 2, \dots, d$ .

Nel caso multidimensionale, continua a valere la proprietà di Markov: la probabilità di spostarsi al tempo  $n + 1$  in una certa posizione non dipende dal percorso seguito durante i primi  $n$  passi, ma solo dalla posizione al tempo  $n$ , ed è data da

$$\begin{aligned} &\mathbb{P}\{\underline{S}_{n+1} = \underline{x}_{n+1} \mid \underline{S}_n = \underline{x}_n, \underline{S}_{n-1} = \underline{x}_{n-1}, \dots, \underline{S}_0 = \underline{x}_0 = \underline{0}\} \\ &= \mathbb{P}\{\underline{S}_{n+1} = \underline{x}_{n+1} \mid \underline{S}_n = \underline{x}_n\} = 1/2d \end{aligned}$$

in cui, per  $k = 1, 2, \dots, n + 1$ , valgono le condizioni  $\|\underline{x}_k - \underline{x}_{k-1}\| = 1$  e  $\underline{x}_0 = \underline{0}$  per ipotesi.

Per quanto riguarda il valore aspettato di  $\underline{S}_n$ , si ottengono delle generalizzazioni di quanto già visto per il caso unidimensionale.

**Lemma 1.6.** *Per un random walk semplice e simmetrico multidimensionale si ha:*

$$\mathbb{E}[\|\underline{S}_n\|^2] = \mathbb{E}[\underline{S}_n \cdot \underline{S}_n] = \mathbb{E}\left[\left(\sum_{j=1}^n \underline{X}_j\right) \cdot \left(\sum_{j=1}^n \underline{X}_j\right)\right] = n.$$

*Dimostrazione.* La dimostrazione è analoga a quella vista nel lemma 1.4, per il caso unidimensionale.  $\square$

Si può riprendere, a questo punto, il ragionamento qualitativo fatto nel caso unidimensionale per stimare la probabilità di tornare nell'origine dopo  $n$  passi. Il valore atteso della distanza dall'origine continua ad essere proporzionale a  $\sqrt{n}$ , mentre il numero di siti del reticolo  $\mathbb{Z}^d$  contenuti in una ipercirconferenza di raggio  $\sqrt{n}$  cresce come  $(\sqrt{n})^d$ . La probabilità di trovarsi su un particolare sito decade, quindi, come  $n^{-d/2}$ .

Analogamente al caso unidimensionale, per poter dare una risposta rigorosa si ricorre alla seguente distribuzione esatta, per poi analizzarne l'andamento limite per  $n \rightarrow \infty$ .

**Lemma 1.7.** Per ogni intero  $n \geq 1$  e per ogni  $d \geq 1$ , vale la distribuzione esatta

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = \underline{0}\} &= (2d)^{-2n} \sum_{n_1+n_2+\dots+n_d=n} \frac{(2n)!}{(n_1!n_2!\dots n_d!)^2} \\ &= (2d)^{-2n} \binom{2n}{n} \sum_{n_1+n_2+\dots+n_d=n} \left(\frac{n!}{n_1!n_2!\dots n_d!}\right)^2. \end{aligned} \quad (1.18)$$

*Dimostrazione.* La dimostrazione si divide in tre casi, a seconda delle dimensioni di  $\mathbb{Z}^d$ :

- i) nel caso  $d = 1$ , si ha il teorema 1.7.
- ii) Per  $d = 2$ , si pone  $2n = 2n_1 + 2n_2$  indicando con  $n_1$  i passi che il random walker compie lungo le ascisse e con  $n_2$  quelli lungo le ordinate. Per  $n_1$  e  $n_2$  fissati, per quanto già visto nel caso unidimensionale, si ha

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = \underline{0}\} = \mathbb{P}\{\underline{S}_{2n_1} = \underline{0}\} \mathbb{P}\{\underline{S}_{2n_2} = \underline{0}\} = \frac{1}{4^{2n}} \binom{2n_1}{n_1} \binom{2n_2}{n_2}.$$

Sommendo sulle configurazioni per le quali  $n = n_1 + n_2$ , si ricava

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = \underline{0}\} = \frac{1}{4^{2n}} \sum_{n_1+n_2=n} \binom{2n_1}{n_1} \binom{2n_2}{n_2} \binom{2n}{2n_1}.$$

Esplicitando i tre coefficienti binomiali e semplificando, si ottiene la (1.18) per  $d = 2$ .

- iii) Per  $d > 2$ , la dimostrazione è analoga, ma con il secondo membro della precedente relazione dato da

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2d}\right)^{2n} \sum_{n_1+\dots+n_d=n} &\binom{2n_1}{n_1} \dots \binom{2n_d}{n_d} \\ &\times \left[ \binom{2n}{2n_1} \dots \binom{2n - 2n_1 - \dots - 2n_{d-2}}{2n_{d-1}} \right], \end{aligned}$$

in cui il prodotto di coefficienti binomiali tra parentesi quadre rappresenta tutte le possibili combinazioni per scegliere  $2n_1 \dots 2n_{d-1}$  salti su  $2n$ .

□

A partire da questa distribuzione esatta, si ottiene facilmente la distribuzione limite per  $n \rightarrow \infty$  anche per il caso multidimensionale.

**Lemma 1.8.** Per ogni intero  $d \geq 1$  e per  $n \rightarrow \infty$ , il random walk ha la distribuzione limite

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = \underline{0}\} \approx 2 \left(\frac{d}{4n\pi}\right)^{d/2}. \quad (1.19)$$

In particolare, per  $d = 2$ , si ha

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = \underline{0}\} = \frac{1}{n\pi} + O\left(\frac{1}{n^2}\right). \quad (1.20)$$

*Dimostrazione.* La dimostrazione sarà approfondita solo per il caso  $d = 2$  e segue da alcune considerazioni di calcolo combinatorio e dall'applicazione della formula di Stirling (1.16).

Facendo riferimento alla (1.18), per  $d = 2$  si ha

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = \underline{0}\} = \frac{1}{4^{2n}} \binom{2n}{n} \sum_{n_1+n_2=n} \left(\frac{n!}{n_1!n_2!}\right)^2.$$

Tenendo in considerazione che per la sommatoria a secondo membro si ha

$$\sum_{n_1+n_2=n} \left(\frac{n!}{n_1!n_2!}\right)^2 = \binom{2n}{n} \quad (1.21)$$

e approssimando il coefficiente binomiale come già visto nella (1.17), si ottiene appunto la relazione (1.20).

La verifica della (1.21) segue da

$$\left(\frac{n!}{n_1!n_2!}\right)^2 = \left(\frac{n!}{n_1!(n-n_1)!}\right)^2 = \binom{n}{n_1}^2$$

che, sommata sulle configurazioni per cui  $n = n_1 + n_2$ , comporta

$$\sum_{n_1+n_2=n} \left(\frac{n!}{n_1!n_2!}\right)^2 = \sum_{n_1=0}^n \binom{n}{n_1}^2 = \binom{n}{0}^2 + \binom{n}{1}^2 + \cdots + \binom{n}{n}^2 = \binom{2n}{n},$$

nell'ultimo passaggio della quale è stata usata l'identità di Vandermonde

$$\binom{m+n}{k} = \binom{m}{k} \binom{n}{0} + \binom{m}{k-1} \binom{n}{1} + \cdots + \binom{m}{0} \binom{n}{k} \quad (1.22)$$

per  $n = m = k$ .

L'identità (1.22) può essere spiegata in termini di semplici osservazioni di calcolo combinatorio: per contare le combinazioni di  $m+n$  oggetti raggruppati  $k$  a  $k$ , si può procedere suddividendo gli oggetti in un gruppo di  $m$  e uno di  $n$  elementi; le combinazioni in cui  $k$  oggetti appartengono al primo gruppo sono date dal primo addendo della somma a secondo membro della (1.22), se  $m \geq k$ , mentre se  $m < k$  non ci sono; il secondo termine della somma rappresenta il numero di possibili combinazioni con  $k-1$  oggetti nel primo gruppo e 1 nel secondo, se  $m \geq k-1$ ; iterando il ragionamento, si ottengono gli altri termini della somma nel secondo membro della (1.22).  $\square$

Come si vede dalla (1.19), il risultato rigoroso conferma il ragionamento qualitativo, secondo il quale la probabilità di ritrovarsi nell'origine dopo  $n$  passi decade come  $n^{-d/2}$ . In seguito, si vedrà il modo in cui l'esponente  $d/2$  sia in relazione con un aspetto fondamentale per un random walk quale è la ricorrenza, che consiste nella proprietà che un random walker torni infinitamente spesso a visitare l'origine.

### 1.3.3 Distribuzione di un random walk bidimensionale

Prima di affrontare l'aspetto della ricorrenza, è opportuno fare alcune considerazioni su quale sia la metrica associata a un random walk bidimensionale.

Per questa analisi, sono utili i seguenti quattro lemmi; dei primi tre, non sarà data dimostrazione, risultato dell'applicazione di considerazioni di calcolo combinatorio e della formula di Stirling e consultabile per esempio in [21]; del quarto, invece, sarà fornita una dimostrazione dettagliata per il caso bidimensionale, di interesse per uno dei due modelli simulati numericamente, di cui si parlerà nel capitolo 3.

**Lemma 1.9.** *Per  $d = 2$ ,  $x_1 + x_2 \equiv 0 \pmod{2}$  e  $|x_1| + |x_2| \leq 2n$ , si ha*

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = (x_1, x_2)\} = 4^{-2n} \sum_{k \in A_n(x_1, x_2)} \binom{2n}{k} \binom{k}{\frac{x_1}{2}} \binom{2n-k}{\frac{2n-x_2}{2}},$$

*in cui*

$$k \in A_n(x_1, x_2) \iff k \equiv x_1 \pmod{2} \quad \text{e} \quad |x_1| \leq k \leq 2n - |x_2|.$$

**Lemma 1.10** (Erdős - Taylor, 1960). *Per  $d = 2$  e  $\underline{x} = (x_1, x_2) \equiv 0 \pmod{2}$  si ha*

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = \underline{x}\} \begin{cases} = \frac{1}{n\pi} + (\|\underline{x}\|^2 + 1)O(n^{-2}), & \text{se } n > \|\underline{x}\|^2, \\ \leq \frac{1}{n\pi} + O(n^{-2}) \exp\left(-\frac{\|\underline{x}\|^2}{2n}\right), & \text{se } n \leq \|\underline{x}\|^2. \end{cases}$$

**Lemma 1.11.** *Per  $d \geq 2$ ,  $\underline{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d)$  e  $x_1 + x_2 + \dots + x_d = 0 \pmod{2}$  si ha*

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = \underline{x}\} \begin{cases} = O(n^{-\frac{d}{2}}), & \text{se } n > \|\underline{x}\|^2, \\ \leq O\left(n^{-\frac{d}{2}} \exp\left(-\frac{\|\underline{x}\|^2}{2n}\right)\right), & \text{se } n \leq \|\underline{x}\|^2. \end{cases}$$

I lemmi 1.9, per il caso 2-dimensionale, e 1.10, per la generalizzazione a  $d$  dimensioni, danno un'informazione molto importante: sebbene il random walker si muova su un reticolo discreto, la probabilità  $\mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = \underline{x}\}$  non è collegata alla norma 1, come ci si potrebbe aspettare, ma all'usuale norma 2 euclidea.

Questo aspetto sarà ripreso in considerazione nel capitolo 3, quando si spiegherà la logica con cui sono state scelte le osservabili del modello a random walk, e successivamente illustrato con i risultati numerici nel capitolo 4.

### 1.3.4 Random walk e ricorrenza

Nell'analisi del comportamento di un random walk semplice e simmetrico multidimensionale, uno dei teoremi fondamentali riguarda la ricorrenza ed è stato enunciato dal matematico ungherese Pólya, nel 1921: se  $d \leq 2$ , il random walker ritorna al suo punto di partenza infinitamente spesso con probabilità 1, mostrando un comportamento detto ricorrente; nel caso di  $d > 2$ , invece, la probabilità di infiniti ritorni è nulla e il random walk è detto transiente.

**Teorema 1.8.** *Teorema della ricorrenza - Pólya, 1921*

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_n = \underline{0} \text{ infinitamente spesso}\} = \begin{cases} 1, & \text{se } d \leq 2, \\ 0, & \text{se } d \geq 3. \end{cases}$$

*Dimostrazione.* Come visto nella (1.19), si ha

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = \underline{0}\} \approx \frac{C_d}{n^{d/2}},$$

in cui  $C_d$  è un coefficiente che dipende dalla dimensione del random walk e può essere trascurato in quanto segue, poiché l'aspetto importante è legato all'esponente  $d/2$  del denominatore  $n$ .

Indicando con  $V$  il numero di visite del random walker all'origine, se ne può calcolare il valore aspettato, per il quale si ottengono due comportamenti distinti, collegati al valore dell'esponente del denominatore  $n$  e dati da

$$\mathbb{E}[V] = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}\{\underline{S}_n = \underline{0}\} = \begin{cases} = \infty, & \text{se } d \leq 2, \\ < \infty, & \text{se } d \geq 3. \end{cases} \quad (1.23)$$

Nel caso  $d \geq 3$ , il random walk risulta essere transiente come diretta conseguenza del lemma di Borel-Cantelli 1.1 applicato alla sequenza infinita di eventi  $S_n = 0$

Per quanto riguarda il caso  $d \leq 2$ , si ottiene invece un valore di aspettazione infinito per il numero di ritorni nell'origine. Come già sottolineato nella definizione 1.7 di valore aspettato, una variabile aleatoria che assume solo valori finiti può avere un valore di aspettazione infinito e si deve approfondire ulteriormente per constatare che non sia questo il caso.

Per verificarlo, si indichi con  $q_d$  la probabilità che il random walker torni infinite volte nell'origine, per  $d = 1, 2$ , e si ipotizzi  $q_d < 1$ . Dal momento che  $V = 1$  se e solo se il random walker parte dall'origine e non ci ritorna mai, si ha

$$\mathbb{P}\{V = 1\} = (1 - q_d).$$

Più in generale, la probabilità sarà

$$\mathbb{P}\{V = k\} = q_d^{k-1}(1 - q_d) \quad k = 1, 2, \dots$$

Si può, quindi, ricalcolare il valore aspettato di  $V$  come

$$\mathbb{E}[V] = \sum_{k=1}^{\infty} k \mathbb{P}\{V = k\} = \sum_{k=1}^{\infty} k q_d^{k-1}(1 - q_d) = \frac{1}{1 - q_d},$$

nel cui ultimo passaggio, si è tenuta in considerazione la serie di potenze

$$\sum_{i=1}^{\infty} i x^i = \frac{x}{(1-x)^2} \quad \text{per } |x| < 1. \quad (1.24)$$

Affinché questo valore aspettato sia infinito, si deve avere  $q_d = 1$ , contraddicendo l'ipotesi  $q_d < 1$  e dimostrando il teorema della ricorrenza di Pólya.  $\square$

### 1.3.5 Random walk e local time

Il concetto di visite che il random walker fa all'origine può essere generalizzato in una quantità che prende il nome di local time.

**Definizione 1.21.** Per un random walk su  $\mathbb{Z}^d$ , si definisce local time la quantità

$$\xi(\underline{x}, n) = \#\{k : 0 < k \leq n, \underline{S}_k = \underline{x}\}, \text{ con } \underline{x} \in \mathbb{Z}^d, n = 1, 2, \dots \quad (1.25)$$

La quantità  $\xi(\underline{x}, n)$  indica il numero di passaggi del random walker su un generico punto  $\underline{x} \in \mathbb{Z}^d$  entro il tempo  $n$  ed è una variabile aleatoria.

Per via del teorema di Pólya 1.8 si ha

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \xi(\underline{0}, n) \begin{cases} = \infty, & \text{se } d \leq 2, \\ < \infty, & \text{se } d \geq 3. \end{cases}$$

Il passo successivo, cui sarà dedicato questo paragrafo, consiste nello studio delle proprietà di  $\xi(\underline{0}, n)$  nel caso  $d = 2$ , per il quale sarà fatto riferimento alle quantità:

$$\rho_n = \min \{ k : k > \rho_{n-1}, \underline{S}_k = \underline{0} \}, \quad (1.26a)$$

che rappresenta la sequenza dei tempi di ritorno nell'origine,

$$p_{2k} = \mathbb{P} \{ \underline{S}_{2k} = \underline{0} \} , \quad p_{2k+1} = 0 , \quad \text{per } k = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.26b)$$

per la probabilità che il random walker si trovi nell'origine dopo  $2k$  passi,

$$\begin{aligned} q_{2k} &= \mathbb{P} \{ \underline{S}_{2k} = \underline{0}, \underline{S}_{2k-2} \neq \underline{0}, \dots, \underline{S}_4 \neq \underline{0}, \underline{S}_2 \neq \underline{0} \} = \mathbb{P} \{ \rho_1 = 2k \} \quad (1.26c) \\ &= \mathbb{P} \{ \xi(\underline{0}, 2k) = 1, \xi(\underline{0}, 2k-1) = 0 \} , \quad \text{per } k = 1, 2, \dots, \end{aligned}$$

per la probabilità che il primo ritorno nell'origine si abbia alla  $2k$ -esima iterazione,

$$\begin{aligned} \gamma_{2k} &= \mathbb{P} \{ \underline{S}_2 \neq \underline{0}, \underline{S}_4 \neq \underline{0}, \dots, \underline{S}_{2k-2} \neq \underline{0} \} = \mathbb{P} \{ \xi(\underline{0}, 2k-2) = 0 \} \quad (1.26d) \\ &= q_{2k} + \gamma_{2k+2} = \sum_{j=k}^{\infty} q_{2j} + \lim_{n \rightarrow \infty} \gamma_{2n} , \quad \text{con } k = 2, 3, \dots \text{ e } \gamma_2 = 1, \end{aligned}$$

per la probabilità che non si visiti l'origine entro i primi  $2k - 2$  passi e, infine, il limite

$$\begin{aligned} \gamma &= \lim_{n \rightarrow \infty} \gamma_{2n} = \mathbb{P} \left\{ \lim_{n \rightarrow \infty} \xi(\underline{0}, n) = \underline{0} \right\} = \mathbb{P} \{ \rho_1 = \infty \} \quad (1.26e) \\ &= 1 - \sum_{j=1}^{\infty} q_{2j} . \end{aligned}$$

**Teorema 1.9** (Erdős - Taylor, 1960). *Per  $d = 2$ , si ha:*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P} \{ \xi(\underline{0}, n) < x \log x \} = 1 - e^{-\pi x}$$

uniformemente per  $0 \leq x < (\log n)^{3/4}$  e

$$\mathbb{E} \left[ \frac{\xi(\underline{0}, n)}{\log n} \right] \rightarrow \frac{1}{\pi} , \quad \text{per } n \rightarrow \infty.$$

La dimostrazione del teorema 1.9 si basa sul seguente lemma.

**Lemma 1.12** (Dvoretzky - Erdős 1950, Erdős - Taylor 1960).

$$\mathbb{P}\{\rho_1 > n\} = \mathbb{P}\{\xi(\underline{0}, n) = 0\} = \frac{\pi}{\log n} + O((\log n)^{-2}), \text{ se } d = 2.$$

*Dimostrazione.* Facendo riferimento alle quantità (1.26b), (1.26c) e (1.26d) e considerando la relazione

$$\begin{aligned} 1 &= \sum_{i=0}^n \mathbb{P}\{\underline{S}_{2i} = \underline{0}, \underline{S}_j \neq \underline{0} \text{ per } j = 2i+1, 2i+2, \dots, 2n\} \\ &= \sum_{i=0}^n \mathbb{P}\{\underline{S}_{2i} = \underline{0}, \underline{S}_j - \underline{S}_{2i} \neq \underline{0} \text{ per } j = 2i+1, 2i+2, \dots, 2n\} \\ &= p_{2i} \gamma_{2n-2i+2}, \end{aligned}$$

si ricava

$$\sum_{k=0}^{n-1} \mathbb{P}\{\underline{S}_{2k} = \underline{0}\} \mathbb{P}\{\xi(\underline{0}, 2n-2k-2) = \underline{0}\} = 1 \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.27)$$

in cui  $\xi(\underline{0}, 0) = 0$ .

Per il lemma 1.8, si ha

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_{2k} = \underline{0}\} \approx (k\pi)^{-1} \quad \forall k \neq 0,$$

quindi

$$\sum_{k=1}^n \mathbb{P}\{\underline{S}_{2k} = \underline{0}\} \approx \frac{\log n}{\pi}. \quad (1.28)$$

La successione  $P\{\xi(\underline{0}, 2n) = 0\}$  è monotona decrescente e, per le equazioni (1.27) e (1.28), si ha

$$\begin{aligned} 1 &\geq \mathbb{P}\{\xi(\underline{0}, 2n-2) = \underline{0}\} \sum_{k=0}^{n-1} \mathbb{P}\{\underline{S}_{2k} = \underline{0}\} \\ &\approx \mathbb{P}\{\xi(\underline{0}, 2n-2) = \underline{0}\} \frac{\log n}{\pi}, \end{aligned}$$

quindi

$$\mathbb{P}\{\xi(\underline{0}, 2n) = 0\} \leq \frac{\pi + o(1)}{\log n}. \quad (1.29)$$

Analogamente per  $0 \leq k \leq n$  e come conseguenza della sola (1.27), si ha

$$1 \leq \left( \sum_{j=0}^k \mathbb{P}\{\underline{S}_{2j} = \underline{0}\} \right) \mathbb{P}\{\xi(\underline{0}, 2n-2k-2) = \underline{0}\} + \sum_{j=k+1}^{n-1} \mathbb{P}\{\underline{S}_{2j} = \underline{0}\}. \quad (1.30)$$

Mandando  $k$  a infinito, dalla (1.29) si ricava

$$\mathbb{P}\{\xi(\underline{0}, 2n-2k) = \underline{0}\} \frac{1 + o(1)}{\pi} \log k + \frac{1 + o(1)}{\pi} \log \frac{n}{k} \geq 1.$$

Infine, prendendo  $k = n - [n/\log n]$ , si ottiene

$$\mathbb{P}\{\xi(\underline{0}, 2n) = 0\} \geq \frac{\pi + o(1)}{\log n}.$$

In questo modo, si è ricavato il termine principale del lemma 1.12; analogamente, si ottiene il termine restante.  $\square$

*Dimostrazione del teorema 1.9 di Erdős - Taylor.* Per  $q = [x \log n] + 1$  e  $p = [n/q]$  si ha<sup>2</sup>

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{\xi(0, n) \geq x \log n\} &\geq \mathbb{P}\{\rho_q < n\} \geq \prod_{k=1}^q \mathbb{P}\left\{\rho_k - \rho_{k-1} \leq \left[\frac{n}{q}\right]\right\} \\ &= (\mathbb{P}\{\rho_1 < p\})^q = (1 - \mathbb{P}\{\xi(0, p) = 0\})^q. \end{aligned}$$

Assumendo  $x < \log n(\log_2 n)^{-(1+e)}$  per il lemma 1.12 si ottiene

$$\mathbb{P}\{\xi(0, n) \geq x \log n\} \geq e^{-\pi x}(1 + o(1)), \quad \text{per } n \rightarrow \infty. \quad (1.31)$$

Si ha quindi

$$\mathbb{P}\{\xi(0, n) \geq x \log n\} \geq e^{-\pi x}(1 + o(\log n)^{-1/4}),$$

uniformemente in  $x$ , per  $x < (\log n)^{3/4}$ .

Per ottenere una stima dall'alto, si consideri l'evento  $E_k$  ( $k = 1, 2, \dots, q$ ) per il quale  $k$  variabili  $\rho_i - \rho_{i-1}$  ( $i = 1, 2, \dots, q$ ) siano maggiori o uguali ad  $n$ , mentre le altre  $q - k$  siano minori di  $n$ . Quindi

$$\{\xi(0, n) \geq x \log n\} \subset \prod_{k=1}^q \overline{E}_k.$$

Si può scrivere, pertanto, che

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{\xi(0, n) < x \log n\} &\geq \sum_{k=1}^q \mathbb{P}\{E_k\} \\ &= \sum_{k=1}^q \binom{q}{k} (\mathbb{P}\{\rho_1 \geq n\})^k (1 - \mathbb{P}\{\rho_1 \geq n\})^{q-k} \\ &= 1 - (1 - \mathbb{P}\{\rho_1 \geq n\})^q \\ &\geq 1 - e^{-\pi x}(1 + O(\log n)^{-1/4}) \end{aligned} \quad (1.32)$$

uniformemente in  $x$ , per  $x < (\log n)^{3/4}$ , grazie al lemma 1.12.

L'uso combinato di (1.31) e di (1.32) implica il primo assunto del teorema 1.9; per quanto riguarda il secondo, basta osservare che la relazione (1.32) e il lemma 1.12 comportano

$$\mathbb{P}\{\xi(0, n) \geq x \log n\} \leq \exp\left(-\pi x + O\left(\frac{x}{\log n}\right)\right) \quad \text{per ogni } x = x_n.$$

□

Il teorema 1.9, appena dimostrato, implica quello seguente.

**Teorema 1.10.**

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P\left\{\rho_n < \exp\left(\frac{n}{z}\right)\right\} = \exp(-\pi z)$$

uniformemente per  $0 < z < n^{3/7}$  e con  $d = 2$ .

---

<sup>2</sup>Con  $[x]$  si intende la parte intera di  $x$ .

Per ogni  $\underline{x} \in \mathbb{Z}^2$  fissato, le proprietà sui limiti di  $\xi(\underline{x}, n)$  sono, ovviamente, le stesse di quelle della funzione  $\xi(\underline{0}, n)$ ; analogamente, restano invariati, i risultati appena ottenuti.

Passiamo ora ad una breve rassegna di importanti informazioni, per il caso completamente differente in cui al posto di  $\underline{x}$  venga considerata una successione  $\underline{x}_n$ , per la quale  $\|\underline{x}_n\| \rightarrow \infty$ .

