

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea in Fisica

Tesi di Laurea

Modelli di diffusione con rumore frazionario

Relatore:
Prof. Flavio Seno

Laureando:
Davide Straziota

Anno Accademico 2018/2019

Abstract

Diffusion, in homogeneous systems, is characterized by linear mean quadratic fluctuations in time and by Gaussian probability density functions. Some recent experiments have shown how diffusion in non-homogeneous or disordered environments has anomalous behaviors, characterized by exponential probability density functions (non-Gaussian diffusion) and / or non-linear mean quadratic displacements in time (Anomalous diffusion). The purpose of this paper is to study these new diffusion phenomena using models characterized by non constant diffusion coefficient and by fractional noise. To achieve this goal, the mean quadratic displacements will be determined analytically, and then, these quantities will be verified numerically in the case of a unitary Hurst index. Thanks to simulations we will also obtain probability density functions, that will be compared with the kurtosis.

Sommario

La diffusione, nei sistemi omogenei, è caratterizzata da fluttuazioni quadratiche medie lineari nel tempo e da densità di probabilità gaussiane. Al contrario di ciò, alcuni recenti esperimenti hanno mostrato come la diffusione in ambienti non omogenei o disordinati abbia comportamenti anomali, caratterizzati da densità di probabilità esponenziali (diffusione non-Gaussiana) e/o spostamenti quadratici medi non lineari nel tempo (diffusione Anomala). Lo scopo di questo elaborato è quello di studiare questi nuovi fenomeni diffusivi usando modelli caratterizzati da coefficiente di diffusione non costante e da rumore frazionario. Per raggiungere questo obiettivo si determineranno, analiticamente, gli spostamenti quadratici medi, per poi verificare, numericamente, i risultati ottenuti nel caso di indice di Hurst unitario. Con l'ausilio di simulazioni si otterranno anche le densità di probabilità che verranno confrontate con quanto atteso dall'analisi numerica della kurtosis.

Indice

1	Introduzione	1
1.1	Le prime osservazioni di Brown	1
1.2	Dal Random Walk alla legge della diffusione	1
1.3	Equazione di Langevin	4
1.4	I sistemi con correlazione e il moto Browniano frazionario	5
1.5	Processi stocastici	6
1.5.1	Processi Auto-similari	7
1.5.2	Proprietà dei processi H-sssi	8
1.5.3	Trattazione matematica moto Browniano	8
1.5.4	Trattazione matematica moto Browniano frazionario	9
2	Nuovi fenomeni diffusivi	11
2.1	Diffusione Anomala	11
2.2	Diffusione non-Gaussiana	11
2.3	Minimal Langevin Model	12
2.4	Oltre il Minimal Langevin Model	12
2.5	Risultati preliminari per il sistema (2.3)	13
2.5.1	Caso persistente ($H > \frac{1}{2}$)	13
2.5.2	Caso antipersistente ($H < \frac{1}{2}$)	14
3	Trattazione analitica del sistema (2.4)	15
3.1	Caso persistente ($H > 1/2$)	16
3.1.1	Massima correlazione ($H = 1$)	17
3.2	Caso antipersistente ($H < 1/2$)	17
3.2.1	$V_H(\tau, \Delta)$ definita a tratti	18
4	Trattazione numerica del sistema (2.4) nel caso di $H = 1$	19
4.1	Introduzione alle simulazioni	19
4.1.1	Accuratezza deterministica	19
4.1.2	Comportamento stocastico	20
4.2	Risultati delle simulazioni	22
4.2.1	Spostamento quadratico medio	22
4.2.2	Kurtosis	23
4.2.3	Distribuzioni delle posizioni ad un istante prefissato	25
4.2.4	Verifica delle simulazioni	26
4.3	Confronto tra il sistema (2.3) e il sistema (2.4)	26
4.3.1	Spostamento quadratico medio	26
4.3.2	Kurtosis	26
4.3.3	Distribuzioni delle posizioni ad un istante prefissato	27
5	Conclusioni	29
A	Appendice	31
A.1	Teorema dell'equipartizione dell'energia	31
A.2	Ulteriori sviluppi del calcolo stocastico di Stratonovich	32
A.2.1	Ordine 1	32
A.2.2	Ordine 2	32
A.3	Algoritmi	32

Indice

A.3.1	Algoritmo di Eulero	33
A.3.2	Algoritmo di Heun	33
A.4	Le leggi di Fick	33
A.5	Gamma di Eulero	35
A.6	Teorema del Limite Centrale	35

1 Introduzione

1.1 Le prime osservazioni di Brown

Nel 1828 Robert Brown scoprì il moto casuale e continuo dei granuli di polline sulla superficie dell'acqua, oggi noto come moto Browniano. In seguito a varie osservazioni del fenomeno, si è notato che, non solo i granuli di polline, ma anche altre particelle danno origine al moto Browniano. Queste particolari particelle sono definite "Particelle colloidali".

Dagli esperimenti di Brown sono state ricostruite alcune fondamentali caratteristiche del fenomeno [17]:

- il moto è "perpetuo";
- a parità di temperatura, i moti di differenti particelle colloidali hanno caratteristiche comuni;
- il moto delle particelle colloidali è più intenso a temperature elevate.

La stretta correlazione tra moto Browniano e temperatura, sottolineata dalle caratteristiche precedentemente elencate, può essere spiegata per mezzo del principio di equipartizione dell'energia, trattato in Appendice. Il principio di equipartizione, però, non riesce a spiegare come il moto delle molecole d'acqua, molto più piccole delle particelle colloidali, possa causarne lo spostamento.

Per questo motivo, è necessario trovare un modo di approcciarsi che giustifichi il moto delle particelle colloidali e che non consideri singolarmente gli urti tra particelle colloidali e molecole d'acqua.

Il primo approccio risolutivo al moto Browniano è fornito da Albert Einstein, in uno dei suoi articoli del 1905 [6].

1.2 Dal Random Walk alla legge della diffusione

L'approccio fornito da Einstein per la trattazione del moto Browniano, si basa sul concetto di Random Walk (Passeggiata Aleatoria). In matematica, una passeggiata aleatoria è la formalizzazione dell'idea di prendere passi successivi in direzioni casuali. Matematicamente parlando, un random walk è un processo markoviano, la cui rappresentazione matematica più nota è costituita dal processo di Wiener.

Si definisce processo stocastico markoviano (o di Markov) un processo aleatorio in cui la probabilità di transizione che determina il passaggio a un nuovo stato del sistema dipende solo dallo stato immediatamente precedente (proprietà di Markov) e non da come si è giunti ad esso; viceversa si dice processo non markoviano un processo aleatorio per cui non vale la proprietà di Markov.

Studiamo il moto di una particella colloidale capace di spostarsi solo lungo l'asse delle x e che all'istante iniziale si trova nell'origine. La scelta della direzione di moto è determinata in modo casuale per ogni intervallo temporale Δt e il passo del moto è costante e pari a L . Essendo impossibile studiare singolarmente le collisioni tra le molecole d'acqua e le particelle colloidali, non si è in grado di osservare i singoli spostamenti della particella. Si può, dunque, solo osservare lo spostamento complessivo dopo un tempo più o meno lungo. Quanto sopra descritto è la trattazione unidimensionale del moto Browniano ed è

1 Introduzione

estendibile al caso tridimensionale considerando tre scelte casuali per la determinazione della direzione di moto lungo i tre assi del sistema di riferimento cartesiano.

Seguono in Figura 1 tre traiettorie Browniane tridimensionali.

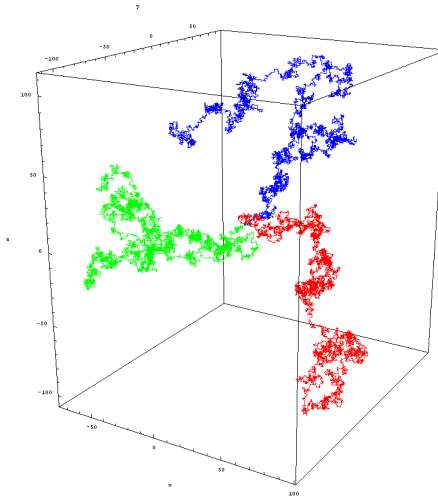


Figura 1: Traiettorie Browniane tridimensionali

Secondo Einstein, l'aver trattato spostamenti complessivi comporterebbe una maggiore comprensione del moto macroscopico delle particelle e la conferma del valore della costante di Boltzman, utile per studiare la diffusione.

Esaminiamo, ora, la distanza percorsa da una particella colloidale nel caso unidimensionale. Consideriamo N scelte casuali, supponendo che ad ogni scelta la particella si muova di una distanza costante L . La posizione della particella al passo j -esimo risulta:

$$x_j = x_{j-1} + k_j L \quad \forall j \quad k_j = \pm 1 \quad (1.1)$$

dove k_j indica la direzione di spostamento.

La posizione più probabile, alla fine del processo, è nulla in quanto ad ogni passo la probabilità di spostarsi a destra è uguale a quella di spostarsi a sinistra.

$$\langle x_N \rangle = 0 \quad (1.2)$$

Per una maggiore comprensione del risultato fornito dall'espressione (1.2) si riportano alcune delle traiettorie percorribili dalla particella colloidale nel caso unidimensionale:

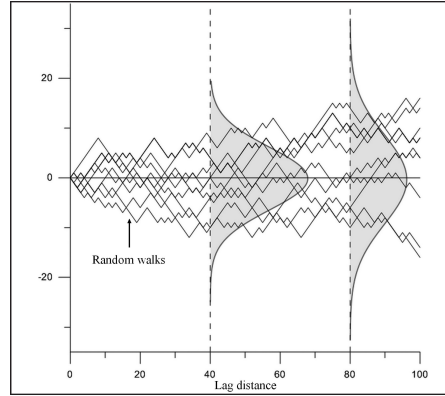


Figura 2: Traiettorie Browniane unidimensionali

Per quanto appena detto, è inutile considerare lo spostamento medio come parametro per lo studio del sistema, servirebbe determinare una nuova quantità per poter trattare il moto della particella colloidale. La quantità ricercata è lo spostamento quadratico medio $\langle x^2 \rangle$.

Partendo dall'equazione (1.1) è possibile ottenere l'espressione per lo spostamento quadratico medio al passo n-esimo:

$$\langle x_N^2 \rangle = \langle (x_{N-1} + k_N L)^2 \rangle = \langle x_{N-1}^2 \rangle + 2L \langle x_{N-1} k_N \rangle + L^2 \langle k_N^2 \rangle$$

Ricordandosi che $k_j = \pm 1$ si ottiene:

$$\langle k_N^2 \rangle = 1 \quad \implies \quad \langle x_N^2 \rangle = \langle x_{N-1}^2 \rangle + 2L \langle x_{N-1} k_N \rangle + L^2$$

Il termine $\langle x_{N-1} k_N \rangle$ consiste in uno spostamento equiprobabile, in due direzioni, di una quantità x_{N-1} . Dunque il suo valor medio è nullo:

$$\langle x_{N-1} k_N \rangle = 0 \quad \implies \quad \langle x_N^2 \rangle = \langle x_{N-1}^2 \rangle + L^2$$

Per il principio di induzione si giunge all'espressione:

$$\langle x_N^2 \rangle = NL^2 \tag{1.3}$$

Sapendo che la scelta della direzione di moto avviene ogni intervallo temporale Δt , indicando con t la durata del processo ed esprimendo il numero di scelte come $N = \frac{t}{\Delta t}$, è possibile definire il coefficiente di diffusione¹ come:

$$D = \frac{L^2}{2\Delta t} \tag{1.4}$$

Sostituendo l'espressione per il coefficiente di diffusione D nell'equazione (1.3) si ottiene:

$$\langle x_N^2 \rangle = 2Dt \tag{1.5}$$

¹Il coefficiente di diffusione è misurato in $\frac{m^2}{s}$

1 Introduzione

Questa equazione è nota come legge della diffusione nel caso unidimensionale. Segue in Appendice un metodo differente per studiare la diffusione. Analogamente, è possibile determinare la legge della diffusione nel caso tridimensionale:

$$\langle x_N^2 \rangle = 6Dt$$

1.3 Equazione di Langevin

Nella seguente sezione tratteremo il fenomeno della diffusione, con lo scopo di ricavare la legge di Einstein-Smoluchowski per il coefficiente di diffusione D .

