

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Scuola di Scienze
Dipartimento di Fisica e Astronomia
Corso di Laurea in Fisica

Introduzione alla Meccanica Statistica dei Random Walk su Network

Relatore:
Prof. Armando Bazzani

Presentata da:
Marco Uguccioni

Anno Accademico 2019/2020

«Il vero viaggio di scoperta non
consiste nel cercare nuove terre,
ma nell'aver nuovi occhi».

Marcel Proust,
Alla ricerca del tempo perduto.

Abstract

Lo scopo della tesi è quello di studiare la dinamica stocastica di particelle che realizzano un random walk su network, focalizzandosi in particolare sulle proprietà dello stato stazionario del processo.

Dopo aver introdotto i concetti fondamentali di network e random walk per singola particella, si generalizza la trattazione a N particelle non interagenti su network a capacità di trasporto e storage infinita (ISTC) e si ricava il relativo stato stazionario con una trattazione meccano-statistica, applicando il principio di massima entropia.

Successivamente, per avvicinarsi a modelli di trasporto reali, si introducono nel sistema dei vincoli sulla capacità di trasporto e di storage (1-FTC+q-FSC) e si derivano le relazioni reciproche di Onsager, mostrando ancora una volta di poter trattare il sistema in termini termodinamici.

Durante la trattazione si realizzano numerose simulazioni numeriche utilizzando codici sviluppati in C++ e ROOT, volte a confermare l'andamento analitico atteso dei sistemi studiati.

Indice

Introduzione	5
1 Network e Random Walk	8
1.1 Grafi	8
1.1.1 Modello di Erdos-Renyi	10
1.1.2 Matrice Laplaciana Canonica di un Grafo	11
1.2 Processi di Markov	12
1.2.1 Equazione di Chapman-Kolmogorov	13
1.2.2 Catene di Markov	14
1.3 Master Equation	14
1.3.1 Stato Stazionario e Bilancio Dettagliato	16
1.4 Random Walk	17
1.4.1 Limite "Long-Time"	18
2 Dinamica su Network a Capacità Infinita (ISTC)	20
2.1 N Particelle Indipendenti su Random Graph	20
2.1.1 Distribuzione Stazionaria	21
2.1.2 Simulazione del Grafo di Erdos-Renyi	22
2.1.3 Simulazione della Master Equation	23
2.2 Un Esempio: Network a 4 Nodi	26
2.3 Entropia	29
2.3.1 Principio di Massima Entropia su Network ISTC	30
2.4 Relazioni Reciproche di Onsager	32
2.4.1 Derivazione delle Relazioni dalla Master Equation	34
3 Dinamica su Network a Capacità Finita (q-FSC+1-FTC)	37
3.1 Introduzione di Vincoli sulla Capacità	37
3.1.1 Limite Inferiore di Capacità sul Nodo: 0	38
3.1.2 Limite Superiore di Capacità sul Nodo: q	39
3.1.3 Doppio Vincolo di Capacità sul Nodo	39
3.2 Simulazione di un Random Walk Vincolato	40
3.3 Principio di Massima Entropia su Network q-FSC	43
3.4 Relazioni di Onsager su Network 1-FTC	45
Conclusioni	47
A Ulteriori Grafici per i Random Walk	48

Introduzione

Il concetto di *network* è stato introdotto in *Fisica dei Sistemi Complessi* per modellizzare le interazioni complesse tra le componenti di un sistema fisico attraverso un grafo matematico, i cui nodi rappresentano le entità fisiche ed i link le interazioni tra esse. Infatti i sistemi economici, sociali e biologici sono solo alcuni dei tanti ad avere una struttura d'interazione non banale, considerata tra le cause primarie delle proprietà emergenti di un sistema complesso. La relazione tra queste strutture e le proprietà dinamiche e statistiche di tali sistemi è un problema chiave: uno tra i possibili approcci consiste nello studio della dinamica dei *random walk*, le cui proprietà dipendono solamente dalla topologia del network in questione. I random walk su grafo possono simulare una grande varietà di fenomeni dinamici: i modelli di trasporto, lo scambio di informazioni quantizzate in un gene, le reazioni metaboliche cellulari, la dinamica delle reazioni chimiche e la diffusione di un epidemia sono solo alcuni esempi della rilevanza di questo metodo [2].

L'idea di network come sistema dinamico consente di introdurre, in un limite termodinamico in cui viene mantenuta la struttura del network, un approccio di meccanica statistica e di teoria degli ensemble, permettendo di studiare il comportamento di sistemi con un grande numero di elementi e rivelando caratteristiche universali e collettive che dipendono dalla topologia e dalla dimensionalità del sistema, piuttosto che dalla natura specifica dei processi microscopici che accadono all'interno. Tale teoria infatti, come mostrato in questo lavoro, si rivela essere un ottimo metodo per l'analisi dello *stato stazionario* di un network, in cui è valida la più stringente condizione di *bilancio dettagliato*. Tuttavia se quest'ultima condizione non è soddisfatta, ovvero se lo stato stazionario del sistema produce delle correnti di probabilità interne, si entra nella più complessa *meccanica statistica del non equilibrio* dove non esiste più una legge generale che definisce le proprietà dello stato stazionario del sistema, come la seconda legge della termodinamica per l'entropia nella termodinamica classica.

L'obiettivo della tesi è lo studio in termini fisici della dinamica su network, inizialmente senza considerare alcuna condizione sul moto delle particelle sul sistema, e successivamente introducendo dei vincoli sulla capacità di trasporto sui link ed immagazzinamento sui nodi del network, in modo da simulare un modello semplificato di un sistema di trasporto. L'inserimento di tali vincoli rispecchia ciò che accade nella vita quotidiana in strade, aeroporti, parcheggi e così via, modificando notevolmente la dinamica libera: da una parte si ha che un nodo vuoto non può inviare niente ai suoi vicini, dall'altra si ha che un nodo che ha raggiunto la sua capacità massima si trova in uno stato di congestione e non può più ricevere nulla. Quando più nodi del sistema raggiungono la rispettiva capacità massima il sistema si dice congestionato.

Nel primo capitolo si introducono gli strumenti necessari alla comprensione del modello. Si parte con nozioni basilari sulla teoria dei grafi [1][3][4][9], analizzando in particolare il *random graph di Erdos-Renyi* [5], un modello ideale ma molto utilizzato come ambiente per le simulazioni. Dopodiché si introducono i *processi di Markov*, ovvero i processi stocastici in cui la probabilità di transizione verso uno stato successivo dipende solo da quello corrente, fondamentali per lo studio dei random walk su network. Ogni processo di Markov deve obbedire all'*equazione di Chapman-Kolmogorov* che, nella sua forma differenziale, è nota come *Master Equation*: essa descrive, tramite un set di equazioni differenziali al primo ordine, l'evoluzione temporale della probabilità che un sistema occupi ciascuno dei suoi possibili stati. Dalla master equation si ricava lo stato stazionario, una soluzione in cui il sistema mantiene un flusso di probabilità costante, e si discute l'importante condizione di bilancio dettagliato, un'asserzione più forte che implica una condizione di equilibrio su ciascun link del network [2][10]. Si conclude il capitolo con la trattazione del random walk su grafo per una singola particella, mostrando che nella tipologia di network trattata la soluzione stazionaria, oltre ad essere unica, è il limite per tempi lunghi del processo di markov considerato [3][7].

Nel secondo capitolo si studia la dinamica di N particelle non interagenti su network con capacità di storage e trasporto infinita per i nodi e per i link rispettivamente (ISTC). Si simula la soluzione della master equation per la dinamica media e si calcola il tempo di rilassamento del sistema per raggiungere lo stato stazionario. La validità della condizione di bilancio dettagliato tra i link ci permette inoltre di trattare il sistema in termini mecano-statistici. Per prima cosa si dimostra la convergenza della master equation allo stato stazionario per tempi lunghi in termini più fisici: si costruisce una funzione *entropia* (o *funzione H* o *funzione di Lyapunov*) limitata e con la proprietà di variare in modo monotono, così da dover tendere ad un limite [10]. Si applica poi il *Principio di Massima Entropia* per ottenere lo stato stazionario [2], graficando la distribuzione delle particelle sui nodi all'equilibrio per il random walk simulato e mostrando che l'andamento delle fluttuazioni è monomodale. Tale andamento mostra che l'indipendenza di un numero molto grande di particelle ci permette di trattare la dinamica media del sistema come la dinamica di singola particella. Si mostra infine che l'ipotesi di validità di bilancio dettaglio permette di ricavare le importanti *relazioni di Onsager*, che esprimono l'uguaglianza di alcune relazioni tra flussi e forze nei sistemi termodinamici lontani dall'equilibrio, ma dove valgono condizioni di equilibrio locale [6][8].

Nel terzo ed ultimo capitolo si introducono dei vincoli al precedente modello, trattando un network con capacità di trasporto singola (1-FTC) e capacità di storage q finita (q-FSC). E' necessario per prima cosa modificare la master equation con opportune funzioni di soglia [2]. Poiché con questi vincoli la probabilità di avere un nodo vuoto o pieno non è trascurabile, si distinguono tre possibili situazioni in base al numero di particelle poste inizialmente sul network: nodi vicini al limite di capacità 0, nodi vicini al limite di capacità q e doppio vincolo di capacità. Si simula allora il random walk vincolato nei tre casi su un *grafo 2-regolare*, più semplice di quello di Erdos ma non banale, verificando la compatibilità dell'andamento delle distribuzioni stazionarie sui nodi con i risultati teorici attesi. Da tale andamento si mostra che l'inserimento di una capacità finita nel network

opera come una forza termodinamica che spinge il picco della distribuzione verso i vincoli considerati. Infine si applica il principio di massima entropia per il network q -FSC per ricavare lo stato stazionario sottoposto al vincolo di capacità e si ricavano le relazioni di Onsager per il network 1-FTC, mostrando che la condizione di bilancio dettaglio continua a valere anche nei modelli vincolati in analisi.

Capitolo 1

Network e Random Walk

1.1 Grafi

Un network è un sistema fisico in interazione descritto in modo formale da una struttura matematica, detta *grafo*.

Dato un insieme finito \mathcal{G} , definiamo *adiacenza* una relazione binaria su \mathcal{G}

$$v \sim u \quad v \in V, u \in U \quad V, U \subseteq \mathcal{G}. \quad (1.1)$$

Identifichiamo allora un grafo con $G(V, E)$, dove $V \subseteq \mathcal{G}$ è un set di elementi identici detti *nodi* o *vertici*, mentre $E \subseteq V \times V$ è una collezione di coppie ordinate di elementi detti *link* o *spigoli*, definiti da una relazione di adiacenza.

I grafi sono solitamente rappresentati tramite diagrammi, disegnando i nodi come punti e i link come linee connettendo i punti correlati dalla relazione (1.1).

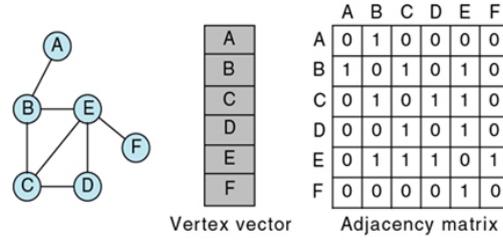
Nella seguente trattazione verranno affrontati solamente grafi *semplici*, cioè privi di *self-loop* (link con estremi uguali) o *multi-archi* (più link con stessi estremi), e *connessi*, per cui esiste sempre un percorso che possa collegare una coppia di vertici. Definendo quindi con (n, m) rispettivamente il numero di nodi e di link di un grafo, si ha $0 \leq m \leq \binom{n}{2}$ e nel caso in cui $m = \binom{n}{2}$ si parla di grafo *completo*.

E' importante sottolineare inoltre la distinzione tra grafi *direzionali*, cioè quelli in cui il link $i \sim j$ differisce da $j \sim i$, e quelli *non direzionali*, in cui le coppie di vertici che definiscono il link non sono ordinate.

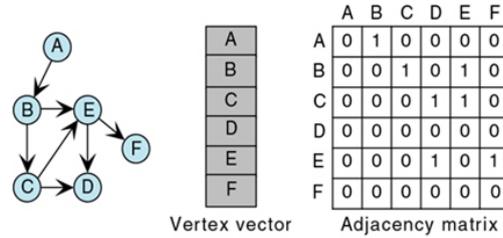
E' conveniente rappresentare i grafi tramite matrici, con il vantaggio di ottenerne le varie caratteristiche con il ben noto calcolo matriciale. E' naturale infatti introdurre la *matrice di adiacenza* $n \times n$, indicata con A_{ij} e definita nel modo seguente:

$$A_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i \sim j \in E \\ 0, & \text{altrimenti.} \end{cases} \quad (1.2)$$

In particolare, per grafi non direzionali la matrice è *simmetrica*, cioè $A_{ij} = A_{ji}$. Un esempio di grafo direzionale e non, con relative matrici di adiacenza, è riportato in Fig. 1.1.



(a) Adjacency matrix for non-directed graph



(a) Adjacency matrix for directed graph

Figura 1.1: Matrici di adiacenza per lo stesso grafo direzionale (a) e non direzionale (b). La presenza di soli zeri sulla diagonale identifica la struttura semplice del grafo.

