# Svuotamento di un gas sovrassaturo ad opera di un cluster supercritico

Leonardo Pozzati 14 Luglio 2015



## Outline



- 1 Introduzione al fenomeno analizzato
  - Modello di riferimento: lattice gas con dinamica di Kawasaki

2 Due modelli per studiare la crescita supercritica

3 I risultati nuovi ottenuti in questo lavoro

## Metastabilià: un approccio dinamico



#### Equilibrio metastabile

Equilibrio caratterizzato da un tempo di vita molto più lungo di quello di un generico stato eccitato, ma comunque finito.

# Metastabilià: un approccio dinamico



#### Equilibrio metastabile

Equilibrio caratterizzato da un tempo di vita molto più lungo di quello di un generico stato eccitato, ma comunque finito.

#### Il punto di vista sulla metastabilità

- Consideriamo la metastabilità come un problema dinamico:
  - dato un sistema fisico con hamiltoniana H e spazio delle configurazioni  $\mathcal X$
  - studiamo la convergenza all'equilibrio di una catena di Markov, definita sullo spazio delle configurazioni in modo che la misura stazionaria, a cui la catena converge, coincida con la misura di Gibbs.



#### Il modello conservativo di riferimento

■ Sia  $\Lambda_{\beta} \subset \mathbb{Z}^2$  un reticolo quadrato finito, centrato nell'origine e con condizioni periodiche al bordo;



#### Il modello conservativo di riferimento

- Sia  $\Lambda_{\beta} \subset \mathbb{Z}^2$  un reticolo quadrato finito, centrato nell'origine e con condizioni periodiche al bordo;
- a ogni sito  $\underline{x} \in \Lambda_{\beta}$  si associ una variabile di occupazione  $\eta(\underline{x})$ , che assume i valori 0 o 1;



#### Il modello conservativo di riferimento

- Sia  $\Lambda_{\beta} \subset \mathbb{Z}^2$  un reticolo quadrato finito, centrato nell'origine e con condizioni periodiche al bordo;
- a ogni sito  $\underline{x} \in \Lambda_{\beta}$  si associ una variabile di occupazione  $\eta(\underline{x})$ , che assume i valori 0 o 1;
- a una generica configurazione  $\eta \in \mathcal{X}_{\Lambda_{\beta}} = \{0,1\}^{|\Lambda_{\beta}|}$  del gas reticolare si associ l'energia

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



#### Il modello conservativo di riferimento

- Sia  $\Lambda_{\beta} \subset \mathbb{Z}^2$  un reticolo quadrato finito, centrato nell'origine e con condizioni periodiche al bordo;
- a ogni sito  $\underline{x} \in \Lambda_{\beta}$  si associ una variabile di occupazione  $\eta(\underline{x})$ , che assume i valori 0 o 1;
- a una generica configurazione  $\eta \in \mathcal{X}_{\Lambda_{\beta}} = \{0,1\}^{|\Lambda_{\beta}|}$  del gas reticolare si associ l'energia

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

-  $\Lambda_{eta}^*$  indica l'insieme dei legami in  $\Lambda_{eta}$ 



#### Il modello conservativo di riferimento

- Sia  $\Lambda_{\beta} \subset \mathbb{Z}^2$  un reticolo quadrato finito, centrato nell'origine e con condizioni periodiche al bordo;
- a ogni sito  $\underline{x} \in \Lambda_{\beta}$  si associ una variabile di occupazione  $\eta(\underline{x})$ , che assume i valori 0 o 1;
- a una generica configurazione  $\eta \in \mathcal{X}_{\Lambda_{\beta}} = \{0,1\}^{|\Lambda_{\beta}|}$  del gas reticolare si associ l'energia

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

- $\Lambda_{eta}^*$  indica l'insieme dei legami in  $\Lambda_{eta}$
- U>0 caratterizza l'energia di legame tra primi vicini.



lacksquare Per questo modello, fissiamo una densità in  $\Lambda_eta$ 

$$\rho = \frac{1}{|\Lambda_\beta|} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_\beta} \eta(\underline{x}) = \boxed{ e^{-\Delta\beta} \quad \text{con } \Delta > 0 }$$



lacksquare Per questo modello, fissiamo una densità in  $\Lambda_eta$ 

$$\rho = \frac{1}{|\Lambda_{\beta}|} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_{\beta}} \eta(\underline{x}) = \boxed{e^{-\Delta \beta} \quad \text{con } \Delta > 0}$$

a cui corrisponde un numero di particelle in  $\Lambda_{\beta}$   $N=\rho |\Lambda_{\beta}|$ 



■ Per questo modello, fissiamo una densità in  $\Lambda_{\beta}$ 

$$\rho = \frac{1}{|\Lambda_{\beta}|} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_{\beta}} \eta(\underline{x}) = \boxed{e^{-\Delta\beta} \quad \text{con } \Delta > 0}$$

a cui corrisponde un numero di particelle in  $\Lambda_{eta}$   $N=
ho|\Lambda_{eta}|$ 

#### Osservazione sui volumi $\Lambda_{eta}$

Perché ci siano particelle dobbiamo scegliere  $|\Lambda_{\beta}| = e^{\Theta\beta}$ .



lacktriangle Per questo modello, fissiamo una densità in  $\Lambda_{\beta}$ 

$$\rho = \frac{1}{|\Lambda_\beta|} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_\beta} \eta(\underline{x}) = \boxed{ e^{-\Delta\beta} \quad \text{con } \Delta > 0 }$$

a cui corrisponde un numero di particelle in  $\Lambda_{eta}$   $N=
ho|\Lambda_{eta}|$ 

#### Osservazione sui volumi $\Lambda_eta$

Perché ci siano particelle dobbiamo scegliere  $|\Lambda_{\beta}| = e^{\Theta\beta}$ .

$$|\Lambda_{\beta}| = e^{\Theta\beta}$$



■ Per questo modello, fissiamo una densità in  $\Lambda_{\beta}$ 

$$\rho = \frac{1}{|\Lambda_{\beta}|} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_{\beta}} \eta(\underline{x}) = \boxed{e^{-\Delta\beta} \quad \text{con } \Delta > 0}$$

a cui corrisponde un numero di particelle in  $\Lambda_{\beta}$   $N=\rho |\Lambda_{\beta}|$ 

#### Osservazione sui volumi $\Lambda_eta$

Perché ci siano particelle dobbiamo scegliere  $|\Lambda_{\beta}| = e^{\Theta\beta}$ .