**Teorema 1.11** (Erdős - Taylor, 1960). *Per  $d = 2$ , si ha*

$$\mathbb{P}\{\xi(\underline{x}, n) = \underline{0}\} = \begin{cases} \frac{2 \log \|\underline{x}\|}{\log n} \left(1 + O\left(\frac{\log_3 \|\underline{x}\|}{\log \|\underline{x}\|}\right)\right) & \text{se } 20 < \|\underline{x}\| < n^{\frac{1}{3}}, \\ 1 - 2 \frac{\log\left(\frac{\sqrt{n}}{\|\underline{x}\|}\right)}{\log n} \left(1 + O\left(\frac{\log_2\left(\frac{\|\underline{x}\|}{\sqrt{n}}\right)}{\log\left(\frac{\|\underline{x}\|}{\sqrt{n}}\right)}\right)\right) & \text{se } n^{\frac{1}{6}} < \|\underline{x}\| < \frac{\sqrt{n}}{20}. \end{cases}$$

*Dimostrazione.* Per il lemma 1.10 si ha

$$\sum_{i=0}^n p_{2i} \gamma_{2n-2i+2} = 1 \quad (1.33)$$

e analogamente

$$\mathbb{P}\{\xi(\underline{x}, 2n) = \underline{0}\} + \sum_{k=1}^n \mathbb{P}\{\underline{S}_{2k} = \underline{x}\} \gamma_{2n-2k+2} = 1 \quad (1.34)$$

in cui  $\underline{x} = (x_1, x_2)$  e  $x_1 + x_2 \equiv 0 \pmod{2}$ .  $\square$

Le due relazioni (1.33) e (1.34) comportano

$$\mathbb{P}\{\xi(\underline{x}, 2n) = \underline{0}\} - \gamma_{2n+2} = \sum_{k=1}^n (p_{2k} - \mathbb{P}\{\underline{S}_{2k} = \underline{x}\}) \gamma_{2n-2k+2}.$$

Per  $1 < k_1 < k_2 < n$ , quindi, si riscrive

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{\xi(\underline{x}, 2n) = \underline{0}\} - \gamma_{2n+2} &\leq \gamma_{2n-2k_1+2} \sum_{k=1}^{k_1} p_{2k} \\ &\quad + \gamma_{2n-2k_2+2} \sum_{k=k_1+1}^{k_2} (p_{2k} - \mathbb{P}\{\underline{S}_{2k} = \underline{x}\}) \\ &\quad + \sum_{k=k_2+1}^n (p_{2k} - \mathbb{P}\{\underline{S}_{2k} = \underline{x}\}). \end{aligned}$$

Ora, nel caso in cui  $400 < \|\underline{x}\|^2 < n^{2/3}$  e con  $k_1 = \|\underline{x}\|^2$  e  $k_2 = [n^{4/5}]$ , per i lemmi 1.12, 1.8 e 1.10, si ottiene:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{\xi(\underline{x}, 2n) = \underline{0}\} - \gamma_{2n+2} &\leq \left( \frac{\pi}{\log(2n - 2k_1)} + O\left(\frac{1}{(\log n)^2}\right) \right) \\ &\quad \times \sum_{k=1}^{k_1} \left( \frac{1}{k\pi} + O\left(\frac{1}{k^2}\right) \right) \\ &\quad + \left( \frac{\pi}{\log(2n - 2k_2)} + O\left(\frac{1}{(\log n)^2}\right) \right) \\ &\quad \times \sum_{k=k_1+1}^{k_2} \left( \frac{1}{k\pi} + O\left(\frac{1}{k^2}\right) - \frac{1}{k\pi} - \|\underline{x}\|^2 O\left(\frac{1}{k^2}\right) \right) \\ &\quad + \sum_{k=k_2+1}^n \left( \frac{1}{k\pi} + O\left(\frac{1}{k^2}\right) \right). \end{aligned}$$

Pertanto si ottiene

$$\mathbb{P}\{\xi(\underline{x}, 2n) = \underline{0}\} - \gamma_{2n+2} \leq \frac{\log\|\underline{x}\|^2 + o(1)}{\log n}$$

e, analogamente, per il caso  $1 < k_3 < n$  si ottiene

$$\mathbb{P}\{\xi(\underline{x}, 2n) = \underline{0}\} - \gamma_{2n+2} \geq \gamma_{2n+2} \sum_{k=1}^{k_3} (p_{2k} - \mathbb{P}\{\underline{S}_{2k} = \underline{x}\}).$$

Prendendo

$$k_3 = \frac{\|\underline{x}\|^2}{\log_2\|\underline{x}\|^2}$$

in virtù, ancora, dei lemmi 1.8, 1.10 e 1.12, si ricava

$$\mathbb{P}\{\xi(\underline{x}, 2n) = \underline{0}\} - \gamma_{2n+2} \geq \frac{\|\underline{x}\|^2}{\log n} \left( 1 - O\left(\frac{\log_3\|\underline{x}\|^2}{\log\|\underline{x}\|^2}\right) \right)$$

che è la condizione del teorema 1.11 per  $20 < \|\underline{x}\| < n^{1/3}$ .

Il caso  $n^{1/6} < \|\underline{x}\| < n^{12}/20$  è analogo.

Come conseguenza banale del teorema 1.11 si ha il seguente lemma.

**Lemma 1.13.** *Per  $n_k = [\exp(e^{k \log k})]$  e per ogni  $k$  abbastanza elevato*

$$\mathbb{P}\left\{\xi(\underline{0}, n_k^{\log k}) - \xi(\underline{0}, n_k) = \underline{0} \mid \underline{S}_j ; j = 0, 1, 2, \dots, n_k\right\} \leq \frac{3}{\log k}.$$

*Dimostrazione.* Poiché  $\|\underline{S}_{n_k}\| \leq n_k$ , per ogni  $\underline{x} \in \mathbb{Z}^2$  per il quale  $\|\underline{x}\| = n_k$  si ha

$$\begin{aligned} &\mathbb{P}\left\{\xi(\underline{0}, n_k^{\log k}) - \xi(\underline{0}, n_k) = \underline{0} \mid \underline{S}_j ; j = 0, 1, 2, \dots, n_k\right\} \\ &\leq \mathbb{P}\left\{\xi(\underline{x}, n_k^{\log k} - n_k) = \underline{0}\right\} \leq \frac{3}{\log k}. \end{aligned}$$

□

## 1.4 Random walk ed equazione del calore discreta

### 1.4.1 La rovina del giocatore

Dato un numero intero positivo  $N$ , si supponga che un random walker parta da uno dei punti dell'insieme  $\{0, 1, \dots, N\}$  e si indichi con  $S_n$  la sua posizione al tempo  $n$ . Con l'ipotesi che il random walker si fermi appena raggiunga uno dei due estremi 0 o  $N$ , si indica il primo tempo di arrivo come

$$T = \min \{ n : S_n = 0 \text{ oppure } S_n = N \}. \quad (1.35)$$

La posizione al tempo  $n$  può essere riscritta come

$$\hat{S}_n = S_{n \wedge T}, \quad (1.36)$$

in cui  $n \wedge T$  indica il minimo tra  $n$  e  $T$ .

È facile verificare che con probabilità 1 si ha  $T < \infty$ , da cui segue che il random walker si ferma in uno dei due estremi dopo un tempo finito: è interessante capire, quindi, quale di questi venga raggiunto per primo.

**Definizione 1.22.** Si definisce la funzione  $F : \mathbb{P}\{0, \dots, N\} \rightarrow [0, 1]$  come

$$F(x) = \mathbb{P}\{S_T = N \mid S_0 = x\}. \quad (1.37)$$

La funzione  $F(x)$  rappresenta la probabilità che il random walker, partendo da  $x$ , arrivi in  $N$  al tempo  $T$ . Ovviamente si ha  $F(0) = 0$ , mentre  $F(N) = 1$ .

Considerando un punto di partenza intermedio tale che  $0 < x < N$ , il random walker può spostarsi con uguale probabilità sia in  $x - 1$  sia in  $x + 1$ , da cui segue

$$F(x) = \frac{1}{2}F(x+1) + \frac{1}{2}F(x-1) \quad \text{per } x = 1, \dots, N-1. \quad (1.38)$$

**Teorema 1.12.** *Dati due numeri reali  $a$  e  $b$  e un intero positivo  $N$ , l'unica funzione  $F : \{0, \dots, N\} \rightarrow \mathbb{R}$  che soddisfi la (1.38), con condizioni al contorno  $F(0) = a$  e  $F(N) = b$ , è la funzione lineare*

$$F_0(x) = a + \frac{x(b-a)}{N}. \quad (1.39)$$

*Dimostrazione.* La verifica che la (1.39) soddisfi la condizione (1.38) è immediata. Per quanto riguarda l'unicità, si supponga che  $F$  sia una funzione che soddisfi la (1.38) e si indichi con  $S_n$  la posizione al tempo  $n$  di un random walker partito da  $x$ . Per ogni  $n$ , vale la relazione

$$\mathbb{E}[F(S_{n \wedge T})] = F(x). \quad (1.40)$$

La validità della (1.40) può essere infatti provata per induzione. Per  $n = 0$ , si ha  $F(S_0) = F(x)$  e, quindi, si ha  $\mathbb{E}[F(S_0)] = F(x)$ .

Per il passo induttivo, si può usare una proprietà del valore aspettato in termini di probabilità condizionata

$$\mathbb{E}[F(S_{(n+1) \wedge T})] = \sum_{y=0}^N \mathbb{P}\{S_{n \wedge T} = y\} \mathbb{E}[F(S_{(n+1) \wedge T}) \mid S_{n \wedge T} = y]. \quad (1.41)$$

Se  $y = 0$ , oppure  $y = N$ , e  $S_{n \wedge T} = y$ , allora  $S_{(n+1) \wedge T} = y$  e quindi si ricava  $\mathbb{E}[F(S_{(n+1) \wedge T}) | S_{n \wedge T} = y] = F(y)$ .

Se  $0 < y < N$  e  $S_{n \wedge T} = y$ , si ha invece

$$\mathbb{E}[F(S_{(n+1) \wedge T}) | S_{n \wedge T} = y] = \frac{1}{2}F(y+1) + \frac{1}{2}F(y-1) = F(y)$$

e si ricava quindi

$$\mathbb{E}[F(S_{(n+1) \wedge T})] = \sum_{y=0}^N \mathbb{P}\{S_{n \wedge T} = y\} F(y) = \mathbb{E}[F(S_{n \wedge T})] = F(x),$$

in cui l'ultima uguaglianza è garantita dall'ipotesi induttiva.

Per la funzione  $F(x)$ , si ottiene

$$\begin{aligned} F(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}[F(S_{n \wedge T})] \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{y=0}^N \mathbb{P}\{S_{n \wedge T} = y\} F(y) \\ &= \mathbb{P}\{S_T = 0\} F(0) + \mathbb{P}\{S_T = N\} F(N) \\ &= [1 - \mathbb{P}\{S_T = N\}] F(0) + \mathbb{P}\{S_T = N\} F(N). \end{aligned} \tag{1.42}$$

Considerando che  $F(0) = a$ ,  $F(N) = b$  e  $\mathbb{P}\{S_T = N | S_0 = x\} = x/N$ , si ottiene

$$F(x) = a + \frac{x}{N}(b-a). \tag{1.43}$$

□

### 1.4.2 Rovina del giocatore in $d$ dimensioni

Il risultato ottenuto nel paragrafo precedente può essere generalizzato al caso multidimensionale. Sia  $A$  un sottoinsieme di  $\mathbb{Z}^d$ , con frontiera

$$\partial A = \{\underline{z} \in \mathbb{Z}^d : \text{dist}(\underline{z}, A) = 1\}$$

e chiusura

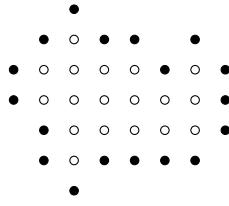
$$\bar{A} = A \cup \partial A,$$

di cui si può vedere un esempio per il caso bidimensionale, nell'immagine in figura 1.2.

**Definizione 1.23.** Si definiscono i due operatori lineari su funzioni  $\mathcal{Q}$  e  $\mathcal{L}$ , come

$$\mathcal{Q}F(\underline{x}) = \frac{1}{2d} \sum_{\substack{\underline{y} \in \mathbb{Z}^d \\ d(\underline{x}, \underline{y})=1}} F(\underline{y}), \tag{1.44}$$

$$\mathcal{L}F(\underline{x}) = (\mathcal{Q} - \mathbf{1})F(\underline{x}) = \frac{1}{2d} \sum_{\substack{\underline{y} \in \mathbb{Z}^d \\ d(\underline{x}, \underline{y})=1}} [F(\underline{y}) - F(\underline{x})]. \tag{1.45}$$



**Figura 1.2:** Esempio di sottoinsieme  $A \subset \mathbb{Z}^2$ : i punti bianchi formano l'insieme  $A$ , quelli neri la sua frontiera  $\partial A$ .

L'operatore  $\mathcal{L}$  è anche detto Laplaciano discreto e, indicando con  $\underline{S}_n$  la posizione del random walker al tempo  $n$ , si ha

$$\mathcal{L}F(\underline{x}) = \mathbb{E}[F(\underline{S}_1) - F(\underline{S}_0) | \underline{S}_0 = \underline{x}]. \quad (1.46)$$

In termini degli operatori appena introdotti, si può introdurre il concetto di funzione armonica a valori discreti.

**Definizione 1.24.** Una funzione a valori discreti  $F$  è detta armonica in  $A$ , se per ogni  $\underline{x} \in A$  soddisfa la relazione

$$\mathcal{L}F(\underline{x}) = 0. \quad (1.47)$$

La relazione (1.47) è un esempio di proprietà del valor medio; per quanto riguarda la condizione al contorno si ha il seguente problema di Dirichlet.

**Definizione 1.25** (Problema di Dirichlet per funzioni armoniche). Dato un insieme  $A \subset \mathbb{Z}^d$  e una funzione  $F : \partial A \rightarrow \mathbb{R}$ , si trovi un'estensione di  $F$  a  $\bar{A}$  per la quale  $F$  sia armonica in  $A$ , ossia

$$\mathcal{L}F(\underline{x}) = 0 \quad \forall \underline{x} \in A. \quad (1.48)$$

Come si è visto nel paragrafo precedente, per il caso unidimensionale con  $A = \{0, \dots, N\}$  è possibile suggerire una soluzione e verificarne la correttezza; per quanto riguarda il caso multidimensionale, trovare una soluzione non è così banale, ma si può vedere che quanto ottenuto per  $d = 1$  si può generalizzare facilmente al caso  $d > 1$ .

**Teorema 1.13.** *Dato un insieme finito  $A \subset \mathbb{Z}^d$ , per ogni  $F : \partial A \rightarrow \mathbb{R}$  esiste una unica estensione di  $F$  ad  $\bar{A}$  che soddisfa la condizione (1.48). Questa estensione è data da*

$$F_0(\underline{x}) = \mathbb{E}[F(\underline{S}_{T_A}) | \underline{S}_0 = \underline{x}] = \sum_{\underline{y} \in \partial A} \mathbb{P}\{\underline{S}_{T_A} = \underline{y} \mid \underline{S}_0 = \underline{x}\} F(\underline{y}),$$

in cui  $T_A = \min\{n \geq 0 : \underline{S}_n \notin A\}$ .

*Dimostrazione.* La verifica del fatto che  $F_0$  sia una soluzione del problema di Dirichlet è immediata. Per dimostrare la sua unicità, si supponga che  $F$  sia armonica su  $A$ , che si abbia  $\underline{S}_0 = \underline{x} \in \bar{A}$  e si ponga

$$M_n = F(\underline{S}_{n \wedge T_A}).$$

La condizione (1.48) può essere riscritta come

$$\mathbb{E}[M_{n+1}|S_0, \dots, S_n] = F(S_{n \wedge T_A}) = M_n. \quad (1.49)$$

Un processo per il quale vale la condizione  $\mathbb{E}[M_{n+1}|S_0, \dots, S_n] = M_n$  è detto martingala: che  $F(S_{n \wedge T_A})$  sia una martingala è equivalente alla proprietà che la funzione  $F$  sia armonica su  $\bar{A}$ .

Per la martingala si verifica facilmente che  $\mathbb{E}[M_n] = \mathbb{E}[M_0]$  e quindi, per  $S_0 = \underline{x}$ , si ottiene

$$\sum_{\underline{y} \in \bar{A}} \mathbb{P}\{\underline{S}_{n \wedge T_A} = \underline{y}\} F(\underline{y}) = \mathbb{E}[M_n] = M_0 = F(\underline{x}).$$

Sempre con facilità, si può dimostrare che con probabilità 1 si ha  $T_A < \infty$ , quindi facendo il limite si ottiene

$$F(\underline{x}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{\underline{y} \in \bar{A}} \mathbb{P}\{\underline{S}_{n \wedge T_A} = \underline{y}\} F(\underline{y}) = \sum_{\underline{y} \in \partial A} \mathbb{P}\{\underline{S}_{T_A} = \underline{y}\} F(\underline{y})$$

in cui lo scambio di limite e sommatoria è consentito dal fatto che quest'ultima è una somma finita, in quanto  $A$  è un insieme finito per ipotesi.  $\square$

Nel caso di un insieme  $A$  infinito, non è più garantita l'unicità della soluzione. Se ad esempio si considera il caso unidimensionale in cui  $A = \{1, 2, 3, \dots\}$  e  $\partial A = \{0\}$ , la funzione  $F(\underline{x}) = cx$  è armonica in  $A$  e ha valore nullo su  $\partial A$  per ogni  $c$  reale.

Ragionando in termini di martingale, è possibile comprendere facilmente il motivo per cui con un insieme  $A$  infinito si perda la certezza riguardo l'unicità della soluzione. Se, di nuovo, si suppone che  $F$  sia una funzione armonica sull'insieme infinito  $A = \{1, 2, 3, \dots\}$ , tale che  $F(0) = 0$ , e si indica con  $S_n$  la posizione del random walker unidimensionale semplice e simmetrico che parte da un intero positivo  $x$ , si può di nuovo porre  $T = \min\{n \geq 0 : S_n = 0\}$  e  $M_n = F(S_{n \wedge T})$  e mostrare, con le stesse argomentazioni, che vale la relazione

$$F(x) = \mathbb{E}[M_n] = \sum_{y=0}^{\infty} F(y) \mathbb{P}\{S_{n \wedge T} = y\}. \quad (1.50)$$

Sempre analogamente al caso precedente in cui l'insieme  $A$  è finito, con probabilità unitaria si ha  $T < \infty$  e quindi

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{y>0} \mathbb{P}\{S_{n \wedge T} = y\} = 0, \quad (1.51)$$

ma nell'ipotesi in cui  $A$  sia illimitato, si perde appunto l'unicità della soluzione perché da questa relazione non si può più ottenere

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{y>0} F(y) \mathbb{P}\{S_{n \wedge T} = y\} = 0. \quad (1.52)$$

Nel caso in cui la funzione  $F$  sia limitata, si ha il seguente teorema per la cui dimostrazione si può consultare ad esempio [13].

**Teorema 1.14.** *Dato un sottoinsieme  $A$  di  $\mathbb{Z}^d$  tale che, per ogni  $\underline{z} \in \mathbb{Z}^d$ , si abbia*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}\{\underline{T}_A > n \mid \underline{S}_0 = \underline{x}\} = 0$$

*e una funzione limitata  $F: \partial A \rightarrow \mathbb{R}$ , allora esiste una sola estensione limitata di  $F$  ad  $\bar{A}$ , che soddisfi la condizione (1.48), ed è data da*

$$F_0(\underline{x}) = \mathbb{E}[F(\underline{S}_{T_A}) \mid \underline{S}_0 = \underline{x}] = \sum_{\underline{y} \in \partial A} \mathbb{P}\{\underline{S}_{T_A} = \underline{y} \mid \underline{S}_0 = \underline{x}\} F(\underline{y}).$$

### 1.4.3 Equazione del calore

A conclusione di questo preambolo matematico, è possibile ora analizzare il legame che intercorre tra il random walk e l'equazione del calore discreta.

Sia  $A$  un sottoinsieme di  $\mathbb{Z}^d$  e  $\partial A$  la sua frontiera

$$\partial A = \{z \in \mathbb{Z}^d \setminus A : d(z, A) = 1\},$$

in cui  $d(z, A)$  è la distanza scelta su  $\mathbb{Z}^d$ , su cui non serve precisare altro ai fini di quanto segue.

Si supponga di fissare a zero la temperatura della frontiera  $\partial A$  e di avere la condizione iniziale  $p_0(\underline{x})$  per la temperatura di tutti i siti  $\underline{x}$  di  $A$ .

Con l'obiettivo di ottenere un modello per la diffusione del calore all'interno di  $A$ , si può supporre che questo si diffonda uniformemente da un sito  $\underline{x}$  ai suoi  $2d$  primi vicini.

Indicando con  $p_n(\underline{x})$  la temperatura di un generico sito  $\underline{x}$  al tempo  $n$ , la legge di evoluzione temporale è

$$p_{n+1}(\underline{x}) = \frac{1}{2d} \sum_{\substack{\underline{y} \in A \\ d(\underline{x}, \underline{y})=1}} p_n(\underline{y})$$

e può essere riscritta come

$$\partial_n p_n(\underline{x}) = \mathcal{L} p_n(\underline{x}) \quad \forall \underline{x} \in A, \quad (1.53)$$

in cui  $\mathcal{L}$  indica il laplaciano discreto, precedentemente definito nella (1.45) e si è posto

$$\partial_n p_n(\underline{x}) = p_{n+1}(\underline{x}) - p_n(\underline{x}).$$

La condizione iniziale sulla temperatura è

$$p_0(\underline{x}) = f(\underline{x}) \quad \forall \underline{x} \in A \quad (1.54)$$

e la condizione al contorno è data da

$$p_n(\underline{x}) = 0 \quad \forall \underline{x} \in \partial A. \quad (1.55)$$

Se  $\underline{x} \in A$ , la condizione iniziale è  $f(\underline{x}) = 1$  e  $f(\underline{z}) = 0$  per  $\underline{z} \neq \underline{x}$ , si ottiene

$$p_n(\underline{y}) = \mathbb{P}\{\underline{S}_{n \wedge T_A} = \underline{y} \mid \underline{S}_0 = \underline{x}\}. \quad (1.56)$$

Senza entrare nel dettaglio della dimostrazione di esistenza e unicità e della ricerca di una funzione  $p_n$  che soddisfi le (1.53)-(1.55), si può comunque vedere

che la relazione (1.56) mostri come l'equazione del calore, pur non presentando casualità in quanto del tutto deterministica, possa essere messa in relazione con un modello stocastico associato al concetto di random walk. In questo modo, si arricchisce il modello per la diffusione del calore, vedendolo anche dal punto di vista delle singole particelle e dei loro movimenti casuali. Si tornerà su questo punto, quando verranno introdotti i due modelli simulati, nel capitolo 3.



## 2 | Metastabilità: due modelli noti

Con gli strumenti matematici introdotti nel capitolo precedente, è ora possibile fare un secondo passo verso l’obiettivo di questo lavoro, che consiste nello studio del rilassamento all’equilibrio di un sistema termodinamico conservativo metastabile, dopo la formazione di una goccia supercritica della fase stabile.

Come viene illustrato in questo capitolo, presentando un modello non conservativo prima e uno conservativo successivamente, la metastabilità è un fenomeno che può interessare sistemi termodinamici vicini a una transizione di fase di primo ordine. Tipicamente questi sistemi permangono in uno stato di falso equilibrio, in cui le osservabili termodinamiche sono ben definite ma lo stato che si osserva non è quello di equilibrio, ma decadono nel tempo verso lo stato stabile.

Dopo aver dato una definizione di cosa si intenda per transizione fase e averne appurato l’esistenza per i due modelli, con l’introduzione di una dinamica di tipo stocastico si può quindi accertare l’esistenza di un comportamento metastabile. In questo scenario, si vede che la formazione di una goccia critica è una caratteristica comune per i sistemi metastabili, almeno per il corto range, e il processo che porta alla sua nucleazione è ben compreso da un punto di vista teorico e con risultati rigorosi in molti regimi.

Allo stato dell’arte però, come spiegato nella conclusione di questo capitolo, il rilassamento all’equilibrio del sistema in seguito alla nucleazione è ben compreso nel caso non conservativo, mentre non risulta chiaro neanche da un punto di vista euristico per il caso conservativo: da qui, l’esigenza di costruire i due modelli che saranno introdotti nel capitolo 3 e verranno successivamente applicati per lo studio numerico delle interazioni tra gas e goccia critica, nella fase successiva alla nucleazione di quest’ultima.

### 2.1 Caso non conservativo: modello di Ising

#### 2.1.1 Introduzione al modello

Si consideri un reticolo bidimensionale quadrato  $\Lambda_L \subset \mathbb{Z}^2$  di lato  $L$ , cardinalità  $|\Lambda_L|$  e centrato nell’origine. Ad ogni sito  $\underline{x} \in \Lambda_L$  si associa una variabile di spin  $\sigma(\underline{x})$  che possa assumere i valori  $\pm 1$ , di modo che una configurazione del sistema sia data da una delle  $2^{|\Lambda_L|}$  possibili realizzazioni  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_{\underline{x}_1}, \dots, \sigma_{\underline{x}_{|\Lambda_L|}})$  dell’insieme delle configurazioni  $\mathcal{X}_{\Lambda_L} = \{-1, +1\}^{|\Lambda_L|}$ .

L'interazione tra le variabili di spin di una data configurazione è descritta dall'hamiltoniana

$$H_{\Lambda_L}(\sigma) = -J \sum_{(\underline{x}, \underline{y}) \in \Lambda_L^*} \sigma(\underline{x})\sigma(\underline{y}) - h \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \sigma(\underline{x}) - \mathcal{B}_{\Lambda_L}(\sigma) \quad (2.1)$$

in cui  $\Lambda_L^*$  indica l'insieme delle coppie di primi vicini in  $\Lambda_L$ ,  $J > 0$  caratterizza l'interazione di coppia,  $h$  è il campo magnetico esterno e  $\mathcal{B}_{\Lambda_L}(\sigma)$  indica la condizione al contorno. Quest'ultima può essere relativamente arbitraria e dipende dal particolare problema fisico analizzato; nel caso in cui si abbia interesse nel limite  $\Lambda_L \rightarrow \infty$ , la condizione al contorno deve soddisfare

$$\lim_{\Lambda_L \rightarrow \infty} \frac{\max_{\sigma} |\mathcal{B}_{\Lambda_L}(\sigma)|}{|\Lambda_L|} = 0, \quad (2.2)$$

come quando  $\mathcal{B}_{\Lambda_L}(\sigma)$  è un termine di superficie.

