

# Indice

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Preliminari matematici</b>	<b>3</b>
2.1	Introduzione alla probabilità . . . . .	3
2.2	Catene di Markov . . . . .	6
2.2.1	Concetti introduttivi . . . . .	6
2.2.2	Evoluzione temporale . . . . .	7
2.2.3	Irriducibilità e aperiodicità . . . . .	8
2.2.4	Comportamento asintotico per tempi lunghi . . . . .	10
2.2.5	Reversibilità . . . . .	17
2.3	Random walk . . . . .	18
2.3.1	Caso unidimensionale . . . . .	18
2.3.2	Caso multidimensionale . . . . .	21
2.3.3	Distribuzione di un random walk bidimensionale . . . . .	24
2.3.4	Random walk e ricorrenza . . . . .	25
2.3.5	Random walk e local time . . . . .	26
2.4	Random walk ed equazione del calore discreta . . . . .	32
2.4.1	La rovina del giocatore . . . . .	32
2.4.2	Rovina del giocatore in $d$ dimensioni . . . . .	33
2.4.3	Equazione del calore . . . . .	36
<b>3</b>	<b>Metastabilità: analisi di due modelli noti</b>	<b>39</b>
3.1	Caso non conservativo: modello di Ising . . . . .	39
3.1.1	Introduzione al modello . . . . .	39
3.1.2	Descrizione geometrica delle configurazioni . . . . .	41
3.1.3	Transizione di fase del primo ordine nel modello di Ising . . . . .	43
	Definizione di transizione di fase . . . . .	43
	Esistenza per il modello di Ising . . . . .	43
3.1.4	Comportamento metastabile del modello di Ising . . . . .	45
	Dinamica di Glauber-Metropolis . . . . .	46
	Regime metastabile . . . . .	47
3.2	Caso conservativo: lattice gas . . . . .	49
<b>4</b>	<b>Due modelli conservativi per la crescita supercritica</b>	<b>51</b>
4.1	Modello particellare . . . . .	51
4.2	Modello con matrice di densità . . . . .	53
4.3	Relazione tra i due modelli . . . . .	54
4.4	Osservabili . . . . .	55

4.4.1	Media sulla distribuzione iniziale . . . . .	56
4.4.2	Motivi di interesse per le osservabili scelte . . . . .	56
4.5	Primo confronto numerico tra i due modelli . . . . .	57
4.5.1	Risultati . . . . .	58
	Particelle intrappolate . . . . .	58
	Svuotamento delle corone . . . . .	60
<b>5</b>	<b>Crescita supercritica: risultati sperimentali</b>	<b>63</b>
5.1	Particelle intrappolate . . . . .	63
5.1.1	Tempi piccoli . . . . .	63
5.1.2	Tempi lunghi . . . . .	65
5.2	Svuotamento delle corone . . . . .	67
5.2.1	Propagazione dell'effetto della trappola . . . . .	67
5.2.2	Fattorizzazione delle densità . . . . .	68
	Fattore spaziale . . . . .	69
	Fattore temporale . . . . .	70
5.2.3	Ricostruzioni delle parti fattorizzate . . . . .	70
5.3	Sviluppi futuri . . . . .	70
<b>A</b>	<b>Sorgenti dei codici</b>	<b>71</b>
	Note legali sul rilascio dei sorgenti . . . . .	71
A.1	Modello particellare . . . . .	71
A.1.1	Namespace <code>MyTypes</code> . . . . .	72
A.1.2	Implementazione del modello . . . . .	74
A.1.3	Classe <code>Grid</code> . . . . .	74
A.1.4	Classe <code>DensManager</code> . . . . .	79
A.1.5	Struttura del <code>main</code> . . . . .	82
A.1.6	Analisi dati per il modello particellare . . . . .	84
A.2	Modello con matrice di densità . . . . .	85
	<b>Bibliografia</b>	<b>86</b>

# 1 | Introduzione



## 2 | Preliminari matematici

Per cominciare il percorso che porterà all'analisi dello svuotamento del gas sovrassaturo 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 alcune delle proprietà che si riveleranno utili nel corso del resto di questo lavoro.

Per concludere, si affronta un excursus riguardante la diffusione del calore, in cui sarà sottolineato il legame che intercorre tra le sue descrizioni deterministica e stocastica, rispettivamente fatte in termini di equazione del calore discreta e di random walk.

La finalità del capitolo è introdurre il lettore che non abbia già familiarità con questi argomenti all'armamentario matematico che sarà usato per presentare il fenomeno della metastabilità in due modelli noti, nel capitolo 3, e successivamente affrontare il vero e proprio cuore di questa tesi, nei capitoli 4 e 5.

### 2.1 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 2.1.** 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 ovvia conseguenza di i) e ii) si ricava  $\mathbb{P} \{ \Omega \} = 1$ .

**Definizione 2.2.** Dati due eventi  $A$  e  $B$ , con  $\mathbb{P}\{B\} > 0$ , 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 2.3.** 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

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

Nel caso di una sequenza infinita di eventi  $(A_1, A_2, \dots)$ , questi sono indipendenti se, per ogni intero positivo  $k$ , gli eventi  $A_1, A_2, \dots, A_k$  risultano indipendenti.

L'indipendenza di due eventi  $A$  e  $B$  comporta  $\mathbb{P}\{A | B\} = \mathbb{P}\{A\}$ , se  $\mathbb{P}\{B\} \neq 0$ .

Si può pensare una variabile casuale 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 invece definito in termini di una variabile casuale  $X$  se il suo verificarsi è ricollegabile al valore di  $X$ .

**Definizione 2.4.** Due variabili casuali  $X$  e  $Y$  sono indipendenti se risulta indipendente ogni coppia di eventi  $A$  e  $B$ , rispettivamente definiti in termini di  $X$  e  $Y$ .

Analogamente, le variabili casuali  $X_1, \dots, X_k$  sono indipendenti se per  $i = 1, \dots, k$  ogni evento  $A_i$  definito in termini di  $X_i$  è indipendente da tutti gli altri; nel caso di una sequenza infinita  $X_1, X_2, \dots$ , queste sono indipendenti se risulta indipendente qualsiasi sequenza finita di eventi  $A_1, A_2, \dots$  in cui ogni evento  $A_i$  della sequenza è definito in termini di una  $X_i$ .

**Definizione 2.5.** Se  $X$  è una variabile casuale a valori reali, si definisce la misura di probabilità  $\mu_X$  di  $X$  su  $\mathbb{R}$  come

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

In termini di quest'ultima, si definisce 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 2.6.**  $X_1, X_2, \dots$  è una sequenza di variabili casuali indipendenti e identicamente distribuite<sup>1</sup>, se:

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

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

Per quanto riguarda una variabile casuale a valori discreti, se ne possono definire il valore di aspettazione e la varianza.

**Definizione 2.7.** Data una variabile casuale  $X$  discreta e con misura di probabilità  $\mathbb{P}$ , si definisce il valore di aspettazione come

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[X] &= \sum_{k=1}^{\infty} k \mathbb{P}\{X = k\} \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \mathbb{P}\{X \geq k\}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Si definisce la varianza come

$$\begin{aligned} \text{Var}[Y] &= \mathbb{E}[(Y - \mathbb{E}[Y])^2] \\ &= \mathbb{E}[Y^2] - (\mathbb{E}[Y])^2. \end{aligned} \quad (2.2)$$

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 per esempio nel ben noto paradosso di San Pietroburgo<sup>2</sup>.

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 2.8 per  $d \geq 3$ .

**Lemma 2.1** (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

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

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

<sup>2</sup>Per il paradosso di San Pietroburgo si rimanda ad un qualsiasi testo introduttivo alla probabilità, come per esempio [8].

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

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

□

## 2.2 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.

### 2.2.1 Concetti introduttivi

**Definizione 2.8.** 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

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{X_{n+1} = s_j \mid X_0 = s_{i_0}, X_1 = s_{i_1}, \dots, X_{n-1} = s_{i_{n-1}}, X_n = s_i\} \\ = \mathbb{P}\{X_{n+1} = s_j \mid X_n = s_i\} \\ = P_{i,j}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

La (2.3) è detta proprietà di Markov e indica che l'evoluzione al tempo  $n+1$  è determinata solo dallo stato della catena 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 appunto 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

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



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

**Teorema 2.1.** *Per una catena di Markov  $X_0, X_1, \dots$  con spazio degli stati  $\{s_1, \dots, s_k\}$ , distribuzione iniziale  $\boldsymbol{\mu}^{(0)}$  e matrice di transizione  $\mathbf{P}$ , si ha*

$$\boldsymbol{\mu}^{(n)} = \boldsymbol{\mu}^{(0)} \mathbf{P}^n \quad \forall n = 1, 2, \dots \quad (2.4)$$

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

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

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

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

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

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

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

□

### 2.2.3 Irriducibilità e aperiodicità

Un aspetto molto importante per una catena di Markov è l'irriducibilità, che in termini generici consiste nella proprietà che ogni stato della catena sia accessibile da tutti gli altri.

Prima di entrare nel dettaglio, si deve però precisare cosa si intenda per accessibilità di uno stato.

**Definizione 2.9.** 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 2.1, 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 simmetria, e quindi  $s_j \rightarrow s_i$ , si dice che i due stati sono intercomunicanti e lo si indica con  $s_j \leftrightarrow s_i$ .

**Definizione 2.10.** 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 altro aspetto importante, per una catena di Markov, è quello della periodicità.

**Definizione 2.11.** 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 2.12.** Una catena di Markov è detta aperiodica se tutti i suoi stati sono aperiodici. In caso contrario è detta periodica.

L'importanza del concetto di periodicità di una catena di Markov risulta evidente con il seguente teorema.

**Teorema 2.2.** 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

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

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 2.2.** *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 2.2.* Dato un generico  $s_i \in S$ , sia

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

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 2.2 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 2.2, con  $N = \max\{N_1, \dots, N_k\}$ .  $\square$

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

**Corollario 2.1.** *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 2.2, 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

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{X_m = s_j \mid X_0 = s_i\} & \geq \mathbb{P}\{X_{m-n_{i,j}} = s_i, X_m = s_j \mid X_0 = s_i\} \\ & = \mathbb{P}\{X_{m-n_{i,j}} = s_i \mid X_0 = s_i\} \mathbb{P}\{X_m = s_j \mid X_{m-n_{i,j}} = s_i\} > 0. \end{aligned} \quad (2.5)$$

L'ultimo passaggio, nella (2.5), è giustificato dal fatto che si ha il 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

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

$\square$

### 2.2.4 Comportamento asintotico per tempi lunghi

Con l'armamentario teorico sviluppato, è ora possibile affrontare l'aspetto del comportamento asintotico di una catena di Markov non banale, per vedere se è possibile fare previsioni interessanti sul suo comportamento per tempi lunghi.

Una catena di Markov è non banale se  $X_n$  fluttua infinitamente per  $n \rightarrow \infty$ , impedendo di ottenere facilmente un'indicazione sulla sua convergenza.

Per arrivare ai risultati relativi al comportamento asintotico, sarà introdotto il concetto di distribuzione stazionaria per una catena di Markov. Di questa distribuzione verrà prima dimostrata l'esistenza, sotto alcune condizioni per la catena, per poi analizzarne il legame con il comportamento asintotico; verrà, infine, dimostrata la sua unicità.

In tutta questa analisi, si lavorerà con catene di Markov irriducibili e aperiodiche, anche se alcuni risultati restano validi rilassando tali condizioni: nello specifico, il teorema 2.3 vale anche per catene di Markov arbitrarie, mentre il teorema 2.5 non necessita dell'ipotesi di aperiodicità.

**Definizione 2.13.** Data una catena di Markov  $(X_0, X_1, \dots)$  con spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$  e matrice di transizione  $\mathbf{P}$ ,  $\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \dots, \pi_k)$  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)  $\boldsymbol{\pi} \mathbf{P} = \boldsymbol{\pi}$ , ovvero  $\sum_{i=1}^k \pi_i P_{i,j} = \pi_j$  per  $j = 1, \dots, k$ .

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

La proprietà i) indica semplicemente che  $\boldsymbol{\pi}$  descrive una distribuzione di probabilità sullo spazio degli stati  $\{s_1, \dots, s_k\}$ .

La proprietà ii) indica invece che se la distribuzione iniziale  $\boldsymbol{\mu}^{(0)}$  è uguale a  $\boldsymbol{\pi}$ , allora

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

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

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

**Definizione 2.14.** Data una 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  $s_i$ , si definisce hitting time la quantità

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

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 indica  $T_{i,j} = \infty$  se lo stato  $s_j$  non è accessibile partendo dallo stato  $s_i$ .

**Definizione 2.15.** Il valore aspettato per l'hitting time è definito come

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

Se  $i = j$ , la quantità  $\tau_{i,i}$  indica il valore aspettato del tempo di ritorno per lo stato  $s_i$ .