$$|\Lambda_{\beta}| = e^{\Theta\beta}, \quad \Delta \in (U, 2U)$$



lacktriangle Per questo modello, fissiamo una densità in  $\Lambda_{eta}$ 

$$\rho = \frac{1}{|\Lambda_\beta|} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_\beta} \eta(\underline{x}) = \boxed{ e^{-\Delta\beta} \quad \text{con } \Delta > 0 }$$

a cui corrisponde un numero di particelle in  $\Lambda_{eta}$   $N=
ho|\Lambda_{eta}|$ 

#### Osservazione sui volumi $\Lambda_{\beta}$

Perché ci siano particelle dobbiamo scegliere  $|\Lambda_{\beta}| = e^{\Theta\beta}$ .

$$|\Lambda_{\beta}| = e^{\Theta\beta}, \quad \Delta \in (U, 2U), \quad \beta \to \infty$$



lacktriangle Per questo modello, fissiamo una densità in  $\Lambda_{eta}$ 

$$\rho = \frac{1}{|\Lambda_\beta|} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_\beta} \eta(\underline{x}) = \boxed{e^{-\Delta\beta} \quad \text{con } \Delta > 0}$$

a cui corrisponde un numero di particelle in  $\Lambda_{\beta}$   $N=\rho |\Lambda_{\beta}|$ 

#### Osservazione sui volumi $\Lambda_{eta}$

Perché ci siano particelle dobbiamo scegliere  $|\Lambda_{\beta}| = e^{\Theta\beta}$ .

$$|\Lambda_{\beta}| = e^{\Theta\beta}, \quad \Delta \in (U, 2U), \quad \beta \to \infty, \quad N = e^{(\Theta - \Delta)\beta} \to \infty.$$



#### Conseguenza di lavorare con volumi $\Lambda_{\beta} = e^{\Theta\beta}$

L'interesse verso volumi  $|\Lambda_{\beta}|$  esponenziali in  $\beta$  comporta la scelta di una dinamica stocastica a tempi continui.



### Conseguenza di lavorare con volumi $\Lambda_{\beta} = e^{\Theta \beta}$

L'interesse verso volumi  $|\Lambda_{\beta}|$  esponenziali in  $\beta$  comporta la scelta di una dinamica stocastica a tempi continui.

lacksquare Definiamo la catena Markov  $(oldsymbol{\eta}_t)_{t\geq 0}$  sul modello:



### Conseguenza di lavorare con volumi $\Lambda_{\beta}=e^{\Theta\beta}$

L'interesse verso volumi  $|\Lambda_{\beta}|$  esponenziali in  $\beta$  comporta la scelta di una dinamica stocastica a tempi continui.

- lacksquare Definiamo la catena Markov  $(oldsymbol{\eta}_t)_{t\geq 0}$  sul modello:
  - ad ogni legame  $b=(\underline{x},\underline{y})\in\Lambda_{\beta}^*$ , associamo un campanello che suona a tempi esponenzialmente dirtribuiti



#### Conseguenza di lavorare con volumi $\Lambda_{\beta}=e^{\Theta\beta}$

L'interesse verso volumi  $|\Lambda_{\beta}|$  esponenziali in  $\beta$  comporta la scelta di una dinamica stocastica a tempi continui.

- $\blacksquare$  Definiamo la catena Markov  $(\eta_t)_{t\geq 0}$  sul modello:
  - ad ogni legame  $b=(\underline{x},\underline{y})\in\Lambda_{\beta}^*$ , associamo un campanello che suona a tempi esponenzialmente dirtribuiti
  - quando suona il campanello associato a b, consideriamo la configurazione  $\eta^b$  con le particelle scambiate rispetto al legame b



### Conseguenza di lavorare con volumi $\Lambda_{\beta}=e^{\Theta\beta}$

L'interesse verso volumi  $|\Lambda_\beta|$  esponenziali in  $\beta$  comporta la scelta di una dinamica stocastica a tempi continui.

- $\blacksquare$  Definiamo la catena Markov  $(\eta_t)_{t\geq 0}$  sul modello:
  - ad ogni legame  $b=(\underline{x},\underline{y})\in\Lambda_{\beta}^*$ , associamo un campanello che suona a tempi esponenzialmente dirtribuiti
  - quando suona il campanello associato a b, consideriamo la configurazione  $\eta^b$  con le particelle scambiate rispetto al legame b
  - questa nuova configurazione  $\eta^b$  è accettata con una probabilità proporzionale al fattore di Boltzmann



## Conseguenza di lavorare con volumi $\Lambda_{eta}=e^{\Thetaeta}$

L'interesse verso volumi  $|\Lambda_{\beta}|$  esponenziali in  $\beta$  comporta la scelta di una dinamica stocastica a tempi continui.

- lacksquare Definiamo la catena Markov  $(\eta_t)_{t\geq 0}$  sul modello:
  - ad ogni legame  $b=(\underline{x},\underline{y})\in\Lambda_{\beta}^*$ , associamo un campanello che suona a tempi esponenzialmente dirtribuiti
  - quando suona il campanello associato a b, consideriamo la configurazione  $\eta^b$  con le particelle scambiate rispetto al legame b
  - questa nuova configurazione  $\eta^b$  è accettata con una probabilità proporzionale al fattore di Boltzmann

$$e^{-\beta[H(\boldsymbol{\eta}^b)-H(\boldsymbol{\eta})]_+}$$



■ Tra la variabile di occupazione  $\eta(\underline{x})$  e la variabile di spin  $\sigma(\underline{x})$  del modello di Ising con interazione di coppia J e campo esterno h

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



■ Tra la variabile di occupazione  $\eta(\underline{x})$  e la variabile di spin  $\sigma(\underline{x})$  del modello di Ising con interazione di coppia J e campo esterno h

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

■ La descrizione del comportamento metastabile di questo modello conservativo, nel limite termodinamico, è approssimabile in termini grancanonici, con hamiltoniana

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



■ Tra la variabile di occupazione  $\eta(\underline{x})$  e la variabile di spin  $\sigma(\underline{x})$  del modello di Ising con interazione di coppia J e campo esterno h

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

■ La descrizione del comportamento metastabile di questo modello conservativo, nel limite termodinamico, è approssimabile in termini grancanonici, con hamiltoniana

$$H_{\lambda}(\boldsymbol{\eta}) = H(\boldsymbol{\eta}) - \lambda N$$
 se  $\rho = e^{\lambda \beta}$ 



■ Tra la variabile di occupazione  $\eta(\underline{x})$  e la variabile di spin  $\sigma(\underline{x})$ del modello di Ising con interazione di coppia J e campo esterno h

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

■ La descrizione del comportamento metastabile di guesto modello conservativo, nel limite termodinamico, è approssimabile in termini grancanonici, con hamiltoniana

$$H_{\lambda}(\eta) = H(\eta) - \lambda N$$
 se  $\rho = e^{\lambda \beta}$ 

■ In particolare, se  $\lambda = -\Delta$  si ottiene la corrispondenza sui parametri

$$J = U/2$$

$$J = U/2 \qquad \qquad h = 2U - \Delta$$



#### Osservazione

La scelta  $\Delta\in(U,2U)$  è collegata alla presenza di una lunghezza critica per la crescita di una goccia della stabile.