Alcuni esempi di condizioni al contorno abbastanza noti sono:

- i) la condizione al contorno aperta, per la quale non si ha interazione tra gli spin interni al reticolo e quello che è al di fuori di esso e, matematicamente, è data da

$$\mathcal{B}_{\Lambda_L}(\sigma) \equiv 0;$$

- ii) la condizione al contorno periodica, secondo cui gli spin dei lati opposti del reticolo  $\Lambda_L$  possono interagire tra loro come fossero primi vicini;
- iii) la condizione al contorno di tipo  $(\epsilon)$ , definita come

$$\mathcal{B}_{\Lambda_L}(\sigma) = -J \sum_{\substack{\underline{x}_j \in \partial \Lambda_L}} \sigma_{\underline{x}_j} \varepsilon_{\xi_j},$$

in cui  $(\xi_1, \xi_2, \dots)$  sono i  $4|\Lambda_L|^{1/2}$  primi vicini esterni al contorno del reticolo,  $\varepsilon = (\varepsilon_{\xi_1}, \varepsilon_{\xi_2}, \dots)$  è il vettore di componenti  $\varepsilon_{\xi_i} = \pm 1$  che descrive le variabili di spin associate ai siti  $(\xi_1, \xi_2, \dots)$ .

Questa condizione al contorno consiste nel disporre la sequenza di spin, associata al vettore  $\varepsilon$ , sui primi vicini esterni al bordo del reticolo  $\Lambda_L$  e permettere l'interazione tra questi e i loro primi vicini interni a  $\Lambda_L$ .

Le due particolari condizioni al contorno in cui  $\varepsilon = (+1, +1, \dots, +1)$  e  $\varepsilon = (-1, -1, \dots, -1)$  sono dette, rispettivamente, di tipo  $(+)$  e  $(-)$ .

Le ben note leggi della meccanica statistica forniscono una relazione tra l'hamiltoniana del sistema (2.1) e le quantità macroscopiche termodinamiche del sistema. In particolare, l'energia libera per unità di volume è data da

$$f_{\Lambda_L}(\beta, h) = \frac{\beta^{-1}}{|\Lambda_L|} \log Z(\beta, h, \Lambda_L, \mathcal{B}), \quad (2.3)$$

in cui  $\beta = T^{-1}$  è la temperatura inversa e

$$Z(\beta, h, \Lambda_L, \mathcal{B}) = \sum_{\sigma \in \mathcal{X}_{\Lambda_L}} e^{-\beta H_{\Lambda_L}(\sigma)} \quad (2.4)$$

è la funzione di partizione grancanonica.

La probabilità di trovare il sistema in una particolare configurazione  $\sigma$  è data dalla misura grancanonica di Gibbs

$$\frac{e^{-\beta H_{\Lambda_L}(\sigma)}}{Z(\beta, h, \Lambda_L, \mathcal{B})} \quad \forall \sigma \in \mathcal{X}_{\Lambda_L}, \quad (2.5)$$

che fornisce quindi una descrizione statistica completa delle proprietà del sistema. Una descrizione alternativa, usata spesso in modo più conveniente e ugualmente completa, è fornita dalle funzioni di correlazione

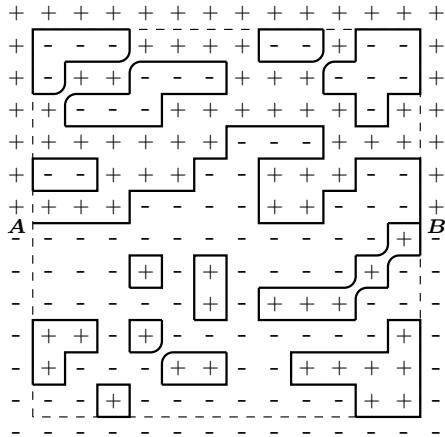
$$\langle \sigma_{\underline{x}_1} \dots \sigma_{\underline{x}_n} \rangle_{\Lambda_L, \mathcal{B}_{\Lambda_L}} = \frac{\sum_{\sigma} \sigma_{\underline{x}_1} \sigma_{\underline{x}_2} \dots \sigma_{\underline{x}_n} e^{-\beta H_{\Lambda_L}(\sigma)}}{\sum_{\sigma} e^{-\beta H_{\Lambda_L}(\sigma)}}.$$

Ad esempio, si definisce la magnetizzazione del sistema in termini di funzioni di correlazione e di energia libera come segue.

**Definizione 2.1.** Si definisce la magnetizzazione media del sistema come

$$m_{\Lambda_L}(\beta, h) = \frac{\sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \langle \sigma_{\underline{x}} \rangle_{\Lambda_L, \mathcal{B}_{\Lambda_L}}}{|\Lambda_L|} = \frac{\partial f_{\Lambda_L}(\beta, h)}{\partial h}.$$

### 2.1.2 Descrizione geometrica delle configurazioni



**Figura 2.1:** Esempio di descrizione geometrica di una configurazione, con condizione al contorno di tipo ( $\epsilon$ )

Con una procedura semplice e diretta, nota come argomento di Peierls, risulta ora possibile descrivere geometricamente l'energia associata a una configurazione di spin del sistema.

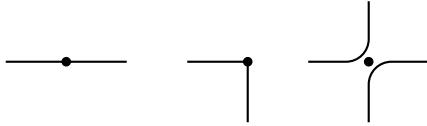
Fissata una configurazione  $\sigma$  sul reticolo  $\Lambda_L$ , il primo passo consiste nel disegnare un segmento unitario perpendicolare al centro di ogni legame ai cui estremi ci siano due spin opposti.

Come si può vedere dall'esempio nell'immagine in figura 2.1, l'insieme dei segmenti unitari così ottenuti può essere raggruppato in linee, che separano le regioni in cui lo spin è positivo da quelle in cui è negativo, tenendo presente che questa descrizione geometrica associata a una configurazione di spin può cambiare al variare della condizioni al contorno, che nell'esempio in figura sono di tipo ( $\epsilon$ ).

Di queste linee, alcune formano dei percorsi aperti, come nel caso di quella che congiunge i punti  $A$  e  $B$  nel reticolo in figura 2.1, mentre altre generano dei poligoni chiusi.

Più precisamente, queste ultime formano dei poligoni non in senso stretto, in quanto le linee possono intersecarsi. Le intersezioni, però, possono trovarsi

nei vertici dei poligoni ma non nei loro lati. Gli estremi dei segmenti unitari ottenuti con questa procedura, infatti, sono punti del reticolo  $\Lambda'_L$ , duale di  $\Lambda_L$  e traslato di  $a = (1/2, 1/2)$  rispetto a quest'ultimo, e possono trovarsi solo in uno



**Figura 2.2:** Esempio dei tre possibili incroci dei segmenti del reticolo duale  $\Lambda'_L$

dei tre possibili casi rappresentati nell'immagine in figura 2.2, in cui è mostrato anche come smussare gli angoli per evitare l'unico caso di intersezione.

Sebbene, come già specificato, la descrizione geometrica di una configurazione di spin possa cambiare al variare delle condizioni al contorno, è interessante notare che nel caso di condizioni al contorno di tipo (+), (-) e periodiche le linee formano solo poligoni chiusi, mentre nel caso di condizioni periodiche, queste linee possono avvolgersi intorno ai due buchi del toro.

Nel seguito, si indicherà con  $(\lambda_1, \dots, \lambda_k)$  l'insieme delle linee aperte e con  $(\gamma_1, \dots, \gamma_h)$  quello delle linee chiuse; con  $|\lambda|$  e con  $|\gamma|$  si indicheranno, invece, le lunghezze totali delle linee appartenenti, rispettivamente, al primo o al secondo insieme.

L'utilità di questa descrizione geometrica è data dal fatto che, se  $\mathcal{N}_{\Lambda_L}$  è il numero complessivo di legami, l'energia di una configurazione di spin in campo nullo può essere riscritta come

$$H_{\Lambda_L}(\sigma) = -J\mathcal{N}_{\Lambda_L} + 2J\left(\sum_i |\gamma_i| + \sum_j |\lambda_j|\right). \quad (2.6)$$

Ogni legame che contribuisce all'energia totale con un fattore  $-J$ , infatti, comporta due spin uguali; i legami che contribuiscono con un fattore  $+J$  hanno, invece, spin opposti e sono separati da una delle  $\gamma_i$  o delle  $\lambda_j$ .

La funzione di granpartizione, sempre in campo nullo e con condizione al contorno non periodica, si riscrive quindi come

$$Z_{\Lambda_L}(\beta) = \sum_{\gamma_1 \dots \gamma_h} \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_k} \left( e^{-2\beta J \sum_i |\gamma_i|} \cdot e^{-2\beta J \sum_j |\lambda_j|} \right) \cdot e^{\beta J \mathcal{N}_{\Lambda_L}}. \quad (2.7)$$

Nella (2.7), le sommatorie tengono in considerazione sia la configurazione degli spin, sia la scelta della condizione al contorno.

Considerando la corrispondenza due a uno tra la configurazione di spin e l'insieme delle linee chiuse, per le condizioni periodiche si ottiene

$$Z_{\Lambda_L}(\beta) = 2 \sum_{\gamma_1 \dots \gamma_h} e^{-2\beta J \sum_i |\gamma_i|} \cdot e^{\beta J \mathcal{N}_{\Lambda_L}}, \quad \text{con } \mathcal{N}_{\Lambda_L} = 2L^2.$$

Grazie a questa descrizione geometrica, si ottengono due risultati importanti:

- i) fissata la condizione al contorno, la probabilità di avere una configurazione  $\sigma$  si può dare in termini di  $(\lambda_1, \dots, \lambda_k)$  e  $(\gamma_1, \dots, \gamma_h)$  ed è proporzionale a

$$e^{-2\beta J (\sum_i |\gamma_i| + \sum_j |\lambda_j|)};$$

- ii) nel caso di condizione al contorno di tipo (+) o (-), ponendo  $\sum_i |\gamma_i| = l$  nella (2.7) e considerando che non si hanno linee aperte, si ricava

$$Z_{\Lambda_L}(\beta) = e^{[2L(L+1)\beta J]} \sum_{l \geq 0} P_l(\Lambda'_L) e^{-2\beta Jl}$$

in cui  $P_l(\Lambda'_L)$  è il numero di poligoni differenti appartenenti al reticolo duale  $\Lambda'_L$  e aventi perimetro totale  $l$ .

### 2.1.3 Transizione di fase del primo ordine nel modello di Ising

Facendo ricorso alla descrizione geometrica delle configurazioni di spin per il modello di Ising, è ora possibile verificare l'ipotesi dell'esistenza di una transizione di fase del primo ordine. Per questo, occorre prima dare una definizione di cosa si intenda per transizione di fase e, successivamente, verificarne l'esistenza.

#### Definizione di transizione di fase

**Definizione 2.2.** Si definisce stato di equilibrio, per un sistema infinito, una famiglia di funzioni di correlazione  $\{ \langle \sigma_{\underline{x}_1} \dots \sigma_{\underline{x}_n} \rangle \}$  per le quali, per una opportuna scelta di  $\mathcal{B}_{\Lambda_L}(\sigma)$ , si abbia

$$\langle \sigma_{\underline{x}_1} \dots \sigma_{\underline{x}_n} \rangle = \lim_{\Lambda_L \rightarrow \infty} \langle \sigma_{\underline{x}_1} \dots \sigma_{\underline{x}_n} \rangle_{\Lambda_L, \mathcal{B}_{\Lambda_L}} \quad (2.8)$$

simultaneamente per ogni  $n \geq 1$  e tutti i siti  $\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_n \in \mathbb{Z}^2$  e per una generica condizione al contorno che soddisfi la (2.2).

**Definizione 2.3.** Una transizione di fase ha luogo per determinati valori  $(\beta, h)$  dei parametri termodinamici, se il sistema è instabile rispetto alle perturbazioni delle condizioni al contorno, nel senso che esistono almeno due condizioni al contorno  $\mathcal{B}_{\Lambda_L}(\sigma)$  e  $\mathcal{B}'_{\Lambda_L}(\sigma)$  per le quali

$$\lim_{\Lambda_L \rightarrow \infty} \langle \sigma_{\underline{x}_1} \dots \sigma_{\underline{x}_n} \rangle_{\Lambda_L, \mathcal{B}_{\Lambda_L}(\sigma)} \neq \lim_{\Lambda_L \rightarrow \infty} \langle \sigma_{\underline{x}_1} \dots \sigma_{\underline{x}_n} \rangle_{\Lambda_L, \mathcal{B}'_{\Lambda_L}(\sigma)} \quad (2.9)$$

Se la condizione (2.9) è soddisfatta, si ha un'instabilità macroscopica del sistema. Un cambiamento nelle condizioni al contorno, per la definizione (2.4) di funzione di granpartizione, non cambia le proprietà estensive del sistema, ma ha invece effetto su quelli intensive, come le funzioni di correlazione. Pertanto, dal momento che

$$\lim_{\Lambda_L \rightarrow \infty} \langle \sigma_{\underline{x}_1} \rangle_{\Lambda_L, \mathcal{B}_{\Lambda_L}(\sigma)} \neq \lim_{\Lambda_L \rightarrow \infty} \langle \sigma_{\underline{x}_1} \rangle_{\Lambda_L, \mathcal{B}'_{\Lambda_L}(\sigma)}$$

si evince che la magnetizzazione locale cambia come conseguenza del cambiamento delle condizioni al contorno anche se il contorno è molto lontano.

#### Esistenza per il modello di Ising

È ora possibile verificare che, effettivamente, per il modello di Ising in 2 dimensioni c'è una transizione di fase del primo ordine. Per appurarla, si ricorre

alla descrizione geometrica delle configurazioni di spin e si mostra che la presenza di una transizione di fase è garantita dal fatto che per  $h = 0$  e  $\beta$  sufficientemente grande

$$\lim_{\Lambda_L \rightarrow \infty} \langle \sigma_{\underline{x}} \rangle_{\Lambda_L, \pm} = \pm m^*(\beta) \neq 0 \quad (2.10)$$

in cui  $\pm$  fa riferimento al tipo di condizione al contorno e  $m$  è la magnetizzazione vista nella definizione 2.1.

La (2.10) implica che la magnetizzazione locale, per  $h = 0$  e  $\beta$  sufficientemente grande, è instabile rispetto alle perturbazioni al contorno.

Considerando la condizione al contorno periodica, si ottiene un ulteriore risultato, differente dalla (2.10) e dato da

$$\lim_{\Lambda_L \rightarrow \infty} \langle \sigma_{\underline{x}} \rangle_{\Lambda_L, \text{Periodica}} = 0,$$

in quanto  $\langle \sigma_{\underline{x}} \rangle_{\Lambda_L, \text{Periodica}} = 0$  se  $h = 0$ , per ragioni di simmetria.

Per dimostrare la relazione (2.10), si ponga

$$\langle \sigma_{\underline{x}} \rangle_{\Lambda_L, +} = 1 - 2P_{\Lambda_L, +}(-), \quad (2.11)$$

in cui  $P_{\Lambda_L, +}(-)$  è la probabilità di avere spin negativo nel sito  $\underline{x}$ . Se il sito è occupato da uno spin negativo, si trova all'interno di un contorno  $\gamma$  associato alla configurazione  $\sigma$ , quindi si può riscrivere

$$P_{\Lambda_L, +}(-) \leq \sum_{\gamma \ni \underline{x}} \rho(\gamma), \quad (2.12)$$

in cui  $\rho(\gamma)$  è la probabilità che il generico contorno  $\gamma$  appartenga all'insieme di linee associate alla configurazione di spin e  $\gamma \ni \underline{x}$  indica che la somma è fatta su tutti i contorni chiusi che contengono  $\underline{x}$  al loro interno.

Ricordando che, fissata una condizione al contorno di tipo (+) o (-), la probabilità associata a una configurazione  $\sigma$  è proporzionale a

$$e^{-2\beta J \sum_i |\gamma_i|},$$

per  $\rho(\gamma)$  si ha

$$\rho(\gamma) = \frac{\sum_{\substack{\Gamma \in G_{\Lambda_L} \\ \Gamma \ni \gamma}} e^{-2\beta J \sum_{\gamma' \in \Gamma} |\gamma'|}}{\sum_{\Gamma \in G_{\Lambda_L}} e^{-2\beta J \sum_{\gamma' \in \Gamma} |\gamma'|}}, \quad (2.13)$$

in cui  $\Gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_n)$  e  $G_{\Lambda_L}$  indica l'insieme delle configurazioni  $\Gamma$  di contorni chiusi autoevitanti in  $\Lambda_L$ .

Dalla relazione (2.13), si ottiene

$$\rho(\gamma) = e^{-2\beta J |\gamma|} \frac{\sum_{\substack{\Gamma \in G_{\Lambda_L} \\ \Gamma \text{ comp } \gamma}} e^{-2\beta J \sum_{\gamma' \in \Gamma} |\gamma'|}}{\sum_{\Gamma \in G_{\Lambda_L}} e^{-2\beta J \sum_{\gamma' \in \Gamma} |\gamma'|}} \leq e^{-2\beta J |\gamma|}, \quad (2.14)$$

in cui la somma  $\sum_{\substack{\Gamma \in G_{\Lambda_L} \\ \Gamma \text{ comp } \gamma}} \dots$  è estesa a tutte le configurazioni di contorni  $\Gamma$ , che non contengono  $\gamma$  ma tali che i  $\gamma'$  siano compatibili con la presenza di  $\gamma$  e quindi non intersechino la linea geometrica corrispondente.

In 2 dimensioni, esistono al massimo  $3^p$  differenti linee  $\gamma$  con perimetro  $p$  e, tra queste, ci sono al massimo  $p^2$  differenti  $\gamma$  congruenti contenenti al loro interno  $\underline{x}$ . Quindi, considerando la (2.12) e la (2.14), si ottiene

$$P_{\Lambda_L,+}(-) \leq \sum_{p=4}^{\infty} p^2 3^p e^{-2\beta J p} = \varepsilon(\beta) \quad (2.15)$$

Per  $\beta \rightarrow \infty$  la quantità  $\varepsilon(\beta)$  definita in (2.15) diventa piccola a piacere. Conseguentemente, per via della relazione (2.11), la quantità  $\langle \sigma_{\underline{x}} \rangle$  è sempre più prossima a 1, indipendentemente dal particolare  $\underline{x}$  in  $\Lambda_L$ .

Un ragionamento analogo mostra che, per la condizione al contorno di tipo  $(-)$ , si ha  $\langle \sigma_{\underline{x}} \rangle_{\Lambda_L,-} = -\langle \sigma_{\underline{x}} \rangle_{\Lambda_L,+}$ .

Risulta in questo modo provata il fatto che ci sia una forte instabilità rispetto alle condizioni al contorno: basta rompere la simmetria al bordo per provocare una rottura all'interno del volume, anche nel limite termodinamico.

L'hamiltoniana del modello di Ising è simmetrica rispetto all'inversione dello spin, se si trascurano le condizioni al contorno. Si può vedere questo fenomeno appena descritto come una rottura della simmetria: la transizione di fase si manifesta nel fatto che ci sono stati di equilibrio in cui la simmetria è violata rispetto a cambiamenti delle condizioni al contorno, anche nel limite termodinamico.

#### 2.1.4 Comportamento metastabile del modello di Ising

Dimostrata la presenza di una transizione di fase del primo ordine per il modello di Ising in 2 dimensioni, è ora lecito chiedersi se ci si possa aspettare un comportamento metastabile in prossimità di questa transizione di fase.

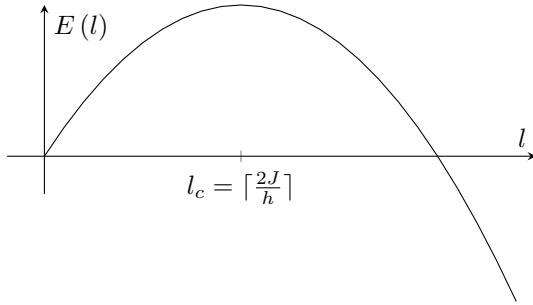
In questo lavoro si affronta la metastabilità come un problema legato alla dinamica del sistema, però, se quest'ultima comporta pochi spin flip ad ogni iterazione, è possibile far riferimento al panorama energetico della formazione di un cluster quadrato, per capire qualitativamente se ci si può aspettare un comportamento metastabile, e ovviamente la forma di riferimento è quella quadrata poiché rappresenta la configurazione di la minima energia a parità di superficie.

Sia, quindi,  $\sigma_{l \times l}$  la configurazione in cui gli spin positivi formano un quadrato di lato  $l \in \mathbb{N}$  in un mare di spin negativi. In virtù dell'hamiltoniana (2.1), l'energia associata a questa configurazione è

$$\begin{aligned} E(l) &= H(\sigma_{l \times l}) - H(\ominus) \\ &= 4Jl - hl^2. \end{aligned} \quad (2.16)$$

La funzione  $E(l)$  ha l'andamento mostrato in figura 2.3, con un massimo per  $l = 2J/h$ . Un campo magnetico piccolo, pur determinando la fase, ha effetti rilevanti solo per scale spaziali maggiori della taglia critica  $l_c$ , data dalla parte intera superiore del massimo dell'energia

$$l_c = \left\lceil \frac{2J}{h} \right\rceil. \quad (2.17)$$



**Figura 2.3:** Andamento dell'energia in funzione del lato  $l$  per una goccia  $l \times l$  nel modello di Ising. Nel grafico è visibile il massimo in corrispondenza del lato critico  $l_c = \lceil \frac{2J}{h} \rceil$ .

Solo per scale spaziali maggiori della taglia critica, infatti, l'energia di volume della goccia supera quella di superficie e un cluster di dimensioni maggiori risulta energeticamente vantaggioso, rispetto ad uno di dimensioni minori. Queste argomentazioni qualitative sono state sviluppate in modo rigoroso, ma, per illustrarle, è necessario introdurre una dinamica per il modello.

### Dinamica di Glauber-Metropolis

Per poter descrivere l'evoluzione di uno stato metastabile, concentrando l'attenzione sul suo decadimento verso l'equilibrio dopo la nucleazione della fase stabile, si definisce una dinamica tramite una catena di Markov sullo spazio delle configurazioni  $\mathcal{X}_{\Lambda_L} = \{-1, +1\}^{|\Lambda_L|}$ , tale da avere la misura di Gibbs (2.5) come misura invariante, corrispondente allo stato stabile.

Indicando con  $(\sigma_t)_{t \in \mathbb{N}_0}$  la catena di Markov a tempi discreti, per la sua dinamica si sceglie l'algoritmo di Glauber-Metropolis:

- i) la configurazione  $\sigma$  può avere transizioni solo verso configurazioni  $\sigma^x$  con  $\underline{x} \in \Lambda_L$  per le quali

$$\sigma^x(y) = \begin{cases} \sigma(y), & \text{se } x \neq y, \\ -\sigma(y), & \text{se } \underline{x} = y; \end{cases} \quad (2.18)$$

- ii) la transizione  $\sigma \rightarrow \sigma'$  avviene con probabilità data da

$$\mathbb{P}(\sigma, \sigma') = \begin{cases} \frac{1}{|\Lambda_L|} e^{-\beta[H(\sigma^x) - H(\sigma)]_+}, & \text{se } \sigma' = \sigma^x \text{ per } x \in \Lambda_L, \\ 1 - \sum_{x \in \Lambda_L} \frac{1}{|\Lambda_L|} e^{-\beta[H(\sigma^x) - H(\sigma)]_+}, & \text{se } \sigma' = \sigma, \\ 0, & \text{altrimenti,} \end{cases} \quad (2.19)$$

in cui  $[a]_+ := a \vee 0$  è la parte positiva del numero reale  $a$ .

La dinamica così introdotta non è conservativa, perché la magnetizzazione totale del sistema non è una quantità conservata.

La misura di Gibbs definita in (2.5) soddisfa la condizione di reversibilità vista nel paragrafo 1.2.5

$$\mu(\sigma)\mathbb{P}(\sigma, \sigma') = \mu(\sigma')\mathbb{P}(\sigma', \sigma) \quad (2.20)$$

ed è quindi la misura invariante per la catena di Markov appena definita. Questa catena è anche irriducibile e aperiodica, quindi per ogni configurazione iniziale  $\sigma_0$  e per ogni  $\sigma$  in  $\mathcal{X}_{\Lambda_L}$  si ha

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P}^t(\sigma_0, \sigma) = \mu(\sigma). \quad (2.21)$$

Da un punto di vista matematico, la metastabilità si presenta quando la catena di Markov è tale che la sua convergenza all'equilibrio avvenga con un meccanismo di grande deviazione. Questa proprietà implica, infatti, l'esistenza di una misura iniziale che è quasi invariante per tempi lunghi.

### Regime metastabile

Introdotta la dinamica di Glauber-Metropolis per il sistema di Ising in 2 dimensioni, si consideri il regime metastabile a volume finito definito come

$$\Lambda_L \text{ grande ma finito e indipendente da } \beta, \quad (2.22a)$$

$$h \in (0, 2J), \quad (2.22b)$$

$$\beta \rightarrow \infty \quad (2.22c)$$

In questo regime metastabile, per il quale la taglia critica  $l_c$  definita in (2.17) è maggiore di 1, si considerino le due configurazioni definite come

$$\oplus : \quad \sigma(\underline{x}) = +1 \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L \quad (2.23)$$

$$\ominus : \quad \sigma(\underline{x}) = -1 \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L \quad (2.24)$$

Nel regime definito con le (2.22) la misura di Gibbs sarà concentrata intorno alla configurazione  $\oplus$ , che è l'unico stato di minima energia. La configurazione  $\ominus$  è invece un minimo locale per l'energia e rappresenta lo stato metastabile.

Come anticipato, le argomentazioni euristiche viste all'inizio del paragrafo 2.1.4 sono state sviluppate in modo rigoroso da Neves e Schonmann. Prima di vedere i risultati dei loro lavori, si devono definire due quantità che risulteranno utili.