Per studiare l'importanza di un determinato vertice di un grafo non direzionale, si introduce il *grado* k_i , cioè il numero di link connessi al nodo i

$$k_i = \sum_{j=1}^n A_{ij}, \quad \text{con} \quad \sum_{i=1}^n k_i = 2m. \quad (1.3)$$

Per un grafo direzionale la situazione è simile, a meno dell'introduzione per ogni vertice i di due distinti gradi, detti *grado-in* k_i^{in} e *grado-out* k_i^{out} , le cui sommatorie coincidono con il numero m di link del grafo.

Nell'analisi di un network è inoltre importante specificare il legame di un vertice con i suoi vicini e per fare ciò si introduce il *coefficiente di clustering* c_i locale. Esso individua la tendenza alla transitività di linking, cioè la probabilità che, se il vertice j è collegato a i e i è collegato a l , il vertice j sia collegato a l . Denotando con e_i il numero di spigoli esistenti tra i k_i vicini del nodo i definiamo allora:

$$c_i = \frac{2e_i}{k_i(k_i - 1)}. \quad (1.4)$$

Il grande numero di elementi presenti nei network a larga scala ci porta all'utilizzo di un'analisi statistica come strumento adeguato per un'utile caratterizzazione matematica. In effetti, nei sistemi di grandi dimensioni, non è possibile trovare regolarità asintotiche semplicemente analizzando elementi o proprietà locali. La più basilare caratterizzazione statistica, sempre facendo riferimento ad un grafo non direzionale, è data dalla *distribuzione dei gradi* $P(k)$, definita come la probabilità che un vertice scelto casualmente nel grafo abbia grado k .

Le forme funzionali generalmente considerate per descrivere la distribuzione dei gradi dei network definiscono due ampie classi: la prima si riferisce ai cosiddetti *random graph*, dove la distribuzione ha un andamento di tipo Gaussiano o Poissoniano; mentre la seconda considera i *complex network*, dove un esempio tipico è dato dalla distribuzione

power-law, del tipo $P(k) = Ak^{-\gamma}$, che definisce i network *scale-free*. Quest'ultima distribuzione presenta una probabilità non trascurabile di trovare vertici con gradi che si discostano di molto dal valore medio $\langle k \rangle$. In altre parole il comportamento medio di tali network non è tipico.

1.1.1 Modello di Erdos-Renyi

I modelli teorici di grafi più semplici sono i *random graph* e sono particolarmente interessanti per l'utilità che hanno nell'analisi delle proprietà fondamentali delle reti complesse, oltre al largo utilizzo di base nei modelli computazionali di processi dinamici su grafi.

Il più noto ed intuitivo tra questi modelli è il *random graph di Erdos-Renyi* che, nella formulazione originale, è indicato con $G(n, m)$, dove il numero di vertici n e di link m è fissato. Costruiamo tale grafo scegliendo a caso, in modo uniforme, uno tra tutti i possibili grafi con n vertici ed m link con probabilità

$$P(G) = \frac{1}{\Omega} \quad \text{dove } \Omega = \binom{\binom{n}{2}}{m} \quad (1.5)$$

E' triviale ottenere da tale distribuzione il valore di aspettazione del grado $\langle k \rangle = 2m/n$.

Una versione matematicamente più gestibile di tale modello è ottenuta con il grafo $G(n, p)$, dove è fissato il numero di vertici n e la probabilità p che tra una coppia di vertici distinti ci sia un link. La relazione tra le due formulazioni è diretta: la probabilità di ottenere un particolare grafo $G(n, m)$ costruendo un grafo $G(n, p)$ è

$$P(G) = p^m (1-p)^{\binom{n}{2}-m}. \quad (1.6)$$

Focalizzandosi quindi sul random graph $G(n, p)$, la probabilità totale di ottenere un grafo con m link segue una distribuzione *binomiale*, data da

$$P(m) = \binom{\binom{n}{2}}{m} p^m (1-p)^{\binom{n}{2}-m}. \quad (1.7)$$

Da tale distribuzione è semplice ricavare i valori medi $\langle m \rangle = \binom{n}{2} p$ e $\langle k \rangle = (n-1)p$. Quest'ultimo in particolare suggerisce una distribuzione dei gradi per tale modello, anch'essa binomiale

$$P(k) = \binom{n-1}{k} p^k (1-p)^{n-1-k}, \quad (1.8)$$

che nel limite per $n \rightarrow \infty$ e $\langle k \rangle$ costante tende ad una distribuzione *poissoniana*

$$P(k) = e^{-\langle k \rangle} \frac{\langle k \rangle^k}{k!}. \quad (1.9)$$

La distribuzione di Poisson (1.9) mostra che in generale solo pochi nodi hanno un grado che si scosta significativamente dal valore medio. E' evidente quindi che un modello come questo, sebbene fondamentale per un primo approccio alla teoria, non sia puramente applicabile ai network reali. Per esempio in questo modello non c'è correlazione tra i gradi di vertici adiacenti dato che i link sono piazzati in modo completamente

casuale, mentre i network reali osservati sono il risultato di un processo evolutivo in cui i nodi nati prima hanno più probabilità di essere connessi, per cui questi tendono a raggrupparsi in "comunità" e quindi i gradi risultano spesso correlati. A titolo di esempio, si riporta in Fig. 1.2, un confronto tra la distribuzione dei gradi di un random graph poissoniano e del network dei voli tra gli aeroporti degli Stati Uniti nel 2010, in scala logaritmica. Sebbene i due andamenti condividano lo stesso valore medio, è evidente che si tratta di forme totalmente diverse.

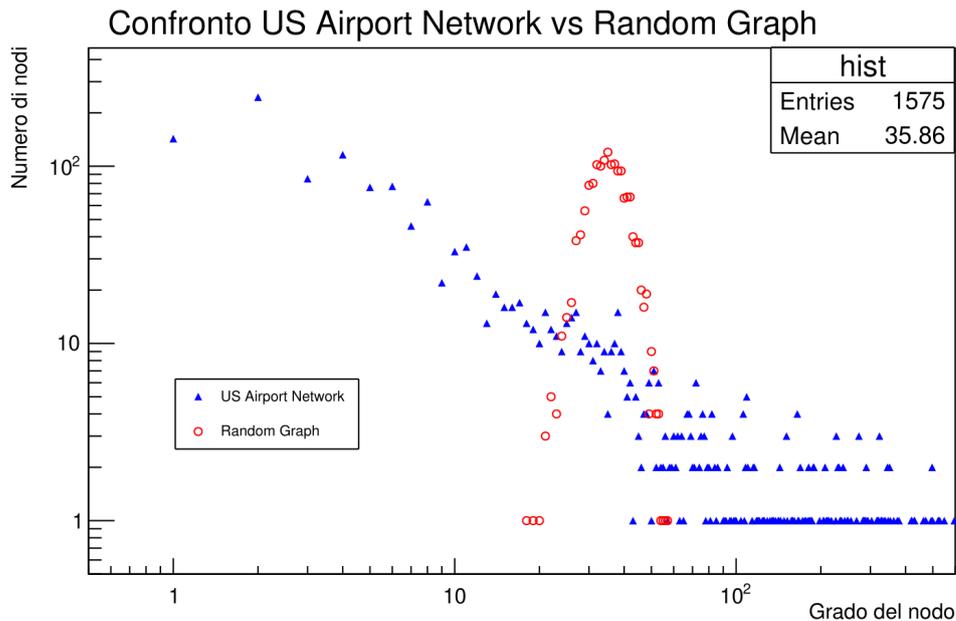


Figura 1.2: Confronto in scala logaritmica tra la distribuzione dei gradi di un random graph poissoniano con il network dei voli tra gli aeroporti degli Stati Uniti nel 2010. I nodi rappresentano gli aeroporti mentre i link individuano le connessioni tra questi. La distribuzione di Poisson è stata realizzata in modo da avere lo stesso grado medio del network di trasporto in analisi.

1.1.2 Matrice Laplaciana Canonica di un Grafo

Oltre alla matrice di adiacenza A_{ij} , definita in Eq. (1.2), è presente un'altra matrice che può dirci di più sulla struttura di un grafo, oltre ad essere importante per lo studio dei random walk su network: essa prende il nome di *Laplaciana canonica* del grafo L . Per poterla definire, consideriamo una *diffusione*, ovvero un processo in cui una generica sostanza si muove da zone di alta densità a zone di bassa densità, guidata da una pressione relativa delle diverse regioni. E' anche possibile considerare dei processi di diffusione su network, per semplicità non direzionale, per realizzare semplici modelli di fenomeni come la diffusione di un'idea o di un'epidemia. Supponiamo allora che nel vertice i sia presente una quantità di sostanza ψ_i che si muove lungo gli spigoli del grafo, passando dal vertice j a quello adiacente i con un rate $C(\psi_j - \psi_i)$, dove C è nota come *costante di diffusione*. Quindi, in un intervallo di tempo infinitesimo, la quantità di sostanza che fluisce da j ad i è $C(\psi_j - \psi_i)dt$, per cui il rate con cui la quantità ψ_i varia è dato da:

$$\frac{d\psi_i}{dt} = C \sum_j A_{ij}(\psi_j - \psi_i). \quad (1.10)$$

La matrice di adiacenza nell'espressione assicura che i termini che appaiono nella sommatoria siano relativi a vertici effettivamente connessi. Facendo alcuni passaggi algebrici ed introducendo la matrice

$$L = D - A \quad \text{con } D = \text{diag}(k_1, \dots, k_n), \quad (1.11)$$

è possibile riscrivere l'Eq. (1.10), in notazione matriciale, come

$$\frac{d\psi}{dt} + CL\psi = 0, \quad (1.12)$$

che ha la stessa forma dell'ordinaria equazione di diffusione per un gas, eccetto per l'operatore Laplaciano ∇^2 sostituito dalla matrice L . Proprio per questo motivo L è chiamata Laplaciana del grafo, sebbene la sua importanza vada oltre i soli processi di diffusione.

La matrice L è per costruzione una matrice con sommatoria sugli elementi di riga nulla, $\sum_j L_{ij} = 0$, quindi $\vec{1}$ è autovettore della laplaciana canonica di autovalore 0. Per un grafo non direzionale L è simmetrica, per cui in tal caso tutti gli autovalori sono reali, ed è inoltre possibile mostrare che tutti gli autovalori della Laplaciana canonica sono non negativi.

Definiamo innanzitutto la *matrice di incidenza* $n \times m$, indicata con B_{ij} , in cui la colonna j associata al link $u \sim v$ avrà esattamente un -1 in corrispondenza della riga associata al nodo u , un 1 in corrispondenza della riga associata al nodo v , e 0 in tutte le altre. Possiamo allora fattorizzare $L = B^T B$ e, assumendo che i suoi autovettori v_i di autovalore λ_i siano normalizzati, avremo $v_i^T B^T B v_i = \lambda_i v_i^T v_i = \lambda_i$. Ma tale quantità è il prodotto interno del vettore reale Bv_i per cui non può essere negativo, fornendo il risultato atteso $\lambda_i \geq 0$.

1.2 Processi di Markov

Indichiamo innanzitutto con $P(A|B)$ la *probabilità condizionata* di un evento A rispetto un evento B , ovvero la probabilità che si verifichi A sapendo che B è verificato, definita nel modo seguente:

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}, \quad (1.13)$$

con $P(A \cap B)$ è la probabilità che si verifichino entrambi gli eventi.

Si definisce allora *processo di Markov* un processo stocastico $X(t)$ con la seguente proprietà: per ogni set di n successivi istanti (i.e. $t_1 < t_2 < \dots < t_n$) si ha

$$P(x_n, t_n | x_1, t_1; \dots; x_{n-1}, t_{n-1}) = P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}) \quad (1.14)$$

cioè la densità di probabilità condizionata del valore x_n nell'istante t_n , dato il valore x_{n-1} a t_{n-1} , è univocamente determinata e non dipende dalla conoscenza degli stati

precedenti. Per ovvi motivi tale proprietà è anche nota come *assenza di memoria* e P prende il nome di *probabilità di transizione*.

La ragione per cui i processi di Markov sono così utili nelle applicazioni è quella di essere completamente determinati da solo due funzioni, $P(x_1, t_1)$ e $P(x_2, t_2|x_1, t_1)$; l'intera gerarchia può essere costruita da queste due densità di probabilità. Si prenda per esempio $t_1 < t_2 < t_3$, allora si ottiene:

$$\begin{aligned} P(x_1, t_1; x_2, t_2; x_3, t_3) &= P(x_1, t_1; x_2, t_2)P(x_3, t_3|x_1, t_1; x_2, t_2) \\ &= P(x_1, t_1)P(x_2, t_2|x_1, t_1)P(x_3, t_3|x_2, t_2). \end{aligned} \quad (1.15)$$

Continuando questo algoritmo ci si riconduce a $P(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)$.

I processi di Markov sono di grande rilevanza in fisica e chimica sotto l'importante ipotesi del *caos molecolare*, ovvero supponendo una distribuzione casuale per le posizioni e le velocità di un numero molto grande di particelle. Uno degli esempi più noti di un tale processo in fisica è sicuramente il *moto Browniano*, in cui una particella è immersa in un fluido costituito da particelle più leggere e collide con queste in modo casuale. Di conseguenza la velocità della particella varia tramite un grande numero di piccoli passi non correlati. Ma non è solo la velocità ad essere un processo di Markov, infatti anche la posizione stessa è soggetta a cambiamenti dipendenti dalla sola posizione corrente e non dalle precedenti.