**Lemma 2.3.** *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*

$$\mathbb{P}\{T_{i,j} < \infty\} = 1. \quad (2.6)$$

*Inoltre per il valore atteso dell' hitting time si ha*

$$\tau_{i,j} < \infty. \quad (2.7)$$

*Dimostrazione.* Come è già stato sottolineato nella definizione 2.7 del valore atteso, la (2.7) non è una diretta conseguenza della (2.6). La dimostrazione, quindi, si articola in due passi.

Per quanto riguarda la (2.6), dato il corollario 2.1 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 pari ad  $\alpha$ , quindi: ha:

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

Iterando questo ragionamento per ogni  $l$ , si ottiene

$$\mathbb{P}\{T_{i,j} > lM\} \leq (1 - \alpha)^l. \quad (2.8)$$

La quantità (2.8) tende a 0 per  $l \rightarrow \infty$ , quindi si ha  $\mathbb{P}\{T_{i,j} = \infty\} = 0$  e la (2.6) risulta dimostrata.

Per quanto riguarda la (2.7), basta calcolare direttamente il valore di aspettazione, per il quale si ha

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

□

Sfruttando il lemma 2.3 appena visto, si può dimostrare il seguente teorema sull'esistenza della distribuzione stazionaria.

**Teorema 2.3.** (*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 2.13.

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

$$\begin{aligned} \pi_j &= \frac{\rho_j}{\tau_{1,1}} = \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}\{X_n = s_j, T_{1,1} > n\} = \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}\{X_n = s_j, T_{1,1} > n\} \\ &= \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}\{X_n = s_j, T_{1,1} > n-1\} \\ &= \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_{n-1} = s_i, X_n = s_j, T_{1,1} > n-1\} \\ &= \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^k \mathbb{P}\{X_{n-1} = s_i, T_{1,1} > n-1\} \mathbb{P}\{X_n = s_j \mid X_{n-1} = s_i\} \\ &= \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^k P_{i,j} \mathbb{P}\{X_{n-1} = s_i, T_{1,1} > n-1\} \\ &= \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{i=1}^k P_{i,j} \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}\{X_{n-1} = s_i, T_{1,1} > n-1\} \\ &= \frac{1}{\tau_{1,1}} \sum_{i=1}^k P_{i,j} \sum_{m=0}^{\infty} \mathbb{P}\{X_m = s_i, T_{1,1} > m\} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^k \rho_i P_{i,j}}{\tau_{1,1}} \\ &= \sum_{i=1}^k \pi_i P_{i,j}. \end{aligned}$$

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

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

Da quest'ultima relazione si ottiene

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

e risulta così soddisfatta la seconda condizione della definizione 2.13 di distribuzione stazionaria.

Per quanto riguarda la prima condizione, per come è stato definito risulta evidente che  $\pi_i \geq 0$  per  $i = 1, \dots, k$ . Considerando inoltre che

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

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.  $\square$

Per affrontare il discorso sulla convergenza di una catena di Markov, è necessario stabilire cosa si intende per convergenza di una distribuzione di probabilità, tramite la definizione di una metrica sulle distribuzioni di probabilità.

**Definizione 2.16.** Date due distribuzioni di probabilità  $\nu^{(1)} = (\nu_1^{(1)}, \dots, \nu_k^{(1)})$  e  $\nu^{(2)} = (\nu_1^{(2)}, \dots, \nu_k^{(2)})$  sullo spazio degli stati  $S = \{s_1, \dots, s_k\}$ , si definisce distanza a variazione totale la quantità

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

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

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

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

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

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

**Teorema 2.4** (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  $\mu^{(0)}$  e distribuzione stazionaria  $\pi$ , si ha che*

$$\mu^{(n)} \xrightarrow{VT} \pi. \quad (2.9)$$

Il teorema 2.4 afferma che, se una catena di Markov evolve per un tempo  $n$  sufficientemente lungo, la distribuzione di probabilità  $\mu^{(n)}$  sarà vicina a quella stazionaria  $\pi$ , in termini di distanza a variazione totale e indipendentemente dalla sua distribuzione iniziale.

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

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

in cui  $\psi_{\mu^{(0)}}$  è una opportuna funzione di inizializzazione per  $\mu^{(0)}$ ,  $\phi$  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 usa il metodo dell'accoppiamento, introducendo una seconda catena di Markov  $(X'_0, X'_1, \dots)$

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



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 2.17.** 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 2.1 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 sopra, con probabilità pari ad 1.

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

$$X''_0 = X_0 \tag{2.10}$$

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 2.17;
- 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 (2.10),  $X''_0$  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 la stessa argomentazione, ma scambiando il ruolo di  $X''_n$  e  $X'_n$ , si ottiene 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

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

Anche la (2.9) risulta quindi soddisfatta e il teorema 2.4 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 2.5** (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 2.3 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 2.4 si ha  $\boldsymbol{\mu}^{(n)} \xrightarrow{VT} \boldsymbol{\pi}$ , ovvero

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

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

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

L'indipendenza di  $d_{VT}(\boldsymbol{\pi}', \boldsymbol{\pi})$  da  $n$  implica quindi  $\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi}'$  e il teorema 2.5 è dimostrato.  $\square$

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

### 2.2.5 Reversibilità

**Definizione 2.18.** 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

$$\pi_i P_{i,j} = \pi_j P_{j,i} \quad \forall i, j \in \{1, \dots, k\}. \quad (2.11)$$

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 discreto sia fatto scorrere in avanti o indietro.

La condizione (2.11) è interpretabile in termini di distribuzione stazionaria, con il teorema che segue.

**Teorema 2.6.** *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  $\pi$  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 2.13 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 (2.11), per l'ultimo passaggio.  $\square$

## 2.3 Random walk

### 2.3.1 Caso unidimensionale

Per una semplice 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: ad 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.

Il procedimento appena descritto, se iterato, produce quello che si chiama 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

$$S_n = S(n) = X_1 + X_2 + \dots + X_n.$$

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

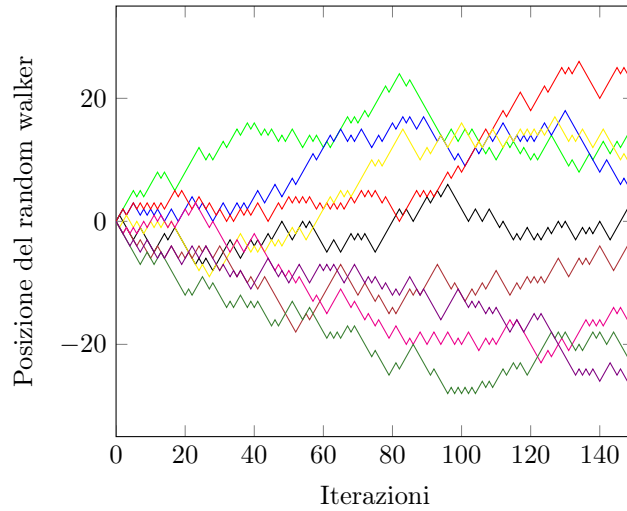
$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{S_{n+1} = i_{n+1} \mid S_n = i_n, S_{n-1} = i_{n-1}, \dots, S_0 = i_0\} \\ = \mathbb{P}\{S_{n+1} = i_{n+1} \mid S_n = i_n\} = 1/2, \end{aligned}$$

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 2.1 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.

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?



**Figura 2.1:** 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.

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

**Lemma 2.4.** *Per un random walk semplice e simmetrico unidimensionale, si hanno i valori aspettati:*

$$\mathbb{E}[S_n] = 0, \quad \mathbb{E}[S_n^2] = n. \quad (2.12)$$

*Dimostrazione.* Si può facilmente vedere che il valore aspettato delle variabili casuali 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 (2.12), in quanto

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

Per il valore aspettato di  $S_n^2$ , basta considerare che per la definizione (2.2) 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 seconda domanda circa la distribuzione di probabilità per un random walk.

**Teorema 2.7.** *Per il random walk semplice e simmetrico unidimensionale, vale la distribuzione esatta*

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

*Dimostrazione.* Il teorema 2.7 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

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

La soluzione di questo sistema indica che  $(n-k)/2$  passi sono stati fatti a sinistra e altrettanti siano 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 2.5.** *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

$$n! \sim \sqrt{2\pi n} (n/e)^n, \quad \text{per } n \rightarrow \infty, \quad (2.13)$$

si può scrivere il coefficiente binomiale come

$$\binom{2n}{n} = \frac{(2n)!}{n!n!} \simeq \frac{\sqrt{(2n)2\pi} (2n)^{2n} e^{-2n}}{\sqrt{2n\pi} \sqrt{2n\pi} n^{2n} e^{-2n}} = \frac{2^{2n}}{\sqrt{n\pi}}. \quad (2.14)$$

Con l'uso combinato della (2.14) e del teorema 2.7, 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.

### 2.3.2 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 dividerne  $d-1$  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 atteso di  $\underline{S}_n$ , si ottengono delle generalizzazioni di quanto già visto per il caso unidimensionale.

**Lemma 2.6.** *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 2.4, 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 deve ricorrere alla seguente distribuzione esatta, per poi analizzarne l'andamento limite per  $n \rightarrow \infty$ .



**Lemma 2.7.** *Per ogni intero  $n \geq 1$  e per ogni  $d \geq 1$ , vale la distribuzione esatta*

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = \underline{0}\} &= (2d)^{-2n} \sum_{n_1+n_2+\dots+n_d=n} \frac{(2n)!}{(n_1!n_2!\dots n_d!)^2} \\ &= (2d)^{-2n} \binom{2n}{n} \sum_{n_1+n_2+\dots+n_d=n} \left(\frac{n!}{n_1!n_2!\dots n_d!}\right)^2. \end{aligned} \quad (2.15)$$

*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 2.7.
- 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

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

Sommando 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 (2.15) 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 2.8.** *Per ogni intero  $d \geq 1$  e per  $n \rightarrow \infty$ , il random walk ha la distribuzione limite*

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = \underline{0}\} \approx 2 \left(\frac{d}{4n\pi}\right)^{d/2}. \quad (2.16)$$

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

$$\mathbb{P}\{\underline{S}_{2n} = \underline{0}\} = \frac{1}{n\pi} + O\left(\frac{1}{n^2}\right). \quad (2.17)$$

*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 (2.13).

Facendo riferimento alla (2.15), per  $d = 2$  si ha

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

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

$$\sum_{n_1+n_2=n} \left(\frac{n!}{n_1!n_2!}\right)^2 = \binom{2n}{n} \quad (2.18)$$

e approssimando il coefficiente binomiale come già visto nella (2.14), si ottiene appunto la relazione (2.17).

La verifica della (2.18) 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

$$\binom{m+n}{k} = \binom{m}{k} \binom{n}{0} + \binom{m}{k-1} \binom{n}{1} + \cdots + \binom{m}{0} \binom{n}{k} \quad (2.19)$$

per  $n = m = k$ .

L'identità (2.19) 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 (2.19), 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 (2.19).  $\square$

Come si vede dalla (2.16), 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.

### 2.3.3 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<sup>3</sup>, perché analogamente ai precedenti sono frutto dell'appli-

<sup>3</sup>Per le dimostrazioni, si può vedere ad esempio [16].

cazione di considerazioni di calcolo combinatorio e della formula di Stirling; 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 4.

**Lemma 2.9.** Per  $d = 2$ ,  $x_1 + x_2 \equiv 0 \pmod{2}$  e  $|x_1| + |x_2| \leq 2n$ , si ha

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

in cui

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

**Lemma 2.10** (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 2.11.** Per  $d \geq 2$ ,  $\underline{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d)$  e  $x_1 + x_2 + \dots + x_d \equiv 0 \pmod{2}$  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 2.9, per il caso 2-dimensionale, e 2.10, 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 4, 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 5.

### 2.3.4 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 2.8.** 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 (2.16), 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 che il random walker fa all'origine, se ne può calcolare il valore atteso, per il quale si ottengono due comportamenti distinti, collegati al valore dell'esponente del denominatore  $n$  e dati da

$$\mathbb{E}[V] = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbb{P}\{S_n = \underline{0}\} = \begin{cases} = \infty, & \text{se } d \leq 2, \\ < \infty, & \text{se } d \geq 3. \end{cases} \quad (2.20)$$

Si può subito constatare che, per  $d \geq 3$ , si ha la sequenza di eventi  $S_n = \underline{0}$  per la quale vale l'ipotesi del lemma 2.1 di Borel-Cantelli: in questo caso, con probabilità pari ad 1 si verifica solo un numero finito di tali eventi e il random walk risulta transiente.