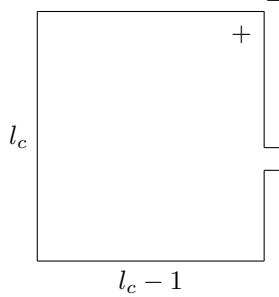
**Definizione 2.4.** Si definisce il primo hitting time dell'insieme  $A \in \mathcal{X}_{\Lambda_L}$  come

$$\tau_A = \min \{ t \in \mathbb{N}_0 : \sigma_t \in A \} \quad (2.25)$$

**Definizione 2.5.** Si definisce il tempo dell'ultima visita ad  $\eta$  prima di visitare  $\eta'$  come

$$\tau_{\eta, \eta'} = \max \{ t < \tau_{\eta'} : \eta_t = \eta \} \quad (2.26)$$

È ora possibile discutere il principale risultato per il regime metastabile a volume finito del modello di Ising con una dinamica di tipo Glauber-Metropolis, dato dal seguente teorema.



**Figura 2.4:** Esempio di cluster quasi rettangolare di spin positivi, in un mare di spin negativi. La regione di spin positivi ha dimensione  $l_c \times (l_c - 1)$  e una protuberanza sul lato più lungo.

**Teorema 2.1** (Neves - Schonmann). *Sia  $\Lambda_L$  un reticolo sufficientemente grande, con  $h \in (0, 2J)$  e  $l_c = \lceil \frac{2J}{h} \rceil$ .*

- i) *Sia  $\mathcal{R}$  un insieme di configurazioni per le quali gli spin positivi formino un rettangolo immerso in un mare di spin negativi. Data una configurazione  $\sigma \in \mathcal{R}$ , si indichi con  $l_1(\sigma) \times l_2(\sigma)$  il rettangolo di spin positivi e sia  $l(\sigma) = \min \{ l_1(\sigma), l_2(\sigma) \}$ . Allora, per ogni  $\sigma \in \mathcal{R}$  si ha*

$$l(\sigma) < l_c: \quad \lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathbb{P} \{ \tau_\ominus < \tau_\oplus \} = 1, \quad (2.27a)$$

$$l(\sigma) \geq l_c: \quad \lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathbb{P} \{ \tau_\oplus < \tau_\ominus \} = 1. \quad (2.27b)$$

- ii) *Sia  $\mathcal{C}_r$  l'insieme delle configurazioni contenenti un cluster del tipo di quello nell'immagine in figura 2.4, in cui gli spin positivi formano una regione quasi rettangolare di dimensioni  $l_c \times (l_c - 1)$  o  $(l_c - 1) \times l_c$ , con una protuberanza sul lato di lunghezza  $l_c$ , e sia  $\bar{\tau}_{\mathcal{C}_r} = \min \{ t > \tau_{\ominus, \oplus} : \sigma_t \in \mathcal{C}_r \}$ . Allora*

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathbb{P}_\oplus \{ \bar{\tau}_{\mathcal{C}_r} < \tau_\oplus \} = 1. \quad (2.28)$$

- iii) *Sia  $\Gamma(J, h) = 4Jl_c - h(l_c^2 - l_c + 1)$  l'energia associata, di nuovo, a un cluster del tipo di quello mostrato nell'immagine in figura 2.4. Allora*

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \log \mathbb{E}_\oplus [\tau_\oplus] = \Gamma(J, h). \quad (2.29)$$

*La distribuzione della quantità  $\tau_\oplus / \mathbb{E}_\oplus [\tau_\oplus]$ , inoltre, converge a una variabile casuale esponenziale con valore aspettato 1.*

Le due relazioni (2.27) rielaborano, in termini rigorosi, quanto anticipato nel paragrafo 2.1.4 relativamente alla crescita di cluster quadrati della fase stabile, in un mare di spin negativi: se il lato minore di un cluster rettangolare è maggiore della taglia critica  $l_c$ , la probabilità che l'hitting time  $\tau_\oplus$  della fase stabile sia minore di quello della fase metastabile  $\tau_\ominus$  tende ad 1 per  $\beta$  che va ad infinito; viceversa, se tale lato è minore della taglia critica, al tendere di  $\beta$  all'infinito sarà unitaria la probabilità che  $\tau_\ominus$  sia minore di  $\tau_\oplus$ . La fase stabile sarà

probabilisticamente favorita o sfavorita rispetto a quella metastabile, quindi, a seconda del rapporto tra lato minore del cluster  $l(\sigma)$  e taglia critica  $l_c$ .

La relazione (2.28) mostra come, per  $\beta \rightarrow \infty$ , diventi unitaria la probabilità che  $\bar{\tau}_{Cr}$  sia minore di  $\tau_{\oplus}$ . Come definito nel secondo punto del teorema 2.1,  $\bar{\tau}_{Cr}$  è il minimo dei tempi che cadono nell'intervallo temporale tra l'ultima visita a  $\ominus$  e la prima a  $\oplus$ . Il fatto che questa quantità, nel limite in cui  $\beta$  va ad infinito, sia minore di  $\tau_{\oplus}$  con probabilità 1 implica che la catena di Markov visiti una configurazione dell'insieme  $Cr$ , analoga a quella mostrata in figura 2.4, prima della formazione di cluster quadrati supercritici.

Per concludere, il modello di Ising con dinamica di Glauber-Metropolis, una volta superata la configurazione quasi rettangolare, impiega un tempo dell'ordine di  $e^{\beta(2J-h)}$  per raggiungere la fase stabile, data dalla configurazione  $\oplus$ .

## 2.2 Caso conservativo: lattice gas

Con l'ipotesi di conservatività sul modello, si introducono ulteriori aspetti che aumentano il livello di difficoltà rispetto al caso non conservativo. Nel seguito del capitolo, viene analizzato il caso del modello lattice gas su un reticolo bidimensionale, di cui si studierà il comportamento metastabile arrivando a ottenere un analogo del teorema 2.1 per una versione semplificata del modello. Dopo aver indicato le caratteristiche simili e le differenze che il processo di nucleazione per questo modello presenta rispetto alla nucleazione del modello di Ising con dinamica di Glauber, il capitolo si conclude affrontando le problematiche che rendono difficile lo studio della crescita supercritica nel caso conservativo.

### 2.2.1 Introduzione al modello

Si consideri un reticolo quadrato finito  $\Lambda_\beta \subset \mathbb{Z}$ , centrato nell'origine e con condizioni periodiche al bordo, e si associa a ogni sito  $\underline{x} \in \Lambda$  una variabile di occupazione  $\eta(\underline{x})$ , che assume i valori 0 o 1 a seconda che il sito sia libero od occupato da una particella.

L'energia associata a una generica configurazione  $\boldsymbol{\eta}$  dello spazio delle configurazioni  $\mathcal{X}_{\Lambda_\beta} = \{0, 1\}^{|\Lambda_\beta|}$  è data da

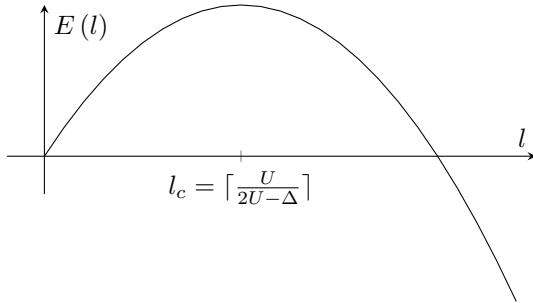
$$H(\boldsymbol{\eta}) = -U \sum_{(\underline{x}, \underline{y}) \in \Lambda^*} \eta(\underline{x}) \eta(\underline{y}), \quad (2.30)$$

in cui  $U > 0$  è l'energia di legame e la somma è ristretta alle coppie di primi vicini.

Si fissi, ora, una densità in  $\Lambda_\beta$

$$\rho := \frac{n}{|\Lambda_\beta|}, \quad (2.31)$$

in cui  $n = \sum_{x \in \Lambda} \eta(x)$ .



**Figura 2.5:** Andamento dell'energia in funzione del lato  $l$  per una goccia  $l \times l$  nel modello a lattice gas. Nel grafico è visibile il massimo in corrispondenza del lato critico  $l_c = \lceil \frac{U}{2U-\Delta} \rceil$ .

### 2.2.2 Comportamento metastabile del modello

La densità corrispondente al regime metastabile per questo modello è data da  $\rho = e^{-\Delta\beta}$ , con  $\Delta \in (U, 2U)$ . Per verificarlo, si consideri la misura di Gibbs grancanonica associata al modello

$$\mu_\lambda(\boldsymbol{\eta}) = \frac{e^{-\beta H_\lambda(\boldsymbol{\eta})}}{Z_\lambda}. \quad (2.32)$$

in cui  $H_\lambda(\boldsymbol{\eta}) = H(\boldsymbol{\eta}) - \lambda n$ ,  $\lambda \in \mathbb{R}$  è un parametro di attività e  $Z$  è la funzione di granpartizione. Si può dimostrare che l'ensemble canonico e grancanonico, sono equivalenti per la descrizione del comportamento metastabile nel limite termodinamico, se  $\rho$  e  $\lambda$  sono legati dalla relazione  $\rho = e^{\lambda\beta}$ .

Sostituendo nell'hamiltoniana grancanonica l'espressione di  $\eta$  in termini della variabile di spin  $\sigma$

$$\eta(\underline{x}) = \frac{1 + \sigma(\underline{x})}{2}, \quad (2.33)$$

si ottiene

$$\begin{aligned} H_\lambda(\sigma) &= -U \sum_{(\underline{x}, \underline{y}) \in \Lambda_\beta^*} \frac{1 + \sigma(\underline{x})}{2} \frac{1 + \sigma(\underline{y})}{2} - \lambda \sum_{\underline{x} \in \Lambda_\beta} \frac{1 + \sigma(\underline{x})}{2} \\ &= \frac{U}{4} \sum_{(\underline{x}, \underline{y}) \in \Lambda_\beta^*} \sigma(\underline{x})\sigma(\underline{y}) - \frac{2U + \lambda}{2} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_\beta} \sigma(\underline{x}) + \text{cost.} \end{aligned} \quad (2.34)$$

Se  $\lambda = -\Delta$ , la (2.34) corrisponde alla hamiltoniana del modello di Ising (2.1) con l'interazione di coppia data da  $J = \frac{U}{2}$  e il campo da  $h = 2U - \Delta$ . La scelta di  $\Delta \in (U, 2U)$  nel regime metastabile di Kawasaki corrisponde quindi a  $h \in (0, 2J)$  nel regime metastabile per modello di Ising. Cambiando il valore di questo parametro, si ottiene un gas instabile se  $\Delta \in (0, U)$ , il punto spinodale per  $\Delta = U$ , il punto di condensazione per  $\Delta = 2U$  e il gas stabile per  $\Delta \in (2U, \infty)$ . Sempre in analogia con il modello di Ising, ci si aspetta ora una lunghezza critica  $l_c = \lceil \frac{U}{2U-\Delta} \rceil$  e la scelta sul parametro  $\Delta$  comporta un lato critico non banale  $l_c \in (1, \infty)$ , come si vede nel grafico in figura 2.5.

A differenza del caso non conservativo, per avere almeno una particella si devono prendere in considerazione volumi esponenzialmente grandi. Più specificamente, per questo modello conservativo si sceglie il regime metastabile di

Kawasaki dato da

$$\begin{aligned}\Lambda &= \Lambda_\beta, \quad \text{con } |\Lambda_\beta| = e^{\Theta\beta}, \\ \Delta &\in (U, 2U), \\ \beta &\rightarrow \infty, \\ n &= \rho |\Lambda_\beta| = e^{(\Theta-\Delta)\beta} \rightarrow \infty.\end{aligned}\tag{2.35}$$

### Dinamica di Kawasaki

Per analizzare il comportamento metastabile da un punto di vista dinamico, si introduce una dinamica stocastica in termini di una catena di Markov a tempi continui  $(\boldsymbol{\eta}_t)_{t \geq 0}$ , data dal generatore

$$(\mathcal{L}f)(\boldsymbol{\eta}) = \sum_{(\underline{x}, \underline{y}) \in \Lambda_\beta^*} c((\underline{x}, \underline{y}), \boldsymbol{\eta}) [f(\boldsymbol{\eta}^{(\underline{x}, \underline{y})}) - f(\boldsymbol{\eta})]\tag{2.36}$$

in cui

$$\boldsymbol{\eta}^{(\underline{x}, \underline{y})}(\underline{z}) = \begin{cases} \eta(\underline{z}) & \text{se } z \neq x, y, \\ \eta(\underline{x}) & \text{se } z = y, \\ \eta(\underline{y}) & \text{se } z = x, \end{cases}\tag{2.37}$$

e

$$c((\underline{x}, \underline{y}), \boldsymbol{\eta}) = e^{-\beta[H(\boldsymbol{\eta}^{(\underline{x}, \underline{y})}) - H(\boldsymbol{\eta})]_+}.\tag{2.38}$$

Considerando che il passaggio al tempo continuo è sempre legato alla necessità di lavorare con volumi esponenziali, si vede facilmente che la dinamica appena definita è reversibile e la catena di Markov  $(\boldsymbol{\eta}_t)_{t \geq 0}$  può essere rappresentata, immaginando di associare ad ogni legame  $b = (\underline{x}, \underline{y}) \in \Lambda_\beta^*$  una sequenza  $\tau_{b,i}$ , con  $i \in \mathbb{N}$ , di tempi casuali che partono da  $\tau_{b,0} = 0$  e i cui incrementi siano indipendenti e identicamente distribuiti esponenzialmente, con media 1. Dal momento che  $|\Lambda_\beta| < \infty$ , si ha

$$\mathbb{P}(\exists b, b', i, i' : \tau_{b,i} = \tau_{b',i'}) = 0.\tag{2.39}$$

Se  $t = \tau_{b,i}$ , si definisce

$$\boldsymbol{\eta}_t = \begin{cases} \boldsymbol{\eta}_{t^-} & \text{con probabilità } 1 - e^{-\beta[H(\boldsymbol{\eta}_{t^-}^b) - H(\boldsymbol{\eta}_{t^-})]_+}, \\ \boldsymbol{\eta}_{t^-}^b & \text{con probabilità } e^{-\beta[H(\boldsymbol{\eta}_{t^-}^b) - H(\boldsymbol{\eta}_{t^-})]_+}. \end{cases}\tag{2.40}$$

### Descrizione locale

Per quanto riguarda il comportamento metastabile da un punto di vista dinamico, si può iniziare ad analizzare cosa accade localmente. Supponiamo quindi di avere una scatola finita  $\bar{\Lambda}$ , centrata nell'origine e contenente al suo interno un cluster quadrato  $l \times l$  di particelle. Si supponga anche che l'effetto del gas in  $\Lambda_\beta \setminus \bar{\Lambda}$  sulla scatola finita  $\bar{\Lambda}$  possa riassumersi nella creazione di nuove particelle nei siti sul bordo interno di  $\bar{\Lambda}$  con probabilità  $e^{-\Delta\beta}$  e l'annichilimento con probabilità 1 nei siti sul bordo esterno. In altre parole, la dinamica di Kawasaki all'interno di  $\bar{\Lambda}$  si descrive in termini dell'algoritmo di Metropolis, con energia data dall'hamiltoniana locale grancanonica

$$\bar{H}(\boldsymbol{\eta}) = H(\boldsymbol{\eta}) + \Delta N_{\bar{\Lambda}}(\boldsymbol{\eta})\tag{2.41}$$

In termini energetici, per aggiungere e per rimuovere una colonna o una riga si hanno, rispettivamente, i contributi

$$\begin{aligned} 2\Delta - U &\quad \text{per aggiungere} \\ (2U - \Delta)(l - 2) + 2U &\quad \text{per rimuovere.} \end{aligned}$$

e il loro bilancio fornisce nuovamente il lato critico  $l_c$ .

### Un modello semplificato

Le precedenti argomentazioni euristiche si basano sull'assunzione che la dinamica interna a  $\bar{\Lambda}$  si possa descrivere effettivamente in termini dell'hamiltoniana locale grancanonica (2.41). A differenza del caso non conservativo, ora le particelle devono arrivare e tornare al gas, che agisce quindi come un reservoir, e non si può quindi disaccoppiare completamente la dinamica in  $\bar{\Lambda}$  da quella in  $\Lambda_\beta \setminus \bar{\Lambda}$ . Un ulteriore aspetto problematico è legato a capire il meccanismo con cui il gas in  $\Lambda_\beta \setminus \bar{\Lambda}$  rimanga all'equilibrio per tempi lunghi, durante i quali si suppone che i due sistemi abbiano scambiato un numero elevato di particelle. Per questi motivi, risulta opportuno avere un certo controllo sul gas, al fine di verificare che la precedente assunzione sia effettivamente accettabile.

Come fatto per esempio in [7], si può risolvere il problema per un sistema semplificato, in cui viene rimossa l'interazione esterna a  $\bar{\Lambda}_0 = \bar{\Lambda} \setminus \partial^-\bar{\Lambda}$ , dove  $\partial^-\bar{\Lambda}$  indica la frontiera interna di  $\bar{\Lambda}$ , e quindi l'interazione è data da

$$H(\boldsymbol{\eta}) = -U \sum_{(\underline{x}, \underline{y}) \in \bar{\Lambda}_0^*} \eta(\underline{x})\eta(\underline{y}). \quad (2.42)$$

Visto l'interesse per densità  $\rho = e^{-\Delta\beta}$  molto piccole, la condizione di rarefazione permette di semplificare la dinamica del gas all'esterno di  $\bar{\Lambda}$  in quella di un insieme di random walk indipendenti, in accordo con l'approssimazione per un gas rarefatto con dinamica di Kawasaki bidimensionale ottenuta nel lavoro [10]. Lo spazio degli stati è dato da

$$\mathcal{N}_N = \{ \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{X}: N_{\Lambda_\beta}(\boldsymbol{\eta}) = N \}, \quad (2.43)$$

in cui  $\mathcal{X} = \{0, 1\}^{\bar{\Lambda}} \times \mathbb{N}_0^{\Lambda_\beta \setminus \bar{\Lambda}}$ ,  $N_{\Lambda_\beta}(\boldsymbol{\eta}) = \sum_{\underline{x} \in \Lambda_\beta} \eta(\underline{x})$  e  $N = \rho|\Lambda_\beta|$ . Per l'hamiltoniana grancanonica locale si ha

$$\bar{H}(\boldsymbol{\eta}) = H(\boldsymbol{\eta}) + \Delta N_{\bar{\Lambda}}(\boldsymbol{\eta}) \quad (2.44)$$

in cui  $H$  è data dalla (2.42).

Per poter arrivare all'analogo del teorema 2.1 nel caso conservativo, è necessario definire le due configurazioni

$$\blacksquare = \{ \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{X}: \eta(\underline{x}) = 1 \quad \forall \underline{x} \in \bar{\Lambda}_0 \}, \quad (2.45)$$

$$\square = \{ \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{X}: \eta(\underline{x}) = 0 \quad \forall \underline{x} \in \bar{\Lambda} \}. \quad (2.46)$$

Inoltre, per  $\bar{\boldsymbol{\eta}} \in \mathcal{X} = \{0, 1\}^{\bar{\Lambda}}$ , si indichi la misura canonica di Gibbs condizionata ad avere la configurazione  $\bar{\boldsymbol{\eta}}$  in  $\bar{\Lambda}$  come

$$\nu_{\bar{\boldsymbol{\eta}}}(\boldsymbol{\eta}) = \frac{\nu(\boldsymbol{\eta}) \mathbb{1}_{I_{\bar{\boldsymbol{\eta}}}}(\boldsymbol{\eta})}{\nu(I_{\bar{\boldsymbol{\eta}}})} \quad (\boldsymbol{\eta} \in \mathcal{X}), \quad (2.47)$$

in cui  $I_{\bar{\eta}} = \{ \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{X} : \boldsymbol{\eta}|_{\bar{\Lambda}} = \bar{\boldsymbol{\eta}} \}$ ,  $\boldsymbol{\eta}|_{\bar{\Lambda}}$  è la restrizione di  $\boldsymbol{\eta}$  a  $\bar{\Lambda}$  e  $\nu$  è la misura canonica di Gibbs

$$\nu_N(\boldsymbol{\eta}) = \frac{e^{-\beta H(\boldsymbol{\eta})} \mathbb{1}_{\mathcal{N}_N}(\boldsymbol{\eta})}{Z_N}, \quad \text{con } Z_N = \sum_{\boldsymbol{\eta} \in \mathcal{N}_N} e^{-\beta H(\boldsymbol{\eta})}. \quad (2.48)$$

Per  $\bar{\boldsymbol{\eta}} \in \bar{\mathcal{X}} = \{ 0, 1 \}^{\bar{\Lambda}}$ , si indichi con  $\mathbb{P}_{\nu_{\bar{\boldsymbol{\eta}}}}$  la legge di probabilità e con  $\mathbb{E}_{\nu_{\bar{\boldsymbol{\eta}}}}$  il valore di aspettazione per il processo di Markov  $(\bar{\boldsymbol{\eta}}_t)_{t \geq 0}$  su  $\mathcal{X}$  con dinamica di Kawasaki e hamiltoniana (2.42).

Sia, infine,  $\square$  la configurazione vuota in  $\bar{\Lambda}$  e si indichi il primo hitting time dell'insieme  $\mathcal{A} \subset \mathcal{X}$  con  $\tau_{\mathcal{A}} = \min \{ t \geq 0 : \boldsymbol{\eta}_t \in \mathcal{A} \}$ .

Il teorema che segue è l'equivalente di quello di Neves e Schonmann per il caso conservativo appena illustrato.

**Teorema 2.2.** *Si fissi  $\Delta \in (\frac{3}{2}U, 2U)$ , con  $U/(2U - \Delta)$  non intero, si ponga  $l_c = \lceil U/(2U - \Delta) \rceil$  e si consideri il caso in cui  $\lim_{\beta \rightarrow \infty} (1/\beta) \log |\Lambda_\beta| = \infty$ .*

i) *Sia  $\bar{\mathcal{R}} \subset \bar{\mathcal{X}}$  l'insieme delle configurazioni in  $\bar{\Lambda}$  per le quali le particelle formano un quadrato o un quasi-quadrato contenuto in  $\bar{\Lambda}_0$ . Per  $\bar{\boldsymbol{\eta}} \in \bar{\mathcal{R}}$ , sia  $l_1(\bar{\boldsymbol{\eta}}) \times l_2(\bar{\boldsymbol{\eta}})$ , con  $|l_1(\bar{\boldsymbol{\eta}}) - l_2(\bar{\boldsymbol{\eta}})| \leq 1$ , il quadrato o quasi-quadrato di particelle della configurazione  $\bar{\boldsymbol{\eta}}$  e sia  $l(\bar{\boldsymbol{\eta}}) = \min \{ l_1(\bar{\boldsymbol{\eta}}), l_2(\bar{\boldsymbol{\eta}}) \}$ . Allora, per ogni  $\bar{\boldsymbol{\eta}} \in \bar{\mathcal{R}}$ ,*

$$\begin{aligned} l(\bar{\boldsymbol{\eta}}) < l_c : \quad & \lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathbb{P}_{\nu_{\bar{\boldsymbol{\eta}}}}(\tau_{\square} < \tau_{\blacksquare}) = 1, \\ l(\bar{\boldsymbol{\eta}}) \geq l_c : \quad & \lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathbb{P}_{\nu_{\bar{\boldsymbol{\eta}}}}(\tau_{\blacksquare} < \tau_{\square}) = 1. \end{aligned} \quad (2.49)$$

ii) *Sia  $\bar{C}^*$  l'insieme delle configurazioni critiche, analoghe a quella in figura 2.6. Si ponga, quindi,  $\theta_{\square, \blacksquare} = \max \{ t < \tau_{\blacksquare} : \boldsymbol{\eta}_t \in \square \}$  e  $\tau_{\square, \bar{C}^*, \blacksquare} = \min \{ t > \theta_{\square, \blacksquare} : \boldsymbol{\eta}_t \in \bar{C}^* \}$ . Allora*

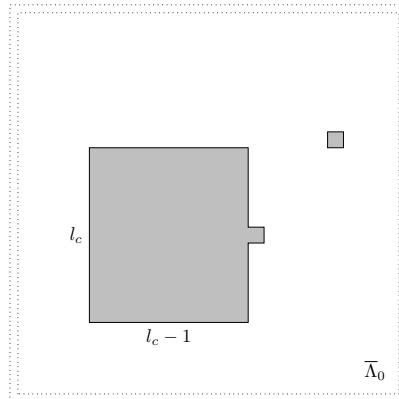
$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathbb{P}_{\nu_{\square}}(\tau_{\blacksquare, \bar{C}^*, \blacksquare} < \tau_{\blacksquare}) = 1. \quad (2.50)$$

iii) *Sia  $\Gamma = \Gamma(U, \Delta) = -U(2l_c^2 - 4l_c + 2) + \Delta(l_c^2 - l_c + 2)$ . Allora*

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathbb{P}_{\nu_{\square}}(e^{(\Gamma-\delta)\beta} < \tau_{\blacksquare} < e^{(\Gamma+\delta)\beta}) = 1 \quad \forall \delta > 0. \quad (2.51)$$

È possibile dimostrare che la convergenza in (2.49)-(2.51) è di tipo esponenziale in  $\beta$ , ma l'evoluzione dei cluster secondo la dinamica di Glauber è differente dall'evoluzione sotto la dinamica di Kawasaki. Nel secondo caso, è un movimento di particelle lungo il bordo della goccia rettangolare che porta a una goccia quadrata più stabile, in un tempo molto minore di quello che serve per crescere o restringersi, dell'ordine di  $e^{\Delta\beta}$ . In secondo luogo, la sottocriticità (supercriticità) di un rettangolo, quindi la sua tendenza a raggiungere  $\square$  prima di  $\blacksquare$  (o vice versa), per la dinamica Glauber è legata al minore dei lati del rettangolo sottocritico, che tende al quadrato di taglia massima in esso contenuto, mentre è legata all'area del cluster per la dinamica di Kawasaki.