1.2.1 Equazione di Chapman-Kolmogorov

Integrando l'identità (1.15) rispetto x_2 e dividendo entrambi i lati per $P(x_1, t_1)$ si ottiene l'importante *equazione di Chapman-Kolmogorov*:

$$P(x_3, t_3|x_1, t_1) = \int P(x_3, t_3|x_2, t_2)P(x_2, t_2|x_1, t_1)dx_2. \quad (1.16)$$

La probabilità di transizione di ogni processo di Markov deve obbedire a questa equazione e, ovviamente, questa vale anche quando x può assumere solo valori discreti: in tal caso l'integrale si riduce ad una sommatoria.

Diremo che un processo di Markov è *stazionario* se la probabilità di transizione P non dipende dai due istanti ma solo dall'intervallo temporale; in questo caso si introduce la notazione

$$P(x_2, t_2|x_1, t_1) = T^{\Delta t}(x_2|x_1), \quad (1.17)$$

con $\Delta t = t_2 - t_1$. L'equazione di Chapman-Kolmogorov diventa:

$$T^{\Delta t + \Delta t'}(x_3|x_1) = \int T^{\Delta t'}(x_3|x_2)T^{\Delta t}(x_2|x_1)dx_2, \quad (1.18)$$

e se si legge l'integrale come un prodotto di due matrici, o di nuclei integrali, l'equazione può essere scritta come

$$T^{\Delta t + \Delta t'} = T^{\Delta t'}T^{\Delta t}. \quad (1.19)$$

1.2.2 Catene di Markov

Una semplice ma speciale classe di processi di Markov sono le *catene di Markov*, definite dalle seguenti proprietà:

- (i) il range del processo X è un set discreto di stati
- (ii) la variabile temporale è discreta ed assume solo valori interi $t = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$
- (iii) il processo è stazionario, valgono cioè le Eq. (1.17) e (1.18).

Tra queste sono rilevanti le *catene di Markov finite*, il cui range consiste in un numero finito n di stati. La prima distribuzione di probabilità $P(x, t)$ diventa quindi un vettore a n componenti $p_i(t)$ ($i = 1, 2, \dots, n$) e la probabilità di transizione $T^{\Delta t}(x_2|x_1)$ è una matrice $n \times n$, detta *matrice di transizione*. La proprietà vista in Eq. (1.19) conduce all'equazione matriciale

$$T^{\Delta t} = (T^1)^{\Delta t} \quad (1.20)$$

con $\Delta t = 0, 1, 2, \dots$ e la distribuzione di probabilità $p(t)$ originata dalla distribuzione iniziale $p(0)$ è data, usando la notazione matriciale e omettendo indici superflui, da

$$p(t) = T^t p(0). \quad (1.21)$$

Quindi lo studio delle catene di Markov finite si riconduce all'analisi delle cosiddette *matrici stocastiche*, cioè potenze della matrice T di cui è noto solo che i suoi elementi sono non negativi e che la somma degli elementi di colonna fa uno, $\sum_i T_{ij} = 1$. Per come è definita, è evidente che T ha un autovettore sinistro $(1, 1, \dots, 1)$ di autovalore 1 ed ha, inoltre, un autovettore destro p^s tale che $Tp^s = p^s$, il quale rappresenta lo *stato stazionario* del processo. Come vedremo tale stato ha una grande rilevanza, in particolare nella descrizione delle fluttuazioni nello stato di equilibrio del network.

Data ora una catena di Markov con matrice di transizione T_{ij} consideriamo il processo inverso, ovvero consideriamo la medesima catena andando indietro nel tempo. Si verifica facilmente che il processo inverso è ancora una catena di Markov e, definita con S_{ij} la matrice di transizione di tale processo inverso, diremo che una catena di Markov è *reversibile* se

$$S_{ij} = T_{ij} \quad \forall i, j. \quad (1.22)$$

1.3 Master Equation

La *master equation* è una versione dell'equazione di Chapman-Kolmogorov più semplice da gestire e dunque più utilizzata nell'applicazione a fenomeni fisici.

Consideriamo innanzitutto un processo di Markov stazionario ed analizziamo il comportamento di $T^{\Delta t'}(x_2|x_1)$ quando $\Delta t'$ tende a zero. Si può dimostrare che nel caso di processi regolari, ovvero processi in cui la probabilità che un evento avvenga in un intervallo $\Delta t'$ tende a 0 con $\Delta t' \rightarrow 0$, vale il seguente sviluppo

$$T^{\Delta t'}(x_2|x_1) = (1 - a_0 \Delta t') \delta(x_2 - x_1) + \pi(x_2|x_1) \Delta t' + o(\Delta t') \quad (1.23)$$

dove $\pi(x_2|x_1) \geq 0$ è la *probabilità di transizione per unità di tempo* da x_1 a x_2 , mentre il coefficiente $1 - a_0\Delta t'$ di fronte la *delta di Dirac* è la probabilità che non avvenga alcuna transizione durante l'intervallo $\Delta t'$ con

$$a_0(x_1) = \int \pi(x_2|x_1)dx_2. \quad (1.24)$$

Inserendo l'Eq. (1.23) in Eq. (1.18) si ottiene

$$T^{\Delta t+\Delta t'}(x_3|x_1) = [1 - a_0(x_3)\Delta t']T^{\Delta t}(x_3|x_1) + \Delta t' \int \pi(x_3|x_2)T^{\Delta t}(x_2|x_1)dx_2, \quad (1.25)$$

e dividendo per $\Delta t'$, passando al limite per $\Delta t' \rightarrow 0$, si ha

$$\frac{\partial}{\partial t}T^{\Delta t}(x_3|x_1) = \int \left\{ \pi(x_3|x_2)T^{\Delta t}(x_2|x_1) - \pi(x_2|x_3)T^{\Delta t}(x_3|x_1) \right\} dx_2, \quad (1.26)$$

cioè la forma differenziale dell'equazione di Chapman-Kolmogorov, detta *master equation*. Sapendo che $P(x, t) = T^{\Delta t}(x|x')P(x', t')$, questa è spesso scritta nella sua forma semplificata, più intuitiva e più nota

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \int \left\{ \pi(x|x')P(x', t) - \pi(x'|x)P(x, t) \right\} dx'. \quad (1.27)$$

Il significato della master equation diventa particolarmente chiaro quando consideriamo un processo di Markov con range di stati finiti; in tal caso si ottiene

$$\dot{p}_i(t) = \sum_{j \neq i} (\pi_{ij}p_j(t) - \pi_{ji}p_i(t)), \quad (1.28)$$

da cui è evidente che essa rappresenta l'*equazione di bilancio delle distribuzioni di probabilità di ogni stato separato i* . Infatti il rate temporale di probabilità nello stato i eguaglia il guadagno di probabilità dovuta alla transizione di stati $j \rightarrow i$ (primo termine a destra) più la perdita dovuta alla transizione di stati $i \rightarrow j$ (secondo termine a destra).

E' molto utile introdurre la matrice *Laplaciana combinatoria* \mathcal{L} che, come si vedrà, è ovviamente correlata alla matrice L trattata nella sezione 1.1.2. Essa è definita come:

$$\mathcal{L}_{ij} = \delta_{ij} - T_{ij}, \quad (1.29)$$

dove T_{ij} è appunto la matrice di transizione del processo di Markov, mentre δ_{ij} è la *delta di Kronecker*.

Con l'introduzione della Laplaciana combinatoria è possibile esprimere la master equation (1.28) in termini di \mathcal{L} . Ricordando infatti lo sviluppo per piccoli $\Delta t'$ della matrice stocastica T in Eq. (1.23), si può ottenere nel caso di un processo discreto, la relazione

$$T_{ij} = \begin{cases} \pi_{ij}\Delta t' & \text{se } i \neq j \\ 1 - \pi_{ij}\Delta t' & \text{se } i = j. \end{cases} \quad (1.30)$$

In questo modo, per $\Delta t' = 1$, si ottiene la riscrittura della master equation in forma matriciale

$$\dot{p} + \mathcal{L}p = 0, \quad (1.31)$$

come dimostrato nei seguenti passaggi algebrici:

$$\begin{aligned} \dot{p}_k &= \sum_{j \neq i} (\pi_{kj} p_j - \pi_{jk} p_k) = - \sum_{j \neq i} \mathcal{L}_{kj} p_j - p_k \sum_{j \neq i} \pi_{jk} = \\ &= - \sum_{j \neq i} \mathcal{L}_{kj} p_j - p_k = - \sum_{j \neq i} \mathcal{L}_{kj} p_j - \mathcal{L}_{kk} p_k = - \sum_{j=1}^n \mathcal{L}_{kj} p_j, \end{aligned} \quad (1.32)$$

ricordando che $\forall k$ si ha $\sum_{j \neq i} \pi_{jk} = 1$ e $\mathcal{L}_{kk} = 1$.

1.3.1 Stato Stazionario e Bilancio Dettagliato

Una soluzione particolare dell'Eq. (1.28) è data dallo *stato stazionario*, in cui si mantiene un flusso di probabilità costante nello stato i e vale quindi $\dot{p}_i = 0$, da cui l'equazione

$$\sum_{j \neq i} \pi_{ij} p_j^s = p_i^s \sum_{j \neq i} \pi_{ji}. \quad (1.33)$$

È evidente quindi che lo stato stazionario non è nient'altro che autovettore di autovalore 0 della laplaciana combinatoria, in quanto si ha banalmente $\mathcal{L}p^s = 0$.

Una proprietà fondamentale per la master equation (1.31) è la seguente: *nel limite $t \rightarrow \infty$ tutte le soluzioni tendono alla soluzione stazionaria* definita dall'Eq. (1.33).

Tale affermazione verrà dimostrata nel capitolo successivo in maniera fisica, costruendo una funzione entropia che varia in modo monotono, ma al tempo stesso limitata, costretta quindi a tendere ad un valore finito.

Un'asserzione più forte di stato stazionario, rispetto la definizione generale, è data dall'importante relazione

$$\pi_{ij} p_j^s = \pi_{ji} p_i^s, \quad (1.34)$$

detta *condizione di bilancio dettagliato*, in cui il rate di probabilità di transizione $i \rightarrow j$ equivale a quello $j \rightarrow i$. In altre parole, se si suddivide il sistema in varie parti, la condizione di equilibrio di ciascun sottosistema non viene alterata.

È importante sottolineare che l'Eq. (1.34) risulta una condizione necessaria per la *reversibilità* della catena di Markov in Eq. (1.22). Infatti una transizione $i \rightarrow j$ indietro nel tempo è equivalente ad una transizione in avanti $j \rightarrow i$ e quindi, se il processo è reversibile, il tasso con cui la catena va avanti è uguale al tasso con cui va indietro.

Il bilancio dettagliato richiede non solo un equilibrio macroscopico del sistema, ma anche microscopico e risulta un potente strumento utilizzato in meccanica statistica per lo studio dei sistemi fisici all'equilibrio, poiché permette di studiare direttamente le proprietà stazionarie senza che sia necessaria una completa soluzione della dinamica. Infatti per sistemi fisici caratterizzati da un ensemble di processi elementari (collisioni, passi, reazioni) tale condizione diventa un vero e proprio principio il quale afferma che, in condizione di equilibrio, ciascun processo elementare è in equilibrio con il suo processo inverso.

Questa condizione è quindi una conseguenza della *reversibilità microscopica* secondo la quale la dinamica microscopica di un sistema è reversibile nel tempo, in quanto le equazioni del moto che la governano sono simmetriche rispetto l'inversione temporale.

Quando lo stato stazionario di un sistema possiede delle correnti di probabilità interne, sebbene la sua master equation si annulli, la condizione di bilancio dettagliato non è soddisfatta poiché tali correnti rompono la reversibilità temporale della dinamica.

Come si mostrerà successivamente, lo stato stazionario di un sistema per il quale vale la condizione di bilancio dettagliato può essere studiato tramite il *principio di massima entropia*, altrimenti ciò non è possibile ed è necessario procedere con un approccio differente.

1.4 Random Walk

Un random walk è un processo stocastico effettuato da uno o più individui, detti walkers, che partono da un punto qualsiasi fissato e prendono decisioni casuali sulla direzione e sulla lunghezza dei passi, in modo da studiare il comportamento di molti processi in numerosi campi oltre la fisica, come la biologia, l'economia, la chimica e l'ecologia.

In questa trattazione siamo in particolare interessati ai *random walk su network*, cioè ai processi dinamici che si realizzano nel seguente modo: dato un grafo ed un nodo iniziale, si sceglie casualmente un nodo nelle vicinanze e ci si sposta su di esso; poi di nuovo si sceglie casualmente un vicino di quest'ultimo, ci si sposta e così via, fino a realizzare, appunto, una "passeggiata aleatoria" sul network.

Questo metodo è una delle strategie più semplici ma efficaci per esplorare un network e si comprende facilmente che tale random walk corrisponde ad un catena di Markov finita.

Consideriamo inizialmente un caso semplice ma esplicativo: un singolo walker parte da uno specifico nodo del grafo ed effettua t step random. Sia $p_i(t)$ la probabilità nel tempo t che il walker si trovi nel vertice i . Se esso si trova nel vertice j al tempo $t - 1$, la probabilità di fare un passo verso uno dei possibili k_j nodi vicini a j è $1/k_j$; quindi in un network non direzionale abbiamo

$$p_i(t) = \sum_j \frac{A_{ij}}{k_j} p_j(t-1), \quad (1.35)$$

dove k_j ed A_{ij} sono rispettivamente il grado del nodo j e la matrice di adiacenza del grafo, già introdotti nella sezione 1.1. Oppure, in notazione matriciale

$$p(t) = AD^{-1}p(t-1), \quad (1.36)$$

dove D , anch'essa già introdotta, è la matrice diagonale dei gradi del grafo k_i .