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 2.7 di valore atteso, 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 atteso 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

$$\sum_{i=1}^{\infty} i x^i = \frac{x}{(1-x)^2} \quad \text{per } |x| < 1. \quad (2.21)$$

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

### 2.3.5 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 2.19.** Per un random walk su  $\mathbb{Z}^d$ , si definisce local time la quantità

$$\xi(\underline{x}, n) = \#\{k : 0 < k \leq n, \underline{S}_k = \underline{x}\}, \text{ con } \underline{x} \in \mathbb{Z}^d, n = 1, 2, \dots \quad (2.22)$$

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 de teorema di Pólya 2.8 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:

$$\rho_n = \min \{ k : k > \rho_{n-1}, S_k = \underline{0} \}, \quad (2.23a)$$

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

$$p_{2k} = \mathbb{P} \{ S_{2k} = \underline{0} \} \quad , \quad p_{2k+1} = 0 \quad , \quad \text{per } k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.23b)$$

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

$$\begin{aligned} q_{2k} &= \mathbb{P} \{ S_{2k} = \underline{0}, S_{2k-2} \neq \underline{0}, \dots, S_4 \neq \underline{0}, S_2 \neq \underline{0} \} = \mathbb{P} \{ \rho_1 = 2k \} \quad (2.23c) \\ &= \mathbb{P} \{ \xi(\underline{0}, 2k) = 1, \xi(\underline{0}, 2k-1) = 0 \} \quad , \quad \text{per } k = 1, 2, \dots, \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \gamma_{2k} &= \mathbb{P} \{ S_2 \neq \underline{0}, S_4 \neq \underline{0}, \dots, S_{2k-2} \neq \underline{0} \} = \mathbb{P} \{ \xi(\underline{0}, 2k-2) = 0 \} \quad (2.23d) \\ &= q_{2k} + \gamma_{2k+2} = \sum_{j=k}^{\infty} q_{2j} + \lim_{n \rightarrow \infty} \gamma_{2n} \quad , \quad \text{con } k = 2, 3, \dots \text{ e } \gamma_2 = 1, \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \gamma &= \lim_{n \rightarrow \infty} \gamma_{2n} = \mathbb{P} \left\{ \lim_{n \rightarrow \infty} \xi(\underline{0}, n) = \underline{0} \right\} = \mathbb{P} \{ \rho_1 = \infty \} \quad (2.23e) \\ &= 1 - \sum_{j=1}^{\infty} q_{2j} \quad . \end{aligned}$$

**Teorema 2.9** (Erdős - Taylor, 1960). *Per  $d = 2$ , si ha:*

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

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

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

La dimostrazione del teorema 2.9 si basa sul seguente lemma.

**Lemma 2.12** (Dvoretzky - Erdős 1950, Erdős - Taylor 1960).

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

*Dimostrazione.* Facendo riferimento alle quantità (2.23b), (2.23c) e (2.23d) 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

$$\sum_{k=0}^{n-1} \mathbb{P}\{\underline{S}_{2k} = \underline{0}\} \mathbb{P}\{\xi(0, 2n-2k-2) = \underline{0}\} = 1 \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.24)$$

in cui  $\xi(0, 0) = 0$ .

Per il lemma 2.8, si ha

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

quindi

$$\sum_{k=1}^n \mathbb{P}\{\underline{S}_{2k} = \underline{0}\} \approx \frac{\log n}{\pi}. \quad (2.25)$$

La successione  $P\{\xi(0, 2n) = 0\}$  è monotona decrescente e, per le equazioni (2.24) e (2.25), si ha

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

quindi

$$\mathbb{P}\{\xi(0, 2n) = \underline{0}\} \leq \frac{\pi + o(1)}{\log n}. \quad (2.26)$$

Analogamente per  $0 \leq k \leq n$  e come conseguenza della sola (2.24), si ha

$$1 \leq \left( \sum_{j=0}^k \mathbb{P}\{\underline{S}_{2j} = \underline{0}\} \right) \mathbb{P}\{\xi(0, 2n-2k-2) = \underline{0}\} + \sum_{j=k+1}^{n-1} \mathbb{P}\{\underline{S}_{2j} = \underline{0}\}. \quad (2.27)$$

Mandando  $k$  e  $n$  ad infinito, dalla (2.26) si ricava

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

Infine, prendendo  $k = n - \lfloor n/\log n \rfloor$ , si ottiene

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

In questo modo, si è ricavato il termine principale del lemma 2.12; analogamente, si ottiene il termine restante.  $\square$

*Dimostrazione del teorema 2.9 di Erdős - Taylor.* Per  $q = [x \log n] + 1$  e  $p = [n/q]$  si ha<sup>4</sup>

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

Assumendo  $x < \log n (\log_2 n)^{-(1+e)}$  per il lemma 2.12 si ottiene

$$\mathbb{P} \{ \xi(\underline{0}, n) \geq x \log x \} \geq e^{-\pi x} (1 + o(1)), \quad \text{per } n \rightarrow \infty. \quad (2.28)$$

Si ha quindi

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

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

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

Si può scrivere, pertanto, che

$$\begin{aligned} \mathbb{P} \{ \xi(\underline{0}, n) < x \log n \} &\geq \sum_{k=1}^q \mathbb{P} \{ E_k \} \\ &= \sum_{k=1}^q \binom{q}{k} (\mathbb{P} \{ \rho_1 \geq n \})^k (1 - \mathbb{P} \{ \rho_1 \geq n \})^{q-k} \\ &= 1 - (1 - \mathbb{P} \{ \rho_1 \geq n \})^q \\ &\geq 1 - e^{-\pi x} (1 + O(\log n)^{-1/4}) \end{aligned} \quad (2.29)$$

uniformemente in  $x$ , per  $x < (\log n)^{3/4}$ , grazie al lemma 2.12.

L'uso combinato di (2.28) e di (2.29) implica il primo assunto del teorema 2.9; per quanto riguarda il secondo, basta osservare che la relazione (2.29) e il lemma 2.12 comportano

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

□

Il teorema 2.9, appena dimostrato, implica quello seguente.

**Teorema 2.10.**

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

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

<sup>4</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 2.11** (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 2.10 si ha

$$\sum_{i=0}^n p_{2i} \gamma_{2n-2i+2} = 1 \quad (2.30)$$

e analogamente

$$\mathbb{P}\{\xi(\underline{x}, 2n) = \underline{0}\} + \sum_{k=1}^n \mathbb{P}\{\underline{S}_{2k} = \underline{x}\} \gamma_{2n-2k+2} = 1 \quad (2.31)$$

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

Le due relazioni (2.30) e (2.31) 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  $k_2 = \lceil n^{4/5} \rceil$ , per i lemmi 2.12, 2.8 e 2.10, si ottiene:

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

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 2.8, 2.10 e 2.12, 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 2.11 per  $20 < \|\underline{x}\| < n^{1/3}$ .

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

Come conseguenza banale del teorema 2.11 si ha il seguente lemma.

**Lemma 2.13.** *Per  $n_k = \lceil \exp(e^{k \log k}) \rceil$  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

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

□

## 2.4 Random walk ed equazione del calore discreta

### 2.4.1 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

$$T = \min \{ n : S_n = 0 \text{ oppure } S_n = N \}. \quad (2.32)$$

La posizione al tempo  $n$  può essere riscritta come

$$\hat{S}_n = S_{n \wedge T}, \quad (2.33)$$

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

$$F(x) = \mathbb{P}\{S_T = N \mid S_0 = x\}. \quad (2.34)$$

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

$$F(x) = \frac{1}{2}F(x+1) + \frac{1}{2}F(x-1) \quad \text{per } x = 1, \dots, N-1. \quad (2.35)$$

**Teorema 2.12.** 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 (2.35), con condizioni al contorno  $F(0) = a$  e  $F(N) = b$ , è la funzione lineare

$$F_0(x) = a + \frac{x(b-a)}{N}. \quad (2.36)$$

*Dimostrazione.* La verifica che la (2.36) soddisfi la condizione (2.35) è immediata. Per quanto riguarda l'unicità, si supponga che  $F$  sia una funzione che soddisfi la (2.35) e si indichi con  $S_n$  la posizione al tempo  $n$  di un random walker partito da  $x$ . Per ogni  $n$ , vale la relazione

$$\mathbb{E}[F(S_{n \wedge T})] = F(x). \quad (2.37)$$

La validità della (2.37) 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

$$\mathbb{E}[F(S_{(n+1) \wedge T})] = \sum_{y=0}^N \mathbb{P}\{S_{n \wedge T} = y\} \mathbb{E}[F(S_{(n+1) \wedge T}) \mid S_{n \wedge T} = y]. \quad (2.38)$$

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

$$\begin{aligned} F(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}[F(S_{n \wedge T})] \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{y=0}^N \mathbb{P}\{S_{n \wedge T} = y\} F(y) \\ &= \mathbb{P}\{S_T = 0\} F(0) + \mathbb{P}\{S_T = N\} F(N) \\ &= [1 - \mathbb{P}\{S_T = N\}] F(0) + \mathbb{P}\{S_T = N\} F(N). \end{aligned} \tag{2.39}$$

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

$$F(x) = a + \frac{x}{N}(b - a). \tag{2.40}$$

□

### 2.4.2 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

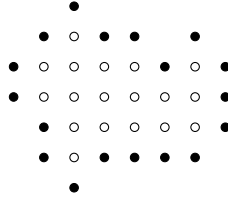
$$\bar{A} = A \cup \partial A,$$

di cui si può vedere un esempio per il caso bidimensionale, nell'immagine in figura 2.2.

**Definizione 2.21.** Si definiscono i due operatori lineari su funzioni  $\mathcal{Q}$  e  $\mathcal{L}$ , come

$$\mathcal{Q}F(\underline{x}) = \frac{1}{2d} \sum_{\substack{\underline{y} \in \mathbb{Z}^d \\ d(\underline{x}, \underline{y})=1}} F(\underline{y}), \tag{2.41}$$

$$\mathcal{L}F(\underline{x}) = (\mathcal{Q} - \mathbf{1})F(\underline{x}) = \frac{1}{2d} \sum_{\substack{\underline{y} \in \mathbb{Z}^d \\ d(\underline{x}, \underline{y})=1}} [F(\underline{y}) - F(\underline{x})]. \tag{2.42}$$



**Figura 2.2:** 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

$$\mathcal{L}F(\underline{x}) = \mathbb{E}[F(\underline{S}_1) - F(\underline{S}_0) | \underline{S}_0 = \underline{x}]. \quad (2.43)$$

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

**Definizione 2.22.** Una funzione a valori discreti  $F$  è detta armonica in  $A$ , se per ogni  $\underline{x} \in A$  soddisfa la relazione

$$\mathcal{L}F(\underline{x}) = 0. \quad (2.44)$$

La relazione (2.44) è un esempio di proprietà del valor medio; per quanto riguarda la condizione al contorno si ha il seguente problema di Dirichlet.

**Definizione 2.23** (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

$$\mathcal{L}F(\underline{x}) = 0 \quad \forall \underline{x} \in A. \quad (2.45)$$

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 2.13.** 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 (2.45). 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 (2.45) può essere riscritta come

$$\mathbb{E}[M_{n+1}|S_0, \dots, S_n] = F(S_{n \wedge T_A}) = M_n. \quad (2.46)$$

Un processo per il quale vale la condizione  $\mathbb{E}[M_{n+1}|S_0, \dots, S_n] = M_n$  è detto martingala: che  $F(\underline{S}_{n \wedge T_A})$  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  $\underline{S}_0 = \underline{x}$ , 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

$$F(x) = \mathbb{E}[M_n] = \sum_{y=0}^{\infty} F(y) \mathbb{P} \{ S_{n \wedge T} = y \}. \quad (2.47)$$

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

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{y>0} \mathbb{P} \{ S_{n \wedge T} = y \} = 0, \quad (2.48)$$

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

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{y>0} F(y) \mathbb{P} \{ S_{n \wedge T} = y \} = 0. \quad (2.49)$$

Nel caso in cui la funzione  $F$  sia limitata, si ha il seguente teorema per la cui dimostrazione si può consultare ad esempio [9].

**Teorema 2.14.** *Dato un sottoinsieme  $A$  di  $\mathbb{Z}^d$  tale che, per ogni  $\underline{z} \in \mathbb{Z}^d$ , si abbia*

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

*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 (2.45), ed è data da*

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

### 2.4.3 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

$$\partial_n p_n(\underline{x}) = \mathcal{L} p_n(\underline{x}) \quad \forall \underline{x} \in A, \quad (2.50)$$

in cui  $\mathcal{L}$  indica il laplaciano discreto, precedentemente definito nella (2.42) 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

$$p_0(\underline{x}) = f(\underline{x}) \quad \forall \underline{x} \in A \quad (2.51)$$

e la condizione al contorno è data da

$$p_n(\underline{x}) = 0 \quad \forall \underline{x} \in \partial A. \quad (2.52)$$

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

$$p_n(\underline{y}) = \mathbb{P} \{ S_{n \wedge T_A} = \underline{y} \mid \underline{S}_0 = \underline{x} \}. \quad (2.53)$$

Senza entrare nel dettaglio della dimostrazione di esistenza e unicità e della ricerca di una funzione  $p_n$  che soddisfi le (2.50)-(2.52), si può comunque vedere

che la relazione (2.53) 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 4.