Consideriamo il moto unidimensionale di una particella in un fluido, supponendo che l'unica forza agente sul sistema sia quella viscosa, descritta dalla legge di Stokes:

$$F_{att}(t) = -f\eta v(t) \quad (1.6)$$

Dalla legge di Stokes è possibile risalire all'equazione del moto:

$$m \frac{dv(t)}{dt} + f\eta v(t) = 0 \quad \text{con} \quad v(t) = \frac{dx(t)}{dt} \quad (1.7)$$

La cui soluzione è:

$$v(t) = v(0)e^{-\frac{f\eta t}{m}} = v(0)e^{-\frac{t}{\tau_B}} \quad \text{con} \quad \tau_B = \frac{m}{f\eta}$$

Per tempi lunghi la velocità della particella si annulla. L'annullarsi della velocità dovrebbe essere proibito dal principio di equipartizione dell'energia, per il quale la velocità quadratica media $\langle v^2 \rangle$, nel limite di t che tende ad ∞ , dovrebbe essere costante e pari a:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{k_B T}{m}$$

Per ovviare a questo problema, si può supporre che nell'equazione (1.7) manchi un termine. Viene, quindi, introdotto un termine stocastico, chiamato forza di Langevin ($F(t)$), a cui è associata la nuova equazione del moto:

$$m \frac{dv}{dt} + f\eta v = F(t) \quad (1.8)$$

La forza di Langevin, essendo una forza stocastica, soddisfa particolari proprietà:

- La forza $F(t)$ è indipendente dalla velocità della particella e dalla sua posizione;
- Le variazioni di $F(t)$ sono più rapide di quelle della velocità;
- $\langle xF(t) \rangle = \langle x \rangle \langle F(t) \rangle = 0$.

Con l'ausilio di queste proprietà è possibile risolvere l'equazione (1.8), nota come equazione di Langevin. Procediamo, ora, alla sua risoluzione.

In primis, moltiplichiamo ambo i membri per x , estraendone il valor medio:

$$\left\langle \frac{d^2x}{dt^2} x \right\rangle + \frac{f\eta}{m} \left\langle x \frac{dx}{dt} \right\rangle = \left\langle x F(t) \right\rangle = \left\langle x \right\rangle \left\langle F(t) \right\rangle = 0$$

Utilizzando la regola di Bernoulli e ricordandosi il principio di equipartizione dell'energia, si giunge all'espressione:

$$\frac{d \left\langle x \frac{dx}{dt} \right\rangle}{dt} + \frac{f\eta}{m} \left\langle x \frac{dx}{dt} \right\rangle = \frac{k_B T}{m} \quad (1.9)$$

L'equazione (1.9) è una equazione differenziale del primo ordine per $\left\langle x \frac{dx}{dt} \right\rangle$, con condizione iniziale $\left\langle x \frac{dx}{dt} \right\rangle(0) = 0$, la cui soluzione risulta:

$$\left\langle x \frac{dx}{dt} \right\rangle = \left(1 - e^{-t \frac{f\eta}{m}}\right) \frac{k_B T}{f\eta} \quad (1.10)$$

Essendo valida l'uguaglianza $\left\langle x \frac{dx}{dt} \right\rangle = \frac{1}{2} \frac{\partial \langle x^2 \rangle}{\partial t}$, è possibile ottenere l'espressione per lo spostamento quadratico medio:

$$\left\langle x^2(t) \right\rangle = 2 \frac{k_B T}{f\eta} \left[t + \frac{m}{f\eta} \left(e^{-t \frac{f\eta}{m}} - 1 \right) \right] \quad (1.11)$$

Può essere utile calcolare i limiti notevoli² per lo spostamento quadratico medio $\left\langle x^2(t) \right\rangle$:

$$\left\langle x^2(t) \right\rangle_0 = \lim_{t \rightarrow 0} \left\langle x^2(t) \right\rangle = \frac{k_B T}{m} t^2 \quad \left\langle x^2(t) \right\rangle_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} \left\langle x^2(t) \right\rangle = 2 \frac{k_B T}{f\eta} t$$

Si può infine notare come il limite per tempi lunghi e l'espressione (1.5) siano uguali, sotto l'assunzione:

$$D = \frac{k_B T}{f\eta} \quad (1.12)$$

La relazione (1.12) è nota come relazione di Einstein-Smoluchowski(1905).

I passaggi intermedi per la risoluzione dell'equazione di Langevin sono riportati in [17]

1.4 I sistemi con correlazione e il moto Browniano frazionario

In seguito allo studio di diversi fenomeni diffusivi si è notato che non tutti i sistemi seguono le leggi della diffusione "standard"³. Esistono, per esempio, sistemi caratterizzati da una

²Per limiti notevoli si intendono i limiti per t che tende a 0 o a ∞

³Introduciamo qui il termine standard, per differenziare questo tipo di diffusione da quelle anomale che tratteremo in seguito

correlazione tra lo spostamento al generico tempo t e quello ad esso precedente, descrivibile per mezzo del moto Browniano frazionario [8].

Il moto Browniano frazionario, o moto Browniano frattale, è la generalizzazione del moto Browniano, in cui si tiene conto, in maniera Auto-similare⁴, della dipendenza dai passi precedenti. Per rappresentare questa dipendenza viene introdotto un indice H , chiamato indice di Hurst, il cui valore è compreso tra zero e uno.

Al variare di H il sistema si comporta in modo differente:

- per $H > \frac{1}{2}$: si ha una serie di eventi persistente, caratterizzata da una dipendenza positiva tra le variazioni generate dal processo: se nell'ultima osservazione abbiamo registrato un incremento (decremento), è più probabile che l'osservazione successiva registri un ulteriore incremento (decremento). La probabilità di registrare due variazioni di segno concorde risulta tanto più alta quando H si avvicina all'unità.

Il rumore stocastico⁵ associato a questo particolare caso di moto Browniano frazionario viene definito rumore nero;

- per $H < \frac{1}{2}$: la serie di eventi è antipersistente: se in un dato periodo il sistema ha subito un incremento (decremento), è più probabile registrare un successivo decremento (incremento), che un ulteriore incremento (decremento). La serie risulta più volatile di una serie casuale, poichè caratterizzata da più frequenti inversioni, tanto più il valore di H si avvicina a zero.

Il rumore stocastico associato a questo particolare caso di moto Browniano frazionario viene definito rumore rosa;

- per $H = \frac{1}{2}$: si è in presenza di una serie di eventi indipendenti: ogni variazione non è influenzata dalle precedenti e neppure influenzerà quelle future. Si è dunque in presenza di moto Browniano.

Il rumore stocastico associato a questo particolare caso di moto Browniano frazionario viene definito rumore bianco.

1.5 Processi stocastici

In questa sezione forniremo alcune delle definizioni fondamentali per la trattazione matematica del moto Browniano e del moto Browniano frazionario, come processi stocastici.

Definizione 1. Sia dato $(\Omega; F; P)$ uno spazio di probabilità e sia $I = [0; \infty)$. Si definisce un processo stocastico a valori reali, una famiglia $\{X_t\}_{t \in I}$ di variabili aleatorie reali definite su $(\Omega; F; P)$:

$$X_t : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}^N, \quad t \in I$$

Per poter trattare, in modo completo, i processi stocastici è utile introdurre i concetti di filtrazione, di processo adattato alla filtrazione e di processo sommabile. Seguono le loro definizioni:

⁴Per la definizione di processo Auto-similare consultare la sezione 1.5

⁵La definizione di rumore verrà data nelle prossime sezioni

Definizione 2. Una famiglia crescente $F_t = \{F_t\}_{t \in I}$ sotto σ -algebra di F è detta filtrazione in $(\Omega; F; P)$.

Definizione 3. Un processo stocastico X è adattato alla filtrazione F_t (o semplicemente F_t -adattato) se X_t è F_t -misurabile per ogni t .

Il concetto di filtrazione e quello di processo stocastico adattato alla filtrazione permettono di introdurre la misura "stocastica", necessaria per poter trattare gli integrali stocastici. Il concetto di integrale stocastico è fondamentale per la trattazione dei processi Browniani.

Definizione 4. Diremo che un processo stocastico X è un processo sommabile se $X_t \in L^1(\Omega, P)$ per ogni t . In particolare se

$$\mathbb{E}(|X_t|) < \infty \quad \forall t.$$

L'idea di sommabilità di un processo stocastico consiste nel richiedere che il valor medio di $\{X_t\}_{t \in I}$ sia limitato.

1.5.1 Processi Auto-similari

Prima di poter trattare i processi stocastici Browniani è necessario definire i processi stocastici Auto-similari. Essi, infatti, sono alla base della trattazione del moto Browniano frazionario.

Definizione 5. Diciamo che un processo stocastico $X = \{X_t\}_{t \geq 0}$ è Auto-similare, e si indica con H-ss, se per ogni $a > 0$, esiste $b > 0$ è tale che:

$$\Phi(X_{at}; t \geq 0) = \Phi(bX_t; t \geq 0)$$

Un elemento di fondamentale importanza per lo studio del moto Browniano frazionario, come generalizzazione del moto Browniano standard, è l'indice di Hurst H . Mostriamo ora come tale indice rientri nella trattazione dei processi stocastici.

Definizione 6. Se $b = a^H$, cioè se vale:

$$\Phi(X_{at}; t \geq 0) = \Phi(a^H X_t; t \geq 0)$$

si dice che $X = \{X_t\}_{t \geq 0}$ è un processo Auto-similare con indice di Hurst H .

L'ultima nozione propedeutica alla trattazione dei fenomeni Browniani è la definizione di processo stocastico ad incrementi stazionari.

Definizione 7. Un processo stocastico $X = \{X_t\}_{t \geq 0}$ è detto processo ad incrementi stazionari, e si indica con si, se per ogni $h \geq 0$ vale:

$$\Phi(X_{t+h} - X_h; t \geq 0) = \Phi(X_t - X_0; t \geq 0) = \Phi(X_t; t \geq 0)$$

Diamo, infine, la definizione di un processo stocastico H-sssi.

Definizione 8. Sia $(\Omega; \mathcal{F}; F_t; P)$ uno spazio di probabilità con filtrazione. Un processo stocastico $X = \{X_t\}_{t \geq 0}$ adattato alla filtrazione F_t è detto H-sssi se è Auto-similare, con indice di Hurst H, ed ha incrementi stazionari.

1.5.2 Proprietà dei processi H-sssi

Vengono ora mostrate alcune delle proprietà fondamentali dei processi stocastici H-sssi.

Sia $X = \{X_t\}_{t \geq 0}$ un processo H-sssi a varianza finita; allora valgono le seguenti proprietà:

- $X_0 = 0$ quasi sicuramente: il processo inizia da un punto che può essere considerato l'origine del sistema di riferimento;
- Se $H \neq 1$, allora per ogni $t \geq 0$ si ha:

$$\mathbb{E}(X_t) = 0$$

- Esiste una funzione di autocovarianza⁶ definita da:

$$\Gamma_{s,t}^H = (|t|^{2H} + |s|^{2H} - |t-s|^{2H}) \frac{\sigma^2}{2} \quad (1.13)$$

- se $X = \{X_t\}_{t \geq 0}$ è un processo H-sssi, allora $H \leq 1$.

Per la dimostrazione della validità delle seguenti proprietà si consultino i riferimenti bibliografici [23] e [9].

1.5.3 Trattazione matematica moto Browniano

In questa sezione definiremo matematicamente i processi stocastici Browniani bianchi, mostrando quali sono le nozioni di base per approcciarsi alla loro trattazione.

Definizione 9. Sia $(\Omega; \mathcal{F}; F_t; P)$ uno spazio di probabilità con filtrazione. Un moto Browniano reale è un processo stocastico $B = \{B_t\}_{t \geq 0}$ in \mathbb{R} tale che:

- $P(B_0 = 0) = 1$;
- B è F_t -adattato e continuo;
- per $t > s \geq 0$, l'incremento $B_t - B_s$ ha distribuzione normale $N_{0,t-s}$ ed è indipendente da F_t .