#### Osservazione

La scelta  $\Delta \in (U,2U)$  è collegata alla presenza di una lunghezza critica per la crescita di una goccia della stabile.

■ Per capirlo, sfruttiamo il rapporto con il modello di Ising



#### Osservazione

La scelta  $\Delta \in (U,2U)$  è collegata alla presenza di una lunghezza critica per la crescita di una goccia della stabile.

■ Per capirlo, sfruttiamo il rapporto con il modello di Ising

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



#### Osservazione

La scelta  $\Delta \in (U,2U)$  è collegata alla presenza di una lunghezza critica per la crescita di una goccia della stabile.

■ Per capirlo, sfruttiamo il rapporto con il modello di Ising

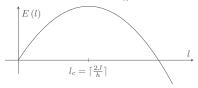
$$H(\boldsymbol{\sigma}) = -J \sum_{(\underline{x},\underline{y}) \in \Lambda_L^*} \sigma(\underline{x}) \sigma(\underline{y}) - h \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \sigma(\underline{x})$$

■ Per l'energia E(l) di una goccia quadrata  $\sigma_{\ell \times \ell}$  di spin positivi immersa in un mare di spin negativi, che indichiamo con  $\ominus$ , si ha

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



■ L'energia della goccia  $\sigma_{\ell \times \ell}$  di spin positivi ha un andamento parabolico con un massimo per  $l_c = \lceil \frac{2J}{h} \rceil$ 



#### Osservazione: significato fisico di $\ell_c$

Il superamento della taglia critica implica che l'energia di volume della goccia di spin positivi prevale sul termine di superficie e la sua crescita è energeticamente favorita.



■ Per la corrispondenza vista tra i due modelli, si ricava la taglia critica per il lattice gas

$$\ell_c = \frac{U}{2U - \Delta}$$



■ Per la corrispondenza vista tra i due modelli, si ricava la taglia critica per il lattice gas

$$\ell_c = \frac{U}{2U - \Delta}$$

La scelta di  $\Delta$  implica una taglia critica non banale

$$\Delta \in (U, 2U) \Longrightarrow \ell_c \in (1, \infty)$$

# Modello semplificato per la nucleazione

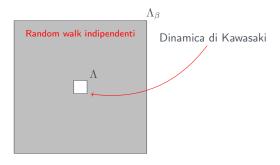


 Vediamo i risultati rigorosi noti per la nucleazione della fase stabile in un modello semplificato

# Modello semplificato per la nucleazione



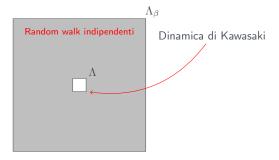
 Vediamo i risultati rigorosi noti per la nucleazione della fase stabile in un modello semplificato



## Modello semplificato per la nucleazione



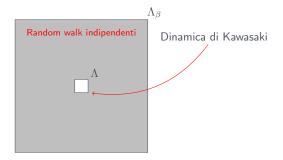
 Vediamo i risultati rigorosi noti per la nucleazione della fase stabile in un modello semplificato



 $\blacksquare$  All'interno di  $\Lambda$ , manteniamo la dinamica di Kawasaki;



 Vediamo i risultati rigorosi noti per la nucleazione della fase stabile in un modello semplificato



- All'interno di  $\Lambda$ , manteniamo la dinamica di Kawasaki;
- all'esterno di Λ, l'interazione di coppia viene rimossa e la dinamica del gas è modellizata in termini di random walk indipendenti.



#### Bontà della descrizione in termini di I.R.W.

La validità della modellizzazione in termini di random walk indipendenti è garantita dai risultati di un lavoro di ricerca che riguarda l'approssimazione della dinamica di Kawasaki per un gas rarefatto.



#### Bontà della descrizione in termini di I.R.W.

La validità della modellizzazione in termini di random walk indipendenti è garantita dai risultati di un lavoro di ricerca che riguarda l'approssimazione della dinamica di Kawasaki per un gas rarefatto.

■ Per questo modello, consideriamo le due configurazioni di riferimento

$$\blacksquare = \{ \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{X} : \boldsymbol{\eta}(\underline{x}) = 1 \quad \forall \underline{x} \in \Lambda \}, 
\square = \{ \boldsymbol{\eta} \in \mathcal{X} : \boldsymbol{\eta}(\underline{x}) = 0 \quad \forall \underline{x} \in \Lambda \}.$$



#### Bontà della descrizione in termini di I.R.W.

La validità della modellizzazione in termini di random walk indipendenti è garantita dai risultati di un lavoro di ricerca che riguarda l'approssimazione della dinamica di Kawasaki per un gas rarefatto.

■ Per questo modello, consideriamo le due configurazioni di riferimento

■ Infine, immaginiamo di avere una condizione iniziale in cui la scatola  $\Lambda$  è vuota.



Fissiamo  $\Delta \in (\frac{3}{2}U, 2U)$ , con  $U/(2U-\Delta)$  non intero. Poniamo quindi  $\ell_c = \lceil U/(2U-\Delta) \rceil$  e sia  $\lim_{\beta \to \infty} (1/\beta) |\Lambda_\beta| = \infty$ 



Fissiamo  $\Delta \in (\frac{3}{2}U, 2U)$ , con  $U/(2U-\Delta)$  non intero. Poniamo quindi  $\ell_c = \lceil U/(2U-\Delta) \rceil$  e sia  $\lim_{\beta \to \infty} (1/\beta) |\Lambda_\beta| = \infty$ 

■ I cluster  $\ell_1 \times \ell_2$  quadrati o quasi quadrati sono destinati a crescere solo se il loro lato minore è maggiore di  $\ell_c$ .