## 3 | Metastabilità: due modelli noti

Con la consapevolezza acquisita grazie all'armamentario matematico sviluppato nel capitolo precedente, è ora possibile fare un secondo passo verso l'obiettivo di questo lavoro, che consiste nell'affrontare alcune problematiche aperte su come un sistema termodinamico conservativo rilassi all'equilibrio dopo la formazione di una goccia critica.

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 un equilibrio apparente, in cui le osservabili termodinamiche sono ben definite ma lo stato che si osserva non è quello di equilibrio, per un tempo lungo rispetto a quello necessario per raggiungere l'equilibrio metastabile.

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 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 4 e verranno successivamente applicati per lo studio numerico delle interazioni tra gas e goccia critica, nella fase successiva alla nucleazione di quest'ultima.

### 3.1 Caso non conservativo: modello di Ising

#### 3.1.1 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 associi 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  $\sigma = (\sigma_{\underline{x}_1}, \dots, \sigma_{\underline{x}_{|\Lambda_L|}})$  dell'insieme delle configurazioni  $\chi_{\Lambda_L} = \{-1, +1\}^{|\Lambda_L|}$ .

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

$$H_{\Lambda_L}(\sigma) = -J \sum_{(\underline{x}, \underline{y}) \in \Lambda_L^*} \sigma(\underline{x})\sigma(\underline{y}) - h \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \sigma(\underline{x}) - \mathcal{B}_{\Lambda_L}(\sigma) \quad (3.1)$$

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

$$\lim_{\Lambda_L \rightarrow \infty} \frac{\max_{\sigma} |\mathcal{B}_{\Lambda_L}(\sigma)|}{|\Lambda_L|} = 0, \quad (3.2)$$

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

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

in cui  $(\xi_1, \xi_2, \dots)$  sono i  $4|\Lambda_L|^{1/2}$  primi vicini esterni al contorno del reticolo,  $\underline{\varepsilon} = (\varepsilon_{\xi_1}, \varepsilon_{\xi_2}, \dots)$  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  $\underline{\varepsilon}$ , 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  $\underline{\varepsilon} = (+1, +1, \dots, +1)$  e  $\underline{\varepsilon} = (-1, -1, \dots, -1)$  sono dette, rispettivamente, di tipo  $(+)$  e  $(-)$ .

Le ben note leggi della meccanica statistica forniscono una relazione tra l'Hamiltoniana del sistema (3.1) e le quantità macroscopiche termodinamiche del sistema. In particolare, l'energia libera per unità di volume è data da

$$f_{\Lambda_L}(\beta, h) = \frac{\beta^{-1}}{|\Lambda_L|} \log Z(\beta, h, \Lambda_L, \mathcal{B}), \quad (3.3)$$

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

$$Z(\beta, h, \Lambda_L, \mathcal{B}) = \sum_{\sigma \in \chi_{\Lambda_L}} e^{-\beta H_{\Lambda_L}(\sigma)} \quad (3.4)$$

è la funzione di partizione grancanonica.

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

$$\frac{e^{-\beta H_{\Lambda_L}(\sigma)}}{Z(\beta, h, \Lambda_L, \mathcal{B})} \quad \forall \sigma \in \chi_{\Lambda_L}, \quad (3.5)$$

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

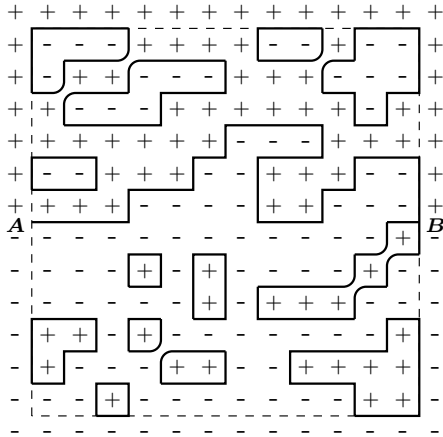
$$\langle \sigma_{x_1} \dots \sigma_{x_n} \rangle_{\Lambda_L, \mathcal{B}_{\Lambda_L}} = \frac{\sum_{\sigma} \sigma_{x_1} \sigma_{x_2} \dots \sigma_{x_n} e^{-\beta H_{\Lambda_L}(\sigma)}}{\sum_{\sigma} e^{-\beta H_{\Lambda_L}(\sigma)}}.$$

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

**Definizione 3.1.** Si definisce la magnetizzazione media del sistema come

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

### 3.1.2 Descrizione geometrica delle configurazioni



**Figura 3.1:** Esempio di descrizione geometrica di una configurazione, con condizione al contorno di tipo  $(\epsilon)$

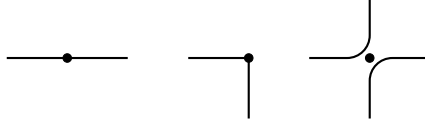
Con una procedura semplice e diretta, risulta ora possibile descrivere geometricamente l'energia associata a una configurazione di spin del sistema.

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 3.1, 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 delle 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 3.1, 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



**Figura 3.2:** Esempio dei tre possibili incroci dei segmenti del reticolo duale  $\Lambda'_L$

ottenuti con questa procedura, infatti, sono punti del reticolo  $\Lambda'_L$ , duale di  $\Lambda_L$  e traslato di  $\underline{a} = (1/2, 1/2)$  rispetto a quest'ultimo, e possono trovarsi solo in uno dei tre possibili casi rappresentati nell'immagine in figura 3.2, 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

$$H_{\Lambda_L}(\sigma) = -J\mathcal{N}_{\Lambda_L} + 2J\left(\sum_i |\gamma_i| + \sum_j |\lambda_j|\right). \quad (3.6)$$

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

$$Z_{\Lambda_L}(\beta) = \sum_{\gamma_1 \dots \gamma_h} \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_k} \left( e^{-2\beta J \sum_i |\gamma_i|} \cdot e^{-2\beta J \sum_j |\lambda_j|} \right) \cdot e^{\beta J \mathcal{N}_{\Lambda_L}}. \quad (3.7)$$

Nella (3.7), 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 (3.7) e considerando che non si hanno linee aperte, si ricava

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

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

### 3.1.3 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 3.2.** 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

$$\langle \sigma_{\underline{x}_1} \dots \sigma_{\underline{x}_n} \rangle = \lim_{\Lambda_L \rightarrow \infty} \langle \sigma_{\underline{x}_1} \dots \sigma_{\underline{x}_n} \rangle_{\Lambda_L, \mathcal{B}_{\Lambda_L}} \quad (3.8)$$

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 (3.2).

**Definizione 3.3.** 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

$$\lim_{\Lambda_L \rightarrow \infty} \langle \sigma_{\underline{x}_1} \dots \sigma_{\underline{x}_n} \rangle_{\Lambda_L, \mathcal{B}_{\Lambda_L}(\sigma)} \neq \lim_{\Lambda_L \rightarrow \infty} \langle \sigma_{\underline{x}_1} \dots \sigma_{\underline{x}_n} \rangle_{\Lambda_L, \mathcal{B}'_{\Lambda_L}(\sigma)} \quad (3.9)$$

Se la condizione (3.9) è soddisfatta, si ha un'instabilità macroscopica del sistema. Un cambiamento nelle condizioni al contorno, per la definizione (3.4) 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 appurarlo, 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

$$\lim_{\Lambda_L \rightarrow \infty} \langle \sigma_{\underline{x}} \rangle_{\Lambda_L, \pm} = \pm m^*(\beta) \neq 0 \quad (3.10)$$

in cui  $\pm$  fa riferimento al tipo di condizione al contorno e  $m$  è la magnetizzazione vista nella definizione 3.1.

La (3.10) 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 (3.10) 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 (3.10), si ponga

$$\langle \sigma_{\underline{x}} \rangle_{\Lambda_L, +} = 1 - 2P_{\Lambda_L, +}(-), \quad (3.11)$$

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

$$P_{\Lambda_L, +}(-) \leq \sum_{\gamma \circ \underline{x}} \rho(\gamma), \quad (3.12)$$

in cui  $\rho(\gamma)$  è la probabilità che il generico contorno  $\gamma$  appartenga all'insieme di linee associate alla configurazione di spin e  $\gamma \circ \underline{x}$  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

$$\rho(\gamma) = \frac{\sum_{\substack{\Gamma \in G_{\Lambda_L} \\ \Gamma \ni \gamma}} e^{-2\beta J \sum_{\gamma' \in \Gamma} |\gamma'|}}{\sum_{\Gamma \in G_{\Lambda_L}} e^{-2\beta J \sum_{\gamma' \in \Gamma} |\gamma'|}}, \quad (3.13)$$

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 (3.13), si ottiene

$$\rho(\gamma) = e^{-2\beta J |\gamma|} \frac{\sum_{\substack{\Gamma \in G_{\Lambda_L} \\ \Gamma \text{ comp } \gamma}} e^{-2\beta J \sum_{\gamma' \in \Gamma} |\gamma'|}}{\sum_{\Gamma \in G_{\Lambda_L}} e^{-2\beta J \sum_{\gamma' \in \Gamma} |\gamma'|}} \leq e^{-2\beta J |\gamma|}, \quad (3.14)$$

in cui la somma  $\sum_{\substack{\Gamma \in G_{\Lambda_L} \\ \Gamma \text{ comp } \gamma}}$  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 (3.12) e la (3.14), si ottiene

$$P_{\Lambda_L,+}(-) \leq \sum_{p=4}^{\infty} p^2 3^p e^{-2\beta J p} = \varepsilon(\beta) \quad (3.15)$$

Per  $\beta \rightarrow \infty$  la quantità  $\varepsilon(\beta)$  definita in (3.15) diventa piccola a piacere. Conseguentemente, per via della relazione (3.11), 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.

La 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.

### 3.1.4 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.

Anche se in questo lavoro si fa riferimento ad una scuola di pensiero che vede la metastabilità come un problema legato alla dinamica del sistema<sup>1</sup>, se questa comporta pochi spin flip ad ogni iterazione è comunque possibile far riferimento al panorama energetico della formazione di un cluster quadrato, per capire qualitativamente se ci si può aspettare un comportamento metastabile.

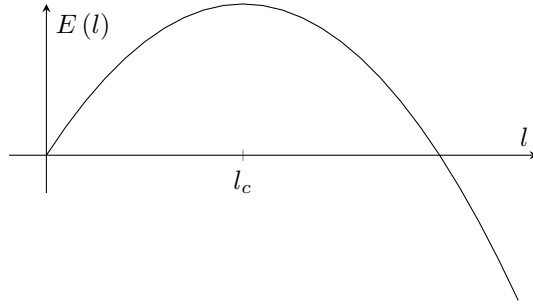
Sia, quindi,  $\sigma_{l \times l}$  la configurazione in cui gli spin positivi formano un quadrato di lato  $l \in \mathbb{N}$  in un mare di spin negativi. In virtù dell'Hamiltoniana (3.1), l'energia associata a questa configurazione è

$$\begin{aligned} E(l) &= H(\sigma_{l \times l}) - H(\ominus) \\ &= 4Jl - hl^2. \end{aligned} \quad (3.16)$$

La funzione  $E(l)$  ha l'andamento mostrato in figura 3.3, 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

$$l_c = \left\lceil \frac{2J}{h} \right\rceil. \quad (3.17)$$

<sup>1</sup>Per maggiori dettagli sulla scuola di pensiero si possono consultare, ad esempio, Lebowitz Penrose 1966 e Cassandro-Galves-Olivieri-Vares 1984



**Figura 3.3:** Energia di una goccia critica per il modello di Ising

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  $\chi_{\Lambda_L} = \{-1, +1\}^{|\Lambda_L|}$ , tale da avere la misura di Gibbs (3.5) 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  $\sigma^{\underline{x}}$  con  $\underline{x} \in \Lambda_L$  per le quali

$$\sigma^{\underline{x}}(\underline{y}) = \begin{cases} \sigma(\underline{y}), & \text{se } \underline{x} \neq \underline{y}, \\ -\sigma(\underline{y}), & \text{se } \underline{x} = \underline{y}; \end{cases} \quad (3.18)$$

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

$$\mathbb{P}(\sigma, \sigma') = \begin{cases} \frac{1}{|\Lambda_L|} e^{-\beta[H(\sigma^{\underline{x}}) - H(\sigma)]_+}, & \text{se } \sigma' = \sigma^{\underline{x}} \text{ per } \underline{x} \in \Lambda_L, \\ 1 - \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \frac{1}{|\Lambda_L|} e^{-\beta[H(\sigma^{\underline{x}}) - H(\sigma)]_+}, & \text{se } \sigma' = \sigma, \\ 0, & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (3.19)$$

in cui  $[a]_+ := a \vee 0$ .