⁶La funzione di autocovarianza si può ricavare dalla nozione di processo stocastico ad incrementi stazionari

Il processo stocastico gaussiano Browniano B_t è definito dal seguente integrale:

$$B_t = \int_0^t 1 dB(s) \quad (1.14)$$

L'integrazione (1.14) viene effettuata usando una misura di rumore bianco ($dB(s)$).

1.5.4 Trattazione matematica moto Browniano frazionario

Unendo le nozioni di processi Auto-similari e di processi Browniani standard, si può giungere alla definizione di moto Browniano frazionario.

Definizione 10. Sia $(\Omega; \mathcal{F}; F_t; P)$ uno spazio di probabilità con filtrazione ed $I \subseteq \mathbb{R}$; un processo stocastico normale $B^H = \{B_t^H\}_{t \in I}$, H-sssi, con $0 < H < 1$, adattato alla filtrazione F_t , è detto moto Browniano frazionario.

Le prime due proprietà precedentemente elencate per il moto Browniano standard sono ancora valide. Si noti, infatti, che scegliendo $H = \frac{1}{2}$ si ottiene il moto Browniano standard.

L'esistenza della funzione di autocovarianza nel caso del moto Browniano frazionario fa sì che il processo $\{B_t^H\}_{t \in I}$ non possa essere rappresentato dall'integrale (1.14). Per ovviare a questo problema si introduce un differente integrale stocastico che tiene conto del valore dell'indice di Hurst:

$$B_t^H = \frac{1}{\Gamma(H + 1/2)} \int_0^t (t - s)^{H-1/2} dB(s)$$

Anche questa definizione del processo stocastico $\{B_t^H\}$ presenta delle problematiche nel caso di moto Browniano frazionario: superenfattizza l'origine. Per questo motivo viene introdotto l'integrale di Weyl [12]:

$$B_t^H = B_0^H + \frac{1}{\Gamma(H + 1/2)} \left\{ \int_{-\infty}^0 \left[(t - s)^{H-1/2} - (-s)^{H-1/2} \right] dB(s) + \int_0^t (t - s)^{H-1/2} dB(s) \right\}$$

Un altro concetto di fondamentale importanza per la trattazione del moto Browniano frazionario è il concetto di rumore Gaussiano frazionario.

Definizione 11 Definiamo rumore Gaussiano frazionario la funzione h_t definita come:

$$h_t = B_t^H - B_{t-1}^H \quad \forall t \geq 1$$

Nei seguenti grafici vengono riportati i cammini relativi a tre valori di H differenti, volti a mostrare la dipendenza del spostamento dal valore di H.

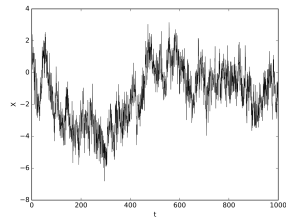


Figura 3: $H=0.15$

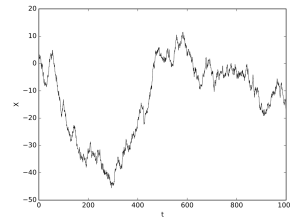


Figura 4: $H=0.55$

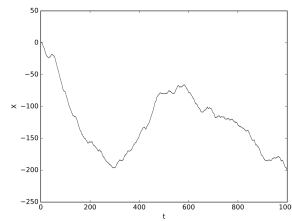


Figura 5: $H=0.95$

2 Nuovi fenomeni diffusivi

In questa sezione cercheremo di introdurre il concetto di diffusione Anomala e di diffusione non-Gaussiana.

Per mezzo dell'approccio fornito da Einstein e Langevin per la trattazione della diffusione standard, si è riusciti a mettere in relazione lo spostamento quadratico medio con l'equazione (1.12) per il coefficiente di diffusione:

$$\langle x^2(t) \rangle = 2Dt$$

2.1 Diffusione Anomala

Non tutti i sistemi diffusivi si comportano, però, secondo quanto predetto da Langevin, infatti, nel 1926 Richardson, studiando il fenomeno della diffusione in presenza di turbolenze, ottiene un risultato inaspettato:

$$\langle x^2(t) \rangle \propto t^3$$

Tutti i sistemi diffusivi che, analogamente a quanto scoperto da Richardson, presentano spostamento quadratico medio non lineare nel tempo, vengono definiti "Anomali".

$$\langle x^2(t) \rangle \propto t^\alpha \quad (2.1)$$

La proporzionalità dello spostamento quadratico medio, per i sistemi diffusivi Anomali, ne ha permesso una classificazione:

- Per $\alpha < 1$ si parla di sistema subdiffusivo;
- Per $\alpha > 1$ si parla di sistema superdiffusivo.

Ciò che caratterizza la diffusione Anomala è l'esistenza di una correlazione a lungo raggio dello spostamento quadratico medio. Le distribuzioni delle posizioni ad un istante prefissato $P(x, \bar{t})$, per sistemi diffusivi simili a quello studiato da Richardson, presentano espressioni analoghe alla seguente:

$$P(x, \bar{t}) \sim \frac{\bar{t}}{|x|^{1+\mu}} \quad 1 < \mu < 2$$

Un sistema caratterizzato da diffusione Anomala è quello dei materiali ottici in cui la luce dà origine al fenomeno del "Levy Flight" [12].

2.2 Diffusione non-Gaussiana

Nuovi esperimenti, condotti sulla diffusione dei colloidi in tubuli fosfolipidici [1] [2], hanno permesso di scoprire una nuova forma di comportamento anomalo. E' noto, infatti, che la distribuzione delle posizioni ad un istante prefissato $P(x, \bar{t})$, nel caso di diffusione standard, ha un andamento gaussiano:

$$P(x, \bar{t}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D}} \frac{e^{-\frac{x^2}{4D\bar{t}}}}{\sqrt{\bar{t}}}$$

Ciò che si riscontra, per esempio, dallo studio della diffusione dei colloidi nei tubuli fosfolipidici è che, per fissati intervalli temporali, la distribuzione delle posizioni ad un istante prefissato $P(x, \bar{t})$ ha un andamento esponenziale.

$$P(x, \bar{t}) = \frac{1}{\sqrt{4\bar{t}D}} e^{-\frac{|x|}{\sqrt{\bar{t}D}}}$$

In questi casi si parla di diffusione "non-Gaussiana". Va sottolineato, però, che il sistema descritto da Wang et al. risulta essere un sistema diffusivo Browniano e dunque lo spostamento quadratico medio, per tempi lunghi, è lineare nel tempo [1] [2].

2.3 Minimal Langevin Model

Per studiare la diffusione anomala e la diffusione non-Gaussiana si sono introdotti i modelli di Diffusing Diffusivity, in cui il coefficiente D non è ottenuto in modo deterministico, ma per mezzo di equazioni stocastiche.

Tra questi modelli rientra il "Minimal Langevin Model" [15], ispirato da [4] e descritto dal seguente sistema di equazioni stocastiche:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \sqrt{2D(t)}\xi(t) \\ D(t) = Y(t)^2 \\ \frac{dY(t)}{dt} = -Y(t) + \eta(t) \end{cases} \quad (2.2)$$

Nel minimal Langevin model, $Y(t)$ rappresenta la variabile associata al processo di Ornstein-Uhlenbeck, un processo stocastico usato per descrivere il moto Browniano in presenza di attrito; e $D(t)$ rappresenta il coefficiente di diffusione, espresso in funzione del quadrato di $Y(t)$. $x(t)$, invece, rappresenta la posizione della particella colloidale di cui si considera il moto. $\xi(t)$ e $\eta(t)$ sono rumori stocastici bianchi, caratterizzati dalle seguenti proprietà:

$$\langle \eta(t) \rangle = \langle \xi(t) \rangle = 0 \quad \langle \eta_l(t_1), \eta_m(t_2) \rangle = \langle \xi_l(t_1), \xi_m(t_2) \rangle = \delta_{m,l} \delta(t_1 - t_2)$$

La prima equazione del sistema (2.2) è nota come equazione di Langevin sovrasmorzata, mentre l'ultima rappresenta l'equazione di Ornstein-Uhlenbeck.

2.4 Oltre il Minimal Langevin Model

Lo studio del moto delle proteine dell'RNA nel citoplasma cellulare, effettuato da Spakowitz, ha portato a nuovi risultati, in cui si trova distribuzione degli spostamenti non gaussiana e in cui lo spostamento quadratico medio presenta un comportamento anomalo.

Sulle orme di quanto fatto nell'articolo [15] si è cercato di apportare delle modifiche al sistema (2.2) per poter spiegare questo fenomeno [25].

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \sqrt{2D(t)}\xi_H(t) \\ D(t) = Y(t)^2 \\ \frac{dY(t)}{dt} = -Y(t) + \eta(t) \end{cases} \quad (2.3)$$

La differenza rispetto al sistema (2.2) è rappresentata dal rumore $\xi_H(t)$, che non è un comune rumore bianco. Siamo, infatti, in presenza di un rumore dipendente dal valore dell'indice di Hurst le cui proprietà sono:

$$\langle \xi_H(t), \xi_H(t+s) \rangle = \frac{1}{2}(|s-1|^{2H} - |s|^{2H} - |s+1|^{2H})$$

Nell'articolo [24] viene introdotto un ulteriore modello per la trattazione della diffusione delle proteine di RNA nel citoplasma cellulare. In tale articolo, si suppone che non sia $D(t)$ a rappresentare il coefficiente di diffusione, quanto il suo quadrato.⁷ Una giustificazione trovata da Cherayl e Tyagi [24], al sistema da loro proposto, risiede nella dimensionalizzazione del problema.

Il modello da loro proposto è descritto da:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = D(t)\xi_H(t) \\ \frac{dD(t)}{dt} = -D(t) + \eta(t) \end{cases} \quad (2.4)$$

Dove con $D(t)$ si denota il nuovo coefficiente di diffusione, dove $\eta(t)$ rappresenta il rumore bianco e $\xi_H(t)$ è nuovamente il rumore dipendente dal valore dell'indice di Hurst.

Si noti che in questo modello, a differenza di quello definito dall'equazione (2.3), il coefficiente di diffusione può diventare negativo, cosa che fisicamente non ha significato, ma che dal punto di vista matematico è pienamente giustificata.

2.5 Risultati preliminari per il sistema (2.3)

Per motivi di completezza in questa sezione mostreremo i valori dello spostamento quadratico medio e della distribuzione delle posizioni ad un tempo fissato per il sistema (2.3) [16].

2.5.1 Caso persistente ($H > \frac{1}{2}$)

Nel caso di rumore persistente i limiti notevoli per lo spostamento quadratico medio risultano:

⁷E' infatti noto che $Y(t)$ può assumere sia valori positivi che valori negativi.

2 Nuovi fenomeni diffusivi

$$\langle x^2(t) \rangle_0 = \alpha t^{2H} \qquad \langle x^2(t) \rangle_\infty = \beta t^{2H}$$

Nel suddetto caso le $P(x, \bar{t})$ sono laplaciane per tempi corti, e diventano gaussiane per tempi lunghi.

2.5.2 Caso antipersistente ($H < \frac{1}{2}$)

Nel caso di rumore antipersistente i limiti notevoli per lo spostamento quadratico medio risultano:

$$\langle x^2(t) \rangle_0 = \gamma t^{2H} \qquad \langle x^2(t) \rangle_\infty = \delta t$$

Nel suddetto caso le $P(x, \bar{t})$ sono laplaciane per tempi corti, e diventano gaussiane per tempi lunghi.

3 Trattazione analitica del sistema (2.4)

Lo scopo del seguente lavoro di tesi è di studiare il sistema (2.4). Per giungere a tale obiettivo ci approcceremo al problema da un punto di vista analitico, per poi verificarne i risultati per mezzo di una simulazione numerica.