La configurazione critica per la dinamica di Kawasaki, mostrata nell'immagine in figura 2.6, ha una forma simile quella del caso conservativo, vista nell'immagine in figura 2.4, con un'ulteriore particella libera, la cui presenza indica che la transizione da  $\square$  a  $\blacksquare$  è stata effettuata e la goccia inizia a crescere.



**Figura 2.6:** Esempio di configurazione critica per il modello a lattice gas. La due regioni in grigio rappresentano un cluster di dimensioni  $l_c \times (l_c - 1)$  con una protuberanza sul lato più lungo e una singola particella.

### Crescita supercritica: un problema aperto

Il comportamento metastabile di questi due modelli prevede due scenari completamente differenti per la crescita supercritica della fase stabile, per la quale si torna a ragionare in termini di volumi esponenziali.

Per quanto riguarda il modello di Ising, i risultati ottenuti da Dehghanpour e Schonmann nel lavoro [5] mostrano che la crescita della goccia critica è sempre più favorita al crescere della goccia. Questo comportamento risulta qualitativamente comprensibile se si tiene in considerazione che la creazione di nuovi spin positivi al bordo della goccia è favorita, in termini entropici, al crescere della taglia del cluster.

La comprensione del meccanismo di crescita supercritica di un cluster della fase stabile nel modello a lattice gas, invece, risulta molto più ostica e allo stato dell'arte non è chiara neanche da un punto di vista euristico, a causa delle difficoltà aggiuntive legate alla conservatività del modello.

Nella sua crescita, la goccia della fase stabile impoverisce il gas delle particelle di cui, appunto, necessita per continuare a crescere. In questo scenario, il gas viene spogliato delle sue particelle con un meccanismo che crea un gradiente di densità, in quanto le zone periferiche risentono diversamente della presenza della goccia, rispetto alla porzione di gas prossima al cluster.

Questo comportamento rende impossibile inquadrare il problema, ad esempio, nell'ambito di una teoria di campo medio e richiede uno studio molto più articolato, per il quale sono stati sviluppati i due modelli di cui si parla nel prossimo capitolo.

# 3 | Crescita supercritica: due modelli

Il caso conservativo apre nuove problematiche non ancora comprese e inquadrate in una teoria moderna della metastabilità, come visto nella conclusione del precedente capitolo. La goccia critica è infatti una caratteristica comune dei sistemi metastabili, ma mentre il suo processo di formazione è ben compreso da un punto di vista teorico, con risultati rigorosi in molti regimi, il rilassamento all'equilibrio che segue la nucleazione rappresenta un problema tuttora aperto anche da un punto di vista euristico.

In questo capitolo si illustrano due modelli sviluppati per studiare l'interazione tra un singolo cluster supercritico e il gas sovrassaturo circostante, nella fase di crescita supercritica successiva alla nucleazione. Il primo modello guarda il problema dal punto di vista stocastico della dinamica di un insieme di random walk quasi del tutto non interagenti, mentre il secondo lo rivede in modo deterministico, attraverso l'evoluzione di una matrice di densità.

Successivamente, viene spiegata la loro relazione teorica e sono presentate le osservabili fisiche scelte per fare un primo passo nella comprensione di questo fenomeno, indicando anche le semplificazioni adottate rispetto al modello presentato nel paragrafo 2.2.

Viene, infine, esposto un primo confronto numerico tra i due modelli, in cui si verifica che sia confermato il legame teorico tra i due modelli e si ottiene un'indicazione relativa alle incertezze sui valori medi per il modello stocastico, che saranno utili nell'analisi dei dati prodotti dalle simulazioni numeriche.

## 3.1 Modello particellare

Si consideri il sottoinsieme di  $\mathbb{Z}^2$ , dato dal reticolo quadrato bidimensionale  $\Lambda_L = \{-L, -L+1, \dots, 0, \dots, L-1, L\}^2 \subset \mathbb{Z}^2$  di lato  $2L+1$ , per un generico  $L \in \mathbb{N}$ .

Al reticolo  $\Lambda_L$ , si impongano condizioni al contorno periodiche, definendo la distanza tra due suoi punti  $\underline{x} = (x_1, x_2)$  e  $\underline{y} = (y_1, y_2)$  come

$$|\underline{x} - \underline{y}|_L = \sqrt{d_L^2(x_1, y_1) + d_L^2(x_2, y_2)}, \quad (3.1)$$

in cui la periodicità è tenuta in considerazione da

$$d_L(x_i, y_i) = L + \frac{1}{2} - \left| |x_i - y_i| - L - \frac{1}{2} \right| \quad \text{per } i = 1, 2.$$

Sul reticolo  $\Lambda_L$  appena definito, si distribuisca un numero arbitrario  $N$  di particelle, in modo equiprobabile e tale che ogni sito  $\underline{x} \in \Lambda_L$  possa ospitare anche più di una particella.

Più rigorosamente, se  $\underline{S}_i(t)$  indica la variabile aleatoria associata alla posizione della  $i$ -esima particella al tempo  $t \in \mathbb{N}_0$ , la probabilità di avere un generico sito del reticolo come realizzazione iniziale della variabile aleatoria  $\underline{S}_i(0)$  segue la distribuzione discreta e uniforme data da

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_i(0) = \underline{x}\} = \frac{1}{|\Lambda_L|} \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L, \forall i = 1, \dots, N \quad (3.2)$$

in cui  $|\Lambda_L|$  è il numero di siti del reticolo.

Le quantità  $\underline{S}_i(0)$  sono quindi variabili casuali indipendenti uniformemente distribuite e una configurazione iniziale del sistema sarà, quindi, una  $N$ -pla di realizzazioni di tali variabili, ossia un elemento  $\mathbf{x}$  dello spazio delle configurazioni  $\Lambda_L^N$  dato da

$$\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N) \quad \underline{x}_i \in \Lambda_L, \forall i = 1, \dots, N.$$

Una volta disposte sul reticolo, le particelle si muovono seguendo una dinamica di random walk bidimensionale semplice e simmetrico con condizioni periodiche al contorno.

Come anticipato nell'introduzione del capitolo, questi random walk sono quasi indipendenti, nel senso che ogni particella ignora la presenza delle altre, con cui interagisce unicamente tramite la trappola che è posta nell'origine del reticolo  $\Lambda_L$  e il cui comportamento si differenzia dagli altri siti: se una particella le passa sopra, rimane incollata, mentre la trappola, se popolata, ha una probabilità fissa  $p_e \in [0, 1]$  di espellere una particella ad ogni iterazione.

Più precisamente, la dinamica del sistema è una catena di Markov, la cui probabilità di transizione tra due configurazioni  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  in  $\Lambda_L^N$  fa distinzione tra i due casi che seguono:

- se la configurazione  $\mathbf{x}$  è tale che  $\underline{x}_i \neq \underline{0} \forall i = 1, \dots, N$ , la trappola è vuota e la probabilità di transizione è data semplicemente da

$$\mathbb{P}\{\mathbf{S}(t+1) = \mathbf{y} \mid \mathbf{S}(t) = \mathbf{x}\} = \left(\frac{1}{4}\right)^N \prod_{i=1}^N \mathbb{1}_{|\underline{x}_i - \underline{y}_i|_L=1};$$

- se invece si ha  $\underline{x}_i = \underline{0}$  per qualche  $i = 1, \dots, N$ , la trappola è popolata e ha una probabilità  $p_e$  di singola emissione. Si può, quindi, definire l'insieme non vuoto  $\mathcal{I} = \{i : \underline{x}_i = \underline{0}\}$  delle particelle intrappolate, la cui cardinalità è  $|\mathcal{I}| = \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{\{\underline{x}_i = \underline{0}\}}$ , e si impone la condizione che, in caso di emissione, viene espulsa dalla trappola la particella associata all'indice più piccolo  $i_e = \min\{i \in \mathcal{I}\}$  tra quelli delle particelle intrappolate.

In questo secondo caso, si ha

$$\mathbb{P}\{\mathbf{S}(t+1) = \mathbf{y} \mid \mathbf{S}(t) = \mathbf{x}\} = \begin{cases} \left(\frac{1}{4}\right)^{(N-|\mathcal{I}|)} \frac{p_e}{4} & \text{se } |\underline{x}_i - \underline{y}_i|_L = 1 \forall i \notin \mathcal{I} \\ & \underline{y}_i = \underline{0} \forall i \in \mathcal{I} \setminus \{i_e\} \\ & \text{e } |\underline{y}_{i_e}|_L = 1, \\ \left(\frac{1}{4}\right)^{(N-|\mathcal{I}|)} (1-p_e) & \text{se } |\underline{x}_i - \underline{y}_i|_L = 1 \forall i \notin \mathcal{I} \\ & \text{e } \underline{y}_i = \underline{0} \forall i \in \mathcal{I}, \\ 0 & \text{altrimenti.} \end{cases}$$

Il modello appena definito è evidentemente conservativo ed è utile, ai fini della futura analisi delle sue proprietà, definire il numero di particelle in un sito

$$n(\underline{x}, t) = \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{\{\underline{s}_i(t) = \underline{x}\}} \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L. \quad (3.3)$$

Anche  $n(\underline{x}, t)$  è una variabile aleatoria e, in virtù della distribuzione iniziale uniforme (3.2) delle  $N$  particelle nel reticolo  $\Lambda_L$ , al momento dell'inizializzazione del sistema, il suo valore aspettato è

$$\mathbb{E}[n(\underline{x}, 0)] = \frac{N}{|\Lambda_L|} \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L. \quad (3.4)$$

## 3.2 Modello con matrice di densità

Come anticipato, il secondo modello è deterministico e consiste nell'evoluzione per tempi discreti  $t \in \mathbb{N}_0$  di una matrice di densità, con la seguente dinamica. Si definisca una funzione  $\rho(\underline{x}, t): \Lambda_L \times \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}_+$ , per la quale si abbia un valore iniziale per  $t = 0$  uniforme su  $\Lambda_L$ , ad eccezione dell'origine

$$\rho(\underline{x}, 0) = \begin{cases} \tilde{\rho}_0 & \text{se } \underline{x} = \underline{0}, \\ \tilde{\rho} & \text{altrimenti,} \end{cases} \quad (3.5)$$

La legge di evoluzione temporale della funzione  $\rho(\underline{x}, t)_{\underline{x} \in \Lambda_L}$  varia a seconda del sito reticolare:

- per  $\underline{x} \neq \underline{0}$ , la funzione  $\rho(\underline{x}, t+1)$  è la media dei valori che la funzione aveva sui primi vicini del sito al tempo  $t$ , con l'unica eccezione che i primi vicini dell'origine vedono il valore fittizio  $\tilde{\rho}_0$  nell'origine, quindi

$$\rho(\underline{x}, t+1) = \begin{cases} \sum_{\substack{\underline{x}' \neq \underline{0} \\ |\underline{x}' - \underline{x}|_L = 1}} \frac{\rho(\underline{x}', t)}{4} + \frac{\tilde{\rho}_0}{4} & \text{se } |\underline{x}|_L = 1, \\ \sum_{|\underline{x}' - \underline{x}|_L = 1} \frac{\rho(\underline{x}', t)}{4} & \text{se } |\underline{x}|_L > 1. \end{cases}$$

- Per  $\underline{x} = \underline{0}$ , si ha

$$\rho(\underline{0}, t+1) = N - \sum_{\underline{x} \neq \underline{0}} \rho(\underline{x}, t+1)$$

in cui  $N = \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \rho(\underline{x}, 0)$ .

Per la funzione  $\rho(\underline{x}, t)_{\underline{x} \in \Lambda_L}$  appena definita, l'insieme dei possibili valori è dato da

$$\left\{ \rho = (\rho(\underline{x}, t))_{\underline{x} \in \Lambda_L} : \rho(\underline{x}, t) \in [0, N] \text{ e } \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \rho(\underline{x}, t) = N, \forall t \in \mathbb{N}_0 \right\}$$

Le quantità  $\tilde{\rho}_0$  e  $\tilde{\rho}$  nella (3.5) devono soddisfare la condizione  $\tilde{\rho}_0 > \tilde{\rho}$ . In questo modo è garantita la positività della  $\rho(\underline{x}, t)$ , che può essere interpretata come

numero di occupazione dei siti di  $\Lambda_L$ . Con questa condizione, inoltre, si può definire il numero di particelle come

$$\sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \rho(\underline{x}, t) = N \quad \forall t \in \mathbb{N}_0.$$

e il modello risulta conservativo.

Se si considera trascurabile la differenza tra i valori di inizializzazione nella (3.5), assunzione sicuramente valida per ogni reticolo che si analizzerà numericamente, la condizione appena vista comporta che per  $t = 0$  si abbia

$$\tilde{\rho} = \frac{N}{|\Lambda_L|} \quad (3.6)$$

### 3.3 Relazione tra i due modelli

I due modelli appena introdotti sono in stretta relazione tra di loro. Per iniziare a comprendere la natura del loro legame, basta confrontare la relazione (3.4) con la (3.6), ottenendo

$$\mathbb{E}[n(\underline{x}, 0)] = \frac{N}{|\Lambda_L|} = \tilde{\rho} \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L : \underline{x} \neq \underline{0}. \quad (3.7)$$

Per  $t = 0$  e se si esclude l'origine del reticolo, il valore di aspettazione del numero di particelle ospitate da ogni sito nel primo modello è uguale al valore di inizializzazione  $\tilde{\rho}$  della funzione  $\rho(\underline{x}, t)$  definita nel secondo modello.

Questa relazione tra i due modelli è ovviamente una conseguenza della distribuzione iniziale delle  $N$  particelle nel reticolo  $\Lambda_L$  nel primo modello, che è uniforme, ma continua ad essere soddisfatta nel corso dell'evoluzione temporale dei due sistemi per  $t \in \mathbb{N}_0$ .

Per comprenderne il motivo, basta osservare cosa accade al numero di particelle in un generico sito diverso dall'origine nel modello a random walk, passando dal tempo  $t$  al tempo  $t + 1$ . Come visto, la dinamica del consiste in random walk quasi indipendenti semplici e simmetrici sul reticolo: le particelle che si trovano nel sito  $\underline{x}$  al tempo  $t$ , pertanto, al tempo  $t + 1$  si saranno spostate, con probabilità uniforme, in uno dei 4 primi vicini del sito; d'altra parte, al tempo  $t + 1$  si saranno spostate su  $\underline{x}$ , in media, un quarto delle particelle che al tempo  $t$  erano in ognuno dei suoi 4 primi vicini.

Da questo segue che la relazione (3.7) continua ad essere soddisfatta durante l'evoluzione temporale e quindi il valore di aspettazione del numero di particelle  $n(\underline{x}, t)$  del primo modello e la densità  $\rho(\underline{x}, t)$  del secondo sono legati dalla relazione

$$\mathbb{E}[n(\underline{x}, t)] = \rho(\underline{x}, t) \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L, t \in \mathbb{N}_0. \quad (3.8)$$

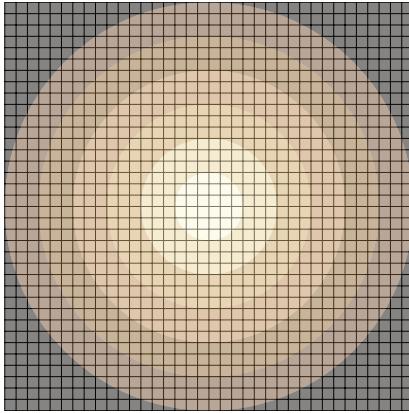
### 3.4 Osservabili

Una prima osservabile per lo studio dell'interazione tra il singolo cluster supercritico e il gas sovrassaturo è stata già introdotta ed è il numero  $n(\underline{0}, t)$  di particelle intrappolate nel cluster in funzione del tempo  $t \in \mathbb{N}_0$ .

Per quanto riguarda il gas circostante, l'informazione relativa al suo svuotamento è certamente contenuta nelle quantità  $n(\underline{x}, t)$ , ma per poter trarre informazioni significative bisogna tener conto della natura stocastica del modello a random walk, che rende necessaria la gestione oculata di due aspetti:

- la fluttuazione dei valori che la variabile aleatoria  $n(\underline{x}, t)$  assume sui siti del reticolo  $\Lambda_L$ , nell'evoluzione per  $t \in \mathbb{N}_0$ , rende opportuno tralasciare l'informazione locale a favore di quantità statistiche macroscopiche più significative e che possano essere confrontate più facilmente con le omologhe quantità del modello a matrice di densità, che non ha una natura stocastica;
- il sistema ha una dipendenza dalla distribuzione iniziale delle particelle nel reticolo  $\Lambda_L$ , di cui bisogna tener conto.

Per il secondo punto si rimanda alla sottosezione 3.4.2, mentre, per risolvere il primo, si può procedere come segue.



**Figura 3.1:** Esempio di suddivisione di un reticolo, per il caso di semilato reticolare  $L = 18$  e passo  $\ell = 3$  per le corone.

Tenendo in considerazione la relazione (3.8) e la simmetria centrale di cui gode il modello con matrice di densità, si può suddividere il reticolo  $\Lambda_L$  in corone circolari concentriche di passo costante  $\ell \in \mathbb{N}^+$  e centrate nell'origine del reticolo.

Per questioni di semplicità, si sceglie un passo  $\ell \in \mathbb{N}^+$  che sia divisore del semilato  $L$  del reticolo. In questo modo la corona più esterna avrà come bordo esterno la circonferenza inscritta nel reticolo.

Alle corone circolari così ottenute, è opportuno aggiungerne l'ulteriore corona generalizzata, data dai 4 spicchi del reticolo  $\Lambda_L$  esterni alla circonferenza inscritta nel reticolo.

Affinché non ci sia sovrapposizione, invece, le corone si considerano prive del loro bordo interno. In questo modo, inoltre, la prima corona sarà la circonferenza di raggio  $\ell$  privata dell'origine, sito che contiene

la trappola viene analizzato separatamente dal resto del gas circostante.

Nell'immagine in figura 3.1, si ha un esempio grafico di questa procedura, in cui sono mostrate con differenti colorazioni sia le corone vere e proprie sia la corona generalizzata più esterna.

Da un punto di vista matematico, le prime  $L/\ell$  corone circolari sono date dall'insieme di punti

$$\Xi_i = \Xi(i, \ell) = \{ \underline{x} \in \Lambda_L : (i-1)\ell < \|\underline{x}\| \leq i\ell \} \quad \text{per } i = 1, \dots, L/\ell. \quad (3.9)$$

La corona generalizzata, associata all'indice  $i = L/\ell + 1$ , è a sua volta data dall'insieme di punti

$$\Xi_{L/\ell+1} = \Lambda_L \setminus \bigcup_{i=1}^{L/\ell} \Xi_i.$$

Invece di mediare i valori locali delle variabili di interesse sulle corone appena definite, è opportuno disporre anche di una media sul tempo. Per questo, si sceglie un intervallo di lunghezza  $\Delta$  e si suddivide l'evoluzione temporale negli intervalli disgiunti

$$\Theta_\tau = \Theta(\tau, \Delta) = [1 + (\tau - 1)\Delta, \tau\Delta] \cap \mathbb{N}^+ \quad \forall \tau \in \mathbb{N}^+ \quad (3.10)$$

Fatta questa suddivisione in intervalli spaziali e temporali, per i tempi  $\tau\Delta$  con  $\tau \in \mathbb{N}^+$ , per il modello a random walk si hanno  $L/\ell + 1$  densità mediate sulle corone  $\Xi_i$  e sugli intervalli temporali  $\Theta_\tau$  date da

$$\delta(i, \tau)_{\text{r.w.}} = \frac{1}{|\Xi_i|} \frac{1}{\Delta} \sum_{t \in \Theta_\tau} \sum_{k=1}^N \mathbb{1}_{\{\underline{S}_k(t) \in \Xi_i\}} \quad (3.11)$$

Le quantità  $\delta(i, \tau)_{\text{r.w.}}$  sono variabili aleatorie e possono essere messe in relazione con le omologhe quantità deterministiche definite per il modello a matrice densità come

$$\delta(i, \tau)_{\text{m.d.}} = \frac{1}{|\Xi_i|} \sum_{\underline{x} \in \Xi_i} \rho(\underline{x}, \tau\Delta) \quad (3.12)$$

ottenendo nuovamente la relazione che vede il modello a matrice densità come valore aspettato per il modello a random walk

$$\mathbb{E}[\delta(i, \tau)_{\text{r.w.}}] = \delta(i, \tau)_{\text{m.d.}} \quad \forall i = 1, \dots, L/\ell + 1, \tau \in \mathbb{N}^+ \quad (3.13)$$

### 3.4.1 Interesse per le osservabili scelte

Supponiamo che l'origine del reticolo  $\Lambda_L$  sia un sito come gli altri e che, quindi, non vi sia posizionata la trappola nel modello a random walk e sia inizializzata con il valore  $\tilde{\rho}$  nel modello a matrice di densità.

Per il modello a matrice di densità si avrebbe ovviamente l'andamento costante dato da

$$\rho(\underline{x}, t) = \tilde{\rho} \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L, \forall t \in \mathbb{N}^+.$$

In virtù della relazione (3.8) tra i due modelli, il valore aspettato del numero di particelle per sito fluttuerrebbe intorno a questo valore costante e si avrebbe una situazione analoga anche per le altre osservabili.

La presenza della trappola introduce nel modello con matrice di densità una simmetria centrale e questa simmetria si riflette anche sui valori medi delle osservabili del modello random walk.

Nel modello stocastico, una particella intrappolata può essere infatti vista come una lacuna che si propaga all'interno del reticolo, al posto della corrispondente particella che, invece di continuare il suo moto, rimane ferma nell'origine fino a che non viene eventualmente riespulsa. Come è stato spiegato nel capitolo 1, con i lemmi 1.9 e 1.10, la probabilità che dopo  $n$  passi la particella si trovi in un punto  $\underline{x}$  del reticolo è una funzione del quadrato della norma  $\|\underline{x}\|$ .

### 3.4.2 Media sulla distribuzione iniziale

Il modello a random walk ha una dipendenza dalla distribuzione iniziale, che rende necessaria un'ulteriore precisazione riguardo la relazione tra i due modelli,

illustrata nel paragrafo 3.3: per poter confrontare i valori aspettati delle osservabili del modello a random walk con le omologhe quantità del modello a matrice di densità, si deve mediare anche sulle possibili realizzazioni della  $N$ -pla delle posizioni delle particelle che si distribuiscono inizialmente sul reticolo.

Per una dimostrazione dell'importanza che questo aspetto ha relativamente alla gestione della analisi dati e delle incertezze sui valori medi, si rimanda al paragrafo 3.5.1.

### 3.4.3 Semplificazioni dei due modelli

I due modelli appena introdotti sono stati sviluppati con l'obiettivo di fare un primo passo nella comprensione delle interazioni tra il singolo cluster e il gas circostante e presentano alcune semplificazioni rispetto al problema di partenza.

In questo primo studio, come anticipato, si trascura del tutto la geometria e la dinamica della trappola, che viene considerata puntiforme e fissa al centro del reticolo  $\Lambda_L$ . La probabilità di emissione  $p_e$ , inoltre, non ha nessuna dipendenza dal numero di particelle intrappolate, ma viene impostata ad un valore costante all'inizio della simulazione.

Il gas sovrassaturo è stato invece modellizzato in termini di random walk indipendenti. Come spiegato nel capitolo 2, nel caso conservativo l'interesse è rivolto verso densità piccole e in questo regime la validità di questa approssimazione è garantita dai risultati ottenuti nel lavoro [10], riguardo l'approssimazione in termini di random walk indipendenti per un gas rarefatto con dinamica di Kawasaki.

## 3.5 Primo confronto numerico tra i due modelli

Prima di affrontare lo studio delle interazioni tra una singola goccia della fase stabile e il gas di random walk ad essa circostante, è opportuno illustrare il modo in cui sono stati tarati i due programmi usati per simulare numericamente i due sistemi appena introdotti, per i cui codici si rimanda invece alla appendice B.

L'analisi è stata svolta sulle seguenti configurazioni reticolari:

- è stata scelta una trappola completamente assorbente, ponendo  $p_e = 0$  per la probabilità di emissione nel modello a random walk e  $\tilde{\rho}_o = 0$  nell'inizializzazione del modello a matrice di densità;
- nella configurazione iniziale la trappola è stata lasciata vuota, mentre la densità media nel reticolo è stata scelta nell'intervallo di valori dato da  $2^{-i}$ , per  $i = 0, \dots, 15$ ;
- il semilato del reticolo  $\Lambda_L$  è stato variato nell'intervallo  $L = 50, 60, \dots, 500$ .

Questa analisi preliminare ha i seguenti obiettivi:

- in primo luogo, aiuta a comprendere come scegliere al meglio alcuni parametri, come la durata complessiva delle simulazioni, l'intervallo  $\Delta$  di iterazioni tra due misure consecutive e il passo  $\ell$  delle corone circolari, scelta di fondamentale importanza al fine di ottenere dati sperimentali significativi da un punto di vista statistico e su cui si tornerà in seguito;

- una volta calibrati i parametri, fornisce conferme di natura numerica riguardo il rapporto tra i due modelli, visto in 3.4.2;
- infine, dà informazioni molto importanti riguardo le incertezze dei valori medi ottenuti con le analisi dei dati prodotti dalle simulazioni del modello a random walk.

### 3.5.1 Risultati

Da questa prima analisi numerica, sono state ricavati i seguenti risultati:

- il passo  $\ell$  delle corone  $\Xi_i$  e il numero  $\Delta$  di iterazioni tra due misure consecutive devono essere calibrati tenendo in considerazione che sono in relazione tra loro e hanno un'importanza cruciale in quanto:
  - il passo  $\ell$  deve essere grande abbastanza da produrre corone circolari  $\Xi_i$  che contengano un numero statisticamente significativo di siti, affinché nelle densità (3.11) del modello a random walk vengano smorzate le fluttuazioni del numero di particelle per sito. Allo stesso tempo,  $\ell$  deve essere abbastanza piccolo rispetto al semilato  $L$ , affinché si abbia un numero di corone che permetta una analisi dettagliata a differenti distanze dalla trappola.
  - Una volta scelto il passo  $\ell$ , l'intervallo temporale  $\Delta$  deve tenere in considerazione l'estensione spaziale delle corone in modo che, tra una misura e la successiva, le particelle non si siano disperse nel reticolo, facendo perdere significatività all'informazione raccolta. Inoltre,  $\Delta$  è stato scelto in modo che si possa trascurare la varianza delle grandezze mediate su questo intervallo, come per esempio le densità  $\delta(i, \tau)_{\text{r.w.}}$  definite in (3.11).