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

La misura di Gibbs definita in (3.5) soddisfa la condizione di reversibilità vista nel paragrafo 2.2.5

$$\mu(\sigma) \mathbb{P}(\sigma, \sigma') = \mu(\sigma') \mathbb{P}(\sigma', \sigma) \quad (3.20)$$



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  $\chi_{\Lambda_L}$  si ha

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P}^t(\sigma_0, \sigma) = \mu(\sigma). \quad (3.21)$$

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. In questo senso, è possibile descrivere il decadimento di uno stato metastabile in termini di convergenza all'equilibrio per una catena di Markov con misura iniziale corrispondente allo stato metastabile.

### 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

$$\Lambda_L \text{ grande ma finito e indipendente da } \beta, \quad (3.22a)$$

$$h \in (0, 2J), \quad (3.22b)$$

$$\beta \rightarrow \infty \quad (3.22c)$$

In questo regime metastabile, per il quale la taglia critica  $l_c$  definita in (3.17) è maggiore di 1, si considerino le due configurazioni definite come

$$\oplus : \quad \sigma(\underline{x}) = +1 \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L \quad (3.23)$$

$$\ominus : \quad \sigma(\underline{x}) = -1 \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L \quad (3.24)$$

Nel regime definito con le (3.22) 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 3.1.4 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.

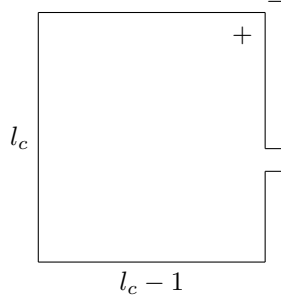
**Definizione 3.4.** Si definisce il primo hitting time dell'insieme  $A \in \chi$  come

$$\tau_A = \min \{ t \in \mathbb{N}_0 : \sigma_t \in A \} \quad (3.25)$$

**Definizione 3.5.** Si definisce il tempo dell'ultima visita ad  $\eta$  prima di visitare  $\eta'$  come

$$\tau_{\eta, \eta'} = \max \{ t < \tau_{\eta'} : \eta_t = \eta \} \quad (3.26)$$

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 3.4:** 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 3.1.** 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

$$l(\sigma) < l_c: \quad \lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathbb{P} \{ \tau_{\ominus} < \tau_{\oplus} \} = 1, \quad (3.27a)$$

$$l(\sigma) \geq l_c: \quad \lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathbb{P} \{ \tau_{\oplus} < \tau_{\ominus} \} = 1. \quad (3.27b)$$

- ii) Sia  $\mathcal{C}_r$  l'insieme delle configurazioni contenenti un cluster del tipo di quello nell'immagine in figura 3.4, 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

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \mathbb{P}_{\ominus} \{ \bar{\tau}_{\mathcal{C}_r} < \tau_{\oplus} \} = 1. \quad (3.28)$$

- 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 3.4. Allora

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \log \mathbb{E}_{\ominus}[\tau_{\oplus}] = \Gamma(J, h). \quad (3.29)$$

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

Le due relazioni (3.27) rielaborano, in termini rigorosi, quanto anticipato nel paragrafo 3.1.4 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'hit 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 (3.28) 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 3.1,  $\bar{\tau}_{Cr}$  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 visita una configurazione dell'insieme  $Cr$ , analoga a quella mostrata in figura 3.4, prima della formazione di cluster quadrati di spin positivi.

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

## 3.2 Caso conservativo: lattice gas



## 4 | Crescita supercritica: due modelli

In questo capitolo si illustreranno dettagliatamente due modelli sviluppati per studiare, nel caso di un sistema conservativo, l'interazione che avviene tra un cluster supercritico e il gas sovrassaturo dopo che sia avvenuta la nucleazione.

Come visto nel precedente capitolo, l'esistenza di una goccia critica è una caratteristica comune dei sistemi metastabili conservativi, ma mentre il processo di formazione della goccia è ben compreso da un punto di vista teorico, con risultati rigorosi in molti regimi, il rilassamento all'equilibrio che avviene successivamente alla nucleazione rappresenta un problema tuttora aperto anche da un punto di vista euristico.

Come si vedrà, il primo dei due modelli guarda il problema dal punto di vista stocastico della dinamica di un insieme di random walker quasi del tutto non interagenti, mentre il secondo lo rivede in modo deterministico, attraverso l'evoluzione di una matrice di densità.

Dopo avere dato esauritive descrizioni matematiche di questi due modelli, verrà spiegata la relazione che li lega e saranno presentate le osservabili fisiche interessanti per poter iniziare ad affrontare le problematiche ancora aperte sul rilassamento all'equilibrio.

Nella conclusione del capitolo, verrà presentato un primo confronto numerico tra i due modelli, che ha permesso di provare la bontà dei due programmi realizzati per simulare numericamente il comportamento

Frase da concludere

### 4.1 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

$$|\underline{x} - \underline{y}|_L = \sqrt{d_L^2(x_1, y_1) + d_L^2(x_2, y_2)}, \quad (4.1)$$

in cui la periodicità è tenuta in considerazione da

$$d_L(x_i, y_i) = L + \frac{1}{2} - \left| x_i - y_i \right| - L - \frac{1}{2} \quad \text{per } i = 1, 2.$$

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

$$\mathbb{P} \{ \underline{S}_i(0) = \underline{x} \} = \frac{1}{|\Lambda_L|} \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L, \forall i = 1, \dots, N \quad (4.2)$$

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

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

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 walker 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 iniziale  $\mathbf{x}$  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 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, dal momento che le particelle sono indistinguibili, si può imporre la condizione che, in caso di emissione, venga 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 ottiene

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

Di queste ultimi tre, il primo caso è quello in cui tutte le particelle esterne alla trappola si muovono di random walk semplice simmetrico e indipendente e la particella associata all'indice  $i_e$  viene espulsa dalla trappola; il secondo caso, invece, si differenzia dal primo perché dalla trappola non viene espulsa nessuna particella; il terzo caso, infine, è quello in cui la dinamica del sistema impedisce la transizione tra le due configurazioni.

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

$$n(\underline{x}, t) = \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{\{\underline{s}_i(t)=\underline{x}\}} \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L. \quad (4.3)$$

Anche  $n(\underline{x}, t)$  è una variabile aleatoria e, in virtù della distribuzione iniziale uniforme (4.2) delle  $N$  particelle nel reticolo  $\Lambda_L$ , al momento dell'inizializzazione del sistema, il suo valore atteso è dato da:

$$\mathbb{E}[n(\underline{x}, 0)] = \frac{N}{|\Lambda_L|} \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L. \quad (4.4)$$

## 4.2 Modello con matrice di densità

Come anticipato, il secondo modello è una rivisitazione in chiave deterministica e consiste nell'evoluzione per tempi discreti  $t \in \mathbb{N}_0$  di una matrice di densità.

Si definisca una funzione a valori discreti  $\rho(\underline{x}, t)$ , per ogni sito  $\underline{x}$  del reticolo  $\Lambda_L$  precedentemente definito, per la quale si abbia un valore iniziale per  $t = 0$  uniforme su  $\Lambda_L$ , ad eccezione dell'origine:

$$\rho(\underline{x}, 0) = \begin{cases} \tilde{\rho}_o & \text{se } \underline{x} = \underline{0}, \\ \tilde{\rho} & \text{altrimenti,} \end{cases} \quad (4.5)$$

in cui  $\tilde{\rho}_o$  e  $\tilde{\rho}$  sono due numeri reali.

numeri reali in  $[0, 1]$ ?

La legge che regola l'evoluzione temporale della funzione  $\rho(\underline{x}, t)_{\underline{x} \in \Lambda_L}$  varia a seconda del sito reticolare:

- 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  $\underline{x} \neq \underline{0}$ , 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 la funzione  $\rho(\underline{x}, t)_{\underline{x} \in \Lambda_L}$  appena definita, l'insieme dei possibili valori è dato da:

$$\left\{ \rho = (\rho(\underline{x}, t))_{\underline{x} \in \Lambda_L} : \rho(\underline{x}, t) \in [0, N] \text{ e } \sum_{\underline{x} \in \Lambda_L} \rho(\underline{x}, t) = N, \forall t \in \mathbb{N}_0 \right\}$$

La funzione  $\rho(\underline{x}, t)$  può essere identificata con il numero di occupazione dei siti di  $\Lambda_L$  e, come si vede dal suo spazio degli stati, anche questo modello è conservativo, in quanto si ha la condizione:

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

Se si considera trascurabile la differenza tra i valori di inizializzazione nella (4.5), assunzione sicuramente valida per ogni reticolo che si analizzerà numericamente, la condizione appena vista comporta che per  $t = 0$  si abbia

$$\tilde{\rho} = \frac{N}{|\Lambda_L|} \quad (4.6)$$

### 4.3 Relazione tra i due modelli

Come anticipato, i due modelli appena introdotti sono in stretta relazione tra di loro e consistono in due punti di vista differenti da cui osservare lo stesso fenomeno.

Per iniziare a comprendere la natura del loro legame, basta confrontare la relazione (4.4) con la (4.6), ottenendo

$$\mathbb{E}[n(\underline{x}, 0)] = \frac{N}{|\Lambda_L|} = \tilde{\rho} \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L : \underline{x} \neq \underline{0} \quad (4.7)$$

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 primo modello 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 (4.7) 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

$$\mathbb{E}[n(\underline{x}, t)] = \rho(\underline{x}, t) \quad \forall \underline{x} \in \Lambda_L, t \in \mathbb{N}_0. \quad (4.8)$$



## 4.4 Osservabili

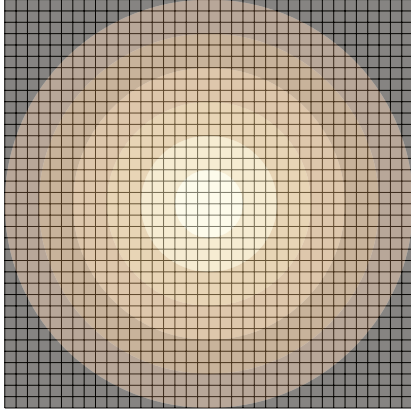
Come visto, i due modelli appena introdotti saranno analizzati al fine di studiare l'interazione che avviene tra il cluster supercritico e il gas sovrassaturo, successivamente alla prima nucleazione.

Una prima osservabile, quindi, 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.

Mente per il secondo punto si rimanda alla sottosezione 4.4.1, per risolvere la prima problematica si può ricorrere alla simmetria dei due modelli.



**Figura 4.1:** Esempio di suddivisione di un reticolo di semilato  $L = 18$  in corone di passo  $\ell = 3$ .

Dal momento che entrambi godono di simmetria centrale, 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.

Vista la conservatività dei due modelli, è opportuno aggiungere a queste corone circolari un'ultima 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, che viene

analizzata separatamente dal resto del gas circostante.

Nella figura 4.1 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

$$\Xi_i = \Xi(i, \ell) = \{ \underline{x} \in \Lambda_L : (i-1)\ell < \|\underline{x}\| \leq i\ell \} \quad \text{per } i = 1, \dots, L/\ell. \quad (4.9)$$

La corona generalizzata, associata all'indice  $i = L/\ell + 1$ , è a sua volta data dall'insieme di punti

$$\Xi_{L/\ell+1} = \Lambda_L \setminus \bigcup_{i=1}^{L/\ell} \Xi_i$$

A questo punto, si può pensare di mediare sulle corone appena definite i valori locali delle variabili di interesse, ma è opportuno anche disporre di una media sul tempo. A tale scopo, si sceglie un intervallo di lunghezza  $\Delta$  e si suddivide l'evoluzione temporale negli intervalli disgiunti

$$\Theta_i = \Theta(i, \Delta) = [1 + (i-1)\Delta, i\Delta] \cap \mathbb{N}^+ \quad \forall i \in \mathbb{N}^+ \quad (4.10)$$

Fatta questa suddivisione in intervalli spaziali e temporali, per i tempi  $j\Delta$  con  $j \in \mathbb{N}^+$ , si hanno  $L/\ell + 1$  densità mediate sulle corone  $\Xi_i$  e sugli intervalli temporali  $\Theta_j$  date da

Queste due formule vanno controllate

$$\delta(i, j, \ell, \Delta)_{\text{r.w.}} = \frac{1}{|\Xi_i|} \frac{1}{\Delta} \sum_{t \in \Theta_j} \sum_{k=1}^N \mathbb{1}_{\{\underline{S}_k(t) \in \Xi_i\}} \quad (4.11)$$

Le quantità  $\delta(i, j, \ell, \Delta)_{\text{r.w.}}$  sono variabili aleatorie e possono essere messe in relazione con le omologhe quantità deterministiche definite per il modello a matrice densità come

$$\delta(i, j, \ell, \Delta)_{\text{m.d.}} = \frac{1}{|\Xi_i|} \sum_{\underline{x} \in \Xi_i} \rho(\underline{x}, j\Delta) \quad (4.12)$$

ottenendo nuovamente la relazione che vede il modello a matrice densità come valore aspettato per il modello a random walk

$$\mathbb{E}[\delta(i, j, \ell, \Delta)_{\text{r.w.}}] = \delta(i, j, \ell, \Delta)_{\text{m.d.}} \quad \forall i = 1, \dots, L/\ell + 1, j \in \mathbb{N}^+ \quad (4.13)$$

#### 4.4.1 Media sulla distribuzione iniziale

La dipendenza del modello a random walk rispetto alla distribuzione iniziale rende necessaria un'ulteriore precisazione riguardo la relazione tra i due modelli, illustrata nel paragrafo 4.3: 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 di questo aspetto, si rimanda al paragrafo 4.5.