Sia dunque dato il sistema:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = D(t)\xi_H(t) \\ \frac{dD(t)}{dt} = -D(t) + \eta(t) \end{cases}$$

Il primo passo per ottenere la soluzione analitica consiste nell'integrazione della seconda equazione, imponendo come condizione iniziale per la posizione:

$$x(0) = 0$$

Dalla suddetta integrazione si ottiene il coefficiente di diffusione $D(t)$:

$$D(t) = D_0 e^{-t} + \int_0^t \eta(t') e^{-(t-t')} dt'$$

In tale espressione D_0 , il valore iniziale del coefficiente di diffusione, viene campionato dalla seguente densità di probabilità:

$$p_D^{st}(D) = \frac{e^{-D^2}}{\sqrt{\pi}} \quad (3.1)$$

Una volta nota la forma analitica del coefficiente di diffusione $D(t)$ è stato possibile risalire, dalla prima equazione, al valore di $x(t)$ e conseguentemente al valore dello spostamento quadratico medio $\langle x^2(t) \rangle$:

$$\langle x^2(t) \rangle = \int_0^t \int_0^t \langle \xi_H(t_1), \xi_H(t_2) \rangle \langle D(t_1), D(t_2) \rangle dt_1 dt_2 \quad (3.2)$$

Per poter svolgere l'integrazione dell'equazione (3.2) è necessario ottenere un'espressione analitica per $\langle D(t_1), D(t_2) \rangle$.

$$\langle D(t_1), D(t_2) \rangle = D_0^2 e^{-(t_1+t_2)} + e^{-(t_1+t_2)} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \langle \eta(t'_1), \eta(t'_2) \rangle e^{t'_1+t'_2} dt'_1 dt'_2 =$$

$$\langle D(t_1), D(t_2) \rangle = D_0^2 e^{-(t_1+t_2)} + \frac{e^{-\tau} - e^{-(t_1+t_2)}}{2} \quad \tau = |t_1 - t_2|$$

Per maggiori dettagli sui passaggi intermedi consultare [16].

3 Trattazione analitica del sistema (2.4)

Una volta nota l'espressione per $\langle D(t_1), D(t_2) \rangle$, se ne è calcolato il limite per tempi lunghi (limite per $t_1 + t_2$ che tende a ∞):

$$\langle D(t_1), D(t_2) \rangle_{\infty} = \lim_{t_1+t_2 \rightarrow \infty} D_0^2 e^{-(t_1+t_2)} + \frac{e^{-\tau} - e^{-(t_1+t_2)}}{2} \sim \frac{e^{-\tau}}{2} \quad (3.3)$$

Si è dunque ricavato il valore di $\langle \xi_H(t_1), \xi_H(t_2) \rangle$ (Per i passaggi consultare [16]):

$$\langle \xi_H(t_1), \xi_H(t_2) \rangle = 2(t - \tau)V_H(\tau) \quad (3.4)$$

Nell'equazione (3.4) viene introdotta la funzione $V_H(\tau)$, la quale dipende dall'indice di Hurst. Essendo dipendente dal valore di H , il suo comportamento varierà a seconda che il rumore sia nero o rosa. Non tratteremo il caso di $H = \frac{1}{2}$, rappresentante la diffusione standard.

L'espressione definitiva dello spostamento quadratico medio è dunque:

$$\langle x^2(t) \rangle = \int_0^t (t - \tau)e^{-\tau}V_H(\tau) d\tau \quad (3.5)$$

3.1 Caso persistente ($H > 1/2$)

Il primo caso che andremo a trattare è il caso di moto Browniano con $H > \frac{1}{2}$. In questo caso la funzione $V_H(\tau)$ ha la seguente forma:

$$V_H(\tau) = H(2H - 1)\tau^{2H-2} \quad (3.6)$$

Inserendo l'espressione (3.6) nell'equazione (3.5) si ottiene lo spostamento quadratico medio $\langle x^2(t) \rangle$:

$$\langle x^2(t) \rangle = H(2H - 1)[(1 - 2H + t)\Gamma(2H - 1) + \Gamma(2H, t) - t\Gamma(2H - 1, t)]$$

Dove con $\Gamma(x)$ si intende la funzione Gamma di Eulero. Il risultato (3.6) è ottenibile per mezzo delle proprietà della funzione Gamma di Eulero, descritte in Appendice.

Una volta noto il risultato dell'integrazione, se ne è determinato il limite per tempi corti⁸:

$$\langle x^2(t) \rangle_0 = \lim_{t \rightarrow 0} \langle x^2(t) \rangle = \frac{t^{2H}}{2}$$

Analogamente, se ne è determinato il limite per tempi lunghi⁹:

$$\langle x^2(t) \rangle_{+\infty} = \lim_{t \rightarrow 0} \langle x^2(t) \rangle = \frac{t\Gamma(2H + 1)}{2}$$

⁸limite per t che tende a 0

⁹limite per t che tende a ∞

$\langle x^2(t) \rangle_{+\infty}$ è lineare in t , dunque, per tempi lunghi possiamo supporre che il sistema (2.4) si comporti come un sistema diffusivo standard. Per confermare tale ipotesi si può confrontare il limite appena ricavato con il limite per tempi lunghi presente in sezione 1.3. Tale confronto conferma l'ipotesi, in quanto il risultato ottenuto da Langevin e quello sopra ricavato presentano la stessa dipendenza funzionale dal tempo.

Si noti come questi risultati siano diversi da quelli ottenuti per il sistema (2.3).

3.1.1 Massima correlazione ($H = 1$)

Si è deciso, per questo lavoro di tesi, di focalizzarsi sulla trattazione del caso con indice di Hurst H unitario. Questo è il caso computazionalmente più facile da trattare, in quanto il rumore $\xi_H(t)$ risulta essere costante per tutti i tempi, fornendo al sistema massima correlazione.

In questo caso sono stati determinati, come in precedenza, l'espressione esplicita per $\langle x^2(t) \rangle$ e i valori dei limiti per tempi lunghi e corti dello spostamento quadratico medio.

L'espressione esplicita dello spostamento quadratico medio è:

$$\langle x^2(t) \rangle = (t - 1 + e^{-t}) \quad (3.7)$$

Il limite per tempi corti vale:

$$\langle x^2(t) \rangle_0 = t^2/2 \quad (3.8)$$

Il limite per tempi lunghi vale:

$$\langle x^2(t) \rangle_{+\infty} = t \quad (3.9)$$

3.2 Caso antipersistente ($H < 1/2$)

Si è trattato, successivamente, il caso di moto Browniano con $H < \frac{1}{2}$.

In questo caso, la funzione $V_H(\tau, \Delta)$ è definita dall'equazione di Mandelbrot:

$$V_H(\tau, \Delta) = \frac{1}{2\Delta^2} [(\tau + \Delta)^{2H} - 2\tau^{2H} + |\tau - \Delta|^{2H}] \quad (3.10)$$

Data la complessità della trattazione dello spostamento quadratico medio $\langle x^2(t) \rangle$, si è cercata una nuova forma per $V_H(\tau, \Delta)$, che ne semplificasse i conti. $V_H(\tau, \Delta)$ è ora definita a tratti [16]:

$$V_H(\tau, \Delta) = \begin{cases} H\Delta^{2H-2} & \tau < \Delta \\ H(2H-1)\tau^{2H-2} & \tau \geq \Delta \end{cases} \quad (3.11)$$

3.2.1 $V_H(\tau, \Delta)$ definita a tratti

A partire dalla funzione (3.11) e dall'integrazione (3.5) si è ottenuta l'espressione per lo spostamento quadratico medio:

$$\langle x^2(t) \rangle = \begin{cases} H\Delta^{2H-2}(t-1 + e^{-\Delta}(-t+1+\Delta)) & t < \Delta \\ H\Delta^{2H-2}(t-1 + e^{-\Delta}(-t+1+\Delta)) + I_1(\Delta, H, t) + I_2(t, H) & t > \Delta \end{cases} \quad (3.12)$$

Dove le funzioni $I_1(\Delta, H)$ e $I_2(t, H)$ sono definite come:

$$I_1(\Delta, H, t) = H(2H-1)[- \Gamma(2H, \Delta) + t\Gamma(2H-1, \Delta)]$$

$$I_2(t, H) = H(2H-1)[-t\Gamma(2H-1, t) + \Gamma(2H, t)]$$

Come nel caso di $H > \frac{1}{2}$ si è calcolato il limite per tempi lunghi dello spostamento quadratico medio:

$$\langle x^2(t) \rangle_{\infty} = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle x^2(t) \rangle = \frac{t\Gamma(2H+1)}{2}$$

Le espressioni di $\langle x^2(t) \rangle$ per tempi lunghi, con $H > \frac{1}{2}$ e $H < \frac{1}{2}$, presentano, entrambe, un'andamento lineare in t , con il medesimo coefficiente.

Successivamente si è calcolato il limiti per tempi corti dell'equazione (3.12):

$$\langle x^2(t) \rangle_0 = \lim_{t \rightarrow 0} \langle x^2(t) \rangle = \frac{t^{2H}}{2}$$

In questo caso i risultati ottenuti per il sistema (2.4), sono gli stessi di quelli del sistema (2.3), per quanto riguarda le proporzionalità temporali. Il sistema (2.4) è sempre diffusivo standard per tempi lunghi e presenta sempre la stessa dipendenza funzionale dal tempo per tempi corti, non risentendo del passaggio dal caso persistente al caso antipersistente.

La sostituzione dell'equazione di Mandelbrot con l'espressione (3.11) può essere, in prima approssimazione, considerata lecita se i limiti notevoli non dipendono da Δ , nel limite per Δ nullo. Il risultato appena ottenuto è, dunque, una prima verifica della liceità della sostituzione effettuata.

4 Trattazione numerica del sistema (2.4) nel caso di $H = 1$

4.1 Introduzione alle simulazioni

Si vorrebbe, ora, ottenere una verifica di quanto ricavato analiticamente per il caso di indice di Hurst unitario, si è, dunque, effettuata una simulazione numerica del sistema (2.4).

Per realizzare la simulazione numerica è necessario trovare un algoritmo capace di risolvere il sistema di equazioni stocastiche presentato nell'articolo [24]. Dato il gran numero di algoritmi che adempiono a questo compito, è necessario sceglierne uno, valutandone le caratteristiche. Le caratteristiche degli algoritmi utilizzati per la risoluzione delle equazioni differenziali stocastiche sono due:

- Accuratezza deterministica;
- Comportamento stocastico.

4.1.1 Accuratezza deterministica

Il criterio della accuratezza deterministica, studia l'algoritmo di integrazione da un punto di vista deterministico, con tecniche standard, ignorando la sua componente stocastica. Vediamo ora come approcciarci alla sua trattazione per una generica equazione differenziale stocastica. Ci concentreremo sul caso di sistemi fisici in cui è presente una sola forza stocastica.

Nel caso appena enunciato, l'equazione differenziale stocastica presenta la seguente forma e le seguenti proprietà:

$$\dot{\vec{x}}_i = f_i(\vec{x}) + g_i(\vec{x})\xi(t), \quad \langle \xi(t) \rangle = 0 \quad \langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t-s) \quad (4.1)$$

dove con ξ si intende il rumore gaussiano.

Chiamiamo Δt il passo di integrazione temporale e usiamo il calcolo stocastico di Stratonovich [21] [7]. I processi di Werner non sono differenziabili, per tale motivo, serve utilizzare nuove regole di calcolo per determinare il valore degli integrali stocastici. Ci sono due versioni dominanti di calcolo stocastico, il calcolo stocastico di Itô e il calcolo stocastico di Stratonovich.