Questo approccio euristico ha portato alla scelta di un passo  $\ell = 5$  per le corone e di un intervallo  $\Delta = 20$  di iterazioni tra due misure consecutive.

- Lo studio delle interazioni tra il cluster e il gas ad esso circostante interesserà anche il comportamento asintotico del modello, come verrà illustrato in 4.2. Questo aspetto comporta un'accortezza su come combinare le densità medie iniziali con il semilato  $L$  del reticolo nelle simulazioni. Il motivo è di natura tecnica ed è legato alla durata reale delle simulazioni del modello a random walk. Per non avere simulazioni eccessivamente lunghe, è preferibile scegliere densità più piccole al crescere del semilato  $L$ . Questo problema, ovviamente, non si presenta per le simulazioni del modello a matrice di densità, le durate delle quali dipendono solo dalla dimensione del reticolo  $\Lambda_L$ .
- Come visto in 3.4.2, il modello a random walk ha una forte dipendenza dalla distribuzione iniziale e si è scelto di mediare su un dataset contenente un numero statisticamente rilevante di singole simulazioni. Tenendo in considerazione che si possono trascurare le incertezze sulle (3.11) prodotte da una singola simulazione, le incertezze prodotte da queste medie sulla configurazione iniziale sono le uniche a rivestire un ruolo importante nell'analisi dei dati.

Sulle incertezze legate alla media sulla configurazione iniziale, sono state ottenute le seguenti informazioni:

- il valore assoluto delle varianze delle osservabili del modello a random walk dipende dalla densità media iniziale delle particelle distribuite e, ovviamente, aumenta per le configurazioni con densità minori;
- le varianze così ottenute hanno un valore approssimativamente costante su tutta la durata delle simulazioni, sia per il numero di particelle intrappolate nell'origine, sia per le densità particellari delle varie corone circolari;
- la dipendenza del modello a random walk dalla configurazione iniziale è tenuta in considerazione mediando le osservabili del modello su un campione contenente un numero  $C$  di differenti distribuzioni iniziali. Nel fare questa media, si deve tenere in considerazione che le varianze così ottenute descrivono la dispersione delle osservabili di una singola simulazione del modello intorno al loro valore medio. Per ricavare la varianza dei valori medi intorno al valore prodotto dalle simulazioni del modello con matrice di densità, queste varianze devono essere moltiplicate per un fattore  $1/\sqrt{C}$ , in cui  $C$  è il numero di campioni di un singolo dataset. La possibilità di aumentare considerevolmente la popolazione di un dataset permette di gestire in modo molto preciso questo aspetto, ottenendo un ottimo accordo tra i valori ottenuti con i due modelli.



# 4 | Crescita supercritica: risultati sperimentali

In questo capitolo conclusivo, vengono discussi i risultati delle analisi dei dati prodotti con le simulazioni numeriche dei due modelli sviluppati per studiare le interazioni tra un singolo cluster della fase stabile e il gas di random walk circostante. I dettagli tecnici dei programmi implementati per simulare i due modelli, e per l'analisi dei dati che queste simulazioni producono, sono discussi in appendice B.

Questa analisi dati è stata svolta sullo stesso consistente insieme di configurazioni reticolari descritte in 3.5, anche se in questo caso l'interesse si è rivolto alle densità piccole che descrivono un gas sovrassaturo rarefatto.

Per i regimi di tempi piccoli e tempi lunghi, il comportamento dei modelli può essere calcolato analiticamente e l'analisi dati ha mostrato un ottimo accordo con le previsioni teoriche.

Nei regimi temporali intermedi, non è possibile fare previsioni analitiche e lo studio si è concentrato sul meccanismo di svuotamento del gas ad opera della goccia della fase stabile. Oltre ad analizzare il modo in cui si propaga all'interno del gas l'informazione della presenza della goccia della fase stabile, è stata verificata la congettura di fattorizzazione delle densità medie, la cui fondatezza si basa sull'analogia con il caso continuo dell'equazione del calore. Una volta verificata la fattorizzazione, sono stati ricostruiti i suoi due fattori spaziale e temporale, utilizzando un programma appositamente implementato.

## 4.1 Particelle intrappolate per tempi piccoli

Nell'ipotesi in cui la trappola nell'origine sia completamente assorbente, e quindi siano nulle sia la probabilità di emissione  $p_e$  per il modello a random walk sia la quantità  $\rho_o$  per il modello con matrice di densità, si può stimare il numero  $n_o(t)$  di particelle intrappolate nell'origine in funzione del tempo come segue.

Nel capitolo 1, è stato introdotto il concetto di hitting time e si è visto che, se un random walker parte da un generico sito  $\underline{x}$ , la probabilità che per tempi piccoli l'hitting time  $\tau_o$  dell'origine sia minore di  $t$  va come

$$\mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o < t \} \sim 1 - \ln |\underline{x}|^2 / \ln t. \quad (4.1)$$

Per il numero  $n_o(t)$  di particelle intrappolate nell'origine, si ha

$$n_o(t) = \sum_{\underline{x}} \rho \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o < t \},$$

il cui la sommatoria può essere riscritta

$$\sum_{|\underline{x}| < c} \rho \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o < t \} + \sum_{c < |\underline{x}| < \sqrt{t}} \rho \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o < t \} + \sum_{|\underline{x}| > \sqrt{t}} \rho \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o < t \}. \quad (4.2)$$

Nella (4.2), la probabilità del terzo addendo risulta trascurabile in quanto, qualitativamente parlando, è associata a un random walk partito troppo lontano dall'origine per poterla raggiungere entro il tempo  $t$ . Il numero di particelle può quindi essere approssimato come

$$n_o(t) = \sum_{|\underline{x}| < c} \rho \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o < t \} + \sum_{c < |\underline{x}| < \sqrt{t}} \rho \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o < t \} \quad (4.3)$$

Tenendo in considerazione la relazione (4.1) e i risultati per l'hitting time esposti nel paragrafo 1.3.5, per tempi  $t \ll |\Lambda_L|$  e maggiori di  $c^2$ , con  $c \simeq 20$ , i due termini della sommatoria possono essere riscritti come segue

$$\begin{aligned} n_o(t) &\simeq \sum_{|\underline{x}| < \sqrt{t}} \rho - \sum_{c < |\underline{x}| < \sqrt{t}} \rho \frac{\ln |\underline{x}|^2}{\ln t} \\ &\simeq \pi \rho t - \left[ \frac{4\pi\rho r^2}{\ln t} \left( \ln t - \frac{1}{2} \right) \right]_c^{\sqrt{t}} \\ &= \pi \rho t - \frac{2\pi\rho}{\ln t} t \left( \frac{1}{2} \ln t - \frac{1}{2} \right) + O\left(\frac{1}{\ln t}\right) \\ &\simeq \frac{\pi \rho t}{\ln t}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

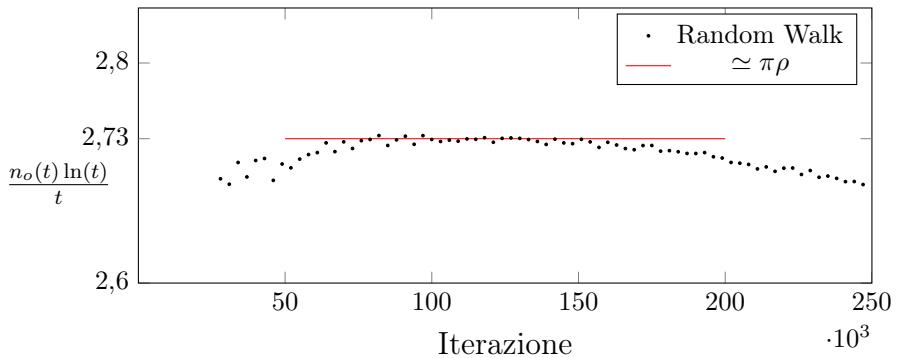
La relazione (4.4) può essere riscritta come

$$\frac{n_o(t) \ln t}{t} \simeq \pi \rho. \quad (4.5)$$

A causa delle approssimazioni fatte, la relazione (4.5) non può essere interpretata in modo rigoroso, ma fornisce ugualmente un'interessante informazione qualitativa: la quantità  $n_o(t) \ln(t)/t$  al primo ordine ha un andamento costante su un opportuno intervallo di tempi piccoli.

L'estremo inferiore cade sicuramente oltre la zona iniziale di rilassamento, in cui l'andamento di  $n_o(t) \ln(t)/t$  risente della natura discreta del reticolo  $\Lambda_L$  e della scelta di avere la trappola vuota per  $t = 0$ . L'estremo superiore è invece dell'ordine di  $(2L+1)^2/4$ , in cui  $L$  è il semilato del reticolo.

Nel grafico in figura 4.1 si può vedere un esempio di questo comportamento per un reticolo di semilato  $L = 250$  nel caso di una densità iniziale unitaria. Per  $t \simeq 115\,000$ , la quantità  $n_o(t) \ln(t)/t$  ha un punto di massimo del valore di 2,73. Nell'intervallo temporale  $T = \{t : 95\,000 \leq t \leq 135\,000\}$ , resta vicina a questo valore massimo, mostrando uno scarto dello 0.5% circa tra il valore massimo e i valori minimi agli estremi dell'intervallo.



**Figura 4.1:** Andamento di  $n_o(t) \ln(t)/t$  per un reticolo di semilato  $L = 250$  e densità iniziale unitaria. In rosso, è mostrato il tratto costante, che approssima l'andamento come previsto teoricamente.

Come è ragionevole aspettarsi, per un dato reticolo  $\Lambda_L$  di semilato  $L$  questi intervalli temporali non dipendono dalla densità iniziale ma solo dall'entità dello scarto. La tabella

Semilato	Estremo inferiore	Massimo	Estremo superiore
50	4560	5240	5980
75	9760	11 340	13 020
100	16 800	19 680	22 760
125	25 660	30 240	35 140
150	36 280	43 000	50 160
175	48 680	57 940	67 800
200	62 800	75 040	88 060
225	78 660	94 280	110 940
250	96 220	115 680	136 420

mostra un quadro sinottico di questi intervalli per differenti semilati  $L$ , ottenuti sui dati prodotti dal modello a matrice densità con uno scarto del 0.5%.

## 4.2 Particelle libere per tempi lunghi

Per tempi lunghi  $t \gg |\Lambda_L|^2$ , è possibile calcolare l'andamento del numero delle particelle rimaste libere nel reticolo  $\Lambda_L$ , dato da

$$n_l(t) = N - n_o(t), \quad (4.6)$$

in cui  $N$  è il numero di particelle iniziali,  $n_o(t)$  è il numero di particelle intrapolate in funzione del tempo. Facendo riferimento alla probabilità dell'hitting time vista con la relazione (4.1), per ottenere  $n_l(t)$  si definiscono le due quantità

$$\begin{aligned} \inf_{\underline{x}} \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o > t_o \} &= a \\ \sup_{\underline{x}} \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o > t_o \} &= b \end{aligned}$$

e si cerca un  $t_o$  per il quale si abbia  $a \simeq b$ .

Dato generico multiplo intero  $t = nt_o$ , iterando le due relazioni precedenti si ottiene

$$a^n \leq \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o > t \} \leq b^n, \quad n \in \mathbb{N},$$

da cui segue che la probabilità ha un andamento temporale esponenziale. Per vederlo meglio, si può scegliere  $t_o$  dell'ordine di  $(2L+1)^2$ . Con  $t_o \simeq e(2L+1)^2$ , per il sup si ottiene

$$\begin{aligned} \sup_{\underline{x}} \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o > e(2L+1)^2 \} &= \mathbb{P}_L \{ \tau_o > e(2L+1)^2 \} \\ &\simeq \frac{2 \ln(L)}{2 \ln(L+1)} \\ &= \left( 1 + \frac{1}{2 \ln(L)} \right)^{-1}. \end{aligned}$$

Iterando la relazione così ottenuta, si ricava appunto l'andamento esponenziale

$$\mathbb{P} \left\{ \frac{\tau_o}{e(2L+1)^2} > k \right\} \leq \left( 1 - \frac{1}{2 \ln(L)} \right)^{-k} \simeq e^{-k/2 \ln(L)}. \quad (4.7)$$

Per il numero di particelle libere per tempi lunghi, si ricava quindi l'andamento temporale

$$n_l(t) = A e^{-Bt}. \quad (4.8)$$

Confrontando la (4.8) con la (4.6), si vede facilmente che il parametro  $A$  è il numero  $N$  di particelle libere nel reticolo per  $t = 0$ . La verifica di questa corrispondenza, banale e non molto interessante, è stata fatta ma verrà tralasciata.

Dal confronto tra (4.8) e (4.7), si ricava che il parametro  $B$  dipende unicamente dal semilato  $L$  del reticolo, secondo la relazione

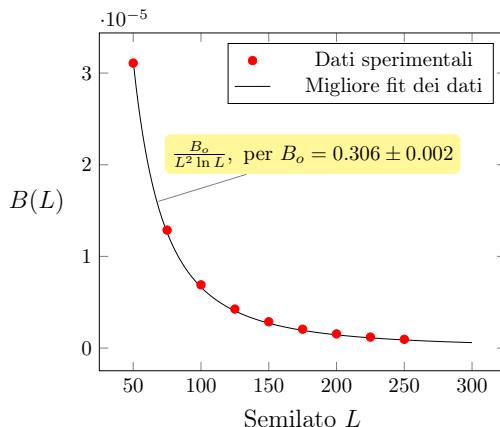
$$B = B(L) = \frac{B_o}{L^2 \ln L}. \quad (4.9)$$

Per trovare il parametro  $B_o$ , risulta più conveniente lavorare sul logaritmo naturale della (4.9)

$$\ln[n_l(t)] = \ln(A) - Bt. \quad (4.10)$$

Si fissa una densità media iniziale  $e$ , al variare del semilato  $L$ , si ricavano i valori di  $B(L)$  con un fit tra i dati sperimentali raccolti per il logaritmo del numero di particelle libere e il suo andamento teorico visto nella (4.10).

Ottenuti in questo modo i valori di  $B(L)$  in funzione del semilato  $L$ , con un secondo fit tra questi e il loro andamento teorico riportato nella (4.9) si ricava il parametro  $B_o$ .



**Figura 4.2:** Fit tra l'andamento teorico  $B_o / (L^2 \ln L)$  e i dati sperimentali per ricavare il parametro  $B_o$  nella (4.9).

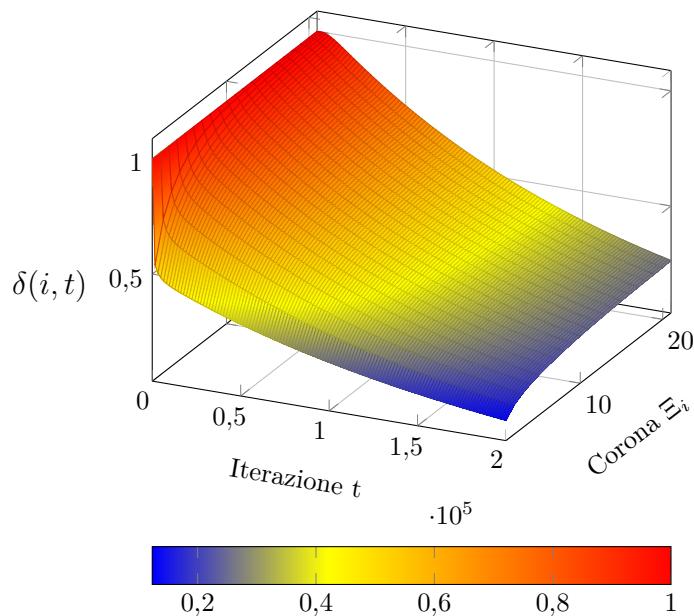
di  $B(L)$  in funzione del semilato  $L$ , con un secondo fit tra questi e il loro andamento teorico riportato nella (4.9) si ricava il parametro  $B_o$ .

Con questa seconda procedura di fit dei dati, riportata nel grafico in figura 4.2, per una densità iniziale  $\rho = 2^{-8}$  si ricava

$$B_o = 0,306 \pm 0,002. \quad (4.11)$$

I valori ottenuti per il parametro  $B_o$  su differenti densità iniziali sono compatibili con (4.11), a conferma dell'indipendenza del parametro  $B(L)$  dalla densità iniziale.

### 4.3 Svuotamento delle corone

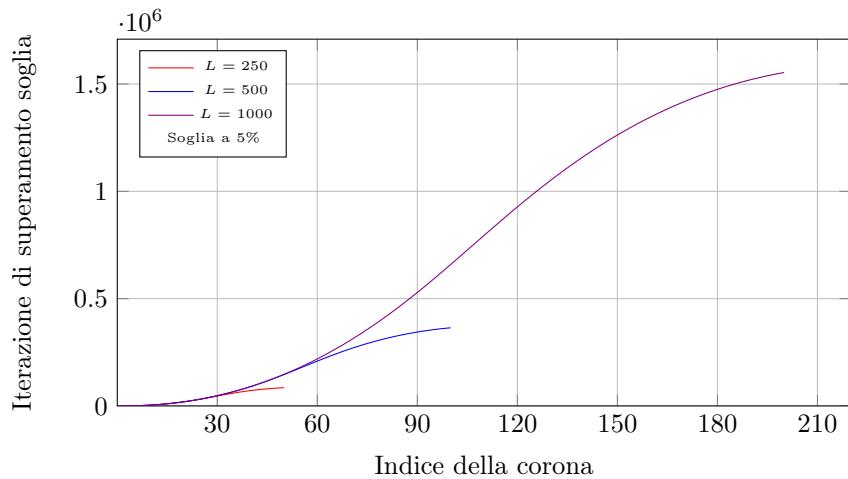


**Figura 4.3:** Superficie di densità per le 20 corone di passo  $\ell = 5$  di un reticolo  $\Lambda_L$  di semilato  $L = 100$ . Per motivi legati ad una buona visualizzazione, il grafico fa riferimento alle prime  $2 \cdot 10^5$  iterazioni e sono mostrati i dati ogni 80 misure.

La presenza della trappola completamente assorbente nell'origine produce un decadimento esponenziale delle particelle libere  $n_l(t)$ , come si visto nella (4.8). Per studiare come si propaga l'effetto della trappola all'interno del gas nel reticolo, si analizza l'evoluzione temporale delle densità medie nelle corone  $\Xi_i$ , definite nella (3.11) e nella (3.12) per i due modelli, di cui è mostrato un esempio per un reticolo di semilato  $L = 100$  e densità iniziale unitaria, nel grafico in figura 4.3.

#### 4.3.1 Propagazione dell'effetto della trappola

Per avere una prima indicazione sulla propagazione dell'effetto della trappola nel gas, è possibile confrontare gli andamenti delle densità medie nelle varie



**Figura 4.4:** Iterazione di superamento soglia in funzione dell'indice della corona, per il caso di soglia al 5%. Nel grafico sono mostrati gli andamenti per i tre semilati  $L = 250, 500, 1000$ .

corone con quelli, costanti, che si avrebbero se la trappola non fosse presente.

In questo senso, si può scegliere una soglia per le densità medie, al di sotto della quale si stabilisce che la corona abbia iniziato a risentire della presenza della trappola. Da un punto di vista matematico, è una procedura analoga allo studio delle curve di livello della superficie di densità, di cui si ha un esempio nel grafico in figura 4.3.

Questa analisi è stata svolta scegliendo differenti soglie critiche di svuotamento per la densità e variando i parametri delle simulazioni secondo le combinazioni indicate nel paragrafo 3.4, per un totale di alcune centinaia di casi diversi.

In ognuno dei differenti casi è stato ottenuto lo stesso comportamento visibile nel grafico in figura 4.4 per il caso di una soglia al 5%:

- la velocità di propagazione dipende solo da fattori geometrici e, in particolare, non dipende dalla densità media iniziale, come ci si aspetta se si considera che quest'ultima rappresenta un fattore moltiplicativo per la legge che regola l'evoluzione temporale del modello a matrice di densità;
- al crescere del semilato  $L$  gli andamenti mostrano un tratto iniziale che si sovrappone; i due andamenti si discostano in prossimità del punto di flesso, che è visibile nel grafico in figura 4.4 e che indica che la propagazione dell'effetto della trappola inizia a risentire della presenza del bordo del reticolo finito.

### 4.3.2 Fattorizzazione delle densità

Per le densità medie  $\delta(i, t)$  nei tempi intermedi, in analogia con il caso continuo dell'equazione del calore, ci si aspetta la fattorizzazione nel prodotto tra

una funzione che dipenda dal solo indice spaziale  $i$  e una che dipenda solo da  $t$ , quindi

$$\delta(i, t) = g(i) \cdot h(t). \quad (4.12)$$

Prendendo il logaritmo della (4.12), si ottiene

$$\ln[\delta(i, t)] = \ln[g(i)] + \ln[h(t)], \quad (4.13)$$

che, fissato un tempo  $t = \bar{t}$ , può essere riscritta come

$$\ln[\delta(i, \bar{t})] = \ln[g(i)] + \bar{A}, \quad (4.14)$$

in cui si è posto  $\ln[h(\bar{t})] = \bar{A}$ .

Scegliendo ora due indici spaziali  $i, j$  tali che  $i \neq j$ , dalla (4.14) si ricava

$$\ln[\delta(i, \bar{t})] - \ln[\delta(j, \bar{t})] = \ln[g(i)] - \ln[g(j)] = \Delta_{i,j}. \quad (4.15)$$

La differenza  $\Delta_{i,j}$  nella (4.15) non dipende dalla variabile  $t$  e questa proprietà suggerisce il modo naturale per verificare l'ipotesi di fattorizzazione sulla parte spaziale:

- dando per scontata l'ipotesi che il passo delle corone  $\ell$  sia un divisore del semilato reticolare  $L$ , ipotesi già introdotta in 3.5, si prendono le combinazioni di coppie di indici di corona  $i, j = 1, \dots, L/\ell$  tali che  $i \neq j$ ;
- si controlla che, per ogni coppia di indici, i logaritmi delle densità  $\delta(i, t)$  e  $\delta(j, t)$  mostrino uno scarto costante e indipendente dal tempo, come visto nella (4.15).

Vista la natura stocastica del modello a random walk, invece di lavorare con le singole quantità  $\Delta_{i,j}$ , si è preferito controllare la compatibilità delle quantità mediate sull'intervallo temporale  $(t_0, t_f)$

$$\bar{\Delta}_j = \frac{1}{(t_f - t_0)} \sum_{\tau=t_0}^{t_f} [\ln \delta(j+1, \tau) - \ln \delta(j, \tau)]. \quad (4.16)$$

Nella (4.16), la sommatoria è svolta sull'intervallo di tempi  $t \in (t_0, t_f)$ , poiché nel caso in esame la fattorizzazione è prevista sui tempi intermedi.

Una volta confermata l'ipotesi di fattorizzazione per le densità, è possibile ricostruire numericamente i due contributi, a meno di un fattore di proporzionalità. Prendendo nuovamente in considerazione la parte spaziale, si ha infatti

$$\ln g(i) - \ln g(i_0) = \sum_{j=i_0}^i \Delta \ln g(j) = \sum_{j=i_0}^i \bar{\Delta}_j, \quad (4.17)$$

in cui le quantità sommate a ultimo membro sono quelle già definite in (4.16), mentre nella sommatoria gli indici  $i_0$  e  $i$  sono scelti in modo da trascurare, rispettivamente, le corone prossime alla trappola e al bordo del reticolo.

Calcolando l'esponenziale della relazione (4.17), per il fattore spaziale della densità si ottiene

$$\frac{g(i)}{g(i_0)} = \exp \left\{ \frac{1}{(t_f - t_0)} \sum_{j=i_0}^i \sum_{\tau=t_0}^{t_f} [\ln \delta(j+1, \tau) - \ln \delta(j, \tau)] \right\}. \quad (4.18)$$

Questo ragionamento si può riapplicare al fattore temporale  $h(t)$  della densità (4.12). In questo caso, le quantità

$$\bar{\Phi}_\tau = \frac{1}{(i_f - i_0)} \sum_{j=i_0}^{i_f} [\ln \delta(j, \tau + 1) - \ln \delta(j, \tau)], \quad (4.19)$$

sono l'analogo delle quantità (4.16) e devono risultare statisticamente compatibili, affinché l'ipotesi di fattorizzazione sia verificata. La ricostruzione del fattore temporale  $h(t)$  è

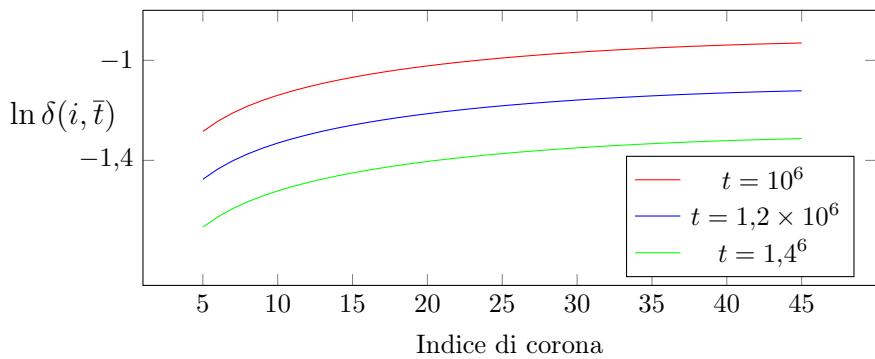
$$\frac{h(t)}{h(t_0)} = \exp \left\{ \frac{1}{(i_f - i_0)} \sum_{\tau=t_0}^t \sum_{j=i_0}^{i_f} [\ln \delta(j, \tau + 1) - \ln \delta(j, \tau)] \right\}. \quad (4.20)$$

Anche in questo caso, la (4.18) risulta valida per tempi intermedi e se si trascu-

### Verifica dell'ipotesi di fattorizzazione

La verifica dell'ipotesi di fattorizzazione è stata svolta su tutto l'insieme di configurazioni presentato in 3.5. I risultati ottenuti sulle varie configurazioni sono analoghi e possono essere facilmente riassunti come segue:

- fissato il semilato reticolare  $L$  e la densità iniziale  $\tilde{\rho}$ , le quantità  $\ln \delta(i, t)$  mostrano un andamento lineare nello spazio, se si esclude un transiente iniziale che arriva fino a tempi dell'ordine del quadrato  $L^2$  del semilato reticolare. Il fit del logaritmo della densità con la retta  $at + b$  produce, per tutte le corone, dei coefficienti angolari  $a$  statisticamente compatibili. Le  $\ln \delta(i, t)$  risultano quindi essere rette tra loro parallele, confermando l'ipotesi di fattorizzazione sulla parte spaziale.
- Per le quantità  $\ln \delta(i, t)$  a  $t$  fissato, indipendentemente dalla configurazione si ottiene un andamento in funzione dello spazio analogo a quello visibile nel seguente grafico

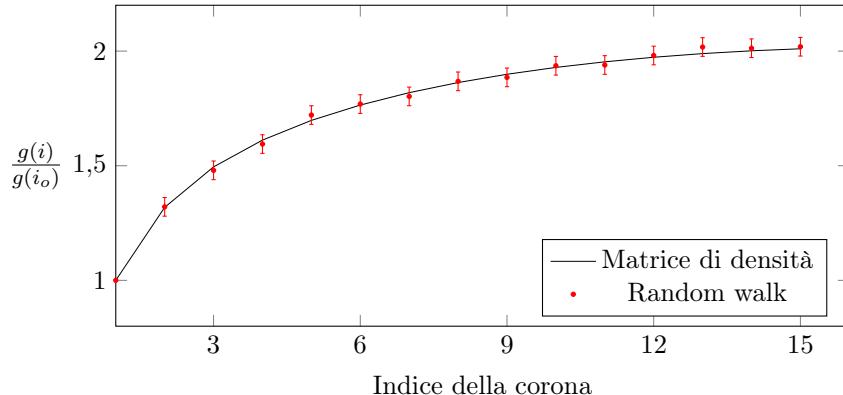


in cui sono mostrati gli andamenti per 3 tempi differenti, nel caso di un reticolo di semilato  $L = 250$  e densità iniziale  $\tilde{\rho} = 2^{-8}$ .