#### 4.4.2 Motivi di 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 (4.8) che lega i due modelli, il valore aspettato del numero di particelle per sito fluttuerebbe intorno a questo valore costante e si avrebbe una situazione analoga anche per le altre osservabili.

Con la trappola, si introduce una simmetria centrale nei due modelli. Una particella intrappolata, nel modello a random walk, 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 respinta. Come è stato spiegato nel capitolo 2, con i lemmi ?? e ??, la probabilità che dopo  $n$  passi la particella si trovi in un punto  $\underline{x}$  del reticolo è una funzione del quadrato della norma  $\|\underline{x}\|$ .

i punti interrogativi, in tutto il documento, ci sono perché non ho compilato né gli altri capitoli né le appendici.

## 4.5 Primo confronto numerico tra i due modelli

Prima di affrontare lo studio delle interazioni tra la goccia e il gas circostante, analisi a cui verrà dedicato il prossimo capitolo, è opportuno illustrare il laborioso processo con 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 A.

Questo processo di taratura è stato effettuato su molteplici configurazioni reticolari e ha portato differenti risultati: in particolar modo, in una prima fase ha permesso di capire come scegliere al meglio alcuni parametri quali la durata complessiva delle simulazioni, l'intervallo  $\Delta$  di iterazioni tra due misure consecutive o 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; successivamente, ha dato conferme di natura numerica riguardo il rapporto che intercorre tra i due modelli e la corretta simulazione di questi ultimi da parte dei due programmi, prima che questi venissero intensivamente utilizzati per l'analisi vera e propria del comportamento metastabile di questi due modelli.

Per quanto riguarda le configurazioni reticolari

- è stata scelta una trappola completamente assorbente, ponendo  $p_e = 0$  per la probabilità di emissione nel modello a random walk e  $\hat{\rho}_o = 0$  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  $L = 50, 60, \dots, 500$ .

Per quanto riguarda la comprensione di come gestire i parametri cruciali, questa prima analisi numerica ha permesso di capire

- il passo  $\ell$  delle corone circolari  $\Xi_i$  e il numero  $\Delta$  di iterazioni tra due misure consecutive sono stati calibrati con vari tentativi empirici, tenendo in considerazione che sono due parametri di cruciale importanza 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 (4.11) del modello a random walk vengano

smorzate le fluttuazioni del numero di particelle per sito, ma al tempo stesso 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.

Le varie prove hanno via via portato alla scelta di un passo  $\ell = 5$  per le corone e di un intervallo  $\Delta = 20$  di iterazioni tra due misure consecutive.

- Per la durata delle simulazioni sono stati scelti tempi lunghi, in modo di avere un primo banco di prova per il comportamento asintotico, che esula dagli interessi di questa prima analisi e verrà illustrato in seguito.

La scelta sulle durate ha comportato 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 medie 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  $\Lambda_L$ .

#### 4.5.1 Risultati

Per concludere, verranno riportati i risultati numerici ottenuti confrontando i dati sperimentali raccolti con due particolari simulazioni dei modelli, in quanto sono del tutto analoghi a quello che è stato ricavato da ognuna delle centinaia di altre prove effettuate.

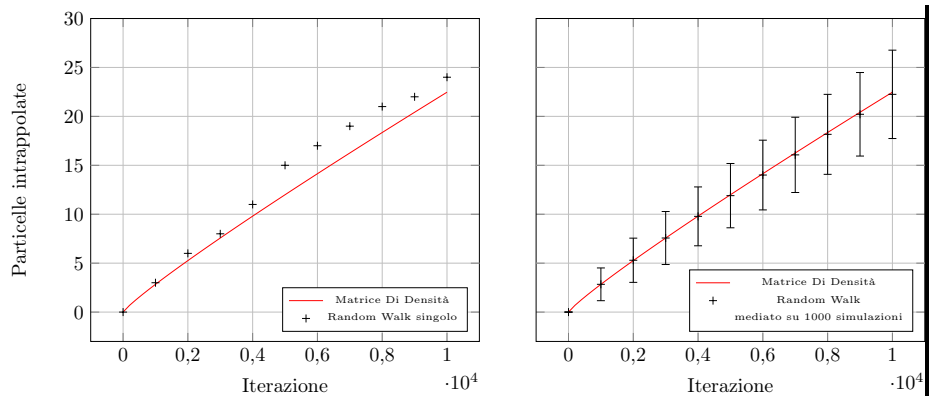
Nello specifico, verranno mostrati i risultati relativi a un reticolo  $\Lambda_L$  di semilato  $L = 100$ . Come già spiegato, la trappola è completamente assorbente, il reticolo è suddiviso in corone circolari di passo  $\ell = 5$ , le misure vengono prese ogni 20 iterazioni e la durata complessiva della simulazione è di 1 000 000 di iterazioni.

Per comprendere l'importanza di quanto spiegato nel sottoparagrafo 4.4.1 riguardo la dipendenza dalla distribuzione iniziale per il modello a random walk, saranno mostrati i risultati per una densità bassa, pari a  $2^{-7}$ , e una elevata, pari a 0,5. Per questi due casi, si vedrà in modo chiaro come il modello a random walk tenda a quello a matrice di densità e come la densità media iniziale influisca sul numero di condizioni iniziali su cui mediare.

#### Particelle intrappolate

Una prima evidenza numerica del legame tra i due modelli visto con la relazione (4.8) viene dall'analisi del numero di particelle intrappolate nell'origine.

**Densità piccola** Per densità medie iniziali piccole, come  $\tilde{\rho} = N/|\Lambda_L| = 2^{-7}$ , si vede chiaramente dai grafici in figura 4.2 che il numero di particelle intrappolate, nel modello a random walk, tende a quanto previsto dal modello a matrice di

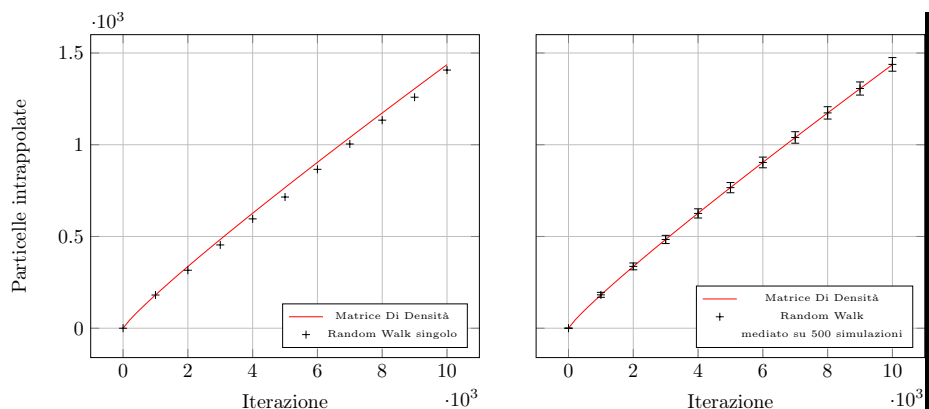


**Figura 4.2:** Numero di particelle intrappolate in funzione dell'iterazione nel caso di densità media iniziale piccola. Nel grafico di destra è visibile come i dati per il modello a random walk, in nero, tendano a quelli del modello a matrice di densità se mediati su un insieme di 1000 differenti configurazioni iniziali.

densità, se si media su un insieme corposo di condizioni iniziali in questo caso contenente 1000 differenti simulazioni.

Nel grafico in figura 4.2, è riportato l'andamento per tempi piccoli, in cui si ha l'errore maggiore sui valori medi del numero di particelle intrappolate. Si è potuto però constatare che l'errore percentuale diminuisce, in virtù del fatto che il valore medio dell'osservabile aumenta, mentre l'errore assoluto rimane costante o tende anche esso a diminuire.

**Densità alta** Come si vede dal grafico in figura 4.3



**Figura 4.3:** Numero di particelle intrappolate in funzione dell'iterazione nel caso di densità media iniziale elevata. Nel grafico di destra è visibile la conferma del legame tra i due modelli; l'insieme delle configurazioni iniziali è però meno corposo e gli errori sono minori di quanto visto nel grafico in figura 4.2 per il caso di una densità media iniziale piccola.

con la densità media iniziale maggiore  $\tilde{\rho} = N/|\Lambda_L| = 2^{-1}$ , si ottiene nuovamente la conferma della relazione che lega i due modelli.

Aumentando la densità media iniziale, le misure ottenute da singole simulazioni del modello a random walk sono però già molto vicine a quelle ottenute con il modello a matrice di densità.

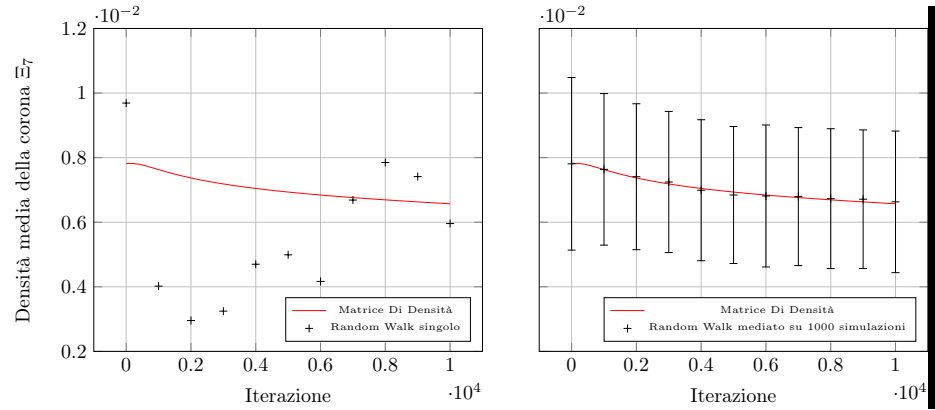
Questo aspetto si riflette sia sulla possibilità di mediare su insiemi di condizioni iniziali meno corposi, sia sulla minore entità dell'errore assoluto, dal momento che le singole misure sono più vicine ai valori medi dati dal modello a matrice di densità.

### Svuotamento delle corone

Il rapporto tra i due modelli riceve un'ulteriore conferma numerica nel caso delle densità medie definite nelle (4.11), per il modello a random walk, e nelle (4.12), per il modello a matrice di densità.

In questo caso, l'effetto dovuto alla media sulle condizioni iniziali è ovviamente ancora maggiore, come si può vedere da cosa avviene per la corona  $\Xi_7$  nei due casi di densità media iniziale già visti per il numero di particelle intrappolate.

**Densità bassa** Come mostrato nel grafico in figura 4.4 per la corona  $\Xi_7$

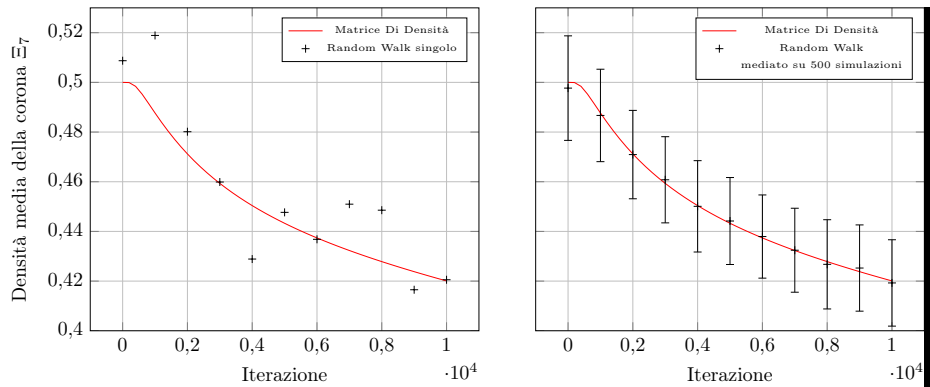


**Figura 4.4:** Andamento della densità media della corona  $\Xi_7$  in funzione dell'iterazione, per la matrice di densità e per il modello a random walk, nel caso di singola simulazione e di un dataset da 1000 simulazioni.

la dispersione dei dati raccolti in una singola simulazione del modello a random walk rispetto a quelli prodotti dal modello a matrice di densità è molto maggiore rispetto al caso del numero di particelle intrappolate.