Dalla teoria delle catene di Markov, trattata in sezione 1.2.2, si nota subito che la matrice di transizione T corrisponde al prodotto tra le matrici AD^{-1} .

Consideriamo ora il limite per $t \rightarrow \infty$: otteniamo, con abuso di notazione, $p(\infty) = AD^{-1}p(\infty)$ e, modificando algebricamente, tale relazione può essere scritta in termini della matrice laplaciana L come

$$(I - AD^{-1})p = (I - T)p = \mathcal{L}p = (D - A)D^{-1}p = LD^{-1}p = 0. \quad (1.37)$$

dove abbiamo usato la definizione di laplaciana combinatoria in Eq. (1.29), ottenendo la relazione $\mathcal{L} = LD^{-1}$. Dunque il vettore $D^{-1}p$ è autovettore di L di autovalore 0. Nella sezione 1.1.2 si è visto che anche $\vec{1}$ soddisfa la stessa proprietà, per cui si dovrà avere $p_i = ak_i$, dove a è un coefficiente determinato dalla normalizzazione $\sum_j p_j = 1$, da cui otteniamo

$$p_i^s = \frac{k_i}{\sum_j k_j} = \frac{k_i}{2m}. \quad (1.38)$$

La probabilità ottenuta nell'equazione precedente corrisponde allo stato stazionario del processo, denotato con p^s , come facilmente verificabile

$$\sum_j \pi_{ij} p_j^s = \sum_j \frac{A_{ij} k_j}{k_j 2m} = \frac{\sum_j A_{ij}}{2m} = \frac{k_i}{2m}, \quad (1.39)$$

e tale stato coincide proprio con la soluzione stazionaria della master equation poiché vale, come visto sopra, la condizione $\mathcal{L}p^s = 0$.

Lo stato p^s soddisfa anche la condizione di bilancio dettagliato in Eq. (1.34) infatti, poiché si sta trattando un network non direzionale, si ha

$$\pi_{ij} p_j^s = \frac{1}{k_j} \frac{k_j}{2m} = \frac{1}{2m} = \frac{1}{k_i} \frac{k_i}{2m} = \pi_{ji} p_i^s. \quad (1.40)$$

Per quanto visto nella sezione 1.3.1 dunque, il random walk in esame è un processo di Markov reversibile e gode quindi della proprietà di *reversibilità temporale* dello stato stazionario, cioè non è possibile distinguere se il processo sta avvenendo nel verso della freccia del tempo o meno.

1.4.1 Limite "Long-Time"

Dai calcoli precedenti si è visto in modo euristico che, nel caso trattato di random walk su network connesso e non direzionale, la soluzione stazionaria oltre ad essere unica, è il limite per $t \rightarrow \infty$ delle distribuzioni $p_i(t)$. Si vuole dare però una dimostrazione più formale di tale risultato e per farlo si deve effettuare un'analisi spettrale. Si sottolinea che nella seguente dimostrazione si considererà per semplicità un grafo *non bipartito*, in cui l'insieme dei suoi vertici non si può partizionare in due sottoinsiemi tali che ogni vertice di una di queste due parti è collegato solo a vertici dell'altra; sebbene la validità del risultato sia di carattere più generale.

Come noto, la matrice di transizione $T = AD^{-1}$ non è in generale simmetrica, come anche la laplaciana combinatoria \mathcal{L} , e non è quindi possibile fare alcuna considerazione sui suoi autovalori.

Consideriamo tuttavia la matrice N , definita nel seguente modo

$$N = D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}} = D^{-\frac{1}{2}} T D^{\frac{1}{2}}. \quad (1.41)$$

Questa è ovviamente simmetrica, per cui possiamo scrivere la decomposizione spettrale

$$N = \sum_{k=1}^n \lambda_k v_k v_k^T, \quad (1.42)$$

dove $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ sono gli autovalori di N e v_1, v_2, \dots, v_n sono i corrispondenti autovettori ortonormali. Una semplice sostituzione mostra che $w_i = \sqrt{k_i}$ è autovettore di N di autovalore 1. Dal momento che tale autovettore è positivo, dal *teorema di Perron-Frobenius* segue che $1 = \lambda_1 > \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq -1$ e $v_1 = (1/\sqrt{2m})w = \sqrt{p^s}$. Si può inoltre mostrare che per un grafo non bipartito vale la disuguaglianza stretta $\lambda_n > -1$.

Ora si ha

$$T^t = D^{\frac{1}{2}} N^t D^{-\frac{1}{2}} = \sum_{k=1}^n \lambda_k^t D^{\frac{1}{2}} v_k v_k^T D^{-\frac{1}{2}} = Q + \sum_{k=2}^n \lambda_k^t D^{\frac{1}{2}} v_k v_k^T D^{-\frac{1}{2}}, \quad (1.43)$$

dove $Q_{ij} = p_j^s$. In altre parole si avrà

$$T_{ij}^t = p_j^s + \sum_{k=2}^n \lambda_k^t v_{ki} v_{kj} \sqrt{\frac{k_j}{k_i}}. \quad (1.44)$$

Inoltre, se il grafo non è bipartito allora $|\lambda_k| < 1$ per $k = 2, \dots, n$, e di conseguenza

$$T_{ij}^t \xrightarrow{t \rightarrow \infty} p_j^s \quad (1.45)$$

come volevasi dimostrare.

Capitolo 2

Dinamica su Network a Capacità Infinita (ISTC)

2.1 N Particelle Indipendenti su Random Graph

Si vuole simulare la dinamica discussa nel capitolo precedente generalizzandola ad N particelle identiche non interagenti che effettuano un random walk su un network, che supponiamo ormai connesso e non direzionale, a *capacità di storage e trasporto infinita* (ISTC), cioè un network i cui nodi non hanno limitazioni sul numero di particelle che possono contenere ed inviare o ricevere da altri.

Poiché le particelle sono indipendenti abbiamo $\langle N_i(t) \rangle = N p_i(t)$, cioè la master equation in Eq. (1.28) rappresenta in questo caso una dinamica media del sistema, in quanto banalmente si ha

$$\frac{d}{dt} \langle N_i(t) \rangle = \sum_{j \neq i} (\pi_{ij} \langle N_j(t) \rangle - \pi_{ji} \langle N_i(t) \rangle). \quad (2.1)$$

In una situazione generale si considera l'evoluzione dell'intero ensemble di particelle che effettua il random walk sul network $G(n, m)$ o $G(n, p)$. Introducendo infatti lo *stato del network* o *vettore popolazione* $\vec{N} = \{N_i\}$ con $i = 1, \dots, n$, le cui componenti rappresentano il numero di walkers presenti su ogni nodo, si è interessati alla probabilità $P(\vec{N}, t)$ sotto l'ovvia assunzione che lo stato del network dipenda solo da quante particelle sono presenti sui nodi e non da quali (i.e. le particelle sono indistinguibili). Se sono distribuite N particelle sul network, tenendo conto di una dinamica conservativa, si avrà uno spazio degli stati del network definito da

$$\Gamma = \left\{ \vec{N}; \sum_{i=1}^n N_i = N \right\}. \quad (2.2)$$

La derivata temporale di $P(\vec{N}, t)$ dipende dagli scambi elementari ammessi nel network allo stesso istante: assumiamo che per ragioni fisiche solo una particella possa muoversi e che quindi non siano ammessi spostamenti sincroni. Parliamo in tal caso di *processi one-step*, ovvero una speciale classe di processi di markov in cui la probabilità di avere più di uno scambio elementare nel sistema in un tempo $\Delta t \rightarrow 0$ è trascurabile. Introdu-

ciamo allora la coppia di *operatori di creazione e distruzione* E^+ e E^- , definiti nel modo seguente

$$E_i^\pm f(N_1, \dots, N_{i-1}, N_i, N_{i+1}, \dots, N_n) = f(N_1, \dots, N_{i-1}, N_i \pm 1, N_{i+1}, \dots, N_n), \quad (2.3)$$

con cui è possibile ottenere la *One-Step Master Equation*

$$\frac{\partial P(\vec{N}, t)}{\partial t} = \frac{1}{N} \left(\sum_{i,j} \pi_{ij} E_j^+ E_i^- N_j P(\vec{N}, t) - \sum_{i,j} \pi_{ji} N_i P(\vec{N}, t) \right). \quad (2.4)$$

Si noti che il rate di probabilità di uno scambio elementare dal nodo j al nodo i è dato da π_{ij}/N , mentre N_j indica che tale scambio può essere realizzato tante volte quante sono il numero di particelle identiche sul nodo j .

E' importante tuttavia tenere conto che l'applicazione degli operatori E^\pm potrebbe non essere sempre fisicamente ammissibile: se, per esempio, $N_i = 0$ allora considerare $E_i^- N_i$ determinerebbe uno stato non fisico per il nodo i . In tal caso si pone per la distribuzione di probabilità il valore $P(\vec{N}, t) = 0$.

2.1.1 Distribuzione Stazionaria

E' possibile risolvere l'Eq. (2.4) usando gli autovettori \vec{v}^λ e gli autovalori λ della matrice dei rate di transizione π_{ij} . Si ricorda che tale matrice, associata alla struttura del network, ha un autovettore di autovalore $\lambda = 1$ con tutte le componenti positive, il quale corrisponde alla soluzione stazionaria della master equation a meno di una costante di normalizzazione.

Si può dimostrare, per sostituzione diretta, che una funzione del tipo

$$f(\vec{N}, t) = e^{-\beta} \prod_{i=1}^n \frac{(v_i^\lambda)^{N_i}}{N_i!} \quad (2.5)$$

è soluzione della master equation (2.4) se e solo se

$$\beta = 1 - \lambda. \quad (2.6)$$

Considerando allora $\lambda = 1$ otteniamo la distribuzione stazionaria del processo, che risulta essere una *distribuzione multinomiale*

$$P^s(\vec{N}) = N! \prod_{i=1}^n \frac{(v_i^1)^{N_i}}{N_i!}, \quad (2.7)$$

da cui è semplice ricavare la distribuzione marginale sul nodo i , che corrisponde ovviamente ad una *distribuzione binomiale*

$$P^s(N_i) = \sum_{j \neq i} P^s(\vec{N}) = \binom{N}{N_i} (v_i^1)^{N_i} (1 - v_i^1)^{N - N_i} \quad (2.8)$$

con media $\langle N_i \rangle = N v_i^1$ e varianza $\sigma^2(N_i) = N(1 - v_i^1)v_i^1$.

Possiamo valutare nel caso della multinomiale

$$P^s(N_i = 0) = (1 - v_i^1)^N = \left(1 - \frac{\langle N_i \rangle}{N}\right)^N \simeq e^{-\langle N_i \rangle}, \quad (2.9)$$

ovvero la probabilità di avere un nodo con 0 particelle è trascurabile quando $\langle N_i \rangle$ è grande.

Nella condizione nota come *limite termodinamico*, ovvero $N \rightarrow \infty$, $n \rightarrow \infty$ e Nv_i^1 finito, la distribuzione marginale sul nodo i è ben approssimata da una *distribuzione di Poisson*

$$P^s(N_i) = \frac{\mu_i^{N_i}}{N_i!} e^{-\mu_i} \quad \text{con } \mu_i = Nv_i^1. \quad (2.10)$$

La distribuzione stazionaria ci permette di descrivere le proprietà termodinamiche e statistiche del sistema. I valori ottenuti di valor medio e varianza per le distribuzioni marginali implicano che le fluttuazioni attese sulla popolazione all'equilibrio siano dell'ordine di $O(\sqrt{N})$. Ciò è un risultato tipico della *Legge dei Grandi Numeri* e dunque, quando operiamo il limite $N \rightarrow \infty$, otteniamo che la dinamica media coincide con la dinamica di singola particella.

2.1.2 Simulazione del Grafo di Erdos-Renyi

Per cominciare, è necessario trovare un ambiente di lavoro adatto alle particelle per effettuare il random walk su network. Con un programma C++ è stato realizzato un algoritmo di generazione grafi random $G(n, p)$ secondo il modello di Erdos-Renyi, discusso nella sezione 1.1.1.

Il programma realizzato richiede in input dei valori fissati di n e p , dopodiché restituisce il grafo $G(n, p)$ con relativa matrice di adiacenza A_{ij} e matrice diagonale dei gradi $D_{ii} = k_i$, in modo da poter ottenere l'espressione della matrice di transizione T_{ij} e di conseguenza la laplaciana \mathcal{L}_{ij} .

A titolo di esempio, vengono riportati in Fig. 2.1 quattro esempi di grafi random con 50 nodi realizzati, rispettivamente, con probabilità 0.01, 0.2, 0.5, 0.8.

La simulazione realizzata è compatibile con il comportamento atteso del grafo $G(n, p)$ al variare di p . Secondo il lavoro di Erdos e Renyi infatti, considerando n grande fissato ed aumentando p , possiamo distinguere 5 fasi di evoluzione del grafo, riportate brevemente in seguito. Definendo convenzionalmente la *dimensione* di un grafo con m , ovvero il numero dei suoi link, avremo:

- Se $np < 1$, in $G(n, p)$ quasi sicuramente non saranno presenti componenti connesse più grandi di $O(\log(n))$.
- Se $np = 1$, in $G(n, p)$ quasi sicuramente la più grande componente connessa avrà dimensione $O(n^{2/3})$.
- Se $np > 1$, in $G(n, p)$ sarà presente quasi sicuramente un'unica *componente gigante*, contenente gran parte dei nodi della rete, mentre le altre componenti non conterranno più di $O(\log(n))$ vertici.
- Se $p < \frac{\ln n}{n}$, il grafo $G(n, p)$ conterrà quasi sicuramente vertici isolati, risultando quindi disconnesso.