Fissiamo  $\Delta \in (\frac{3}{2}U, 2U)$ , con  $U/(2U-\Delta)$  non intero. Poniamo quindi  $\ell_c = \lceil U/(2U-\Delta) \rceil$  e sia  $\lim_{\beta \to \infty} (1/\beta) |\Lambda_\beta| = \infty$ 

- I cluster  $\ell_1 \times \ell_2$  quadrati o quasi quadrati sono destinati a crescere solo se il loro lato minore è maggiore di  $\ell_c$ .
- Esiste una configurazione critica per la transizione  $\square \to \blacksquare$  in  $\Lambda$ , la cui forma è





Fissiamo  $\Delta \in (\frac{3}{2}U, 2U)$ , con  $U/(2U-\Delta)$  non intero. Poniamo quindi  $\ell_c = \lceil U/(2U-\Delta) \rceil$  e sia  $\lim_{\beta \to \infty} (1/\beta) |\Lambda_\beta| = \infty$ 

- I cluster  $\ell_1 \times \ell_2$  quadrati o quasi quadrati sono destinati a crescere solo se il loro lato minore è maggiore di  $\ell_c$ .
- Esiste una configurazione critica per la transizione  $\square \to \blacksquare$  in  $\Lambda$ , la cui forma è



Il terzo risultato riguarda il tempo di rilassamento all'equilibrio. Una volta superata la configurazione critica, il raggiungimento della fase stabile avviene in tempi relativamente brevi.

## Crescita supercritica: un problema aperto



#### Non esiste una descrizione rigorosa

A differenza del modello di Ising, per il quale si hanno risultati rigorosi in molti regimi, la conservatività del modello comporta difficoltà aggiuntive:

## Crescita supercritica: un problema aperto



#### Non esiste una descrizione rigorosa

- A differenza del modello di Ising, per il quale si hanno risultati rigorosi in molti regimi, la conservatività del modello comporta difficoltà aggiuntive:
  - ad esempio, l'effetto di spogliamento del gas ad opera del cluster comporta l'impossibilità di disaccoppiare la dinamica e descrivere la crescita supercritica con una teoria semplice.

# Semplificazioni del modello



### Cosa ci interessa maggiormente

Siamo interessati a capire il comportamento del gas.

# Semplificazioni del modello



#### Cosa ci interessa maggiormente

Siamo interessati a capire il comportamento del gas.

#### Semplifichiamo il problema iniziale

■ Il gas viene descritto in termini di random walk indipendenti, semplici e simmetrici su un reticolo bidimensionale  $\Lambda_L$ , con condizioni periodiche al bordo.

# Semplificazioni del modello



#### Cosa ci interessa maggiormente

Siamo interessati a capire il comportamento del gas.

#### Semplifichiamo il problema iniziale

- Il gas viene descritto in termini di random walk indipendenti, semplici e simmetrici su un reticolo bidimensionale  $\Lambda_L$ , con condizioni periodiche al bordo.
- Al centro di questo reticolo, sistemiamo una trappola che simula la goccia, trascurandone sia l'aspetto geometrico sia quello dinamico.



■ È un modello particellare con una dinamica stocastica:



- É un modello particellare con una dinamica stocastica:
  - $\blacksquare$  per t=0, distribuiamo in modo uniforme N particelle sui siti di un reticolo  $\Lambda_L$  con condizioni periodiche al bordo;



- È un modello particellare con una dinamica stocastica:
  - lacktriangledown per t=0, distribuiamo in modo uniforme N particelle sui siti di un reticolo  $\Lambda_L$  con condizioni periodiche al bordo;
  - lacktriangle per t>0, le dinamica delle particelle è quella di random walk indipendenti, semplici e simmetrici;



- È un modello particellare con una dinamica stocastica:
  - lacktriangledown per t=0, distribuiamo in modo uniforme N particelle sui siti di un reticolo  $\Lambda_L$  con condizioni periodiche al bordo;
  - per t > 0, le dinamica delle particelle è quella di random walk indipendenti, semplici e simmetrici;
  - nel centro del reticolo c'è un sito particolare:



- È un modello particellare con una dinamica stocastica:
  - lacktriangle per t=0, distribuiamo in modo uniforme N particelle sui siti di un reticolo  $\Lambda_L$  con condizioni periodiche al bordo;
  - per t > 0, le dinamica delle particelle è quella di random walk indipendenti, semplici e simmetrici;
  - nel centro del reticolo c'è un sito particolare:
    - se un random walk arriva su questo sito, resta intrappolato



- È un modello particellare con una dinamica stocastica:
  - per t=0, distribuiamo in modo uniforme N particelle sui siti di un reticolo  $\Lambda_L$  con condizioni periodiche al bordo;
  - per t > 0, le dinamica delle particelle è quella di random walk indipendenti, semplici e simmetrici;
  - nel centro del reticolo c'è un sito particolare:
    - se un random walk arriva su questo sito, resta intrappolato
    - se la trappola è popolata, ha una probabilità finita  $p_{\rm e} \in [0,1]$  di riemettere una singola particella con probabilità 1/4 su ognuno dei suoi primi vicini.



- È un modello particellare con una dinamica stocastica:
  - per t = 0, distribuiamo in modo uniforme N particelle sui siti di un reticolo  $\Lambda_L$  con condizioni periodiche al bordo;
  - per t > 0, le dinamica delle particelle è quella di random walk indipendenti, semplici e simmetrici;
  - nel centro del reticolo c'è un sito particolare:
    - se un random walk arriva su questo sito, resta intrappolato
    - se la trappola è popolata, ha una probabilità finita  $p_{\rm e} \in [0,1]$  di riemettere una singola particella con probabilità 1/4 su ognuno dei suoi primi vicini.

#### Abbiamo bisogno di un secondo modello

La simulazione numerica del comportamento di questo modello è molto complessa: serve un secondo modello che aiuti nelle simulazioni.