Questa maggiore dispersione è ovviamente motivata dal fatto che si stanno sommando le fluttuazioni del numero di particelle nei siti interni ad una singola corona.

Sempre diversamente da quanto avviene per il numero di particelle intrappolate, l'errore relativo aumenta nel tempo. Anche in questo caso, infatti, l'errore assoluto è all'incirca costante, ma il valore medio diminuisce.



**Figura 4.5:** Rapporto degli andamenti della densità media della corona  $\Xi_7$  in funzione dell'iterazione, per la matrice di densità e per il modello a random walk, nel caso di singola simulazione e di un dataset da 1000 simulazioni.

**Densità alta** Anche in questo caso, l'avvicinamento del modello a random walk al modello a matrice di densità è ancora più evidente rispetto a quanto avviene per il numero di particelle intrappolate, come si può vedere dal grafico in figura 4.5 relativo allo svuotamento della settima corona numero per densità media iniziale elevata.

Le misure ottenute con una singola simulazione, per via dell'aumento di densità, sono più vicine ai valori medi, ma l'errore relativo tende, di nuovo, a crescere per gli stessi motivi appena visti per precedente caso.





## 5 | Crescita supercritica: risultati sperimentali

Facendo riferimento alle osservabili introdotte nel paragrafo 4.4, in questo capitolo vengono esposti previsioni teoriche e rispettivi risultati sperimentali, ottenuti con le simulazioni numeriche svolte con i due programmi per i codici dei quali si rimanda in appendice A.

Come specificato precedentemente, l'obiettivo è lo studio delle interazioni tra la goccia supercritica e il gas sovrassaturo in seguito alla nucleazione nei due modelli descritti nel precedente capitolo.

In questa analisi, verrà presentato quanto ottenuto per il caso di un reticolo con una trappola assorbente posizionata nell'origine e suddiviso in corone circolari di passo  $\ell = 5$ . Per quanto riguarda l'aspetto temporale, l'intervallo tra due misure è sempre di  $\Delta = 20$  iterazioni e le durate complessive sono state scelte in modo che fosse certo il raggiungimento del comportamento asintotico, di cui si parlerà nel seguito. Verrà inoltre scelto di volta in volta il semilato  $L$  più congeniale al fine di esporre con maggior chiarezza i risultati che, se non specificato diversamente, sono comuni a tutte le altre centinaia di casi simulati variando i parametri analogamente a come illustrato nel paragrafo 4.5.

### 5.1 Particelle intrappolate

Analogamente all'analisi per la taratura fatta nel precedente capitolo, una prima informazione si ottiene osservando cosa accade nella trappola.

#### 5.1.1 Tempi piccoli

Con l'approfondimento relativo a catene di Markov e random walk nel capitolo 2, è stato introdotto il concetto di hitting time e si è visto che, per un random walker partito da un generico sito  $\underline{x}$  e per tempi piccoli, la probabilità che l'hitting time  $\tau_o$  dell'origine sia maggiore di  $t$  va come

$$\mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o > t \} \sim \ln|\underline{x}|^2 / \ln t. \quad (5.1)$$

Nell'ipotesi in cui la trappola nell'origine sia completamente assorbente e la densità reticolare iniziale sia  $\rho$ , a partire dalla (5.1) si può stimare il numero  $n_o(t)$  di particelle intrappolate nell'origine in funzione del tempo come

$$\begin{aligned}
n_o(t) &= \sum_{\underline{x}} \rho \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o < t \} \\
&= \sum_{|\underline{x}| < c} \rho \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o < t \} + \sum_{c < |\underline{x}| < \sqrt{t}} \rho \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o < t \} + \sum_{|\underline{x}| > \sqrt{t}} \rho \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o < t \} \\
&\simeq \sum_{|\underline{x}| < \sqrt{t}} \rho + \rho \sum_{c < |\underline{x}| < \sqrt{t}} \frac{\ln |\underline{x}|^2}{\ln t} \\
&\simeq \pi \rho t - \left[ \frac{4\pi\rho}{\ln t} \frac{r^2}{2} \left( \ln t - \frac{1}{2} \right) \right]_c^{\sqrt{t}} \\
&= \pi \rho t - \frac{2\pi\rho}{\ln t} t \left( \frac{1}{2} \ln t - \frac{1}{2} \right) + O\left( \frac{1}{\ln t} \right) \\
&\simeq \frac{\pi \rho t}{\ln t},
\end{aligned}$$

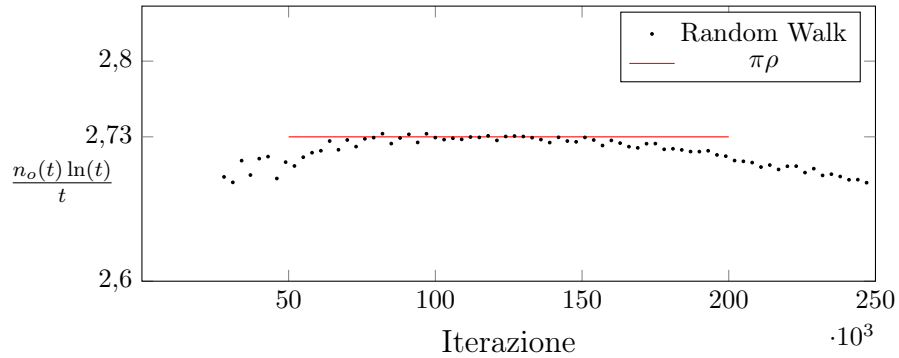
che può essere riscritta come

$$\frac{n_o(t) \ln t}{t} \simeq \pi \rho. \quad (5.2)$$

A causa delle approssimazioni fatte, la relazione (5.2) non può essere interpretata in modo rigoroso, ma fornisce ugualmente una 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 5.1



**Figura 5.1:** Andamento di  $n_o(t) \ln(t)/t$  per un reticolo di semilato  $L = 250$  e densità iniziale unitaria. Nell'ingrandimento è visibile il tratto costante previsto teoricamente.

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 funzione ha un punto di massimo del valore di 2,73. Nell'intervallo temporale  $T = \{t : 95\,000 \leq t \leq 135\,000\}$ , a cui fa riferimento l'ingrandimento presente nel grafico, la quantità  $n_o(t) \ln(t)/t$  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.

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  $L$ , sempre per uno scarto del 0.5‰.

### 5.1.2 Tempi lunghi

Per tempi lunghi, risulta interessante studiare l'andamento del numero delle particelle rimaste libere nel reticolo  $\Lambda_L$ , dato da

$$n_l(t) = N - n_o(t), \quad (5.3)$$

in cui  $N$  è il numero di particelle iniziali,  $n_o(t)$  è il numero di particelle intrappolate in funzione del tempo.

Facendo riferimento alla probabilità dell'hit time vista con la relazione (5.1), si definiscono le due quantità

$$\inf_{\underline{x}} \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o > t_o \} = a$$

$$\sup_{\underline{x}} \mathbb{P}_{\underline{x}} \{ \tau_o > t_o \} = b$$

e si cerca un  $t_o$  per il quale si abbia  $a \simeq b$ .

Dato un suo 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 esponenziale.

Dovrei motivare questa scelta per  $t_o$ .

Per vederlo meglio, si può scegliere  $t_o$  dell'ordine di  $(2L+1)^2$  per l'estremo superiore: per esempio con  $t_o \simeq e(2L+1)^2$ , 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

$$\mathbb{P} \left\{ \frac{\tau_o}{e(2L+1)^2} > k \right\} \leq \left( 1 - \frac{1}{2 \ln(L)} \right)^{-k} \simeq e^{-k/2 \ln(L)}. \quad (5.4)$$

Per il numero di particelle libere per tempi lunghi, si ottiene quindi l'andamento temporale

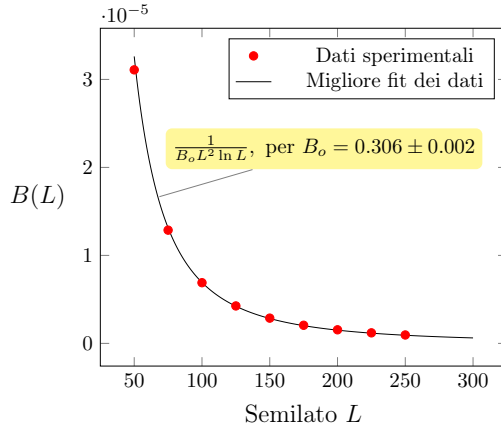
$$n_l(t) = A e^{-Bt}. \quad (5.5)$$

Confrontando la (5.5) con la (5.3) si vede facilmente che il parametro  $A$  è il numero  $N$  di particelle libere disposte nel reticolo per  $t = 0$ . La verifica di questa corrispondenza, banale e non molto interessante, è stata fatta ma verrà tralasciata.

Dal confronto con la (5.4), si ricava che il parametro  $B$  dipende dal solo semilato  $L$  del reticolo

$$B(L) = \frac{1}{B_o L^2 \ln L}. \quad (5.6)$$

Su questa relazione ho alcuni dubbi, anche se il fit viene particolarmente bene



**Figura 5.2:** Fit tra l'andamento teorico  $1/(B_o L^2 \ln L)$  e i dati sperimentali per ricavare il parametro  $B_o$  nella (5.6).

Per trovare il parametro  $B_o$ , è più conveniente lavorare sul logaritmo naturale della (5.6)

$$\ln[n_l(t)] = \ln(A) - Bt. \quad (5.7)$$

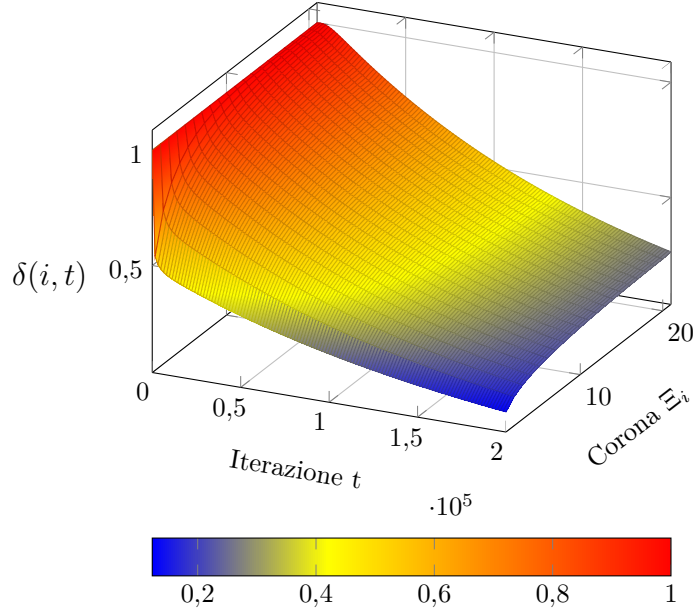
Si sceglie una densità media iniziale  $e$ , al variare del semilato  $L$ , si ricavano numericamente i valori di  $B(L)$  con un fit tra i dati sperimentali raccolti per il logaritmo del numero di particelle libere e il suo andamento teorico visto nel secondo membro nella (5.7).

Ottenuti in questo modo i valori di  $B(L)$  in funzione del semilato  $L$ , con un secondo fit tra questi ultimi e il loro andamento teorico riportato nella (5.6) si ricava il parametro  $B_o$ .

Con questa seconda procedura di fit dei dati, riportata nel grafico in figura 5.2, si ricava

$$B_o = 0.306 \pm 0.002. \quad (5.8)$$

## 5.2 Svuotamento delle corone



**Figura 5.3:** 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.

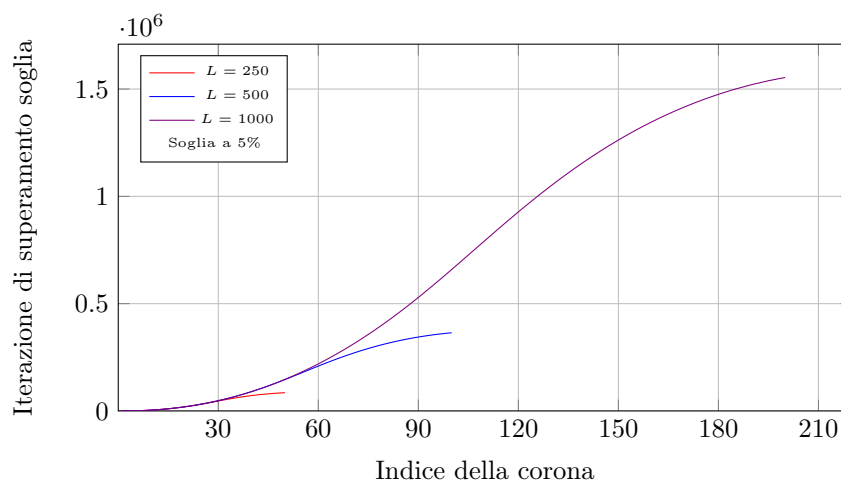
L'intrappolamento di particelle nella trappola completamente assorbente produce un decadimento esponenziale delle particelle libere  $n_l(t)$ , come si vede dalla (5.5). Risulta quindi interessante lo studio dell'evoluzione temporale delle densità medie nelle corone  $\Xi_i$ , definite nella (4.11) e nella (4.12) per i due modelli.