- Se $p > \frac{\ln n}{n}$, il grafo $G(n, p)$ sarà quasi sicuramente connesso.

La scelta si è focalizzata quindi sul network di $n = 50$ nodi e probabilità di linking $p = 0.2$, in quanto si tratta di un valore che riproduce un grafo connesso e al tempo stesso ne permette una rappresentazione grafica non troppo caotica.

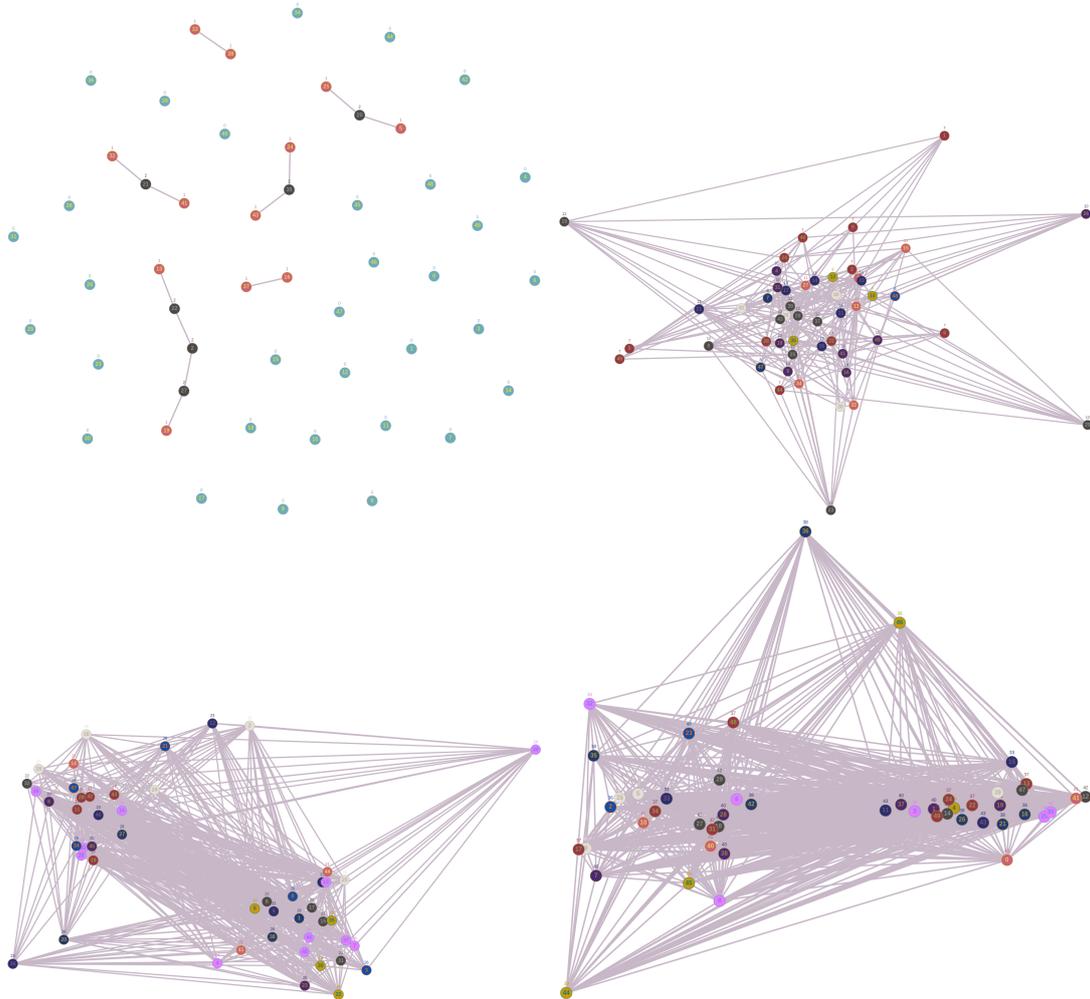


Figura 2.1: Confronto tra grafi random di Erdos-Renyi nella forma $G(n, p)$ con 50 nodi e probabilità di linking, rispettivamente da in alto a sinistra, di 0.01, 0.2, 0.5, 0.8. Il primo grafo è l'unico non connesso, costituito da molte componenti. E' possibile ricavare il numero medio di link per grafo $\langle m \rangle$ di 12, 245, 612, 980, e il valor medio di gradi del nodo $\langle k \rangle$ di 1/2, 10, 25, 39, rispettivamente.

2.1.3 Simulazione della Master Equation

Quando si vuole simulare un random walk su network, bisogna tenere conto che si tratta di un processo discreto nel tempo: ad ogni istante i walkers prendono contemporaneamente una decisione casuale, basandosi solamente sulla matrice di transizione $T = AD^{-1}$.

Operando il limite termodinamico, come discusso precedentemente, è possibile approssimare correttamente l'andamento delle popolazioni sui nodi tramite la master equa-

tion (1.31), considerando il tempo continuo. Da un punto di vista analitico, la soluzione di tale equazione può essere scritta tramite l'esponenziale di matrice della laplaciana combinatoria \mathcal{L} come

$$p(t) = e^{\mathcal{L}t}p(0), \quad (2.11)$$

ovvero come combinazione lineare dei suoi autovettori v_i di autovalore λ_i

$$p(t) = \sum_{k=1}^n c_k e^{-\lambda_k t} v_k. \quad (2.12)$$

Nel caso che si sta trattando, \mathcal{L} è per costruzione una matrice con autovalori positivi tranne uno nullo, corrispondente come già visto alla soluzione stazionaria in Eq. (1.38). Tutti gli altri addendi della sommatoria quindi contribuiscono alla soluzione con termini esponenziali decrescenti nel tempo, destinati ad annullarsi per tempi lunghi. Definiamo in particolare l'autovalore più piccolo tra i positivi come *tempo di rilassamento*, poiché corrisponde appunto al termine che si "spegne" per ultimo prima del raggiungimento dello stato stazionario.

Viene riportata in Fig. 2.2 la soluzione della master equation (1.31) per N particelle non interagenti sul network $G(n = 50, p = 0.2)$, ottenuta con il *metodo di Runge-Kutta 4* (RK4). Dal programma realizzato precedentemente è infatti nota la matrice \mathcal{L} del grafo su cui si effettua il random walk, dipendente solo dalla topologia del network. Si ha quindi tutto il necessario per risolvere la master equation, consistente in un set di n equazioni differenziali del primo ordine, senza dipendenza esplicita dal tempo. La condizione iniziale assegnata al problema è data da una popolazione media equamente distribuita su ogni nodo e si nota che la frazione di walker su ogni nodo $p_i(t)$ converge verso uno stato stazionario, come discusso per il random walk di singola particella in sezione 1.4.

È possibile calcolare il tempo di rilassamento del sistema andando a sottrarre a ciascuna soluzione della master equation di un generico nodo i il corrispondente stato stazionario, cioè $\Delta p_i(t) = |p_i(t) - p_i^s|$, e sommando tali contributi; dopodiché è sufficiente effettuare un fit esponenziale ai dati, facendo attenzione al fatto che il campionamento debba iniziare in un istante sufficientemente grande da fare spegnere tutti gli altri contributi della soluzione di Eq. (2.12).

In Fig. 2.3 viene riportato il fit esponenziale effettuato alla somma delle $\Delta p_i(t)$ di ogni nodo del network. Il fit è in ottimo accordo con i dati ed è possibile ricavare da questo il tempo di rilassamento del sistema.

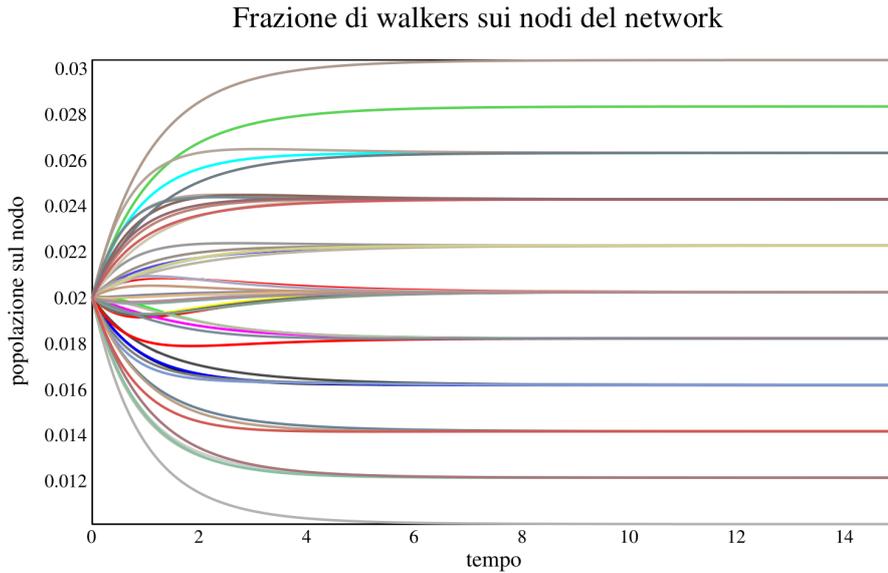


Figura 2.2: Soluzione della master equation per N particelle non interagenti su network ISTC di tipo $G(n = 50, p = 0.2)$. Ogni curva colorata rappresenta l'andamento della popolazione media (normalizzata) nel tempo (unità arbitrarie) su ogni diverso nodo del network. la condizione iniziale è data da $p_i(0) = 1/50, \forall i$, ed è ben visibile la convergenza verso lo stato stazionario.

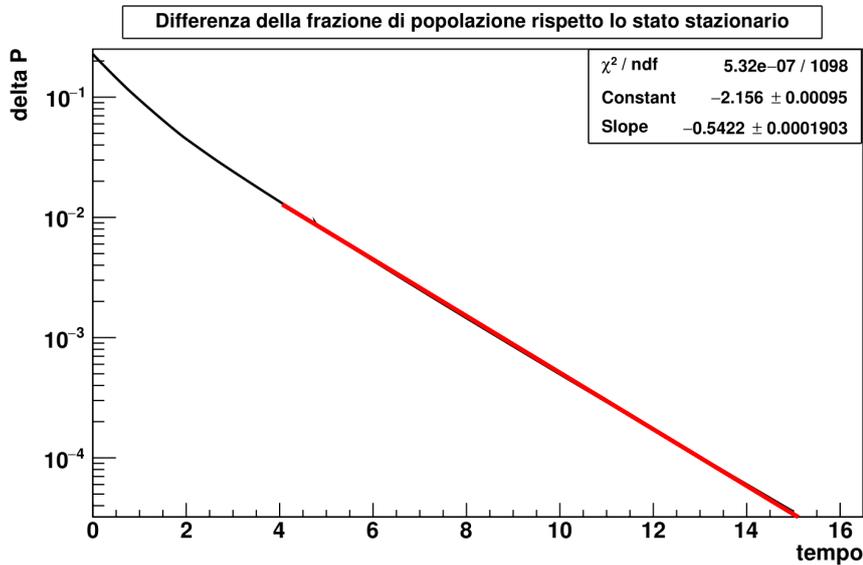


Figura 2.3: Andamento nel tempo della somma in modulo delle differenze $\Delta p_i(t) = |p_i(t) - p_i^s|$ delle frazioni di popolazione sui nodi rispetto lo stato stazionario con relativo fit esponenziale (scala logaritmica). Il grafico, realizzato con il framework *ROOT* in C++, mostra un perfetto accordo tra dati della simulazione e il fit, come si può vedere dal χ^2 ridotto in figura. Dal fit è possibile inoltre ottenere l'autovalore che definisce il tempo di rilassamento: si ottiene $\lambda_{relax} = (0.5422 \pm 0.0001)$.

2.2 Un Esempio: Network a 4 Nodi

Come già discusso precedentemente, c'è una differenza sostanziale tra la simulazione del random walk su network e la soluzione della master equation: nel primo caso si sta trattando un sistema stocastico con variabile temporale discreta, mentre nel secondo caso abbiamo un campo medio a tempo continuo.

Si vuole allora lavorare su un network semplice, riportato in Fig. 2.4, per simulare un vero e proprio random walk e confrontarlo con la soluzione della master equation precedente, ma anche per verificare il corretto funzionamento dell'algoritmo realizzato, avendo sotto controllo tutte le matrici del network.

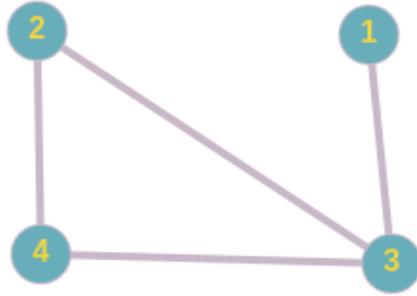


Figura 2.4: Schema grafico del network studiato a 4 nodi e 4 link.