■ Definiamo sul reticolo  $\Lambda_L$  una funzione  $\rho(\underline{x},t) \colon \Lambda_L \times \mathbb{N} \to \mathbb{R}_+$ 



- Definiamo sul reticolo  $\Lambda_L$  una funzione  $\rho(\underline{x},t) \colon \Lambda_L \times \mathbb{N} \to \mathbb{R}_+$ 
  - Per t=0, scegliamo due numeri reali  $\tilde{\rho}_{\rm o}<\rho$  e inizializziamo  $\rho(\underline{x},t)$

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



- Definiamo sul reticolo  $\Lambda_L$  una funzione  $\rho(\underline{x},t) \colon \Lambda_L \times \mathbb{N} \to \mathbb{R}_+$ 
  - Per t=0, scegliamo due numeri reali  $\tilde{\rho}_{\mathrm{o}}<\rho$  e inizializziamo  $\rho(\underline{x},t)$

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

- Per t > 0, l'evoluzione temporale dipende dal sito

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



- Definiamo sul reticolo  $\Lambda_L$  una funzione  $\rho(\underline{x},t) \colon \Lambda_L \times \mathbb{N} \to \mathbb{R}_+$ 
  - Per t=0, scegliamo due numeri reali  $\tilde{\rho}_{\mathrm{o}}<\rho$  e inizializziamo  $\rho(\underline{x},t)$

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

- Per t > 0, l'evoluzione temporale dipende dal sito

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

$$\rho(\underline{0},t+1) = N - \sum_{x \neq 0} \rho(\underline{x},t+1) \qquad \qquad \text{con } N = \tilde{\rho}|\Lambda_L|$$



$$\mathbb{E}[n(\underline{x},t)] = \rho(\underline{x},t) \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L, t \in \mathbb{N}_0.$$



■ Il modello deterministico è il "valore aspettato" di quello stocastico. Se indichiamo con  $n(\underline{x},t)$  il numero di particelle del sito  $\underline{x}$  al tempo t, abbiamo

$$\mathbb{E}[n(\underline{x},t)] = \rho(\underline{x},t) \quad \forall \, \underline{x} \in \Lambda_L, t \in \mathbb{N}_0.$$

- Per t=0, segue dalla distribuzione uniforme delle N particelle nel reticolo



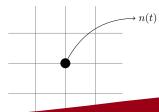
$$\mathbb{E}[n(\underline{x},t)] = \rho(\underline{x},t) \quad \forall \, \underline{x} \in \Lambda_L, t \in \mathbb{N}_0.$$

- Per t=0, segue dalla distribuzione uniforme delle N particelle nel reticolo
- $\operatorname{Per}\ t>0$ , si può ragionare come segue



$$\mathbb{E}[n(\underline{x},t)] = \rho(\underline{x},t) \quad \forall \, \underline{x} \in \Lambda_L, t \in \mathbb{N}_0.$$

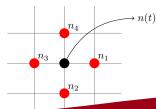
- Per t=0, segue dalla distribuzione uniforme delle N particelle nel reticolo
- Per t > 0, si può ragionare come segue





$$\mathbb{E}[n(\underline{x},t)] = \rho(\underline{x},t) \quad \forall \, \underline{x} \in \Lambda_L, t \in \mathbb{N}_0.$$

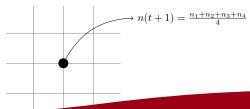
- Per t=0, segue dalla distribuzione uniforme delle N particelle nel reticolo
- Per t > 0, si può ragionare come segue





$$\mathbb{E}[n(\underline{x},t)] = \rho(\underline{x},t) \quad \forall \, \underline{x} \in \Lambda_L, t \in \mathbb{N}_0.$$

- Per t=0, segue dalla distribuzione uniforme delle N particelle nel reticolo
- Per t > 0, si può ragionare come segue





### Per studiare il cluster

-  $n_{o}(t)$ 

particelle intrappolate al tempo  $\boldsymbol{t}$ 



### Per studiare il cluster

-  $n_{\rm o}(t)$  particelle intrappolate al tempo t

-  $n_\ell(t)$  particelle libere al tempo t



### Per studiare il cluster

-  $n_{
m o}(t)$  particelle intrappolate al tempo t

-  $n_\ell(t) = N - n_{
m o}(t)$  particelle libere al tempo t



#### Per studiare il cluster

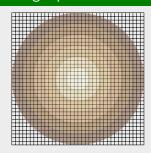
- $n_{
  m o}(t)$  particelle intrappolate al tempo t
- $n_\ell(t) = N n_{
  m o}(t)$  particelle libere al tempo t

### Per studiare il gas: comportamento diffusivo del random walk

$$\mathbb{P}\left\{\,\underline{S}_{2n} = \underline{x}\,\right\} \left\{ \begin{aligned} &= O(n^{-1}), & \text{se } |\underline{x}|^2 < n, \\ &\leq O(n^{-1}e^{-\frac{|x|^2}{2n}}), & \text{se } |\underline{x}|^2 \geq n. \end{aligned} \right.$$



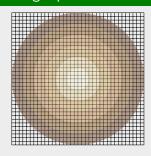
#### Strategia per lo studio del gas



- Scelgo un intero  $\ell$  divisore del semilato L e ricopro il reticolo  $\Lambda_L$  con  $L/\ell$  corone  $\Xi_i$ ,



#### Strategia per lo studio del gas



- Scelgo un intero  $\ell$  divisore del semilato L e ricopro il reticolo  $\Lambda_L$  con  $L/\ell$  corone  $\Xi_i$ ,
- analizzo le densità medie  $\delta(i,t)$  delle corone in funzione del tempo.



### Definizioni rigorose

lacktriangle Le corone  $\Xi_i$  corrispondono agli insiemi disgiunti

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



### Definizioni rigorose

■ Le corone  $\Xi_i$  corrispondono agli insiemi disgiunti

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

■ Il modello stocastico richiede una media sul tempo

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



### Definizioni rigorose

■ Le corone  $\Xi_i$  corrispondono agli insiemi disgiunti

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

■ Il modello stocastico richiede una media sul tempo

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

lacksquare La densità della i-esima corona al tempo  $au\Delta$  è data da



#### Definizioni rigorose

■ Le corone  $\Xi_i$  corrispondono agli insiemi disgiunti

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

■ Il modello stocastico richiede una media sul tempo

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

lacksquare La densità della i-esima corona al tempo  $au\Delta$  è data da

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



#### Definizioni rigorose

■ Le corone  $\Xi_i$  corrispondono agli insiemi disgiunti

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

■ Il modello stocastico richiede una media sul tempo

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

lacksquare La densità della i-esima corona al tempo  $au\Delta$  è data da

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

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



### Definizioni rigorose

■ Le corone  $\Xi_i$  corrispondono agli insiemi disgiunti

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

■ Il modello stocastico richiede una media sul tempo

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

lacksquare La densità della i-esima corona al tempo  $au\Delta$  è data da

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

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

- continua a valere la relazione tra i due modelli.