L'andamento temporale di queste densità medie è qualitativamente prevedibile da quanto esposto finora e se ne può vedere un esempio nel grafico tridimensionale in figura 5.3.

### 5.2.1 Propagazione dell'effetto della trappola

Una prima analisi interessante relativa all'effetto dovuto alla trappola è lo studio di come si diffonda all'interno del reticolo l'informazione della sua presenza.

Per comprendere questo aspetto, si possono confrontare gli andamenti delle densità medie nelle varie corone con quelli, costanti, che si avrebbero se la trappola non fosse presente, riprendendo il discorso visto nel sottoparagrafo 4.4.2. In questo senso, si sceglie 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 simile allo studio delle curve di livello della superficie di densità di cui si ha un esempio nel grafico in figura 5.3.



**Figura 5.4:** 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  $L = 250, 500, 1000$ .

Questa analisi è stata fatta scegliendo differenti soglie critiche per la densità e variando i parametri delle simulazioni secondo le combinazioni indicate nel paragrafo 4.4, 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 5.4 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 5.4 e che indica che la propagazione dell'effetto della trappola inizia a risentire della presenza del bordo del reticolo finito;
- 

## 5.2.2 Fattorizzazione delle densità

il motivo per cui ci si aspetta una fattorizzazione credo non sia questo, ma ho alcuni dubbi

Nel paragrafo 2.4, è stato spiegato il legame che intercorre tra il random walk e l'equazione del calore discreta. In base a questo rapporto, ci si aspetta che gli andamenti delle densità medie siano fattorizzabili nel prodotto di una parte spaziale e una temporale.

Prima di illustrare i risultati numerici ottenuti per la verifica dell'ipotesi di fattorizzazione, è opportuno spiegare la logica che è stata seguita.

Per definizione, una funzione di due generiche variabili  $i$  e  $t$  è fattorizzabile nel prodotto di due funzioni delle singole variabili se, sul suo dominio, è

soddisfatta la condizione

$$f(i, t) = g(i) \cdot h(t). \quad (5.9)$$

Per il logaritmo della funzione vale, quindi, la condizione

$$\ln[f(i, t)] = \ln[g(i)] + \ln[h(t)]. \quad (5.10)$$

Nel caso delle densità medie  $\delta(i, t)$ , le due variabili sono rispettivamente l'indice spaziale  $i$  della corona e l'indice temporale  $t$  dell'iterazione. Fissando un tempo  $t = \bar{t}$  nella (5.10), si ha

$$\ln[f(i, \bar{t})] = \ln[g(i)] + \bar{A}, \quad (5.11)$$

in cui si è posto  $\ln[h(\bar{t})] = \bar{A}$ . Scegliendo due indici spaziali  $i, j$  tali che  $i \neq j$  nella (5.11), si ottiene

$$\ln[f(i, \bar{t})] - \ln[f(j, \bar{t})] = \ln[g(i)] - \ln[g(j)] = \bar{\Delta}_{i,j}. \quad (5.12)$$

La differenza  $\bar{\Delta}_{i,j}$  nella (5.12) non dipende dalla variabile  $t$  e questa proprietà suggerisce il modo naturale per verificare l'ipotesi di fattorizzazione sulla parte spaziale:

- 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 (5.12).

Nel primo punto, è data per scontata l'ipotesi che il passo delle corone  $\ell$  sia un divisore del semilato reticolare  $L$ , ipotesi già introdotta nel paragrafo 4.5, ed è stata trascurata la corona generalizzata di indice  $L/\ell + 1$ .

Questo ragionamento si può, ovviamente, applicare anche al fattore temporale  $h(t)$  nella (5.9), ottenendo una procedura di verifica analoga, in cui si controlla che, per ogni coppia di indici temporali, la differenza dei logaritmi delle densità non dipenda dall'indice della corona.

La verifica dell'ipotesi di fattorizzazione è stata svolta su ognuno dei casi simulati, ma riportarne ogni singolo risultato sarebbe proibitivo, vista la mole di casi da analizzare, se si considerano tutte le configurazioni reticolari esaminate, di cui si è parlato nel paragrafo 4.5, e si tiene in conto l'ulteriore complessità legata al dover controllare ogni coppia di differenti indici, spaziali e temporali.

I risultati ottenuti mostrano caratteristiche comuni e possono essere riassunti trattando il singolo caso di un reticolo di semilato  $L = 250$ , suddiviso in corone di passo  $\ell = 5$  e con una densità media iniziale unitaria e una trappola completamente assorbente.

### Fattore spaziale

Le funzioni  $\ln[\delta(i, t)]$ , per ogni  $i$  fissato, mostrano un andamento temporale di tipo lineare, se ovviamente non si considerano i tempi appartenenti al transiente iniziale di cui si è già parlato nella trattazione dell'andamento del numero di particelle per tempi piccoli, nel paragrafo 5.1.1.

Con un fit lineare sui tempi intermedi  $t \in [10^7, 2 \cdot 10^7]$ , si osserva inoltre che i coefficienti angolari delle  $\ln[\delta(i, t)]$  sono dell'ordine di 0,162 052 con un errore relativo

Per quanto riguarda le differenze  $\bar{\Delta}_{i,j}$  viste nella (5.12)

#### Fattore temporale

Anche gli andamenti delle funzioni  $\ln[\delta(i, t)]$  sono compatibili con l'ipotesi di fattorizzazione. A differenza

### 5.2.3 Ricostruzioni delle parti fattorizzate

**Parte spaziale** Per il teorema fondamentale

$$\sum_{j=1}^i \overline{\Delta \ln f} = \sum \Delta \ln g = \ln g(i) - \ln g(j) \quad (5.13)$$

in cui

$$\overline{\Delta \ln f} = \frac{1}{T} \sum_{t=0}^T [\ln f() - \ln f()] \quad (5.14)$$

**Parte temporale**

## 5.3 Sviluppi futuri



# A | Sorgenti dei codici

It's not a bug, it's a feature.

---

## 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 verranno 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 programmi implementati per simulare i due modelli, che saranno discussi nel seguito di questa appendice, sono stati scritti in C++.

L'analisi dati, infine, è stata fatta sia usando alcuni noti programmi sia implementandone ad hoc alcuni in Python.

I sorgenti del parser della riga di comando, del generatore di numeri pseudocasuali e tutti quelli implementati per simulare i due modelli, di cui si discuterà nel seguito di questa appendice, 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>.

## A.1 Modello particellare

I sorgenti implementati per simulare il modello particellare a random walk sono interamente disponibili al sito <https://github.com/LeonardoPozzati/MetastableRandomWalk>. Nel seguito di questo paragrafo se ne discuteranno gli aspetti interessanti ai fini della comprensione di come sia stato simulato numericamente il modello.

### A.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
29     //tipi usati solo nella classe DensManager
30     typedef std::pair<unsigned long, unsigned long> countAndNorm;
31     typedef std::map<unsigned long, countAndNorm> idVsCountAndNorm;
32 }
33
34 #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 A.1.4, nella spiegazione della classe **DensManager** in cui vengono usati.

### A.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.

#### A.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 sia la condizione per cui una particella libera venga intrappolata. È stata pensata per sviluppi futuri del modello, in cui si possano per esempio aggiungere altre trappole in posizioni differenti dall'origine del reticolo. In questo scenario, che non verrà approfondito ulteriormente perché esula dai fini di questo lavoro, il puntatore `*gridTrap` a struttura diventa un array di puntatori a strutture di tipo `Trap`, di dimensione uguale al numero di trappole che si vuole inserire.

Per quanto riguarda le funzioni membro private, è sicuramente interessante vedere come venga 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 gli sviluppi futuri di cui si è parlato precedentemente.

Come illustrato nello studio del modello a random walk nel paragrafo 4.1, 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 mosca = RandGen.IRandomX(0, 3);
6         coords expelled(gridTrap->position);
7         if(mosca == 0) {
8             expelled.first += 1;
9         } else if(mosca == 1) {
10            expelled.second += 1;
11        } else if(mosca == 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    }
25    if((*it1) == gridTrap->position) {
26        it1 = gridWalkers.erase(it1);
27        ++gridTrap->totalTrapped;
28        ++gridTrap->trappingCounter;
29    } else {
30        it1++;
31    }
32 }
33 if(previouslyTrapped) {
34     trapEmission();
35 }
36 }
```

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 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 }

```



### A.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 (4.9).

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 4.1, 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`

```
1 ostream &operator<<( ostream &output, const DensManager &toPrint){
2   idVsCountAndNorm::const_iterator it1;
3   for(it1=toPrint.crCountVsNorm.begin();
4     it1!=toPrint.crCountVsNorm.end(); ++it1){
5     cout << (float)((*it1).second.first) /
6             (float)((*it1).second.second) << ",";
7   } cout << (float)((*it1).second.first) /
8         (float)((*it1).second.second);
9   return output;
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.

### A.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 del parser appositamente implementato, a cui si è già accennato, e per i fini di questa analisi può essere tralasciata 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 fasi, di cui 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.

### A.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 4.4.1, 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 legate 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 A.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 A.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}'".format(e.errno,
11                                                                e.strerror,
12                                                                filePath)
13                self.IOErrStrings.append(IOError)
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
```

## A.2 Modello con matrice di densità

I sorgenti dei programmi per simulare numericamente il modello con matrice di densità sono disponibili al sito <https://github.com/LeonardoPozzati/MetastableDensMat>. Riproducendo un sistema completamente deterministico,





# Bibliografia

- [1] A. Bovier, F. den Hollander e C. Spitoni. «An introduction to metastability through random walk». In: *Brazilian Journal of Probability and Statistics* 24 (2010), pp. 361–399.
- [2] P. Brémaud. *Markov Chains: Gibbs fields, Monte Carlo Simulations, and Queues*. Springer, 1998.
- [3] O. Catoni e R. Cerf. «The exit path of a Markov chain with rare transitions». In: *ESAIM Probab. Stat* (1995/1997), pp. 95–144.
- [4] 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.
- [5] M. I. Freidlin e A. D. Wentzell. *Random Perturbation of Dynamical System*. New York: Springer, 1984.
- [6] G. Gallavotti. «Instabilities and Phase Transition in the Ising Model. A Review.» In: *La Rivista del Nuovo Cimento* 2 (1972), pp. 133–169.
- [7] A. Gaudillière 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.
- [8] O. Häggström. *Finite Markov Chains and Algorithmic Applications*. London Mathematical Society Student Texts, 2002.
- [9] Gregory F. Lawler. *Random Walk and Heat Equation*. Vol. 55. Student Mathematical Library. American Mathematical Society, 2010.
- [10] E. J. Neves e R. H. Schonmann. «Behavior of droplets for a class of Glauber dynamics at very low temperatures». In: *Prob. Theory Relat. Fields* 91 (1992), pp. 331–354.
- [11] E. J. Neves e R. H. Schonmann. «Critical droplets and metastability for a Glauber dynamics at very low temperatures». In: *Commun. Math. Phys.* 137 (1999), pp. 209–230.
- [12] E. Olivieri e E. Scoppola. «An introduction to metastability through random walk». In: *Brazilian Journal of Probability and Statistics* 24 (2010), pp. 361–399.
- [13] 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.

- [14] 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.
- [15] 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.
- [16] Pál Révész. *Random Walk in Random And Non-random Environments*. 2<sup>a</sup> ed. World Scientific Publishing Company, 2005.
- [17] D. Ruelle. *Statistical Mechanics*. New York: Benjamin, 1969.
- [18] 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.
- [19] R. H. Schonmann. «The pattern of escape from metastability of a stochastic Ising model». In: *Commun. Math. Phys.* 147 (1992), pp. 231–240.
- [20] R. H. Schonmann. «Theorems and conjectures on the droplet-driven relaxation of stochastic Ising model». In: *Non pervenuto* 420 (1994), pp. 265–301.
- [21] Ya. G. Sinai. *Theory of Phase Transitions: Rigorous Results*. Budapest: Akadémiai Kiado, 1982.
- [22] 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.