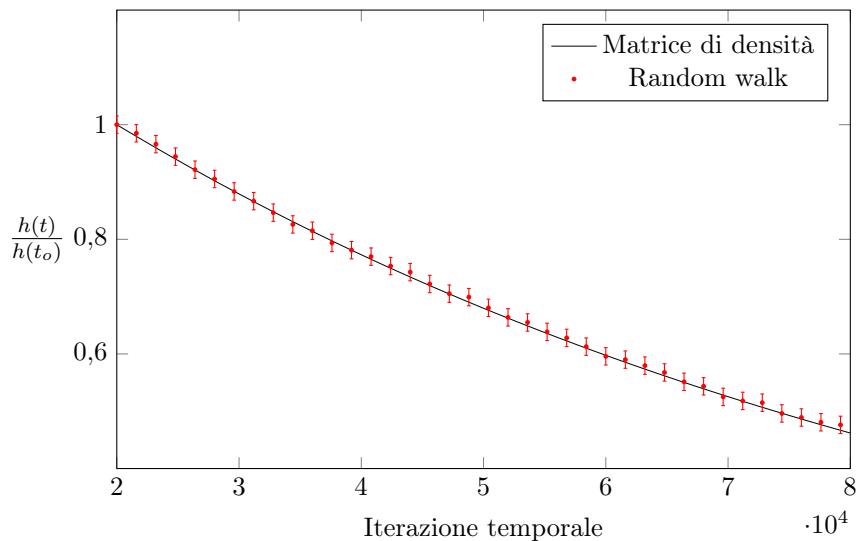
Per ogni differente configurazione reticolare, è stata verificata la compatibilità statistica delle quantità definite in (4.19).

### Ricostruzione dei fattori

Verificata l'ipotesi di fattorizzazione per le densità, grazie a un programma appositamente scritto sono stati calcolati i due fattori della  $\delta(i, t)$  a meno di una costante di proporzionalità. Nei grafici in figura 4.6 e 4.6 sono rispettivamente mostrate le ricostruzioni del fattore spaziale e temporale nel caso di un reticolo di semilato  $L = 75$  e densità media iniziale  $\bar{\rho} = 2^{-8}$ .



**Figura 4.5:** Ricostruzione dell'andamento di  $g(i)/g(i_o)$  per il modello a matrice di densità e per il modello a random walk, con indici di corona  $i_o = 1$  e  $i \in [1, 15]$ , nel caso di semilato reticolare  $L = 75$  e densità iniziale 0,0039.



**Figura 4.6:** Ricostruzione dell'andamento del rapporto  $h(t)/h(t_o)$  per il modello a matrice di densità e per il modello a random walk, con indici temporali  $t_o = 20\,000$  e  $t \in [20\,000, 80\,000]$ , nel caso di semilato reticolare  $L = 75$  e densità iniziale 0,0039.



# Ringraziamenti

Ringrazio, con tutto il cuore e il cervello, la Prof. **Elisabetta Scoppola** per avermi introdotto ai processi stocastici, proponendomi un lavoro di tesi che ha rappresentato una bellissima opportunità di crescita personale e culturale. Insieme a lei, ringrazio sentitamente il Dr. **Francesco Manzo**, per avermi supportato e sopportato con molta pazienza e tenacia in questo percorso.

Ringrazio tutti quelli che mi sono stati vicino, fornendomi inesauribili dimostrazioni di amicizia nei momenti in cui *lo studio* prendeva il sopravvento.

Tra questi, un posto privilegiato spetta a **Valerio Boncompagni** e ai miei amici linuxiani **Andrea Marinelli**, **Daniele Lugli**, **Marco Chieppa** e **Francesco Romani**.

Molto utili e graditi sono stati, inoltre, i contributi di **Vincenzo Lo Cicero** nello sviluppo del parser della riga di comando a cui ho accennato nell'appendice B, e di **Agner Fog** per aver messo a disposizione in rete i codici del generatore di numeri pseudocasuali Mersenne Twister, abbondantemente usato nel corso delle simulazioni del modello particellare a random walk.

Un pensiero speciale va alla mia famiglia a cui questo lavoro è dedicato, mia nonna **Aurelia** e mia madre **Maria Luisa**, mio fratello **Alessio** e il mio caro amico **Andrea**: con voi, e qualche volta anche contro di voi, ho avuto la fortuna di vivere in uno splendido sistema metastabile, ancora prima di avere la possibilità di studiarne uno matematicamente... ora possiamo rilassarci verso l'equilibrio.



# A | Simulazione numerica di catene di Markov

Per poter avere applicazioni pratiche delle catene di Markov, uno degli aspetti cruciali è riuscire a simularne l'evoluzione con un computer.

Questo aspetto comporta l'analisi di due punti distinti. Il primo è creare un algoritmo consistente, per simulare una catena di Markov, che possa essere tradotto in un linguaggio di programmazione. Il secondo è relativo alle problematiche inerenti l'uso di un generatore di numeri pseudocasuali per ottenere una sequenza di variabili i.i.d.  $(U_0, U_1, \dots)$  necessaria all'algoritmo.

## A.1 Algoritmo

Per quanto riguarda l'algoritmo, si supponga di voler simulare una catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$  con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$ , probabilità di transizione  $P$  e distribuzione iniziale  $\mu^{(0)}$ .

Gli ingredienti fondamentali di questo algoritmo sono dati da una sequenza di numeri casuali  $(U_0, U_1, \dots)$  e due funzioni, una detta di inizializzazione e una detta di aggiornamento.

La funzione di inizializzazione  $\psi: [0, 1] \rightarrow S$  è usata per generare il valore iniziale  $X_0$  e deve soddisfare le condizioni

- i) è costante a tratti sull'intervallo  $[0, 1]$
- ii) per ogni  $s \in S$  la lunghezza totale degli intervalli su cui  $\psi(x) = s$  è pari ad  $s$ , ovvero

$$\int_0^1 \mathbb{1}_{\{\psi(x)=s\}}(x) dx = \mu^{(0)}(s) \quad \forall s \in S \quad (\text{A.1})$$

in cui  $\mathbb{1}_{\{\psi(x)=s\}}$  è la funzione indicatrice di  $\{\psi(x) = s\}$

$$\mathbb{1}_{\{\psi(x)=s\}}(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } \psi(x) = s \\ 0 & \text{altrimenti.} \end{cases}$$

Data questa funzione di inizializzazione, si può generare  $X_0$  a partire dal primo numero  $U_0$  della sequenza di numeri casuali, ponendo

$$X_0 = \psi(U_0)$$

Per vedere che in questo modo si ottiene la corretta distribuzione per  $X_0$ , basta osservare che, data la (A.1), per ogni  $s \in S$  si ha

$$\mathbb{P}\{X_0 = s\} = \mathbb{P}\{\psi(U_0) = s\} = \int_0^1 \mathbb{1}_{\{\psi(x)=s\}}(x) dx = \mu^{(0)}(s).$$

In questo senso,  $\psi$  è una valida funzione di inizializzazione per la catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$ .

Dato lo spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$  la costruzione esplicita di una valida funzione di inizializzazione può essere

$$\psi(x) = \begin{cases} s_1 & \text{per } x \in [0, \mu^{(0)}(s_1)) \\ \vdots & \\ s_i & \text{per } x \in [\sum_{j=1}^{i-1} \mu^{(0)}(s_j), \sum_{j=1}^i \mu^{(0)}(s_j)) \\ \vdots & \\ s_k & \text{per } x \in [\sum_{j=1}^{k-1} \mu^{(0)}(s_j), 1) \end{cases}$$

Con questa scelta per la funzione di inizializzazione, è facile vedere che le proprietà i) è ovviamente soddisfatta, mentre per verificare la ii) si ha

$$\int_0^1 \mathbb{1}_{\{\psi(x)=s\}}(x) dx = \sum_{j=1}^i \mu^{(0)}(s_j) - \sum_{j=1}^{i-1} \mu^{(0)}(s_j) = \mu^{(0)}(s_i)$$

per ogni  $i = 1, \dots, k$ .

Capito il modo in cui generare  $X_0$ , si deve riuscire a generare  $X_{n+1}$  a partire da  $X_n$  per ogni  $n$ . Per questo si ricorre al numero casuale  $U_{n+1}$  e alla funzione di aggiornamento  $\phi: S \times [0, 1] \rightarrow S$ , che prende in ingresso uno stato  $s \in S$  e un numero nell'intervallo  $[0, 1]$  e produce uno stato  $s' \in S$ . Questa funzione deve soddisfare le due condizioni

- i) fissato  $s_i$ , la funzione  $\phi(s_i, x)$  è costante a tratti in  $x$
- ii) per ogni coppia di stati  $s_i, s_j \in S$  la lunghezza dell'intervallo per il quale  $\phi(s_i, x) = s_j$  è pari a  $P_{i,j}$ , ovvero

$$\int_0^1 \mathbb{1}_{\{\phi(s_i, x)=s_j\}}(x) dx = P_{i,j} \quad \forall s_i, s_j \in S. \quad (\text{A.2})$$

Se la funzione  $\phi$  soddisfa la (A.2), si ha

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{X_{n+1} = s_j \mid X_n = s_i\} &= \mathbb{P}\{\phi(s_i, U_{n+1}) = s_j \mid X_n = s_i\} \\ &= \mathbb{P}\{\phi(s_i, U_{n+1}) = s_j\} \\ &= \int_0^1 \mathbb{1}_{\{\phi(s_i, x)=s_j\}}(x) dx \\ &= P_{i,j}, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

dove nella (A.3) il condizionamento sulla probabilità può essere tolto in virtù del fatto che  $U_{n+1}$  è indipendente da  $(U_0, \dots, U_n)$  e quindi anche da  $X_n$ .

In questo senso, una funzione  $\phi$  che soddisfi la (A.2) è una valida funzione di aggiornamento per la catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$ .

Per ogni  $s_i \in S$  la funzione di aggiornamento può essere costruita esplicitamente come

$$\psi(x) = \begin{cases} s_1 & \text{per } x \in [0, P_{i,1}) \\ \vdots & \\ s_i & \text{per } x \in \left[ \sum_{l=1}^{j-1} P_{i,l}, \sum_{l=1}^j P_{i,l} \right) \\ \vdots & \\ s_k & \text{per } x \in \left[ \sum_{l=1}^{k-1} P_{i,l}, 1 \right) \end{cases}$$

Così definita, per ogni coppia  $s_i, s_j \in S$  si avrà infatti

$$\int_0^1 \mathbb{1}_{\{\phi(s_i, x) = s_j\}}(x) dx = \sum_{l=1}^j P_{i,l} - \sum_{l=1}^{j-1} P_{i,l} = P_{i,j}.$$

Si hanno, ora, tutti gli ingredienti per simulare la catena di Markov come

$$\begin{aligned} X_0 &= \psi(U_0) \\ X_1 &= \phi(X_0, U_1) \\ X_2 &= \phi(X_1, U_2) \\ &\vdots \\ X_n &= \phi(X_{n-1}, U_n). \end{aligned}$$

## A.2 Generatore di numeri casuali

Nella maggior parte dei linguaggi di programmazione, sono disponibili dei generatori di numeri casuali, ai quali ricorrere per produrre la sequenza di variabili casuali i.i.d.  $(U_0, U_1, \dots)$ , uniformemente distribuite nell'intervallo  $[0, 1]$ .

Occorre però fare alcune precisazioni. Due sono di natura generale:

- i) La sequenza ottenuta con un generatore di numeri non è, in realtà, uniformemente distribuita sull'intervallo  $[0, 1]$ . Questo è dovuto al fatto che i numeri prodotti sono razionali, per via della loro rappresentazione binaria, in contrasto con la possibilità di dimostrare che una variabile casuale uniformemente distribuita su  $[0, 1]$  assume valori irrazionali con probabilità 1.
- ii) La sequenza non è, in realtà, neanche casuale e il motivo è l'algoritmo deterministico usato per generare i numeri. Per questo si parla, più propriamente, di generatori di numeri pseudocasuali.

La i) in realtà non è un grande problema, perché basta avere una rappresentazione binaria ragionevolmente grande, per esempio a 32 bit. La ii) è invece l'obiezione più dura delle due e la si deve tenere in considerazione, nelle simulazioni numeriche.

Attualmente, esistono generatori di numeri pseudocasuali molto raffinati, le cui sequenze di numeri casuali superano test statistici appositamente studiati per

valutarne la bontà. Si fa, pertanto, l'assunzione che questi generatori mettano a disposizione delle vere e proprie sequenze di numeri casuali i.i.d. uniformemente su  $[0, 1]$ .

La terza considerazione, invece, riguarda le simulazioni vere e proprie per il modello a random walk, descritte in appendice B. In queste simulazioni è stata inizialmente usata, come generatore di numeri pseudocasuali, la famiglia di funzioni `rand48`, disponibile su piattaforme di tipo \*nix, per il linguaggio C++ in cui sono state scritte le simulazioni.

Questa famiglia di funzioni, però, si è dimostrata inadeguata per gli scopi delle simulazioni, dando problemi dovuti alla correlazione tra i numeri prodotti e portando alla scelta di sostituire tali generatori con il più raffinato e affidabile algoritmo che prende il nome di Mersenne Twister.

# B | Sorgenti dei codici

It's not a bug, it's a feature.

---

## B.1 Modello particellare

In questo paragrafo, si discutono gli aspetti interessanti del programma implementato per la simulazione del modello particellare, i cui sorgenti sono disponibili in <https://github.com/LeonardoPozzati/MetastableRandomWalk>.

### B.1.1 Namespace MyTypes

Come prima accortezza, è stato creato il namespace `MyTypes` per semplificare la codifica e la lettura di alcuni tipi di variabile dalla struttura complessa.

MyTypes.h

```
1 #ifndef MyTypes_H
2 #define MyTypes_H
3
4 #include <utility>
5 #include <list>
6 #include <map>
7
8 namespace MyTypes{
9
10    //tipi usati nelle classi Grid e DensManager
11    typedef std::pair<signed long, signed long> coords;
12    typedef std::list<coords> coordsList;
13    typedef std::list<coords>::size_type partsCounter;
14
15    //struttura per la trappola della classe Grid
16    struct Trap {
17        coords position;
18        bool initiallyPopulated;
19        double stickiness;
20        partsCounter totalTrapped;
21        unsigned long trappingCounter, emissionCounter;
22
23        Trap(coords trapPos, bool partAtInit,
24              double glue, partsCounter trapped):
25            position(trapPos), initiallyPopulated(partAtInit),
26            stickiness(glue), totalTrapped(trapped) {}
27    };
}
```

```

28     //tipi usati solo nella classe DensManager
29     typedef std::pair<unsigned long, unsigned long> countAndNorm;
30     typedef std::map<unsigned long, countAndNorm> idVsCountAndNorm;
31 }
32
33 #endif

```

I primi tre tipi di dato forniti da questo namespace sono intuitivi; è invece opportuno chiarire il modo in cui è stata modellizzata la trappola nell'origine del reticolo  $\Lambda_L$  per il modello particellare.

Come si può vedere facilmente dal codice del costruttore della struttura `Trap`, quando ne viene creata un'istanza vengono inizializzate le sue variabili interne:

- `position`, che ovviamente indica la posizione della trappola ed è stata lasciata libera di essere inizializzata, nell'eventualità di voler studiare, in futuro, configurazioni reticolari in cui non corrisponda all'origine;
- `initiallyPopulated`, che è una variabile booleana e indica se, nella distribuzione casuale iniziale delle particelle nel reticolo, si vuole tenere in considerazione anche il sito in cui è posizionata la trappola;
- `stickiness`, che corrisponde a  $1 - p_e$ , in cui  $p_e \in [0, 1]$  è la probabilità di emissione per il modello, e su cui si tornerà quando verrà affrontato l'aspetto dinamico della simulazione;
- `totalTrapped`, che è un contatore del numero di particelle intrappolate e, se inizializzato ad un valore non nullo maggiore di zero, permette di avere la libertà di disporre un numero di particelle direttamente nella trappola, all'avvio della simulazione.

L'uso combinato delle due variabili `totalTrapped` e `initiallyPopulated` permette la gestione di quattro scenari, quando si crea un'istanza della trappola:

- non si dispone un numero noto di particelle nella trappola e questa non viene neanche considerata come uno dei siti del reticolo su cui distribuire inizialmente le particelle in modo casuale;
- la trappola continua a non essere considerata nella distribuzione casuale iniziale delle particelle, ma si posiziona al suo interno un numero noto di particelle;
- la trappola viene presa in considerazione nella distribuzione iniziale, ma non si aggiunge un ulteriore numero noto di particelle da posizionarci;
- la trappola viene presa in considerazione nella distribuzione iniziale e, in più, si posiziona al suo interno un ulteriore numero noto di particelle.

Oltre a questi membri, la struttura che descrive la trappola è fornita anche di due contatori `trappingCounter` ed `emissionCounter`, per il conteggio del numero di intrappolamenti e di emissioni. Queste due variabili servono più che altro per un ulteriore controllo sulla conservatività del modello durante la simulazione numerica.

Gli ultimi due tipi di dato sono meno intuitivi, ma verranno illustrati in B.1.4, nella spiegazione della classe `DensManager` in cui vengono usati.

### B.1.2 Implementazione del modello

Il modello è stato implementato ricorrendo a due classi: la classe `Grid`, per gestire gli aspetti della dinamica del modello, e la classe `DensManager`, per gestire gli aspetti del conteggio delle particelle e della gestione delle densità.

### B.1.3 Classe Grid

L'interfaccia della classe che gestisce la dinamica del modello è data da

`Grid.h`

```

1 #ifndef Grid_H
2 #define Grid_H
3
4 #include <utility>
5 #include <list>
6 #include <iostream>
7 #include <algorithm>
8 #include "MyTypes.h"
9 #include "randomc.h"
10
11 class Grid {
12     signed long halfSide;
13     MyTypes::Trap *gridTrap;
14     MyTypes::partsCounter gridPart;
15     unsigned seed;
16     CRandomMersenne RandGen;
17     MyTypes::coordsList gridWalkers;
18     struct isAt;
19
20 public:
21     Grid(const signed long &bound,
22           const MyTypes::coords &trapPos,
23           const bool &initiallyTrapped,
24           const double &glueStrength,
25           const MyTypes::partsCounter &initiallyTrappedPart,
26           const MyTypes::partsCounter &initiallyGridPart,
27           const unsigned &GenSeed);
28     void particlesDistribute();
29     void trappedRemoval();
30     void trapEmission();
31     void oneStepMove();
32     MyTypes::coordsList getWalkers();
33     MyTypes::partsCounter howManyWalkers();
34     MyTypes::partsCounter howManyTrapped();
35     unsigned long howManyTrappings();
36     unsigned long howManyEmissions();
37     ~Grid();
38     friend std::ostream& operator<< (std::ostream &,
39                                         const Grid &);
40 };
41
42 #endif

```

Il significato dei membri privati della classe `Grid` è facilmente intuibile dal nome stesso:

- `halfSide` è il semilato  $L$  del reticolo  $\Lambda_L$ ;
- `*gridTrap` è un puntatore a una struttura di tipo `Trap`, che abbiamo visto modellizzare la trappola del reticolo  $\Lambda$ ;

- `gridPart` è il contatore delle particelle inizialmente distribuite nel reticolo;
- `seed` è il seme di inizializzazione del generatore di numeri pseudocasuali;
- `RandGen` è il generatore;
- `gridWalkers` è la lista delle coordinate dei random walker liberi;

`isAt` è una struttura usata come predicato, per indicare al programma quale è la condizione verificata la quale una particella libera viene intrappolata.

Per quanto riguarda le funzioni membro private, è sicuramente interessante vedere come viene inizializzato il sistema. Il costruttore della classe è

Costruttore della classe `Grid`

```

1 Grid::Grid(const signed long &bound,
2             const coords &trapPos,
3             const bool &initiallyTrapped,
4             const double &glueStrength,
5             const partsCounter &initiallyTrappedPart,
6             const partsCounter &initiallyGridPart,
7             const unsigned &GenSeed):
8             halfSide(bound),
9             gridTrap(new Trap(trapPos, initiallyTrapped,
10                           glueStrength, initiallyTrappedPart)),
11            gridPart(initiallyGridPart),
12            seed(GenSeed),
13            RandGen(seed)
14            { particlesDistribute(); }
```

Nella lista di inizializzazione, viene inizializzato il semilato del reticolo, allocata dinamicamente la trappola, la cui inizializzazione separata è stata discussa precedentemente, inizializzato il numero di particelle e il generatore di numeri casuali; successivamente viene chiamata la funzione `particleDistribute()`.

`Grid::particleDistribute()`

```

1 void Grid::particlesDistribute() {
2     coords partPos;
3     partsCounter partIndex;
4     for(partIndex=1; partIndex<=gridPart;){
5         partPos.first = RandGen.IRandomX(0, 2*halfSide) - halfSide;
6         partPos.second = RandGen.IRandomX(0, 2*halfSide) - halfSide;
7         if(gridTrap->initiallyPopulated) {
8             gridWalkers.push_back(partPos);
9             ++partIndex;
10        } else {
11            if(partPos.first || partPos.second) {
12                gridWalkers.push_back(partPos);
13                ++partIndex;
14            }
15        }
16    }
17 }
18 }
```

Il compito svolto da questa funzione, come suggerisce anche il nome, è appunto la distribuzione casuale delle particelle nel reticolo, distinguendo il caso in cui sia richiesto di tenere in considerazione anche la trappola da quello in cui si preferisca ignorarla.

Nel caso in cui si scelga di distribuire le particelle iniziali, indifferentemente, anche sul sito in cui è presente la trappola, occorre eliminare queste particelle dalla lista dei random walker liberi. Per questo, è stata implementata la funzione

Grid::trappedRemoval()

```

1 void Grid::trappedRemoval() {
2     partsCounter initial = gridWalkers.size();
3     gridWalkers.remove_if(isAt(gridTrap->position));
4     gridTrap->totalTrapped += (initial - gridWalkers.size());
5 }
```

il cui compito è, appunto, la rimozione delle particelle intrappolate dalla lista dei random walker e l'aggiornamento del contatore `totalTrapped`. Come si vede, nella funzione `remove_if` della libreria standard del C++ si usa la struttura `isAt` come predicato. Anche se in questo caso di singola trappola è analogo all'uso della una coppia di coordinate della trappola, questo uso è pensato per sviluppi futuri, in cui possono essere aggiunte ulteriori trappole.

Come illustrato nello studio del modello a random walk nel paragrafo 3.1, se la trappola è popolata ha una probabilità di emissione di una particella, a sua volta espulsa in modo equiprobabile in uno dei primi vicini della trappola. L'espulsione della particella è affidata alla funzione `trapEmission()`, la cui implementazione è

Grid::trapEmission()

```

1 void Grid::trapEmission() {
2     if(RandGen.Random()>gridTrap->stickiness) {
3         --gridTrap->totalTrapped;
4         ++gridTrap->emissionCounter;
5         int mossa = RandGen.IRandomX(0, 3);
6         coords expelled(gridTrap->position);
7         if(mossa == 0) {
8             expelled.first += 1;
9         } else if(mossa == 1) {
10            expelled.second += 1;
11        } else if(mossa == 2) {
12            expelled.first -= 1;
13        } else {
14            expelled.second -= 1;
15        }
16        gridWalkers.push_back(expelled);
17    }
18 }
```

La procedura consiste nell'estrazione di un numero pseudocasuale, compreso nell'intervallo  $[0, 1]$ ; se questo è maggiore del valore impostato per la variabile `stickiness` della trappola, viene estratto un numero intero casuale nell'intervallo  $[0, 3]$  e viene quindi espulsa la particella su uno dei primi vicini della trappola. In questa procedura, il contatore `totalTrapped` viene diminuito di una unità, mentre `emissionCounter` è incrementato.