#### Obiettivo della taratura



#### Obiettivo della taratura

Ottenere una descrizione dettagliata del gas, nello spazio e nel tempo, minimizzando le incertezze sulle medie spaziotemporali del modello stocastico.

lacksquare Scelta del passo  $\ell$  delle corone



#### Obiettivo della taratura

- lacksquare Scelta del passo  $\ell$  delle corone
  - numero statisticamente rilevante di punti nelle corone;



#### Obiettivo della taratura

- lacksquare Scelta del passo  $\ell$  delle corone
  - numero statisticamente rilevante di punti nelle corone;
  - numero di corone che permetta un'analisi spaziale dettagliata.



#### Obiettivo della taratura

- lacksquare Scelta del passo  $\ell$  delle corone
  - numero statisticamente rilevante di punti nelle corone;
  - numero di corone che permetta un'analisi spaziale dettagliata.
- $lue{}$  Scelta dell'intervallo  $\Delta$  tra misure consecutive



#### Obiettivo della taratura

- lacksquare Scelta del passo  $\ell$  delle corone
  - numero statisticamente rilevante di punti nelle corone;
  - numero di corone che permetta un'analisi spaziale dettagliata.
- $lue{}$  Scelta dell'intervallo  $\Delta$  tra misure consecutive
  - minimizzare la dispersione dei random walk tra due misure consecutive;



#### Obiettivo della taratura

- lacksquare Scelta del passo  $\ell$  delle corone
  - numero statisticamente rilevante di punti nelle corone;
  - numero di corone che permetta un'analisi spaziale dettagliata.
- $\blacksquare$  Scelta dell'intervallo  $\triangle$  tra misure consecutive
  - minimizzare la dispersione dei random walk tra due misure consecutive;
  - trascurare le incertezze dovute alle medie temporali.

# Configurazioni simulate



### Configurazioni simulate

- Reticoli  $\Lambda_L$  di semilato  $L=50,60,\ldots,250,500,1000.$ 

## Configurazioni simulate



### Configurazioni simulate

- Reticoli  $\Lambda_L$  di semilato  $L=50,60,\ldots,250,500,1000.$
- Densità iniziali  $\tilde{\rho}=2^{-i}$ , per  $i=1,\dots,15$ .

## Configurazioni simulate



### Configurazioni simulate

- Reticoli  $\Lambda_L$  di semilato  $L = 50, 60, \dots, 250, 500, 1000.$
- Densità iniziali  $\tilde{\rho}=2^{-i}$ , per  $i=1,\dots,15$ .
- Trappola completamente assorbente e inizialmente vuota.



lacksquare Guardiamo il numero  $n_{o}(t)$  di particelle intrappolate



■ Guardiamo il numero  $n_o(t)$  di particelle intrappolate

$$n_{\mathbf{o}}(t) = \tilde{\rho} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \mathbb{P}_{\underline{x}} \left\{ \, \tau_o < t \, \right\}$$



■ Guardiamo il numero  $n_o(t)$  di particelle intrappolate

$$n_{\mathbf{o}}(t) = \tilde{\rho} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \mathbb{P}_{\underline{x}} \left\{ \, \tau_o < t \, \right\}$$

i) trascuriamo le particelle per cui  $|\underline{x}| > \sqrt{t}$ , per via del comportamento diffusivo;



■ Guardiamo il numero  $n_o(t)$  di particelle intrappolate

$$n_{\mathbf{o}}(t) = \tilde{\rho} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \mathbb{P}_{\underline{x}} \left\{ \, \tau_o < t \, \right\}$$

- i) trascuriamo le particelle per cui  $|\underline{x}| > \sqrt{t}$ , per via del comportamento diffusivo;
- ii) nel regime temporale  $c^2 < t \ll |\Lambda_L|$ , con  $c \simeq 20$



lacksquare Guardiamo il numero  $n_{o}(t)$  di particelle intrappolate

$$n_{\mathbf{o}}(t) = \tilde{
ho} \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \mathbb{P}_{\underline{x}} \left\{ \tau_o < t \right\}$$

- i) trascuriamo le particelle per cui  $|\underline{x}| > \sqrt{t}$ , per via del comportamento diffusivo;
- ii) nel regime temporale  $c^2 < t \ll |\Lambda_L|$ , con  $c \simeq 20$

$$\mathbb{P}_{\underline{x}} \left\{ \left. \tau_o < t \right. \right\} \sim 1 - \ln \left| \underline{x} \right|^2 / \ln t$$



 $\blacksquare$  Per  $n_o(t)$  a tempi piccoli, si ottiene



■ Per  $n_o(t)$  a tempi piccoli, si ottiene

$$n_o(t) \simeq \sum_{|\underline{x}| < \sqrt{t}} \tilde{\rho} - \sum_{c < |\underline{x}| < \sqrt{t}} \tilde{\rho} \frac{\ln|\underline{x}|^2}{\ln t}$$



■ Per  $n_o(t)$  a tempi piccoli, si ottiene

$$n_o(t) \simeq \sum_{|\underline{x}| < \sqrt{t}} \tilde{\rho} - \sum_{c < |\underline{x}| < \sqrt{t}} \tilde{\rho} \frac{\ln |\underline{x}|^2}{\ln t}$$
$$\simeq \pi \tilde{\rho} t - \left[ \frac{4\pi \tilde{\rho}}{\ln t} \frac{r^2}{2} \left( \ln t - \frac{1}{2} \right) \right]_c^{\sqrt{t}}$$
$$\simeq \frac{\pi \tilde{\rho} t}{\ln t}$$



■ Per  $n_o(t)$  a tempi piccoli, si ottiene

$$n_o(t) \simeq \sum_{|\underline{x}| < \sqrt{t}} \tilde{\rho} - \sum_{c < |\underline{x}| < \sqrt{t}} \tilde{\rho} \frac{\ln|\underline{x}|^2}{\ln t}$$

$$\simeq \pi \tilde{\rho} t - \left[ \frac{4\pi \tilde{\rho}}{\ln t} \frac{r^2}{2} \left( \ln t - \frac{1}{2} \right) \right]_c^{\sqrt{t}}$$

$$\simeq \frac{\pi \tilde{\rho} t}{\ln t}$$

$$\frac{n_o(t) \ln t}{t} \simeq \pi \tilde{\rho}$$



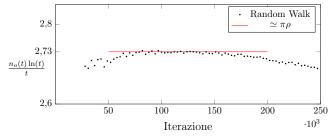
■ La relazione  $\frac{n_o(t) \ln t}{t} \simeq \pi \tilde{\rho}$  è stata verificata su ognuna delle configurazioni precedentemente illustrate.