Si riportano in seguito la matrice di adiacenza A e la matrice diagonale dei gradi D del grafo

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

da cui si può ottenere la matrice di transizione T e la laplaciana combinatoria \mathcal{L}

$$T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 & 1/2 \\ 1 & 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 1/3 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathcal{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1/3 & 0 \\ 0 & 1 & -1/3 & -1/2 \\ -1 & -1/2 & 1 & -1/2 \\ 0 & -1/2 & -1/3 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Diagonalizzando la matrice \mathcal{L} e calcolando l'autovettore stazionario p^s di autovalore nullo si ottiene

$$\lambda = \{0 \quad 0.771 \quad 1.5 \quad 1.729\} \quad p^s = (1/8 \quad 2/8 \quad 3/8 \quad 2/8), \quad (2.15)$$

da cui otteniamo l'espressione analitica del tempo di rilassamento $\lambda_{relax} = 0.771$, che dovrà essere confrontata con il modello numerico.

Si può quindi procedere a ripetere l'algoritmo di Runge-Kutta per la risoluzione della master equation sul network in questione, per poi calcolare il tempo di rilassamento del sistema, in completa analogia con la simulazione nel paragrafo precedente.

Nelle figure 2.5 e 2.6 si riportano, rispettivamente, l'andamento della frazione di popolazione sui nodi del grafo e il fit esponenziale per il calcolo del tempo di rilassamento.

Ad ogni nodo è stata assegnata una condizione iniziale diversa, diversamente dalla simulazione precedente, e si nota che tutte e 4 le curve tendono precisamente ai valori stazionari definiti dalla soluzione p^s in Eq. (2.15). Il tempo di rilassamento del sistema, ricavato dal fit esponenziale, è ragionevolmente compatibile con il valore analitico. Tali considerazioni mostrano quindi un corretto funzionamento della simulazione realizzata.

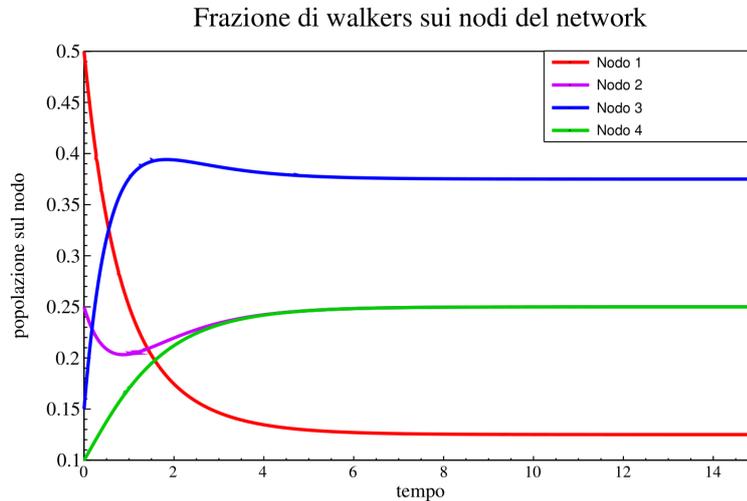


Figura 2.5: Soluzione della master equation per N particelle non interagenti sul network a 4 nodi considerato. Ogni curva rappresenta l'andamento della popolazione media (normalizzata) nel tempo su ogni diverso nodo del network. A ciascun nodo è assegnata una condizione iniziale differente, definita da $p(0) = (0.5, 0.25, 0.15, 0.1)$. La soluzione riproduce esattamente i valori dello stato stazionario p^s trovati analiticamente.

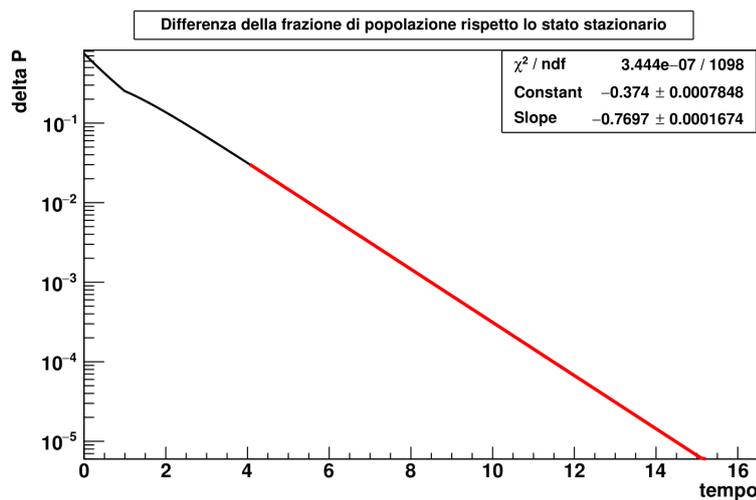


Figura 2.6: Andamento nel tempo della somma in modulo delle differenze $\Delta p_i(t) = |p_i(t) - p_i^s|$ delle frazioni di popolazione sui nodi rispetto lo stato stazionario con relativo fit esponenziale (scala logaritmica). Oltre all'ottimo accordo dei dati con il fit, determinato dal χ^2 ridotto, si ottiene una buona compatibilità tra il tempo di rilassamento della simulazione $\lambda_{relax}^{exp} = (0.7697 \pm 0.0002)$ e quello analitico $\lambda_{relax} = 0.771$.

In Fig. 2.7 si simula il random walk per 100 e 10000 walkers indipendenti che effettuano 100 passi. Dal confronto tra i grafici si nota molto chiaramente che un grande numero di particelle sui nodi del network permette di trascurare le fluttuazioni all'equilibrio del sistema: in tal caso infatti l'andamento del random walk si stabilizza intorno ai valori dello stato stazionario p^s trovati analiticamente. Viceversa, diminuendo il numero di particelle sui nodi del network, le fluttuazioni diventano sempre più rilevanti e la dinamica media descritta dalla master equation non è più in grado di rispecchiare l'andamento reale del sistema.

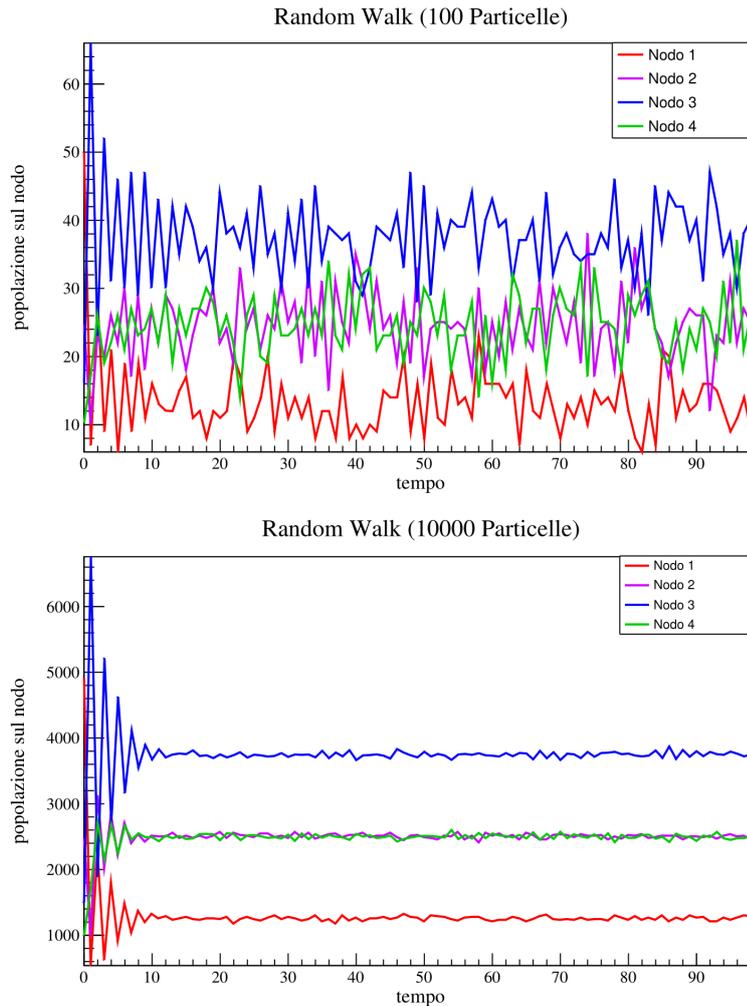


Figura 2.7: Random Walk di 100 passi per 100 particelle (sopra) e 10000 particelle (sotto) non interagenti sul network a 4 nodi considerato. Ciascun set di dati colorato rappresenta la popolazione ad ogni step su ciascun nodo del network. Le frazioni di walkers sui nodi all'inizio della simulazione sono rispettivamente 0.5, 0.25, 0.15, 0.1. Si nota che nel caso di 100 particelle le fluttuazioni assumono un carattere rilevante nella descrizione della dinamica, mentre nel caso di 10000 particelle si nota bene una convergenza allo stato stazionario p^s ottenuto analiticamente.

I risultati ottenuti per questo semplice network ci forniscono un'importante considerazione: la master equation (1.28) permette di analizzare fedelmente lo stato stazionario

e il tempo di rilassamento del network, ma risulta molto più approssimativa per quanto riguarda l'analisi dei transienti, oltre a non tener conto delle fluttuazioni attorno al valore medio, trattate nel paragrafo successivo.

2.3 Entropia

Si vuole mostrare che la soluzione della master equation (1.31) tende alla soluzione stazionaria per tempi sufficientemente lunghi. Si vuole in particolare provare ciò in termini mecano-statistici, con la costruzione di una funzione che definiamo *entropia* per motivi che saranno ovvi in seguito.

E' necessario premettere che tale dimostrazione, sebbene rilevante per la sua interpretazione fisica, risulta limitata rispetto ad altre, poiché si deve supporre a priori l'esistenza di una soluzione stazionaria normalizzata e positiva ovunque. Ciò è sicuramente vero per i sistemi fisici isolati e chiusi, per i quali è valida anche la condizione di bilancio dettagliato, dove la soluzione stazionaria della master equation coincide con quella di equilibrio, che indicheremo con p^e .

Si prenda un'arbitraria funzione convessa non negativa $f(x)$ definita per x positivi:

$$0 \leq x < \infty, \quad f(x) \geq 0, \quad f''(x) > 0. \quad (2.16)$$

Si definisca una quantità H come

$$H(t) = \sum_i p_i^e f\left(\frac{p_i(t)}{p_i^e}\right) = \sum_i p_i^e f(x_i), \quad (2.17)$$

con $p_i(t)$ soluzione della master equation, p_i^e soluzione di equilibrio e x_i indica per semplicità il rapporto p_i/p_i^e . Chiaramente $H(t) \geq 0$ e

$$\frac{dH(t)}{dt} = \sum_{i \neq j} f'(x_i)(\pi_{ij}p_j - \pi_{ji}p_i) = \sum_{i \neq j} \pi_{ij}p_j^e \{x_j f'(x_i) - x_j f'(x_j)\}. \quad (2.18)$$

Ora per un arbitrario set di numeri ψ_i si verifica facilmente l'identità

$$\sum_{i \neq j} \pi_{ij}p_j^e (\psi_i - \psi_j) = 0. \quad (2.19)$$

Scegliendo $\psi_i = f(x_i) - x_i f'(x_i)$ e aggiungendo tale risultato all'Eq. (2.18) si ottiene

$$\frac{dH(t)}{dt} = \sum_{i \neq j} \pi_{ij}p_j^e \{(x_j - x_i)f'(x_i) + f(x_i) - f(x_j)\}. \quad (2.20)$$

E' semplice mostrare che per ogni funzione convessa f il fattore $\{\dots\}$ è negativo eccetto per $x_i = x_j$. La conclusione è che $H(t)$ decresce in modo monotono.

Dato che decresce ma non può essere negativa, $H(t)$ deve tendere ad un limite. In tale limite l'Eq. (2.20) deve annullarsi: ciò è possibile se $x_i = x_j$ per tutte le coppie di stati i, j per la quale $\pi_{ij} \neq 0$. Questo implica che ciascun x_j è uguale a tutti gli x_i che possono essere collegati da una probabilità di transizione non nulla. Allora, in base alle proprietà della matrice dei rate di transizione π_{ij} , si hanno due possibilità: o i copre

tutti gli stati, oppure copre un sottoinsieme di questi non connesso da probabilità di transizione non nulla a nessuno degli stati fuori da tale sottoinsieme. Nel primo caso, $p_i(\infty)$ risulta proporzionale a p_i^e , ma a causa della normalizzazione richiesta tali valori devono coincidere, portandoci al risultato richiesto. Nel secondo caso si è alle prese con una matrice Laplaciana \mathcal{L}_{ij} decomponibile, ed è quindi possibile affermare semplicemente che $p_i(\infty)$ è proporzionale a p_i^e dentro il sottoinsieme, mentre nei diversi sottoinsiemi si potrebbero avere diverse costanti di proporzionalità.

E' possibile dare un importante significato fisico alla funzione $f(x)$ scegliendo

$$f(x) = x \log x, \quad H = \sum_i p_i \log \frac{p_i}{p_i^e}, \quad (2.21)$$

la quale è limitata inferiormente ed ha due proprietà aggiuntive peculiari. La prima è che questa particolare forma di H può essere usata per dimostrare la convergenza all'equilibrio nel caso dell'*equazione di Boltzmann per il trasporto*, un'importante equazione della meccanica statistica che descrive il comportamento statistico di un sistema nello stato di non equilibrio termodinamico.

La seconda proprietà è data dal fatto che in questa forma H diventa una quantità *additiva*.