È ora possibile analizzare la funzione `oneStepMove`, che si occupa di far evolvere di un singolo passo il sistema, nel suo complesso. L'implementazione di questa funzione è

```
Grid::oneStepMove()
1 void Grid::oneStepMove() {
2     partsCounter previouslyTrapped = gridTrap->totalTrapped;
3     coordsList::iterator it1;
4     int mossa;
5     for(it1=gridWalkers.begin();it1!=gridWalkers.end();/*inside*/) {
6         mossa = RandGen.IRandom(0, 3);
7         if(mossa == 0) {
8             if((*it1).first == halfSide) {
9                 (*it1).first = -halfSide;
10            } else ++((*it1).first);
11        } else if(mossa == 1) {
12            if((*it1).second == halfSide) {
13                (*it1).second = -halfSide;
14            } else ++((*it1).second);
15        } else if(mossa == 2) {
16            if((*it1).first == -halfSide) {
17                (*it1).first = halfSide;
18            } else --((*it1).first);
19        } else {
20            if((*it1).second == -halfSide) {
21                (*it1).second = halfSide;
22            } else --((*it1).second);
23        }
24        if((*it1) == gridTrap->position) {
25            it1 = gridWalkers.erase(it1);
26            ++gridTrap->totalTrapped;
27            ++gridTrap->trappingCounter;
28        } else {
29            it1++;
30        }
31    }
32    if(previouslyTrapped) {
33        trapEmission();
34    }
35 }
```

Come prima operazione, viene registrato in una variabile il numero di particelle totali intrappolate prima di far evolvere i random walker. Per l'evoluzione di questi ultimi, si scorre la lista delle coordinate dei random walker e a ognuna si applica l'algoritmo di evoluzione:

- a seconda del numero pseudocasuale estratto nell'intervallo [0, 3] il random walker si muove in uno dei 4 primi vicini, tenendo ovviamente in considerazione le condizioni al contorno periodiche;
- per ogni random walker mosso, si controlla se è stato intrappolato e, in questo caso, viene rimosso dalla lista dei random walker liberi, con l'incremento degli opportuni contatori;
- nel ciclo `if` finale, si controlla se all'inizio del turno la trappola era popolata e, nel caso, viene chiamata la funzione `trapEmission()`.

La classe `Grid` ha cinque funzioni membro per poter accedere al valore delle variabili private

Funzioni per accedere al valore di variabili private

```

1 coordsList Grid::getWalkers() {
2     return gridWalkers;
3 }
4 partsCounter Grid::howManyWalkers() {
5     return gridWalkers.size();
6 }
7 partsCounter Grid::howManyTrapped() {
8     return gridTrap->totalTrapped;
9 }
10 unsigned long Grid::howManyTrappings() {
11     return gridTrap->trappingCounter;
12 }
13 unsigned long Grid::howManyEmissions() {
14     return gridTrap->emissionCounter;
15 }
```

Il distruttore della classe, il cui codice è stato omesso, si occupa di liberare lo spazio allocato in memoria per la struttura che descrive la trappola e stampa alcune informazioni di controllo sulla simulazione in un file di log.

Per concludere, è stato eseguito l'overload dell'operatore di output, per poter stampare a video le coordinate dei random walker liberi opportunamente formattate

Overload dell'operatore di output per la classe `Grid`

```

1 ostream &operator<<( ostream &output, const Grid &myGrid) {
2     coordsList::const_iterator it1;
3     for(it1=myGrid.gridWalkers.begin();
4         it1!=myGrid.gridWalkers.end();
5         ++it1) {
6         cout << "(" << (*it1).first << ", "
7             << (*it1).second << ") ";
8     } cout << endl;
9     return output;
10 }
```

### B.1.4 Classe DensManager

Alla classe `DensManager` è affidata la gestione del calcolo delle densità e della loro stampa in un formato su cui sia poi semplice fare analisi dati. L’interfaccia della classe è

```

DensManager.h
1  #ifndef DensManager_H
2  #define DensManager_H
3
4  #include <iostream>
5  #include <list>
6  #include <map>
7  #include <cmath>
8  #include "MyTypes.h"
9
10 class DensManager {
11     signed long halfSide;
12     unsigned long crownStep;
13     MyTypes::idVsCountAndNorm crCountVsNorm;
14 public:
15     DensManager(const signed long &, const unsigned long &);
16     unsigned long crRecog(const MyTypes::coords &);
17     unsigned long circleSites(const unsigned long &);
18     void counterInit();
19     void counterTimeScale(const unsigned long &);
20     void counterUpdate(const MyTypes::coordsList &);
21     void counterReset();
22     ~DensManager();
23     friend std::ostream& operator<< (std::ostream &,
24                                         const DensManager &);
25
26 };
27
28 #endif
```

La classe ha due variabili private collegate alla descrizione del reticolo:

- `halfSide`, che anche in questo caso rappresenta il semilato del reticolo  $\Lambda_L$ ;
- `crownStep`, che rappresenta il passo  $\ell$  delle corone circolari  $\Xi(i, \ell)$ , introdotte nella (3.9).

La variabile della classe con cui si gestisce tutto il conteggio è `crCountVsNorm`. Il tipo di questa variabile è `MyTypes::idVsCountAndNorm`, definito nel namespace `MyTypes` come

Tipi di dato `countAndNorm` e `idVsCountAndNorm`

```

1  typedef std::pair<unsigned long, unsigned long> countAndNorm;
2  typedef std::map<unsigned long, countAndNorm> idVsCountAndNorm;
```

Il tipo di dato `MyTypes::idVsCountAndNorm` è un container associativo di tipo `std::map`, che associa una chiave numerica intera a un elemento mappato di tipo `MyTypes::countAndNorm`. La chiave numerica intera rappresenta l’indice della corona; la variabile mappata, invece, è di tipo `std::pair` e consiste in una coppia di numeri interi, di cui il primo conteggia le particelle, mentre il secondo è il fattore di normalizzazione. Per capirne meglio il funzionamento, si deve vedere l’implementazione delle funzioni membro della classe `DensManager`.

Il codice del costruttore della classe è

Costruttore della classe DensManager

```

1 DensManager::DensManager(const signed long &bound,
2                           const unsigned long &step):
3                           halfSide(bound), crownStep(step)
4                           { counterInit(); }
```

Come si vede, il costruttore si occupa di inizializzare il semilato del reticolo e il passo delle corone, per poi chiamare la funzione `counterInit`, che si occupa di riempire i fattori di normalizzazione della variabile `crCountVsNorm`. L'implementazione di questa funzione è

DensManager::counterInit()

```

1 void DensManager::counterInit() {
2     unsigned long out = 0, in = 0, counter = 0;
3     for(; counter<(halfSide/crownStep);++counter){
4         out = circleSites((counter+1)*crownStep);
5         crCountVsNorm.insert(make_pair(counter+1,
6                                         make_pair(0, out - in)));
7         in = out;
8     }
9     crCountVsNorm.insert(make_pair(counter+1,
10                         make_pair(0,
11                             (2*halfSide+1)*(2*halfSide+1)
12                             - out))
13                         );
14     (crCountVsNorm[1]).second -= 1;
15 }
```

in cui si fa uso dell'altra funzione membro

DensManager::circleSites(const unsigned long &r)

```

1 unsigned long DensManager::circleSites(const unsigned long &r){
2     unsigned long diagonal = (int) (r/sqrt(2));
3     unsigned long internal = 0;
4     unsigned long counter = 0;
5     for (counter=1;counter<=diagonal;++counter) {
6         internal += sqrt(r*r - counter*counter) - counter;
7     }
8     return 8*internal + 4*(diagonal + r) + 1;
9 }
```

La funzione `circleSites`, come suggerisce il nome, si occupa di calcolare il numero di siti reticolari interni a una circonferenza di raggio `r`. A partire da questi valori, supponendo di lavorare su un reticolo di semilato  $L$  ricoperto da corone di passo  $\ell$ , la funzione `counterInit`:

- per  $i = 1, \dots, L/\ell$  calcola la differenza tra il numero di punti contenuti nelle circonferenze di raggio  $i\ell$  e  $(i-1)\ell$  e la inserisce come fattore di normalizzazione nell'elemento di `crCountVsNorm` associato all'indice di corona  $i$ ;
- calcola la differenza tra siti contenuti in tutto il reticolo e quelli contenuti nella circonferenza inscritta, ottenendo così il numero dei siti contenuti nella corona generalizzata, e li inserisce nell'elemento di `crCountVsNorm` associato all'indice  $L/\ell + 1$ ;

- elimina dal conteggio dei siti della prima corona quello associato alla trappola.

È opportuno ricordare che con questa procedura, come spiegato anche nella presentazione del modello nella sezione 3.1, non si considerano appartenenti alla corona i siti che cadono sulla circonferenza di raggio minore; analogamente la trappola non è considerata un sito della prima corona.

Sempre per quanto riguarda il fattore di normalizzazione, oltre a quello spaziale si è tenuto in considerazione quello temporale con la funzione membro `counterTimeScale`. Questa funzione, semplicemente, moltiplica il fattore di normalizzazione spaziale per il numero di iterazioni che intercorrono tra una misura e la successiva. Il suo codice è

```
DensManager::counterTimeScale(const unsigned long &timeScale)
1 void DensManager::counterTimeScale(const unsigned long &timeScale){
2     idVsCountAndNorm::iterator it1;
3     for(it1=crCountVsNorm.begin();it1!=crCountVsNorm.end();++it1) {
4         ((*it1).second).second *= scale;
5     }
6 }
```

Per quanto riguarda le altre funzioni membro della classe `DensManager`, la funzione

```
DensManager::crRecog(const coords &position)
1 unsigned long DensManager::crRecog(const coords &position) {
2     double a = sqrt( (position.first)*(position.first) +
3                      (position.second)*(position.second) );
4     if(a == 0) {
5         return 1;
6     } else if(a > halfSide) {
7         return halfSide / crownStep + 1;
8     } else if(fmod(a, crownStep) != 0) {
9         return int(a / crownStep) + 1;
10    } else {
11        return int(a / crownStep);
12    }
13 }
```

prende come parametro la coppia di coordinate di un random walker e ne mostra l'indice della corona in cui si trova.

La funzione `counterUpdate` si occupa di aggiornare il conteggio delle particelle nella variabile `crCountVsNorm`. Il suo codice è

```
DensManager::counterUpdate(const coordsList &walkersCoords)
1 void DensManager::counterUpdate(const coordsList &walkersCoords){
2     coordsList::const_iterator it1;
3     unsigned long crown;
4     for(it1=walkersCoords.begin(); it1!=walkersCoords.end(); ++it1){
5         crown = crRecog(*it1);
6         crCountVsNorm[crown].first += 1;
7     }
8 }
```

Come si vede, prende in ingresso la lista di coordinate dei random walker e, per ogni coppia di coordinate, individua il numero di corona in cui si trova il random walker e aggiorna l'opportuno contatore.

Il conteggio appena visto, dopo ogni misura, va azzerato e questo compito è gestito dalla funzione `counterReset`, che reimposta a zero tutti i contatori e il cui codice è

```

DensManager::counterReset()
1 void DensManager::counterReset(){
2     idVsCountAndNorm::iterator it1;
3     for(it1=crCountVsNorm.begin();it1!=crCountVsNorm.end();++it1){
4         ((*it1).second).first = 0;
5     }
6 }
```

Il distruttore, come nel caso della classe `Grid`, si occupa di stampare alcune informazioni di controllo su un file di log.

Per concludere, le quantità misurate devono essere memorizzate su un file con una formattazione che tenga in considerazione la successiva analisi dati. Di questa procedura si occupa l'overload dell'operatore di output `<<` per la classe `DensManager`, il cui codice è

#### Overload dell'operatore di output per la classe `DensManager`

```

ostream &operator<<( ostream &output, const DensManager &toPrint){
1     idVsCountAndNorm::const_iterator it1;
2     for(it1=toPrint.crCountVsNorm.begin();
3         it1!=toPrint.crCountVsNorm.end();++it1){
4         cout << (float)((*it1).second.first) /
5             (float)((*it1).second.second) << ",";
6     } cout << (float)((*it1).second.first) /
7         (float)((*it1).second.second);
8     return output;
9 }
10 }
```

Per ogni corona, compresa quella generalizzata più esterna, vengono stampati i rapporti tra i conteggi del numero di particelle e i fattori di normalizzazione, dopo aver fatto le opportune conversioni a `float`. Come separatore tra i campi, è stata scelta la virgola, dal momento che il punto è il separatore decimale nella notazione anglosassone, usata generalmente dai linguaggi di programmazione.

### B.1.5 Struttura del main

Avendo a disposizione le singole parti che concorrono alla descrizione del modello, alla gestione della sua dinamica, al calcolo e alla stampa delle osservabili, è ora possibile analizzare il codice del `main` del programma.

La prima parte del `main` si occupa di impostare i valori delle variabili del sistema che si desidera simulare, analizzando i parametri passati al momento del lancio delle simulazioni con comandi del tipo

```

1 ./RandomWalk --glue 1 --part 20201 --bound 250 --step 5 \\
2 --duration 1000000 --print 20 --seed 123
```

Questa parte iniziale fa uso di un parser appositamente implementato e i cui dettagli, ai fini di questa analisi, possono essere tralasciati supponendo di lavorare con i parametri già impostati.

La porzione di codice del `main` che si occupa di simulare il modello si può dividere in due parti: la prima si occupa solo dell'istante iniziale, mentre la seconda gestisce l'evoluzione successiva nel suo complesso.

Nella prima parte, il cui codice è

```

1  Grid MyGrid(bound, trapPos, initiallyTrapped, glue,
2          trappedPart, gridPart, seed);
3  DensManager DensHandle(bound, step);
4  if(initiallyTrapped) {
5      MyGrid.trappedRemoval();
6  }
7  DensHandle.counterUpdate(MyGrid.getWalkers());
8  cout << DensHandle << ","
9      << MyGrid.howManyTrapped() << ",0" << endl;
10 DensHandle.counterReset();

```

- vengono creati un oggetto di tipo `Grid` e uno di tipo `DensManager`, con i parametri richiesti;
- se la distribuzione iniziale delle particelle ha tenuto in considerazione anche la trappola, la lista delle coordinate dei random walker viene controllata per rimuovere quelli posizionati nella trappola;
- vengono aggiornati i contatori, vengono stampate le osservabili per  $t = 0$  e infine vengono riazzerati i contatori.

Si noti che, nella stampa delle osservabili, oltre alle densità medie vengono stampati anche il numero di particelle intrappolate e l'iterazione, sempre usando la virgola come separatore.

Nella parte di codice successiva, che si occupa di simulare l'evoluzione temporale del modello e il cui codice è

```

1  DensHandle.counterTimeScale(printStep);
2  unsigned long time, cicle;
3  for(cicle=1;cicle<=duration/printStep;cicle++){
4      time = (cicle - 1) * printStep + 1;
5      for(; time<=cicle * printStep; time++) {
6          MyGrid.oneStepMove();
7          DensHandle.counterUpdate(MyGrid.getWalkers());
8      }
9      cout << DensHandle << ","
10     << MyGrid.howManyTrapped() << ","
11     << time - 1 << endl;
12     DensHandle.counterReset();
13 }

```

- i fattori di normalizzazione spaziali vengono moltiplicati per il numero di iterazioni tra una misura e la successiva;
- il numero totale di iterazioni viene suddiviso in cicli all'interno dei quali, in ogni iterazione il sistema viene fatto evolvere e i contatori vengono aggiornati;
- alla fine di ogni ciclo, vengono stampate le osservabili e riazzerati i contatori.

Anche qui, ovviamente, oltre le densità vengono stampati il numero di particelle intrappolate e l'iterazione.

### B.1.6 Analisi dati per il modello particellare

Come visto, le simulazioni numeriche del sistema particellare producono in output stringhe numeriche, contenenti le densità medie delle corone, il numero di particelle intrappolate e l'iterazione corrispondente. Immaginando di lavorare con un reticolo  $\Lambda_L$ , di semilato  $L = 150$  e suddiviso in corone di semilato  $\ell = 5$ , le stringhe di output contengono:

- 31 campi associati alle densità medie nelle corone;
- 1 campo associato al numero di particelle intrappolate;
- 1 campo associato all'iterazione in cui si prende la misura.

Tralasciando il fatto che il numero di cifre significative per le densità può variare e fissandolo a 10, per semplicità, e trascurando le cifre per descrivere il numero di particelle intrappolate e l'iterazione, per poter memorizzare<sup>1</sup> una stringa di questo tipo occorrono circa 450 B.

Per poter analizzare il comportamento del sistema fino a tempi lunghi, una simulazione di una configurazione di questo tipo viene fatta evolvere per  $10^7$  iterazioni e considerando, inoltre, che si è ritenuto opportuno fare una misura ogni 20 iterazioni, ogni singolo file di output risulta composto da  $5 \cdot 10^5$  righe.

Moltiplicando la memoria necessaria per una singola riga e il numero complessivo delle righe, si ottiene che il file prodotto da una singola simulazione ha un dimensione approssimativa di 230 MB.

Nell'ambito della presentazione teorica del modello, nel paragrafo 3.4.2, è stata sottolineata l'importanza di mediare anche sulla distribuzione iniziale. Da un punto di vista numerico, questo si traduce nella necessità mediare su un numero di file testuali che può variare dal centinaio al migliaio, a seconda della densità iniziale.

Continuando ad approssimare per difetto, si può immaginare di lavorare con un dataset composto da 500 simulazioni, arrivando alla conclusione che in questo scenario l'analisi dati di ogni singola densità simulata comporta la gestione di circa 100 GB di informazioni.

Per risolvere la difficoltà legata a un'analisi dati così impegnativa dal punto di vista del consumo delle risorse, è stata appositamente implementata in Python una classe di nome `MultiFile`, il cui codice essenziale è consultabile in B.1.

Questa classe generalizza il concetto di iterabile di tipo file fornito con il linguaggio Python, permettendo di gestire un numero arbitrario di file con una notevole riduzione dell'utilizzo della memoria. L'idea è quella di leggere, ad ogni iterazione, le sole righe corrispondenti di ogni singolo file e disporle in una lista, che viene successivamente processata con le routine di analisi dati fornite dalla libreria `numpy`. La classe `MultiFile` fornisce anche una serie di funzioni di controllo sulla consistenza dei dati analizzati, ma queste esulano dagli scopi di questo lavoro e non verranno trattate, fermo restando che sono disponibili ai link del progetto.

---

<sup>1</sup>In questa analisi si fa riferimento a un sistema operativo a 64 bit di tipo Linux e all'installazione di Python 2.7.6, su cui si è svolta la analisi dati.

**Codice B.1:** Classe MultiFile

```

1  class MultiFile(object):
2      def __init__(self, mode, *files):
3          self.filenames = list(files)
4          self.files = []
5          self.IOErrStrings = []
6          for filePath in self.filenames:
7              try:
8                  self.files.append(open(filePath, mode))
9              except IOError as e:
10                  IOerror = "I/O error({0}): {1} : '{2}'"
11                  self.IOErrStrings.append(IOerror.format(e.errno,
12                                              e.strerror,
13                                              filePath))
14
15      if self.IOErrStrings:
16          stderr.write('\n'.join(self.IOErrStrings) + '\n')
17          raise IOError
18
19      def __iter__(self):
20          while True:
21              lines = [next(f, '') for f in self.files]
22              if all(lines):
23                  yield lines
24              else:
25                  overFiles = [filename for filename, line
26                               in zip(self.filenames, lines) if line == '']
27                  if len(overFiles) != len(self.filenames):
28                      stderr.write("over: {0}\n".format(', '.join(overFiles)))
29                      break

```

**B.2 Modello con matrice di densità**

I codici del programma implementato per simulare numericamente il modello con matrice di densità non risultano così complessi da necessitare di una analisi dettagliata, come quella fatta per il modello particellare. Descrivendo un modello deterministico, consistono infatti nell'inizializzazione di un array bidimensionale di variabili di tipo `float` e nell'evoluzione dei suoi elementi secondo la dinamica descritta nel paragrafo 3.2.

I sorgenti sono disponibili al sito  
<https://github.com/LeonardoPozzati/MetastableDensMat>.

### Note legali sul rilascio dei sorgenti

Per facilitare l'utilizzo dei programmi impiegati per la simulazione dei modelli studiati, è stato implementato in C un parser della riga di comando. I sorgenti di questo parser non vengono mostrati, perché la loro analisi esula dagli scopi di questo lavoro, ma sono disponibili al sito <https://github.com/Vincenzo1968/myoptParser>.

Per quanto riguarda il generatore di numeri pseudocasuali impiegato nelle simulazioni del modello particellare a random walk, dopo aver constatato l'inadeguatezza dei generatori lineari congruenziali forniti con la libreria standard del linguaggio C++ per gli scopi di queste simulazioni, è stato fatto uso di un'implementazione del generatore noto con il nome Mersenne Twister, i cui sorgenti sono disponibili al sito [www.agner.org/random](http://www.agner.org/random).

I sorgenti dei programmi implementati per simulare i due modelli, degli script per l'analisi dei dati, del parser della riga di comando e del generatore di numeri pseudocasuali sono stati rilasciati con licenza open source di tipo GNU GENERAL PUBLIC LICENSE Versione 3, 29 Giugno 2007.

Sono, quindi, utilizzabili modificabili e ridistribuibili secondo i termini descritti sia nei file COPYING contenuti nei progetti sia direttamente al sito <http://www.gnu.org/licenses/gpl.html>.



# Bibliografia

- [1] A. Bovier, F. den Hollander e C. Spitoni. «Homogeneous Nucleation for Glauber And Kawasaki Dynamics in Large Volumes at Low Temperatures». In: *The Annals of Probability* 38.2 (2010), pp. 661–713.
- [2] P. Brémaud. *Markov Chains: Gibbs fields, Monte Carlo Simulations, and Queues*. Springer, 1998.
- [3] M. Cassandro et al. «Metastable Behavior of Stochastic Dynamics: A Pathwise Approach». In: *Journal of Statistical Physics* 35 (1984), pp. 603–634.
- [4] O. Catoni e R. Cerf. «The exit path of a Markov chain with rare transitions». In: *ESAIM Probab. Stat* (1995/1997), pp. 95–144.
- [5] P. Dehghanpour e R. Schonmann. «Metropolis dynamics relaxation via nucleation and growth». In: *Communications of Mathematical Physics* 188 (1997), pp. 89–119.
- [6] F. den Hollander. *Probability Theory: The Coupling Method*. 2012. URL: <http://websites.math.leidenuniv.nl/probability/lecturenotes/CouplingLectures.pdf>.
- [7] F. den Hollander, E. Olivieri e E. Scoppola. «Metastability and nucleation for a conservative dynamics». In: *Journal of Mathematical Physics* 41 (2000), pp. 1294–1498.
- [8] M. I. Freidlin e A. D. Wentzell. *Random Perturbation of Dynamical System*. New York: Springer, 1984.
- [9] G. Gallavotti. «Instabilities and Phase Transition in the Ising Model. A Review.» In: *La Rivista del Nuovo Cimento* 2 (1972), pp. 133–169.
- [10] A. Gaudilli  re et al. «Ideal gas approximation for a two-dimensional rarefied gas under Kawasaki dynamics». In: *Stochastic Processes and their Application* 119 (2009), pp. 737–774.
- [11] O. H  ggstr  m. *Finite Markov Chains and Algorithmic Applications*. London Mathematical Society Student Texts, 2002.
- [12] K. Huang. *Meccanica Statistica*. Zanichelli, 1997.
- [13] Gregory F. Lawler. *Random Walk and Heat Equation*. Vol. 55. Student Mathematical Library. American Mathematical Society, 2010.
- [14] J. L. Lebowitz e O. Penrose. «Rigorous Treatment of the Van Der Waals-Maxwell Theory of the Liquid-Vapor Transition». In: *Journal of Mathematical Physics* 7 (1966), pp. 98–113.

- [15] E. J. Neves e R. H. Schonmann. «Behaviour of droplets for a class of Glauber dynamics at very low temperatures». In: *Prob. Theory Relat. Fields* 91 (1992), pp. 331–354.
- [16] E. J. Neves e R. H. Schonmann. «Critical droplets and metastability for a Glauber dinamics at very low temperatures». In: *Commun. Math. Phys.* 137 (1999), pp. 209–230.
- [17] E. Olivieri e E. Scoppola. «An introduction to metastability through random walk». In: *Brazilian Journal of Probability and Statistics* 24 (2010), pp. 361–399.
- [18] E. Olivieri e E. Scoppola. «Markov chains with exponentially small transition probabilities: First exit problem from general domain. I. The reversible case». In: *J. Stat. Phys.* 79 (1995), pp. 613–647.
- [19] E. Olivieri e E. Scoppola. «Markov chains with exponentially small transition probabilities: First exit problem from general domain. II. The general case». In: *J. Stat. Phys.* 84 (1996), pp. 987–1041.
- [20] E. Olivieri e E. Scoppola. «Metastability and typical exit paths in stochastic dynamics». In: *Proceedings of the European Congress of Mathematics, Budapest, 22-26 Luglio, 1996*. A cura di A. Balog et al. Vol. 169. Progr. Math. Birkhäuser Boston, 1998, pp. 124–150.
- [21] Pál Révész. *Random Walk in Random And Non-random Environments*. 2<sup>a</sup> ed. World Scientific Publishing Company, 2005.
- [22] D. Ruelle. *Statistical Mechanics*. New York: Benjamin, 1969.
- [23] R. H. Schonmann. «Slow droplet driven relaxation of stochastic Ising models in the vicinity of the phase coexistence region». In: *Commun. Math. Phys.* 161 (1994), pp. 1–49.
- [24] R. H. Schonmann. «The pattern of escape from metastability of a stochastic Ising model». In: *Commun. Math. Phys.* 147 (1992), pp. 231–240.
- [25] R. H. Schonmann. «Theorems and conjectures on the droplet-driven relaxation of stochastic Ising model». In: *Non pervenuto* 420 (1994), pp. 265–301.
- [26] Ya. G. Sinai. *Theory of Phase Transistions: Rigorous Results*. Budapest: Akademiai Kiado, 1982.
- [27] H. Tomita e S. Miyashita. «Statistical properties of the relaxation process of metastable states in the kinetic Ising model». In: *Physical Review B* 46 (1992), pp. 8886–8893.