- La relazione  $\frac{n_o(t)\ln t}{t} \simeq \pi \tilde{\rho}$  è stata verificata su ognuna delle configurazioni precedentemente illustrate.
- Un esempio dell'andamento costante di  $n_o(t) \ln t/t$ , nel caso di semilato L=250 e densità iniziale unitaria, è dato da



- La relazione  $\frac{n_o(t)\ln t}{t} \simeq \pi \tilde{\rho}$  è stata verificata su ognuna delle configurazioni precedentemente illustrate.
- Un esempio dell'andamento costante di  $n_o(t) \ln t/t$ , nel caso di semilato L=250 e densità iniziale unitaria, è dato da





■ Nel regime di tempi lunghi  $t\gg |\Lambda_L|$ , l'attenzione si è rivolta al numero di particelle ancora libere nel reticolo

$$n_{\ell}(t) = N - n_o(t)$$



■ Nel regime di tempi lunghi  $t\gg |\Lambda_L|$ , l'attenzione si è rivolta al numero di particelle ancora libere nel reticolo

$$n_{\ell}(t) = N - n_o(t)$$

- Un random walk partito da un generico sito del reticolo ha una probabilità finita di arrivare nell'origine per tempi  $t\simeq L^2\ln L$ 



■ Nel regime di tempi lunghi  $t\gg |\Lambda_L|$ , l'attenzione si è rivolta al numero di particelle ancora libere nel reticolo

$$n_{\ell}(t) = N - n_o(t)$$

- Un random walk partito da un generico sito del reticolo ha una probabilità finita di arrivare nell'origine per tempi  $t\simeq L^2\ln L$
- Il numero di random walk ancora liberi nel reticolo dopo tempi multipli di  $L^2 \ln L$  decade esponenzialmente

$$n_{\ell}(t) = Ne^{-Bt}$$



■ Nel regime di tempi lunghi  $t\gg |\Lambda_L|$ , l'attenzione si è rivolta al numero di particelle ancora libere nel reticolo

$$n_{\ell}(t) = N - n_o(t)$$

- Un random walk partito da un generico sito del reticolo ha una probabilità finita di arrivare nell'origine per tempi  $t\simeq L^2\ln L$
- Il numero di random walk ancora liberi nel reticolo dopo tempi multipli di  $L^2 \ln L$  decade esponenzialmente

$$\left( n_{\ell}(t) = Ne^{-Bt} \right)$$

B è l'inverso del tempo caratteristico e dipende unicamente dal semilato reticolare  ${\cal L}$  secondo la legge

$$B = \frac{B_o}{L^2 \ln L} \qquad \text{con } B_o \text{ costante.}$$



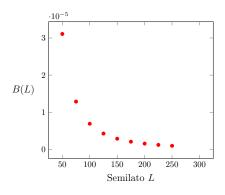
Per ricavare la costante  $B_o$  è più comodo lavorare con il logaritmo

$$\ln[n_{\ell}(t)] = N - B t$$



Per ricavare la costante  $B_o$  è più comodo lavorare con il logaritmo

$$\ln[n_{\ell}(t)] = N - B t$$

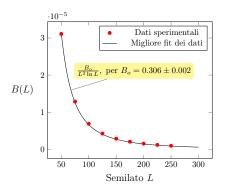


Si fissa una densità iniziale di riferimento  $\tilde{\rho}$  e, al variare del semilato, con un fit lineare si ricavano i B(L) sperimentali



Per ricavare la costante  $B_o$  è più comodo lavorare con il logaritmo

$$\ln[n_{\ell}(t)] = N - B t$$



- Si fissa una densità iniziale di riferimento  $\tilde{\rho}$  e, al variare del semilato, con un fit lineare si ricavano i B(L) sperimentali
- lacktriangle Con un secondo fit tra questi punti e l'andamento teorico di B(L), si ricava

$$B_o = 0.306 \pm 0.002$$

## Regime dei tempi intermedi



### Regime dei tempi intermedi: risultati nuovi

I risultati nuovi contenuti in questo lavoro riguardano la caratterizzazione del comportamento del gas nel regime dei tempi intermedi, per il quale non si hanno ancora risultati rigorosi su questo fenomeno.



■ Il destino del gas, per tempi lunghi, è uno svuotamento esponenziale.



- Il destino del gas, per tempi lunghi, è uno svuotamento esponenziale.
- Analizziamo la propagazione al suo interno dell'informazione della presenza della trappola:



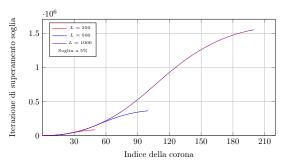
- Il destino del gas, per tempi lunghi, è uno svuotamento esponenziale.
- Analizziamo la propagazione al suo interno dell'informazione della presenza della trappola:
  - fissiamo una soglia di svuotamento rispetto alla densità iniziale



- Il destino del gas, per tempi lunghi, è uno svuotamento esponenziale.
- Analizziamo la propagazione al suo interno dell'informazione della presenza della trappola:
  - fissiamo una soglia di svuotamento rispetto alla densità iniziale
  - analizziamo i tempi in cui le corone superano questa soglia



- Il destino del gas, per tempi lunghi, è uno svuotamento esponenziale.
- Analizziamo la propagazione al suo interno dell'informazione della presenza della trappola:
  - fissiamo una soglia di svuotamento rispetto alla densità iniziale
  - analizziamo i tempi in cui le corone superano questa soglia



# Tempi intermedi: superficie di densità

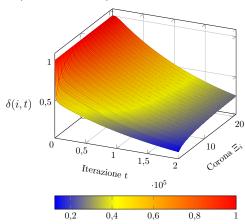


■ Successivamente, sono stati analizzati gli andamenti delle densità in funzione dello spazio e del tempo.

# Tempi intermedi: superficie di densità



■ Successivamente, sono stati analizzati gli andamenti delle densità in funzione dello spazio e del tempo.