L'idea più semplice per risolvere la precedente equazione differenziale stocastica, per mezzo del calcolo di Stratonovich, è di integrarla usando lo sviluppo in serie di Taylor attorno al tempo $t = 0$, così da ottenere, ricorsivamente, i vari contributi alla soluzione. Nel presente elaborato verrà discusso solo il caso di equazioni differenziali stocastiche unidimensionali, la cui equazione del moto è ricavabile dall'espressione (4.1):

$$\dot{x} = f(x) + g(x)\xi(t) \quad (4.2)$$

Integrando l'equazione (4.2) in dt , tra 0 e Δt , si ottiene:

$$x(\Delta t) - x(0) = \int_0^{\Delta t} (f(x(t)) + g(x(t))\xi(t))dt \quad (4.3)$$

Definendo:

$$f_0 \equiv f(x(0)) \quad g_0' \equiv \left. \frac{\partial g(x(t))}{\partial x(t)} \right|_{x=x(0)}$$

e sviluppando in serie f_t all'ordine 0 si giunge all'espressione:

$$x(\Delta t) - x(0) = \int_0^{\Delta t} (f_0 + g_0 \xi(t)) dt = \Delta t f_0 + g_0 \int_0^{\Delta t} \xi(t) dt$$

A partire dalla precedente espressione è possibile definire "Integrale stocastico $Z_1(\Delta t)$ " la funzione:

$$Z_1(\Delta t) \equiv \int_0^{\Delta t} \xi(t) dt \quad (4.4)$$

Lo stesso "Integrale stocastico" è una funzione Gaussiana, o per meglio dire, essa presenta una densità di probabilità Gaussiana. Ciò segue dalle caratteristiche del rumore $\xi(t)$. $Z_1(\Delta t)$ presenta importanti proprietà ottenibili dall'equazione (4.4):

- $\langle Z_1(\Delta t) \rangle = \int_0^{\Delta t} \langle \xi(t) \rangle dt = 0$
- $\langle Z_1^2(\Delta t) \rangle = \int_0^{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \langle \xi(t)\xi(s) \rangle dt ds = \int_0^{\Delta t} dt = \Delta t$

Per la dimostrazione di tali proprietà consultare l'articolo [13].

Introduciamo ora una variabile stocastica, distribuita secondo la PDF normale, con media nulla e deviazione standard unitaria, Y_1 . E' possibile, partendo da (4.4), esprimere $Z_1(\Delta t)$ come:

$$Z_1(\Delta t) = \sqrt{\Delta t} Y_1$$

Sostituendo la nuova espressione per $Z_1(\Delta t)$ nell'equazione (4.3) otteneniamo:

$$x(\Delta t) - x(0) = \Delta t f_0 + g_0 Z_1(\Delta t) = \Delta t f_0 + g_0 \sqrt{\Delta t} Y_1$$

Il primo elemento dell'equazione è di ordine 1 in Δt , mentre il secondo è di ordine 1/2 in Δt . Da quanto finora affermato, converrebbe sviluppare ulteriormente le funzioni per una migliore precisione numerica.

Seguono in Appendice le espressioni per gli sviluppi in serie agli ordini successivi.

4.1.2 Comportamento stocastico

Il criterio del comportamento stocastico viene introdotto poichè, per tempi lunghi, l'andamento della soluzione non può essere studiato per mezzo degli sviluppi in serie. Questi possono solo mostrare il corretto comportamento della soluzione per tempi corti. Per questo motivo, è necessario derivare le proprietà di stabilità dell'algoritmo numerico.

L'obbiettivo è quello di trovare un algoritmo che riproduca al meglio l'andamento del sistema a tempi lunghi e che, dunque, riesca a riprodurre le proprietà di equilibrio del sistema.

Studiamo il comportamento stocastico per la generica equazione:

$$\dot{x}(t) = F(x,t)$$

Il propagatore ad essa associato risulta essere:

$$P(x,t + \Delta t) - P(x,t) = \sum_{n=1}^{+\infty} \sum_{x_i} \frac{\partial}{\partial x_1} \dots \frac{\partial}{\partial x_n} K_{1\dots n} P(x,t)$$

dove $P(x,t)$ è la densità di probabilità generata nella simulazione, partendo da $P(x,0)$, e dove:

$$K_{1\dots n} = (-1)^n \frac{1}{n!} \langle F_1 \dots F_n \rangle_{rumore}$$

Una volta raggiunto l'equilibrio, il membro sinistro dell'equazione è nullo, mentre il membro destro è una equazione implicita per $P(x,\infty)$.

Per un sistema caratterizzato dal "principio di bilancio dettagliato", si ottiene la seguente equazione per $P(x,\infty)$:

$$P(x,\infty)_{sim} = P(x,\infty)_{vero} e^{\sum_{n=1}^{+\infty} (\Delta t)^n \frac{S_n}{D}}$$

Dove S_n è nullo se l'algoritmo è esatto.

Dato il sistema:

$$\dot{x} = -V'(x) + \sqrt{2D}\xi(t)$$

che ha come distribuzione esatta all'equilibrio:

$$P(x,\infty)_{vero} = N e^{-\frac{V(x)}{D}}$$

la distribuzione finale all'equilibrio sarà:

$$P(x,\infty)_{sim} = N' e^{-\frac{V(x) + \Delta t S(\Delta t, x)}{D}}$$

Sulla base del comportamento stocastico, è possibile affermare che un algoritmo è tanto migliore quanto l'ordine in Δt di $S(\Delta t, x)$ è elevato.

4.2 Risultati delle simulazioni

Per studiare il sistema (2.4), nel caso di H unitario, lo si è simulato così da risolverne le equazioni differenziali stocastiche. L'algoritmo usato per le simulazioni è l'algoritmo di Eulero, scelto non solo per motivi di efficienza computazionale, ma anche per le tempistiche necessarie alla simulazione. Le simulazioni effettuate analizzano e forniscono informazioni per tre tipi grandezze che caratterizzano il fenomeno diffusivo associato al sistema (2.4):

- Lo spostamento quadratico medio $\langle x^2 \rangle$;
- La kurtosis γ_2 o l'indice di Pearson β_2 ;
- La distribuzione delle possibili posizioni della particella colloidale ad un istante prefissato $P(x, \bar{t})$.

Il passo temporale scelto vale 0,001, mentre il coefficiente di diffusione iniziale, per le differenti simulazioni, viene campionato a partire dalla distribuzione (3.3). A conferma dell'utilizzo della corretta distribuzione viene riportato l'istogramma dei valori di D_0 campionati.

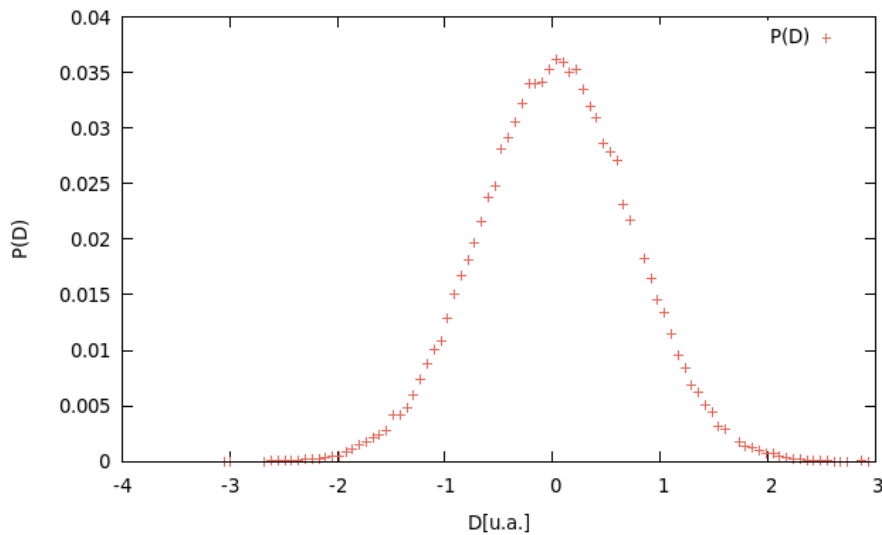


Figura 6: Iistogramma dei valori campionati di D_0 , nel caso di $H = 1$

L'andamento dell'istogramma corrisponde alla distribuzione (3.3).

Come si potrà notare nelle prossime sezioni, la kurtosis e le $P(x, \bar{t})$ forniscono informazioni sul sistema correlate tra loro.

4.2.1 Spostamento quadratico medio

La prima informazione utile ottenuta, per mezzo delle simulazioni numeriche, è lo spostamento quadratico medio della particella colloidale.

I risultati sono presentati come grafico, così da mostrare in modo più preciso l'andamento funzionale di $\langle x^2(t) \rangle$. Sono state rappresentate le funzioni ottenute analiticamente in sezione 3.1.1. I plot presentano lo spostamento quadratico medio $\langle x^2(t) \rangle$ in funzione del tempo.

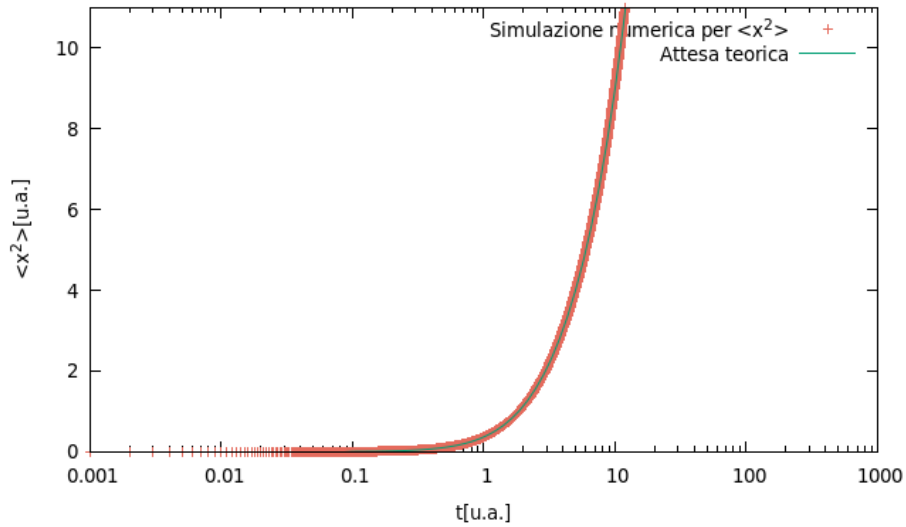


Figura 7: $\langle x^2(t) \rangle$ con scala logaritmica sull'asse delle x, nel caso di $H = 1$ (Sistema (2.4))

I grafici delle funzioni $\langle x^2 \rangle / t$ e $\langle x^2 \rangle / t^2$ costituiscono una verifica dei limiti notevoli calcolati in sezione 3.1.1.

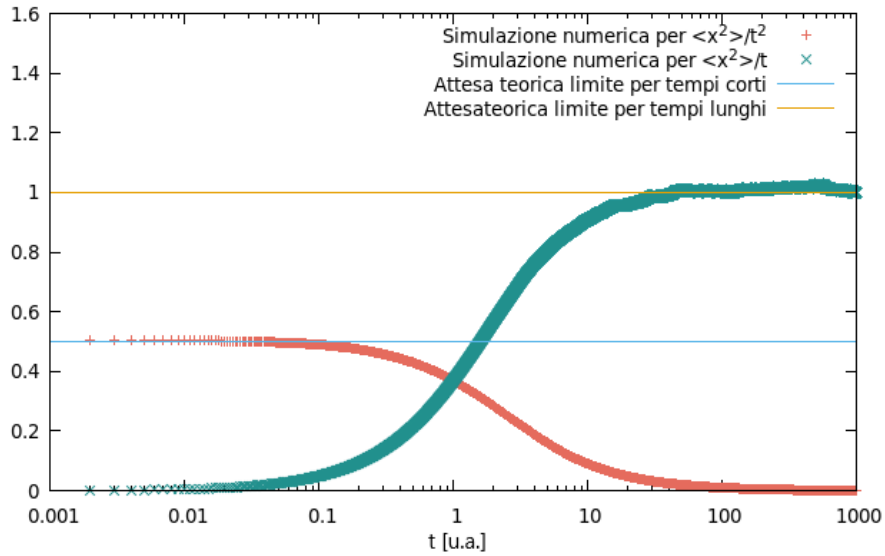


Figura 8: $\langle x^2(t) \rangle / t$ (in verde) e $\langle x^2(t) \rangle / t^2$ (in rosso) con scala logaritmica sull'asse delle x, nel caso di $H = 1$ (Sistema (2.4))

Come si può notare i risultati ottenuti dalle simulazioni corrispondono a quelli ottenuti analiticamente. Si ha, dunque, una prima conferma dell'efficacia delle simulazioni numeriche adoperate per studiare il sistema (2.4).

4.2.2 Kurtosis

Il sistema (2.4) descrive, come precedentemente affermato, un sistema diffusivo non-Gaussiano. Per poter quantificare questo comportamento è utile studiare l'andamento funzionale della kurtosis.