Tali proprietà ci permettono di definire un'*entropia generalizzata*

$$S = -kH + S^e, \quad (2.22)$$

dove k è una costante dimensionale e S^e è l'entropia all'equilibrio o termodinamica del sistema, indipendente da p_i . Infatti per $p_i = p_i^e$ la funzione H si annulla e dunque si ha $S = S^e$.

H quindi non è nient'altro che la differenza di entropia tra lo stato di equilibrio e di non equilibrio.

2.3.1 Principio di Massima Entropia su Network ISTC

Nel caso di un random walk su network, una popolazione di N walkers si muove negli n nodi del network fino a raggiungere l'equilibrio. Come già visto, in questo stato le popolazioni dei singoli nodi sono simili al loro valore medio se stiamo lavorando con un grande numero di particelle, ma è importante tenere conto delle piccole deviazioni che si verificano, chiamate fluttuazioni. Lo studio delle fluttuazioni consiste nel trovare la distribuzione delle probabilità di queste deviazioni rispetto al valore medio.

Si è già mostrato che la distribuzione stazionaria per un network ISTC corrisponde ad una multinomiale, descritta in Eq. (2.7). E' possibile studiare il sistema anche da un punto di vista mecano-statistico, derivando tale distribuzione dal *Principio di Massima Entropia*, secondo il quale un sistema isolato evolve verso lo stato di equilibrio, in cui la sua entropia è massima. La possibilità di applicare tale principio è strettamente legata alla validità del bilancio dettagliato, discussa nella sezione 1.3.1, poiché sotto tale condizione la soluzione stazionaria del sistema coincide con quella di equilibrio.

Nel caso del random walk di singola particella, trattata in sezione 1.4, la condizione di bilancio dettagliato è banalmente soddisfatta. Per quanto riguarda N particelle non interagenti su network ISTC ci aspettiamo che nulla cambi rispetto il caso visto precedentemente, poiché l'indipendenza delle N particelle, non soggette a limitazioni dovute

al network, assicura l'indipendenza degli N random walks e di conseguenza la condizione di bilancio dettagliato sui link.

Possiamo allora procedere all'ottenimento della distribuzione stazionaria considerando l'*entropia di Gibbs*, funzionale della distribuzione di probabilità $P(\vec{N})$, definita come

$$\mathcal{S}_G[P] = - \sum_{\vec{N} \in \Gamma} P(\vec{N}) \log P(\vec{N}), \quad (2.23)$$

dove Γ è lo spazio degli stati definito in Eq. (2.2), e denotiamo con P^s la distribuzione all'equilibrio che si vuole trovare. Dato che P^s deve sottostare a dei vincoli, si useranno i *moltiplicatori di Lagrange* per determinarla.

Le particelle in ciascun nodo sono indistinguibili una dall'altra, quindi considerando permutazioni di particelle sul nodo la popolazione \vec{N} del network non varia. Ciò significa che P^s deve tenere conto di tutti i modi con cui uno stato del network può essere ottenuto, che viene chiamato *peso statistico* $w(\vec{N})$ dello stato \vec{N} del network. Ora, l'indipendenza tra le popolazioni dei nodi e l'indistinguibilità delle particelle ci permette di scrivere

$$w(\vec{N}) = \frac{N!}{\prod_{i=1}^n N_i!}, \quad (2.24)$$

e dunque, poiché per definizione l'entropia di Gibbs è calcolata mediando il logaritmo della probabilità di un microstato su tutti i possibili microstati, si riscrive l'entropia di un network come

$$\mathcal{S}_G[P] = - \sum_{\vec{N} \in \Gamma} P(\vec{N}) \log \left(\frac{P(\vec{N})}{w(\vec{N})} \right). \quad (2.25)$$

I vincoli considerati corrispondono ad avere un numero medio di particelle finito su ciascun nodo

$$\langle N_i \rangle = \sum_{\vec{N} \in \Gamma} N_i P(\vec{N}), \quad (2.26)$$

per cui avremo bisogno di n moltiplicatori μ_i per poter massimizzare \mathcal{S}_G . Variando la distribuzione di probabilità P si ha quindi

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{S}_G &= - \sum_{\vec{N} \in \Gamma} \delta \left\{ P(\vec{N}) \log \left(\frac{P(\vec{N})}{w(\vec{N})} \right) - \sum_{i=1}^n \mu_i N_i P(\vec{N}) \right\} \\ &= - \sum_{\vec{N} \in \Gamma} \delta P(\vec{N}) \left\{ \log \left(\frac{P(\vec{N})}{w(\vec{N})} \right) - \sum_{i=1}^n \mu_i N_i \right\} = 0, \end{aligned} \quad (2.27)$$

dove abbiamo usato $\sum_{\vec{N} \in \Gamma} P(\vec{N}) = 1$ dunque $\sum_{\vec{N} \in \Gamma} \delta P(\vec{N}) = 0$.

Si ottiene allora la distribuzione delle popolazioni sui nodi all'equilibrio

$$P^s(\vec{N}) \propto w(\vec{N}) \exp \left(- \sum_{i=1}^n \mu_i N_i \right), \quad (2.28)$$

ed identificando $\mu_i = -\log(v_i^1) = -\log(\langle N_i \rangle / N)$, riotteniamo la distribuzione multinomiale ottenuta in Eq. (2.7).

In Fig. 2.8 si grafica la distribuzione marginale all'equilibrio delle particelle mediata su tutti i nodi del network ITSC di Erdos $G(n = 50, p = 0.2)$, durante il random walk. La distribuzione ottenuta risulta, come atteso, monomodale con fluttuazioni intorno al valor medio, confermando quanto discusso finora.

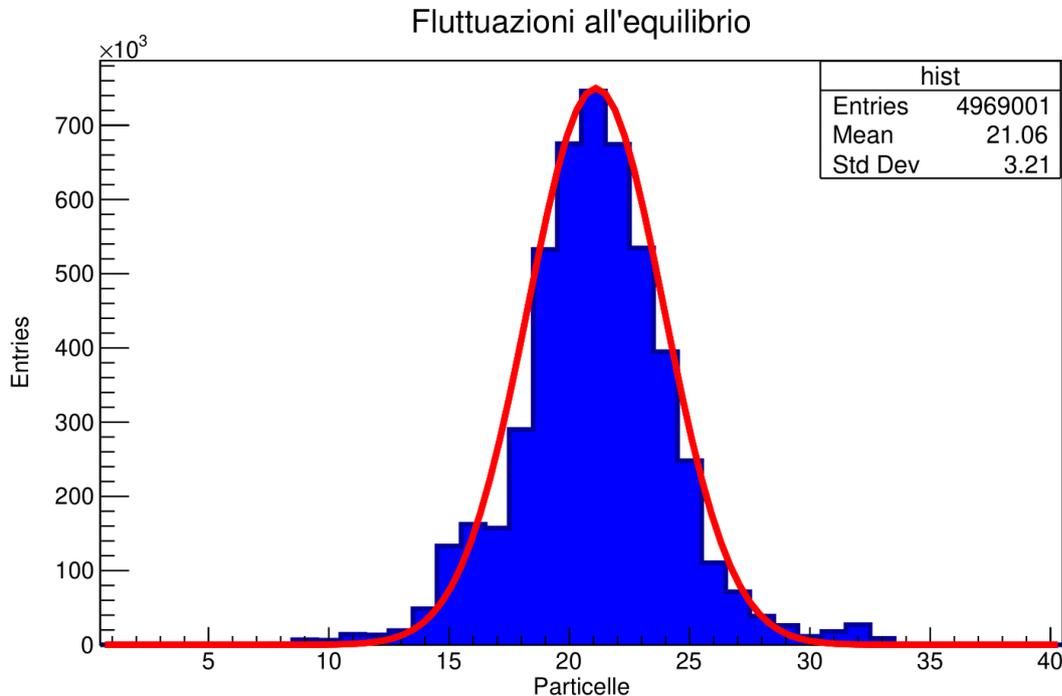


Figura 2.8: Distribuzione della popolazione mediata su tutti i nodi del random graph all'equilibrio. Per riempire l'istogramma creato con *ROOT* è stato effettuato un random walk per 1000 particelle non interagenti, di 5000 passi, trascurando i primi step di transizione. Il relativo fit gaussiano conferma la distribuzione dei dati in modo monomodale.

2.4 Relazioni Reciproche di Onsager

Sembra intuitivamente ragionevole che il principio variazionale di Gibbs che determina la condizione di equilibrio possa essere generalizzato a condizioni di non equilibrio: in tal caso uno stato stazionario di non equilibrio dovrebbe rendere costante la produzione di una certa entropia generalizzata.

Tra i progressi più importanti verso questo obiettivo sono presenti i lavori del fisico Lars Onsager, fondamentali per lo studio della termodinamica dei processi irreversibili e premiati con il premio Nobel per la chimica nel 1968.

La termodinamica dei processi irreversibili fonda le sue radici nell'analisi della termocoppia, da parte di Thomson nel 1854. Per effetto del trasporto di una carica q lungo un circuito, egli assunse di applicare semplicemente il principio di Carnot nella forma $\sum Q_i/T_i = 0$ all'effetto Peltier, fenomeno termoelettrico di natura reversibile per cui una corrente elettrica produce trasferimento di calore, sebbene fosse presente anche una conduzione di calore irreversibile. La sua assunzione andò oltre la termostatica ed indi-

viduò, a causa dell'interazione tra flusso di calore e corrente elettrica, il primo esempio di una *relazione reciproca di Onsager*. Nel 1931 molte di queste relazioni furono notate, e Onsager ricercò una giustificazione teorica ad esse. In seguito si riporta brevemente la sua argomentazione, costituita da quattro assunzioni.

Consideriamo un sistema chiuso caratterizzato da certi parametri a_1, \dots, a_n definiti in modo da annullarsi nello stato di equilibrio a massima entropia. Allora in un intorno di tale stato possiamo espandere l'entropia come

$$S = S^e - 1/2 \sum_{i,j} G_{ij} a_i a_j + \dots, \quad (2.29)$$

dove G è una matrice definita positiva e simmetrica, $G = G^T$. Il sistema è allontanato dall'equilibrio in modo non specificato, poi rilasciato per poter tornare in tale condizione. Allora le derivate

$$\gamma_i = \frac{\partial S}{\partial a_i} = - \sum_j G_{ij} a_j \quad (2.30)$$

si possono considerare come *forze entropiche* o *termodinamiche* che riportano il sistema all'equilibrio. La prima assunzione di Onsager consiste nel considerare una relazione tra tali forze e i flussi dei parametri che definiscono il sistema:

$$\dot{a}_i = \sum_j \mathcal{L}_{ij} \gamma_j \quad (2.31)$$

dove \mathcal{L}_{ij} sono i *coefficienti fenomenologici di Onsager*. Dunque il rilassamento dei parametri a avviene lungo la traiettoria definita da $\dot{a} = -\mathcal{L}Ga$, con soluzione

$$a(t + \tau) = e^{-\mathcal{L}G\tau} a(t), \quad \tau > 0. \quad (2.32)$$

Spostiamoci ora nello stato di equilibrio ed esaminiamo le piccole fluttuazioni intorno ai parametri a . Se si postula che la stessa entropia $S(a_i)$, oltre a generare le forze, individua anche la distribuzione di probabilità di tali fluttuazioni, si ottiene la seconda assunzione:

$$P(a_1, \dots, a_n) \propto \exp(k^{-1} S(a_i)) \quad (2.33)$$

dove k è la costante di Boltzmann. Per ipotesi di lavoro abbiamo $\langle a_i \rangle = 0$, mentre la matrice di covarianza $K_{ij} = \langle a_i a_j \rangle$ corrisponde, a meno della costante k , all'inversa della matrice G , $KG = GK = kI$; K_{ij} indica quanto lontano, ma non quanto velocemente, si attende che gli a_i fluttuino intorno allo 0.

La terza assunzione si può considerare nel modo seguente: la regressione media di queste fluttuazioni spontanee segue la stessa legge assunta per le deviazioni forzate dall'equilibrio (2.32). Quindi, dato l'evento $a(t)$, la media di $a(t + \tau)$ dopo un tempo τ , su molte ripetizioni dell'evento sarà

$$\langle a(t + \tau) \rangle = e^{-\mathcal{L}G\tau} a(t), \quad \tau > 0. \quad (2.34)$$

Con questa considerazione, possiamo definire una matrice di covarianza dipendente dal tempo

$$K_{ij}(\tau) = \langle\langle a_i(t + \tau)a_j(t) \rangle\rangle \quad (2.35)$$

dove la doppia media è calcolata prima sulle diverse ripetizioni e poi sulla distribuzione (2.33). Inserendo Eq. (2.34) nella precedente, otteniamo che la matrice K_{ij} deve a sua volta decadere esponenzialmente

$$K(\tau) = e^{-\mathcal{L}G\tau} K(0) = K(0)e^{-G\mathcal{L}\tau}, \quad \tau > 0. \quad (2.36)$$

dove $K(0) = kG^{-1}$, e si è usata l'identità $f(\mathcal{L}G)G^{-1} = G^{-1}f(G\mathcal{L})$. Inoltre vale la relazione $K(-\tau) = K^T(\tau)$, o equivalentemente

$$K(-\tau) = K(0)e^{-G\mathcal{L}^T\tau}, \quad (2.37)$$

sapendo che è valida l'identità $f^T(\mathcal{L}G) = f(\mathcal{L}^TG^T)$.