#### Congettura di fattorizzazione delle densità

Si basa sull'analogia con l'equazione del calore, di cui il modello deterministico è una versione su un reticolo discreto.



#### Congettura di fattorizzazione delle densità

Si basa sull'analogia con l'equazione del calore, di cui il modello deterministico è una versione su un reticolo discreto.

- Se la densità  $\delta(i,t)$  si fattorizza nel prodotto di una funzione spaziale e una temporale, abbiamo

$$\delta(i,t) = g(i) \cdot h(t) \Longrightarrow \ln[\delta(i,t)] = \ln[g(i)] + \ln[h(t)]$$



#### Congettura di fattorizzazione delle densità

Si basa sull'analogia con l'equazione del calore, di cui il modello deterministico è una versione su un reticolo discreto.

- Se la densità  $\delta(i,t)$  si fattorizza nel prodotto di una funzione spaziale e una temporale, abbiamo

$$\delta(i,t) = g(i) \cdot h(t) \Longrightarrow \ln[\delta(i,t)] = \ln[g(i)] + \ln[h(t)]$$

- Fissiamo il tempo e calcoliamo la differenza del logaritmo della densità per due indici di corona  $i \neq j$ 

$$\ln[\delta(i,\bar{t})] - \ln[\delta(j,\bar{t})] = \ln[g(i)] - \ln[g(j)] = \Delta_{i,j}$$



#### Congettura di fattorizzazione delle densità

Si basa sull'analogia con l'equazione del calore, di cui il modello deterministico è una versione su un reticolo discreto.

- Se la densità  $\delta(i,t)$  si fattorizza nel prodotto di una funzione spaziale e una temporale, abbiamo

$$\delta(i,t) = g(i) \cdot h(t) \Longrightarrow \ln[\delta(i,t)] = \ln[g(i)] + \ln[h(t)]$$

- Fissiamo il tempo e calcoliamo la differenza del logaritmo della densità per due indici di corona  $i \neq j$ 

$$\ln[\delta(i,\bar{t})] - \ln[\delta(j,\bar{t})] = \ln[g(i)] - \ln[g(j)] = \Delta_{i,j}$$

- L'indipendenza dal tempo delle quantità  $\Delta_{i,j}$  suggerisce il modo naturale di verificare la congettura.



- La verifica della fattorizzazione è stata effettuata su tutto l'insieme di configurazioni simulate numericamente. I risultati possono essere riassunti come segue:
  - l'andamento temporale delle  $\ln \delta(i,t)$  è di tipo lineare su tutte le corone.



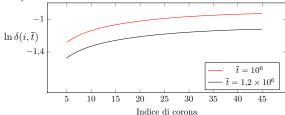
- La verifica della fattorizzazione è stata effettuata su tutto l'insieme di configurazioni simulate numericamente. I risultati possono essere riassunti come segue:
  - l'andamento temporale delle  $\ln \delta(i,t)$  è di tipo lineare su tutte le corone.
    - Il fit lineare di questi andamenti ha mostrato che queste rette sono parallele, dando una prima conferma per la congettura.



- La verifica della fattorizzazione è stata effettuata su tutto l'insieme di configurazioni simulate numericamente. I risultati possono essere riassunti come segue:
  - l'andamento temporale delle  $\ln \delta(i,t)$  è di tipo lineare su tutte le corone.
    - Il fit lineare di questi andamenti ha mostrato che queste rette sono parallele, dando una prima conferma per la congettura.
  - La seconda conferma è stata data dall'analisi degli andamenti a tempo fissato.



- La verifica della fattorizzazione è stata effettuata su tutto l'insieme di configurazioni simulate numericamente. I risultati possono essere riassunti come segue:
  - l'andamento temporale delle  $\ln \delta(i,t)$  è di tipo lineare su tutte le corone.
    - Il fit lineare di questi andamenti ha mostrato che queste rette sono parallele, dando una prima conferma per la congettura.
  - La seconda conferma è stata data dall'analisi degli andamenti a tempo fissato.



## Ricostruzione dei fattori



È possibile ricostruire i due fattori a meno di una costante di normalizzazione, applicando il teorema fondamentale del calcolo integrale alle differenze dei logaritmi.

## Ricostruzione dei fattori



È possibile ricostruire i due fattori a meno di una costante di normalizzazione, applicando il teorema fondamentale del calcolo integrale alle differenze dei logaritmi.

■ Per il fattore spaziale, si ha

$$\frac{g(i)}{g(i_0)} = \exp\left\{\frac{1}{(t_{\rm f} - t_0)} \sum_{j=i_0}^{i} \sum_{\tau=t_0}^{t_{\rm f}} \left[\ln \delta(j+1,\tau) - \ln \delta(j,\tau)\right]\right\}$$

## Ricostruzione dei fattori



È possibile ricostruire i due fattori a meno di una costante di normalizzazione, applicando il teorema fondamentale del calcolo integrale alle differenze dei logaritmi.

■ Per il fattore spaziale, si ha

$$\frac{g(i)}{g(i_0)} = \exp\left\{\frac{1}{(t_f - t_0)} \sum_{j=i_0}^{i} \sum_{\tau=t_0}^{t_f} \left[\ln \delta(j+1, \tau) - \ln \delta(j, \tau)\right]\right\}$$

■ Per il fattore temporale, si ha

$$\frac{h(t)}{h(t_0)} = \exp\Big\{\frac{1}{(i_f - i_0)} \sum_{\tau = t_0}^{t} \sum_{j=i_0}^{i_f} \left[\ln \delta(j, \tau + 1) - \ln \delta(j, \tau)\right]\Big\}.$$

# Esempio di ricostruzione dei due fattori

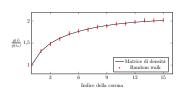


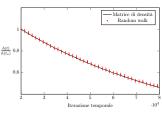
■ Concludiamo questa analisi con un esempio di ricostruzione dei due fattori, nel caso di semilato L=75, densità iniziale  $\tilde{\rho}=2^{-8}$ ,  $i_0=1$ ,  $t_0=2\times 10^4$  e  $t_f=8\times 10^4$ 

# Esempio di ricostruzione dei due fattori



Concludiamo questa analisi con un esempio di ricostruzione dei due fattori, nel caso di semilato L=75, densità iniziale  $\tilde{\rho}=2^{-8}$ ,  $i_0=1$ ,  $t_0=2\times 10^4$  e  $t_f=8\times 10^4$ 





# Ringraziamenti



# Grazie per l'attenzione!