4 Trattazione numerica del sistema (2.4) nel caso di $H = 1$

La kurtosis, nel linguaggio della statistica, è un allontanamento dalla normalità distributiva, rispetto alla quale si verifica un maggiore appiattimento (distribuzione platicurtica) o un maggiore allungamento (distribuzione leptocurtica) [3] [11]. La sua misura più nota è l'indice di Pearson β_2 , rapporto tra il momento centrato di ordine 4 e il quadrato della varianza.

Il coefficiente di kurtosis è dato dall'espressione:

$$\gamma_2 = \beta_2 - 3$$

Dove:

$$\beta_2 = \frac{m_4}{m_2^2}$$

è l'indice di Pearson, dove m_4 e m_2 sono rispettivamente il momento centrale di ordine 4 e 2. Nel caso di una variabile casuale normale, $\beta_2 = 3$, così che il coefficiente di kurtosis γ_2 risulta pari a zero.

Se il coefficiente di kurtosis è:

- > 0 la curva si definisce leptocurtica, cioè più "appuntita" di una normale;
- < 0 la curva si definisce platicurtica, cioè più "piatta" di una normale;
- $= 0$ la curva si definisce normocurtica (o mesocurtica), cioè "piatta" come una normale.

Un'ulteriore informazione fornita dalle simulazioni è l'andamento dell'indice di Pearson β_2 in funzione del tempo. Anche in questo caso, si è deciso di riportare i risultati sotto forma di grafico.

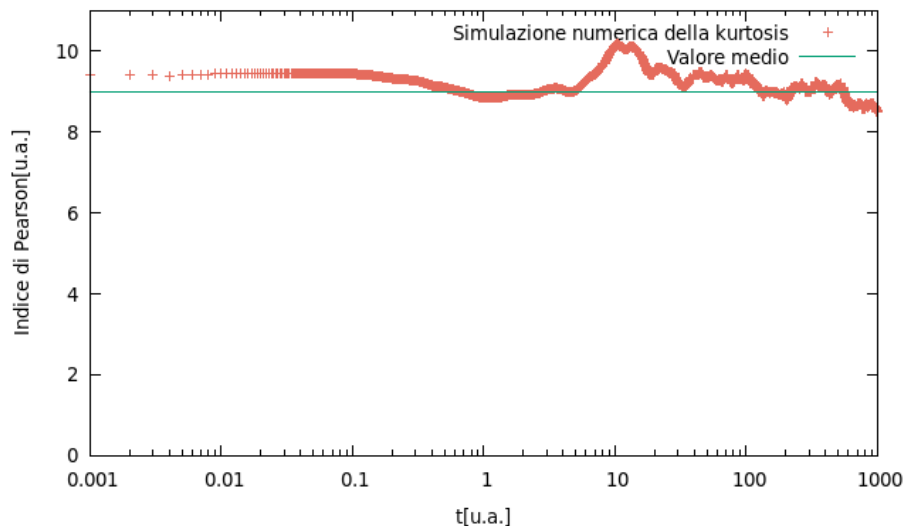


Figura 9: $\beta_2(t)$ con scala logaritmica sull'asse delle x, nel caso di $H = 1$ (Sistema (2.4))

Come si può notare dalla Figura 9, sebbene siano presenti alcune fluttuazioni statistiche, dovute al basso numero di simulazioni effettuate, l'indice di Pearson presenta un valore quasi sempre prossimo a nove e comunque maggiore di tre. Il sistema è dunque leptocurtico.

Per quanto appena affermato, ci si attende che le $P(x, \bar{t})$ non siano gaussiane, ma abbiano un andamento esponenziale. Ciò è una prima conferma del fatto che il sistema (2.4) rappresenti il fenomeno diffusivo non-Gaussiano trattato nell'articolo [25].

Anche in questo caso il sistema (2.4) risulta essere diverso dal sistema (2.3).

4.2.3 Distribuzioni delle posizioni ad un istante prefissato

Dalle simulazioni si sono calcolate, infine, le $P(x, \bar{t})$. Si sono plottate le distribuzione dei punti in funzione della posizione, per i tempi: $\bar{t} = 0,1$ u.a.; 1 u.a.; e 10 u.a. Seguono i grafici delle $P(x, \bar{t})$ in funzione della posizione x .

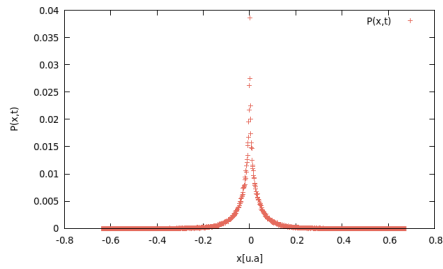


Figura 10: $P(x; 0,1)$, nel caso di $H = 1$ per il Sistema (2.4)

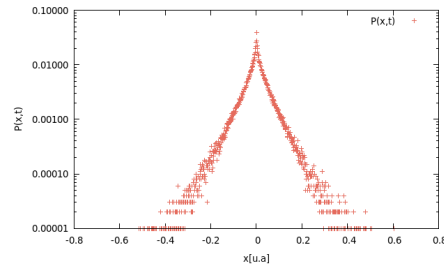


Figura 11: $P(x; 0,1)$ con scala logaritmica asse y, nel caso di $H = 1$ per il Sistema (2.4)

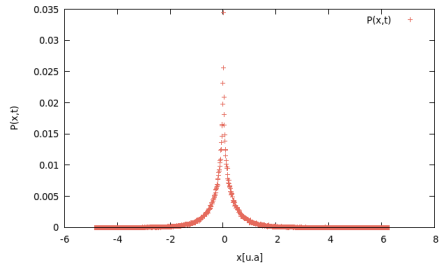


Figura 12: $P(x; 1)$, nel caso di $H = 1$ per il Sistema (2.4)

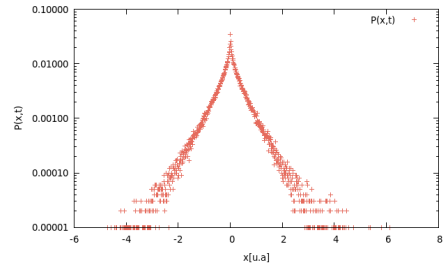


Figura 13: $P(x; 1)$ con scala logaritmica asse y, nel caso di $H = 1$ per il Sistema (2.4)

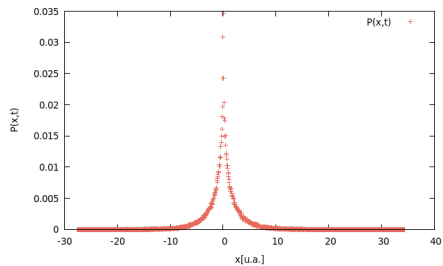


Figura 14: $P(x; 10)$, nel caso di $H = 1$ per il Sistema (2.4)

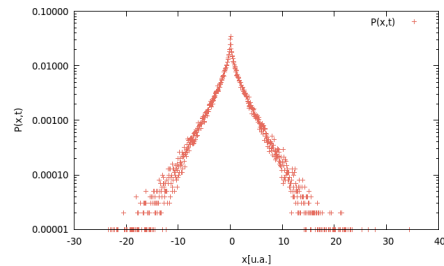


Figura 15: $P(x; 10)$ con scala logaritmica asse y, nel caso di $H = 1$ per il Sistema (2.4)

Le distribuzioni hanno un andamento esponenziale per ogni valore di \bar{t} . Ciò conferma quanto previsto dall'analisi della kurtosis. Lo si può notare dai plot con scala logaritmica sull'asse delle y .

La compatibilità dei risultati ottenuti dall'analisi della kurtosis e delle $P(x, \bar{t})$ è un'ulteriore verifica dell'affidabilità delle simulazioni effettuate.

4.2.4 Verifica delle simulazioni

Per verificare il corretto funzionamento del programma si è deciso di simulare il sistema (2.3), confrontando le informazioni così ottenute con quelle trovate e descritte in [16]. Effettivamente i risultati ottenuti per il sistema (2.3) sono gli stessi ottenuti da Chechkin et al.

4.3 Confronto tra il sistema (2.3) e il sistema (2.4)

Nella seguente sezione verranno presentati i risultati ottenuti per mezzo delle simulazioni del sistema (2.3). In contemporanea, essi verranno confrontati con i risultati ottenuti per il sistema (2.4) e con quanto si osserva nel caso di moto Browniano standard.

4.3.1 Spostamento quadratico medio

In primis, si sono determinati i limiti notevoli degli spostamenti quadratici medi del sistema (2.3). Seguono in figura i grafici ottenuti per mezzo delle simulazioni.

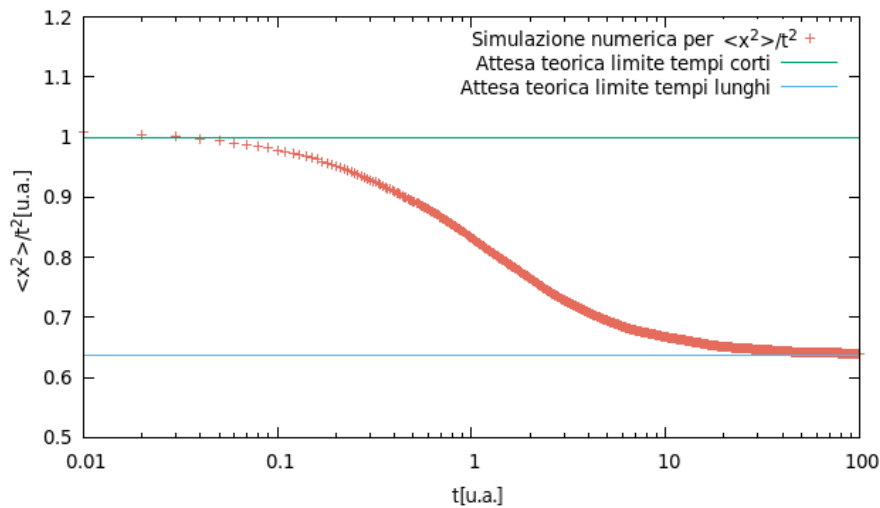


Figura 16: $\langle x^2(t) \rangle / t^2$ con scala logaritmica sull'asse delle x, nel caso di $H = 1$ (Sistema (2.3))

Entrambi i limiti notevoli, $\langle x^2(t) \rangle_0$ e $\langle x^2(t) \rangle_\infty$ mostrano un andamento funzionale proporzionale a t^2 . Il sistema (2.3) ed il sistema (2.4) mostrano andamenti funzionali differenti nel limite per tempi lunghi, mentre nel limite per tempi corti entrambi sono proporzionali a t^2 .

Nello studio del sistema (2.4) si riscontra una curiosità: i limiti notevoli ottenuti in sezione 1.3, per il moto Browniano standard, presentano gli stessi andamenti funzionali di quelli ottenuti per il sistema (2.4).

4.3.2 Kurtosis

Nella figura sottostante si può osservare l'andamento funzionale dell'indice di Pearson per il sistema (2.3).

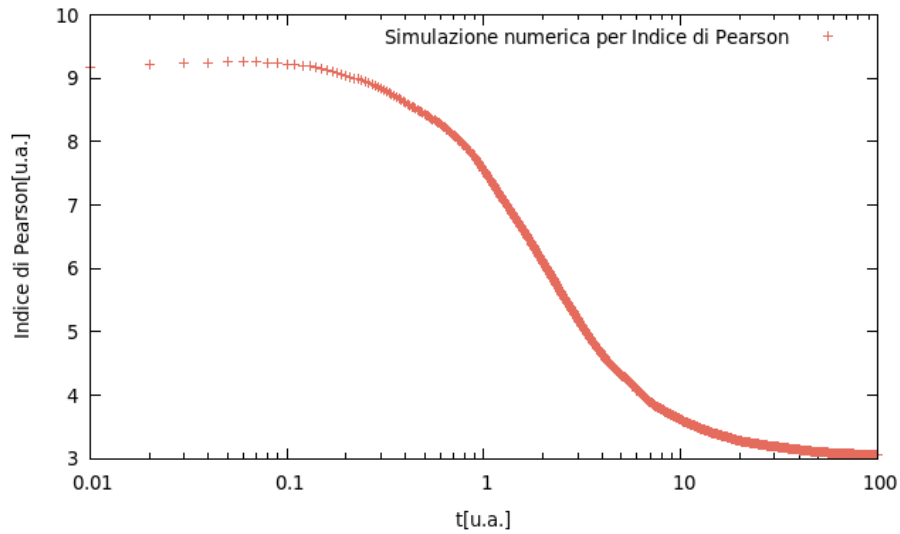


Figura 17: $\beta_2(t)$ con scala logaritmica sull'asse delle x, nel caso di $H = 1$ (Sistema (2.3))

A differenza del caso precedente, si può notare come l'andamento non sia solo leptocurtico, ma, nel corso del tempo, vari, diventando per tempi lunghi mesocurtico. Ciò preannuncia che la distribuzione dei punti al variare del tempo passi, dall'aver un andamento esponenziale per tempi corti, ad avere un andamento gaussiano per tempi lunghi. Da questo punto di vista, il sistema (2.3), per tempi lunghi, sembrerebbe essere il più vicino al comportamento di un sistema caratterizzato da moto Browniano standard, nonostante l'andamento proporzionale a t^2 dello spostamento quadratico medio.

4.3.3 Distribuzioni delle posizioni ad un istante prefissato

Quanto preannunciato nella sezione precedente, dalla trattazione della kurtosis, viene confermato dalle $P(x; \bar{t})$. Seguono i grafici delle $P(x; \bar{t})$ a prova di quanto affermato.

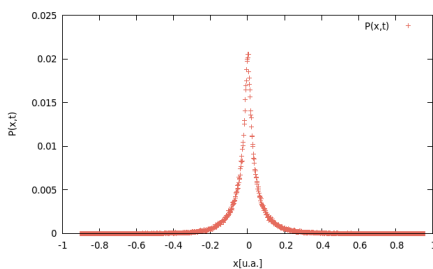


Figura 18: $P(x;0,1)$, nel caso di $H = 1$ per il Sistema (2.3)

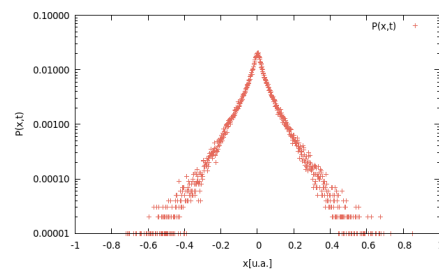


Figura 19: $P(x;0,1)$ con scala logaritmica asse y, nel caso di $H = 1$ per il Sistema (2.3)

4 Trattazione numerica del sistema (2.4) nel caso di $H = 1$

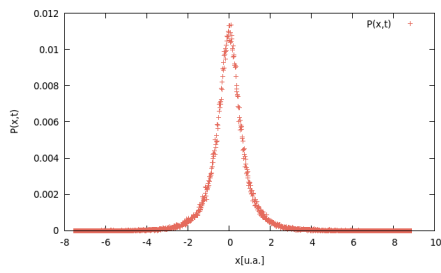


Figura 20: $P(x;1)$, nel caso di $H = 1$ per il Sistema (2.3)

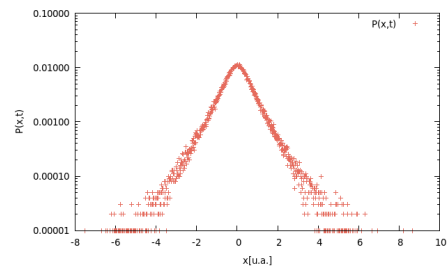


Figura 21: $P(x;1)$ con scala logaritmica asse y, nel caso di $H = 1$ per il Sistema (2.3)

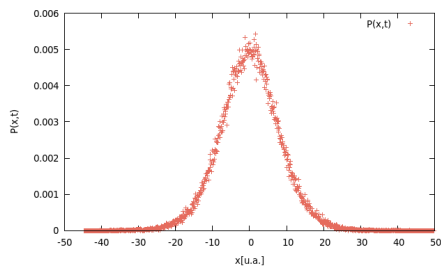


Figura 22: $P(x;10)$, nel caso di $H = 1$ per il Sistema (2.3)

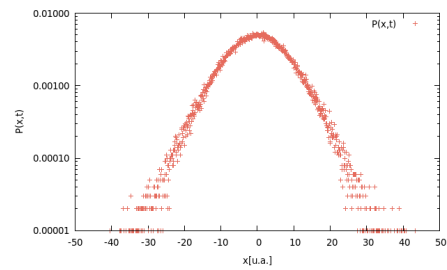


Figura 23: $P(x;10)$ con scala logaritmica asse y, nel caso di $H = 1$ per il Sistema (2.3)

Si può dunque notare, dal confronto appena eseguito, come il sistema (2.3) e il sistema (2.4) si comportino in modo analogo per tempi corti, differendo per tempi lunghi.

Come si deduce dalla Figura 20 e dalla Figura 21, il comportamento del sistema (2.3), inizia a essere mesocurtico a partire dall'istante $\bar{t} = 10$ u.a.

5 Conclusioni

In questo elaborato si è cercato di estendere i modelli di Diffusing Diffusivity, recentemente utilizzati per trattare la diffusione Browniana non-Gaussiana, per poter interpretare il fenomeno della diffusione Anomala non-Gaussiana. In particolar modo, ci si è focalizzati sullo studio di una possibile estensione del Minimal Langevin Model, descritta dal sistema (2.4). Nel corso della trattazione si è prestata maggiore attenzione all'analisi dello spostamento quadratico medio, della kurtosis e delle distribuzioni delle posizioni ad un istante prefissato. Ciò ha permesso di ottenere importanti risultati, discordanti con quelli ottenuti per il sistema (2.3), ma analoghi a quelli osservati in [25]:

- Per $H > \frac{1}{2}$ ¹⁰, il sistema (2.4) è diffusivo, infatti, per tempi lunghi il relativo spostamento quadratico medio è lineare in t . Si può, però, riscontrare una anomalia per tempi corti: $\langle x^2(t) \rangle_0$ non è proporzionale al quadrato del tempo, ma dipende dal valore dell'indice di Hurst.

$$\langle x^2 \rangle_0 = \frac{t^{2H}}{2} \quad \langle x^2 \rangle_{+\infty} = \frac{t\Gamma(2H+1)}{2}$$

- Per $H < \frac{1}{2}$ ¹¹, il sistema (2.4) è nuovamente diffusivo. Anche in questo caso l'espressione dello spostamento quadratico medio per tempi corti è anomala, essendo $\langle x^2(t) \rangle_0$ proporzionale a t^{2H} .

$$\langle x^2 \rangle_0 = \frac{t^{2H}}{2} \quad \langle x^2 \rangle_{\infty} = \frac{t\Gamma(2H+1)}{2}$$

- Per $H = 1$ ¹², sebbene il sistema (2.4) sia Browniano non-Gaussiano, presenta delle anomalie: la kurtosis è leptocurtica e le $P(x, \bar{t})$ hanno andamento esponenziale per tutti i tempi.

Questi tre risultati, aprono, quindi, delle questioni:

- Com'è possibile che per tempi lunghi il Teorema del Limite Centrale non è applicabile?
- Com'è possibile che, al variare del tempo, il rumore frazionario faccia passare il sistema (2.4) dall'essere un sistema Anomalo all'essere un sistema Browniano?

Per rispondere a questi quesiti è necessario introdurre modelli teorici microscopici, che permettano di riprodurre la fenomenologia descritta. Un primo passo in questa direzione potrebbe essere rappresentato dai risultati ottenuti in [18]. Il Teorema del Limite Centrale è enunciato in Appendice.

Presentiamo, ora, gli eventuali miglioramenti apportabili al programma utilizzato per la realizzazione delle simulazioni. In sezione 4.1 sono state presentate le caratteristiche degli algoritmi utilizzati per la soluzione di equazioni differenziali stocastiche. Dalla loro analisi è possibile stabilire, tra due algoritmi, quale sia il più adatto alla situazione.

Sulla base di queste caratteristiche si potrebbe effettuare una trattazione più precisa del sistema (2.4) utilizzando nuovi algoritmi. Per questo motivo confrontiamo, ora, l'algoritmo di

¹⁰Il seguente caso rappresenta una successione di eventi persistente

¹¹Il seguente caso rappresenta una successione di eventi anti-persistente

¹²Il sistema presenta massima correlazione

5 Conclusioni

Eulero, quello di Heun e l'algoritmo al Secondo Ordine, le cui condizioni di aggiornamento sono presentate in Appendice.

Algoritmo	Accuratezza deterministica	Comportamento stocastico
Eulero	Accurato fino a $O(\Delta t)$	$S(\Delta t, x) = \frac{V'^2}{4} - D\frac{V''}{2}$
Heun	Accurato fino a $O(\Delta t^2)$	$S(\Delta t, x) = O(\Delta t)$
Secondo Ordine	Accurato fino a $O(\Delta t^2)$	$S(\Delta t, x) = O(\Delta t)$

Tabella 1: Classificazione algoritmi.

Dalla Tabella 1 si evince che per migliori simulazioni numeriche converrebbe utilizzare l'algoritmo di Heun o quello al Secondo Ordine.

Un passo successivo per la trattazione del sistema di equazioni stocastiche introdotto da Cherayl e Tyagi [24] consisterebbe nel realizzare un programma capace di simulare numericamente il sistema (2.4) nel caso di indice di Hurst non unitario. Per far ciò è necessario costruire un algoritmo, che valuti il rumore $\xi_H(t)$, per ogni valore di H , utilizzando la funzione di autocovarianza (1.13), presentata in sezione 1.5.

A Appendice

A.1 Teorema dell'equipartizione dell'energia

Il teorema di equipartizione dell'energia permette di valutare l'energia interna di un sistema termodinamico, non considerandone la quantizzazione: esso è fondato sulla meccanica statistica classica, con particolare riferimento alle ipotesi della teoria cinetica dei gas.

$$E_k = \frac{1}{2}m \langle v^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T \quad (1.1.1)$$

Ora forniremo la dimostrazione del teorema di equipartizione dell'energia.

Nell'insieme microcanonico, il sistema è isolato dal resto del mondo, o quantomeno interagisce molto debolmente con esso, quindi la sua energia totale è effettivamente costante; per essere più precisi, diciamo che l'energia totale H è compresa tra E e $E + \Delta E$. Per una data energia E e un intervallo ΔE , c'è una regione dello spazio delle fasi Γ in cui il sistema ha questa energia e la probabilità per ogni stato in questa regione dello spazio delle fasi è la stessa. Date queste definizioni, l'equipartizione media delle variabili dello spazio delle fasi x_m e x_n è data da

$$\begin{aligned} \left\langle x_m \frac{\partial H}{\partial x_n} \right\rangle &= \frac{1}{\Gamma} \int_{H \in [E, E + \Delta E]} x_m \frac{\partial H}{\partial x_n} d\Gamma \\ &= \frac{\Delta E}{\Gamma} \frac{\partial}{\partial E} \int_{H < E} x_m \frac{\partial H}{\partial x_n} d\Gamma \\ &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial E} \int_{H < E} x_m \frac{\partial (H - E)}{\partial x_n} d\Gamma, \end{aligned}$$

dove l'ultimo passaggio è possibile perché E è una costante e non dipende quindi da x_n . Integrando per parti otteniamo:

$$\begin{aligned} \int_{H < E} x_m \frac{\partial (H - E)}{\partial x_n} d\Gamma &= \int_{H < E} \frac{\partial}{\partial x_n} (x_m (H - E)) d\Gamma - \int_{H < E} \delta_{mn} (H - E) d\Gamma \\ &= \delta_{mn} \int_{H < E} (E - H) d\Gamma, \end{aligned}$$

dove il primo termine a destra dell'uguaglianza vale zero.

Sostituendo questo risultato nella precedente equazione si ha:

$$\left\langle x_m \frac{\partial H}{\partial x_n} \right\rangle = \delta_{mn} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial E} \int_{H < E} (E - H) d\Gamma = \delta_{mn} \frac{1}{\rho} \int_{H < E} d\Gamma = \delta_{mn} \frac{\Sigma}{\rho}.$$

Poiché $\rho = \frac{\partial \Sigma}{\partial E}$ il teorema di equipartizione diventa:

$$\left\langle x_m \frac{\partial H}{\partial x_n} \right\rangle = \delta_{mn} \left(\frac{1}{\Sigma} \frac{\partial \Sigma}{\partial E} \right)^{-1} = \delta_{mn} \left(\frac{\partial \log \Sigma}{\partial E} \right)^{-1} = \delta_{mn} k_B T.$$

Abbiamo così ricavato la formulazione generale del teorema di equipartizione dell'energia:

$$\left\langle x_m \frac{\partial H}{\partial x_n} \right\rangle = \delta_{mn} k_B T$$

Quanto mostrato ed eventuali approfondimenti può essere ritrovato su [10].

A.2 Ulteriori sviluppi del calcolo stocastico di Stratonovich

Nella sezione 4.1, dopo aver definito il calcolo stocastico di Stratonovich, si è determinato l'ordine zero dello sviluppo in serie di Taylor in t dell'equazione (4.2). Seguono gli sviluppi agli ordini successivi in $t=0$ dell'equazione (4.2).

A.2.1 Ordine 1

Lo sviluppo al primo ordine l'equazione stocastica (4.2) risulta:

$$x(\Delta t) - x(0) = \Delta t f_0 + g_0 Z_1(\Delta t) + \frac{1}{2} g_0 g_0' Z_1(\Delta t)^2$$

A.2.2 Ordine 2

Definiamo due funzioni ausiliarie stocastiche:

$$Z_2(\Delta t) = \int_0^{\Delta t} Z_1(t) dt = (\Delta t)^{\frac{3}{2}} \left\{ \frac{Y_1}{2} + \frac{Y_2}{2\sqrt{3}} \right\}$$

$$Z_3(\Delta t) = \int_0^{\Delta t} Z_1(t)^2 dt \approx \frac{(\Delta t)^2}{3} \left\{ Y_1^2 + Y_3 + \frac{1}{2} \right\}$$

Dove Y_1 , Y_2 e Y_3 sono variabili stocastiche gaussiane. Nel caso in cui il rumore fosse additivo ($g(x) = \sqrt{2D}$), lo sviluppo dell'equazione (4.2) al secondo ordine in Δt risulterebbe:

$$x(\Delta t) - x(0) = \Delta t f_0 + \sqrt{2D} Z_1(\Delta t) + \sqrt{2D} Z_2(\Delta t) f_0' + D Z_3(\Delta t) f_0'' + \frac{(\Delta t)^2}{2} f_0' f_0$$

A.3 Algoritmi

Vengono riportati in seguito le regole di aggiornamento degli algoritmi trattati in sezione 4.1. Nei successivi passaggi si intenderà:

$$x_i = x(i\Delta t) \quad t_i = i\Delta t \quad f(x_i, t_i) = f(x(i\Delta t), i\Delta t)$$

A.3.1 Algoritmo di Eulero

L'algoritmo di Eulero esplicito è:

$$x_{i+1} = x_i + f(x_i, t_i) \Delta t$$

L'algoritmo di Eulero implicito è:

$$x_{i+1} = x_i + f(x_{i+1}, t_{i+1}) \Delta t$$

Seguono in figura i Tableau di Butcher relativi all'algoritmo di Eulero.

0		0
		1

Figura 24: Tableau di Butcher per Eulero Esplicito

0		1
		1

Figura 25: Tableau di Butcher per Eulero Implicito

A.3.2 Algoritmo di Heun

La regola di aggiornamento per l'algoritmo di Heun è:

$$x_1 = x(0) \sqrt{2D} Z_1(\Delta t) + \Delta t f_0$$

$$x(t) = x(0) \sqrt{2D} Z_1(\Delta t) + \frac{\Delta t}{2} (f_0 + f(x_1))$$

Segue in figura il Tableau di Butcher relativo all'algoritmo di Heun.

0		0	0
1		1	0
		0,5	0,5

Figura 26: Tableau di Butcher per algoritmo di Heun

A.4 Le leggi di Fick

In questa sezione mostreremo un approccio fisico al fenomeno della diffusione che non necessita dell'introduzione del moto Browniano. Quanto verrà presentato può essere ritrovato in [14] [17].

A Appendice

Consideriamo un sistema costituito da un soluto, inserito in un volume fisso di solvente. Supponiamo che le particelle di soluto si muovano a caso, in una dimensione, soltanto a destra e a sinistra con la stessa probabilità, e facendo salti di lunghezza L per ogni unità di tempo Δt . Supponiamo di dividere in volumetti, di dimensioni LYZ , il volume di solvente. All'interno di ogni volumetto è presente un numero N di particelle.

Sia $N(x)$ il numero di particelle nella scatola centrata in x . Per la membrana A , nell'unità di tempo, passano $\frac{1}{2}N(x-L) - \frac{1}{2}N(x)$ particelle. Sviluppando in serie per, L piccoli, si giunge a:

$$\frac{1}{2}N(x-L) - \frac{1}{2}N(x) \simeq \frac{1}{2} \left[N(x) - L \frac{dN}{dx} - N(x) \right] = -\frac{L}{2} \frac{dN}{dx}$$

La concentrazione in ogni singolo volume è data da:

$$c(x) = \frac{N(x)}{LYZ}$$

Definiamo ora flusso, il numero di particelle che attraversa una membrana nell'unità di tempo e di area:

$$j_A = j\left(x - \frac{L}{2}\right) = -\frac{L}{2YZ\Delta t} \frac{dN}{dx} = -\frac{L^2}{2\Delta t} \frac{dc}{dx}$$

Dalla precedente espressione è possibile ottenere quella che è nota come prima legge di Fick:

$$j = -D \frac{dc}{dx}$$

Dove D è il coefficiente di diffusione, misurato in $\frac{m^2}{s}$:

$$D = -\frac{L^2}{2\Delta t}$$

La legge appena introdotta ci dice che le differenze di concentrazione tendono ad annullarsi per una ragione entropica.

Dedichiamoci ora alla trattazione di un singolo cubetto e cerchiamo di trovarne l'equazione di continuità.

$$\frac{dN}{dt} = YZ \left[j\left(x - \frac{L}{2}\right) - j\left(x + \frac{L}{2}\right) \right] = -LYZ \frac{dj}{dx} \implies \frac{dc}{dt} = -\frac{dj}{dx}$$

Inserendo l'espressione appena trovata nella prima legge di Fick si giunge all'equazione della diffusione:

$$\frac{dc}{dt} = D \frac{d^2c}{dx^2}$$

A.5 Gamma di Eulero

La funzione Gamma di Eulero è definita come:

$$\Gamma(x) = \int_0^{+\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$$

Con $\Gamma(x,k)$ si intende la funzione Gamma di Eulero Incompleta:

$$\Gamma(x,k) = \int_k^{+\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$$

Per ottenere gli sviluppi dell'espressione (3.7) in 0 ed in ∞ sono state utilizzate le seguenti proprietà della funzione Gamma:

- $\Gamma(x+1,k) = x\Gamma(x,k) + k^x e^{-k}$
- $\gamma(x,k) = \int_0^k t^{x-1} e^{-t} dt$
- $\Gamma(x) = \lim_{k \rightarrow +\infty} \gamma(x,k)$
- $\gamma(x,k) + \Gamma(x,k) = \Gamma(x)$
- $t\Gamma(2H-1,t) = t\Gamma(2H-1) + \frac{t^{2H}}{1-2H}$
- $\Gamma(2H,t) = \Gamma(2H) - \frac{t^{2H}}{2H}$

A.6 Teorema del Limite Centrale

Il teorema del limite centrale afferma che [11] [3]:

Teorema Sia data una popolazione numerica infinita di media μ e deviazione standard σ da cui vengono estratti dei campioni casuali formati ciascuno da un numero fissato di elementi, con n sufficientemente grande. La distribuzione delle medie campionarie tende a una distribuzione gaussiana di media

$$\mu_x = \mu$$

e deviazione standard

$$\sigma_x = \sigma\sqrt{n}$$

In altre parole il teorema del limite centrale afferma che, anche in una popolazione che non segue il modello gaussiano, le medie campionarie, se calcolate su campioni abbastanza grandi, tendono a distribuirsi secondo una legge gaussiana.

Riferimenti bibliografici

- [1] B. Wang; J. Kuo; C. Bae e S. Granick. «When Brownian diffusion is not Gaussian». In: *Nature Materials* **11**, 481–485 (2012).
- [2] B. Wang; S. P. Antony; C. Bae e S. Granick. «Anomalous yet Brownian». In: *PNAS* **106**, n°. 36, 15160-15064 (2009).
- [3] R. J. Barlow. *Statistics: A Guide to the Use of Statistical Methods in the Physical Sciences*. Wiley, 1993.
- [4] M. V. Chubynsky e G. W. Slater. «Diffusing diffusivity: a model for anomalous, yet Brownian, diffusion.» In: *Physical Review Letters* **113**(9), 098302 (2014).
- [5] T. Dieker. «Simulation of fractional Brownian motion». In: *Tesi di Laurea* (2004).
- [6] A. Einstein. «Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen». In: *Annalen der Physik* **322**(8), 549–560 (1905).
- [7] C. Gardiner. *Stochastic Methods: A Handbook for the Natural and Social Sciences*. Springer, 2009.
- [8] E. Barkai; Y. Garini e R. Metzler. «Strange kinetics of single molecules in living cells». In: *Physics Today* **65**(8), 29 (2012).
- [9] G. I. Ghiara. «Approssimazione del moto Browniano frazionario con passeggiate aleatorie pesate». In: *Tesi di Laurea* (2011).
- [10] K. Huang. *Meccanica Statistica*. Zanichelli, 2017.
- [11] M. Loreti. *Teoria degli errori e fondamenti di statistica. Introduzione alla fisica sperimentale*. Znicelli, 1998.
- [12] B. B. Mandelbrot. *The Fractal Geometry of Nature*. W. H. Freeman, 1982.
- [13] R. Mannella. *A Gentle Introduction to the Integration of Stochastic Differential Equations*. Springer, 2001.
- [14] M. Marendà. «Quorum sensing communication in bacteria: the role of the system size». In: *Tesi di Laurea* (2014).
- [15] A. V. Chechkin; F. Seno; R. Metzler e I. M. Sokolov. «Brownian yet non-Gaussian diffusion: from superstatistics to subordination of diffusing diffusivities». In: *Physical Review* **7**,021002 (2017).
- [16] A. V. Chechkin; F. Seno; R. Metzler e I. M. Sokolov. «Private communications». In: (2019).
- [17] P. Nelson. *Biological Physics*. W. H. Freeman, 2016.
- [18] F. Seno; E. Orlandini e F. Baldovin. «Polimerization induce non-Gaussian diffusion». In: *Frontier in Physics (To be published)* ().
- [19] V. Sposini; A. V. Chechkin; F. Seno; G. Pagnini e R. Metzler. «Random diffusivity from stochastic equations: comparison of two models for Brownian yet non-Gaussian diffusion». In: *New Journal of Physics* **20**, 043044 (2018).
- [20] R. Angelico; A. Ceglie; U. Olsson; G. Palazzo e L. Ambrosone. «Anomalous surfactant diffusion in a living polymer system». In: *Physical review* **74**, 031403 (2006).
- [21] H. Risken. *The Fokker-Planck Equation*. Springer, 1984.
- [22] I. M. Sokolov e J. Klafter. «From diffusion to anomalous diffusion: A century after Einstein’s Brownian motion». In: *Chaos* **15**, 026103 (2005).
- [23] D. Soluri. «Moto Browniano frazionario ed applicazioni finanziarie». In: *Tesi di Laurea* (2016).
- [24] N. Tyagi e B. J. Cherayl. «Non-Gaussian Brownian diffusion in dynamically disordered thermal environments». In: *The journal of physical chemistry* **121**(29),7204-7209 (2017).

- [25] T. J. Lampo; S. Stylianidou; M. P. Backlund; P. A. Wiggins e A. J. Spakowitz.
«Cytoplasmic RNA-Protein Particles Exhibit Non-Gaussian Subdiffusive Behavior».
In: *Biophysical Journal* **112(3)**, 532-542 (2017).