Finalmente consideriamo la quarta e più importante assunzione, che Onsager stesso chiamò *reversibilità microscopica* all'equilibrio

$$K(-\tau) = K(\tau), \quad (2.38)$$

secondo la quale non è possibile distinguere se le fluttuazioni all'equilibrio stanno seguendo la freccia del tempo o meno, in quanto le equazioni del moto che le governano sono invarianti temporalmente.

Dall'ultima assunzione si ottiene l'importantissimo risultato di simmetria dei coefficienti fenomenologici di Onsager

$$\mathcal{L}_{ij} = \mathcal{L}_{ji}. \quad (2.39)$$

Continuando l'esempio della termocoppia trattato inizialmente, la reciprocità di Onsager negli effetti termoelettrici si manifesta nell'uguaglianza tra i coefficienti dell'effetto Peltier (flusso di calore causato da una differenza di potenziale) e del suo opposto effetto Seebeck (corrente elettrica generata da una differenza di temperatura), sebbene si tratti in entrambi i casi di processi irreversibili.

2.4.1 Derivazione delle Relazioni dalla Master Equation

Come visto precedentemente, le relazioni di Onsager possono essere derivate dall'assunzione della reversibilità microscopica. Si vuole mostrare dunque che tali relazioni possono essere ottenute direttamente da una master equation per un processo di Markov reversibile. Come già discusso infatti, la reversibilità di un processo di Markov implica una condizione di bilancio dettagliato nel sistema in esame.

Consideriamo la master equation di campo medio (1.28) che descrive, sotto l'opportuno limite termodinamico, il comportamento di un random walk di N particelle indipendenti su network privo di vincoli sulle varie capacità.

Ad un certo istante t , lo stato statistico del sistema è determinato dalle probabilità p_1, \dots, p_n , o equivalentemente, fornendo i corrispondenti valori medi di $n - 1$ quantità fisiche indipendenti q^1, \dots, q^{n-1} . Se q_i^k denota il valore della quantità q^k quando il sistema si trova nello stato i , allora il valore medio di q^k è

$$\langle q^k \rangle = \sum_i q_i^k p_i. \quad (2.40)$$

Ponendosi nelle vicinanze di uno stato di equilibrio si ha $p_i = p_i^e + \delta p_i$, con $p_i^e = k_i/2m$ per il network considerato, da cui possiamo scrivere le fluttuazioni di q^k intorno il suo valore medio

$$y^k = \sum_i q_i^j p_i - \sum_i q_i^k \frac{k_i}{2m} = \sum_i q_i^k \delta p_i. \quad (2.41)$$

In generale è possibile esprimere in forma equivalente la master equation (1.28), utilizzando gli osservabili q^j , più utili e fisicamente importanti rispetto le probabilità p_i :

$$\frac{d}{dt} \langle q^j \rangle = \left\langle \frac{\partial q^j}{\partial t} \right\rangle + \sum_{i,j} p_i(t) \pi_{ij} (q_j^k - q_i^k). \quad (2.42)$$

Da questa è possibile scrivere l'equazione di evoluzione delle fluttuazioni, ma per scriverla nel modo più semplice è opportuno ridurre in forma simmetrica la matrice dei rate di transizione π_{ij} . Ciò è assicurato dalla validità del bilancio dettagliato in quanto

$$\frac{\pi_{ij}}{\pi_{ji}} = \frac{p_i}{p_j} = \frac{k_i}{2m} \frac{2m}{k_j} = \frac{k_i}{k_j}, \quad (2.43)$$

e ci permette quindi di operare la trasformazione

$$\pi_{ij} \longrightarrow \tilde{\pi}_{ij} = (D^{-\frac{1}{2}} T D^{\frac{1}{2}})_{ij} = \frac{A_{ij}}{\sqrt{k_i k_j}}, \quad (2.44)$$

che rende la nuova matrice $\tilde{\pi}$ simmetrica, $\tilde{\pi}_{ij} = \tilde{\pi}_{ji}$.

Le fluttuazioni evolvono quindi secondo l'equazione

$$\frac{d}{dt} y^k = \frac{d}{dt} \langle q^k \rangle = \sum_{i,j} \delta p_i \tilde{\pi}_{ij} (q_j^k - q_i^k). \quad (2.45)$$

L'entropia di Gibbs per il sistema in analisi si scrive semplicemente come

$$S(t) = - \sum_i p_i(t) \log p_i(t), \quad (2.46)$$

da cui, approssimandola alla sua forma quadratica, si ottiene

$$S = - \sum_i p_i^e \log p_i^e - \sum_i \frac{(\delta p_i)^2}{2p_i^e}, \quad (2.47)$$

e la sua derivata temporale diventa

$$\frac{d}{dt} S = - \sum_i \frac{\delta p_i}{p_i^e} \frac{d}{dt} \delta p_i. \quad (2.48)$$

Per rendere evidenti le relazioni di Onsager è necessario introdurre le *forze termodinamiche* γ^k , in modo che la forma approssimata dell'entropia vicino l'equilibrio assuma la sua forma fenomenologica

$$\frac{d}{dt}S = \sum_k \gamma^k \frac{d}{dt}y^k = \sum_k \sum_i \gamma^k q_i^k \frac{d}{dt}\delta p_i. \quad (2.49)$$

Eguagliando l'espressione precedente con l'Eq. (2.48) si ottiene la variazione δp_i in funzione delle forze termodinamiche γ^k

$$\delta p_i = -p_i^e \sum_k \gamma^k q_i^k + \lambda \quad (2.50)$$

dove λ è una costante determinata dalla condizione $\sum_i \delta p_i = 0$. Allora l'equazione di evoluzione delle fluttuazioni diventa

$$\frac{d}{dt}y^k = \sum_{i,j} p_i^e \sum_l \gamma^l q_i^l \tilde{\pi}_{ij} (q_i^k - q_j^k) = \sum_l \gamma^l \mathcal{L}_{lk}. \quad (2.51)$$

dove i coefficienti fenomenologici di Onsager \mathcal{L}_{lk} valgono

$$\mathcal{L}_{lk} = \sum_{i,j} p_i^e \tilde{\pi}_{ij} (q_i^l q_i^k - q_i^l q_j^k), \quad (2.52)$$

e risultano simmetrici, $\mathcal{L}_{lk} = \mathcal{L}_{kl}$, portandoci al risultato richiesto.

Capitolo 3

Dinamica su Network a Capacità Finita (q-FSC+1-FTC)

3.1 Introduzione di Vincoli sulla Capacità

Fino a questo punto abbiamo assunto che la dinamica di ciascuna particella sul network fosse indipendente dalle altre. Un altro modo di intendere tale indipendenza è l'assenza di un qualsiasi tipo di limite sulla capacità su ciascun nodo del network, ovvero probabilità di transizione indipendenti dallo stato della rete.

Tuttavia, per modellizzare effetti di congestione, si è interessati alla dinamica di particelle su network in cui lo stato del nodo gioca un ruolo rilevante, in quanto la matrice del rate di transizione π_{ij} ha una dipendenza funzionale da quest'ultimo. Per esempio una strada può permettere il passaggio solo di una quantità finita di veicoli alla volta e allo stesso tempo un parcheggio può ospitare un numero finito di vetture, mostrando che per modellare matematicamente tali fenomeni è necessario tenere conto di una qualche capacità finita del network.

Introducendo quindi dei vincoli sulla capacità, le master equation trattate fino ad ora non sono più corrette ed è necessario effettuare delle opportune modifiche. Nella seguente trattazione assumeremo in particolare:

- *capacità di trasporto finita* e fissata ad 1: in un dato istante solo una particella alla volta può attraversare il link che collega due nodi. In tal caso la variazione di particelle su un generico nodo i è contenuta nel range $[-1, k_i]$, con k_i grado del nodo.
- *capacità di storage finita* con valore massimo q : per un generico nodo i il numero di particelle su di esso sarà contenuto necessariamente nel range $N_i \in [0, q]$. Se $N_i = 0$ allora i non può scambiare particelle con i suoi vicini ma solo essere un ricevitore; d'altra parte se $N_i = q$ esso non può ricevere finché una qualsiasi particella non esca da tale nodo.
- *processo one-step*: in un intervallo temporale infinitesimo avviene un solo scambio elementare nel sistema, assunzione già trattata nella sezione precedente.

Operare con vincoli sulla capacità significa che è necessario tenere traccia dello stato del nodo ad ogni istante t . Per cominciare si utilizza la funzione *Theta di Heaviside* che ci permette di tenere conto dei due limiti sulla capacità; per il limite inferiore si ha

$$\theta(N_i) = \begin{cases} 1 & \text{se } N_i \geq 0 \\ 0 & \text{altrimenti,} \end{cases} \quad (3.1)$$

mentre per il limite superiore si necessita della funzione a gradino $\theta(q - N_i)$, per ciascun nodo i .

In base al numero di particelle N nel sistema si tratterà separatamente uno dei due casi. Oppure se entrambi i limiti possono essere raggiunti si considera un'opportuna combinazione delle due funzioni theta:

$$\Theta_{ij} = \theta(N_j)\theta(q - N_i), \quad (3.2)$$

se la transizione avviene dal nodo j al nodo i .

3.1.1 Limite Inferiore di Capacità sul Nodo: 0

Nel caso in cui la probabilità di avere zero particelle su un nodo risulti rilevante, una one-step master equation può essere ottenuta modificando semplicemente la (2.4) come segue

$$\frac{\partial P(\vec{N}, t)}{\partial t} = \frac{1}{N} \left(\sum_{i,j} \pi_{ij} E_j^+ E_i^- \theta(N_j) P(\vec{N}, t) - \sum_{i,j} \pi_{ji} \theta(N_i) P(\vec{N}, t) \right), \quad (3.3)$$

da cui si nota che la nuova matrice dei rate di transizione del processo è $\pi_{ij}\theta(N_j)$.

Cerchiamo una distribuzione stazionaria del tipo

$$P^s(\vec{N}) = \begin{cases} C_N^{-1} \prod_{k=1}^n (v_k^1)^{N_k} & \text{se } N_k \geq 0, \forall k \\ 0 & \text{altrimenti,} \end{cases} \quad (3.4)$$

dove v_1^1, \dots, v_n^1 sono le componenti dell'autovettore stazionario, cioè di autovalore 1, della matrice del rate di transizione associato al processo. Infatti, applicando gli operatori E^\pm alla soluzione precedente si ha

$$E_j^+ E_i^- \theta(N_j) P^s(\vec{N}) = \frac{v_j^1}{v_i^1} \theta(N_i) P^s(\vec{N}), \quad (3.5)$$

dove è stata utilizzata la funzione theta per evitare il caso di distruzione non fisica. Infine, una semplice sostituzione nella master equation conferma l'effettiva correttezza della soluzione cercata.

La costante di normalizzazione C_N si ottiene sommando su tutte le possibili configurazioni dello stato del network

$$C_N = \sum_{\vec{N} \in \Gamma} \prod_{i=1}^n (v_i^1)^{N_i} = \frac{1}{N!} \frac{d^N}{dx^N} \Big|_{x=0} \prod_{i=1}^n \frac{1}{1 - v_i^1 x}. \quad (3.6)$$

Particolarmente interessante è la stima della distribuzione marginale su un generico nodo i all'equilibrio. Si può infatti dimostrare la validità della seguente espressione

$$P^s(N_i) \propto \left[\left(1 - \frac{N_i}{N} \right)^N \right]^{\frac{n}{N}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \exp\left(-\frac{n}{N} N_i \right). \quad (3.7)$$

Tale andamento esponenziale sarà utilizzato come fit per il confronto dei dati sulla simulazione del random walk con il modello teorico in analisi.

3.1.2 Limite Superiore di Capacità sul Nodo: q

Si vuole ora descrivere che cosa accade quando i nodi del network sono vicini al loro massimo limite di capacità. Modifichiamo ancora una volta la master equation per ottenere

$$\frac{\partial P(\vec{N}, t)}{\partial t} = \frac{1}{N} \left(\sum_{i,j} \pi_{ij} E_j^+ E_i^- \theta(q - N_i) P(\vec{N}, t) - \sum_{i,j} \pi_{ji} \theta(q - N_j) P(\vec{N}, t) \right). \quad (3.8)$$

In questo caso per ricavare la distribuzione stazionaria dobbiamo considerare l'auto-vettore stazionario sinistro della matrice del rate di transizione, le cui componenti sono denotate con w_1^1, \dots, w_n^1 . Si cerca quindi una soluzione del tipo

$$P^s(\vec{N}) = \begin{cases} K_N^{-1} \prod_{k=1}^n (w_k^1)^{q-N_k} & \text{se } N_k \leq q, \forall k \\ 0 & \text{altrimenti,} \end{cases} \quad (3.9)$$

la cui validità si ottiene, in totale analogia con il caso precedente, applicando gli operatori E^\pm alla distribuzione

$$E_j^+ E_i^- \theta(q - N_i) P^s(\vec{N}) = \frac{w_i^1}{w_j^1} \theta(q - N_j) P^s(\vec{N}), \quad (3.10)$$

seguita da una semplice sostituzione di quanto ottenuto nella master equation del processo considerato.

Di conseguenza come in Eq. (3.7) si avrà, per grandi N , una distribuzione marginale sul nodo i con un andamento esponenziale, del tipo

$$P^s(N_i) \propto \exp\left(\frac{n}{N} (N_i - q) \right). \quad (3.11)$$

3.1.3 Doppio Vincolo di Capacità sul Nodo

Il caso più generale si ottiene semplicemente combinando le due equazioni (3.3),(3.8)

$$\frac{\partial P(\vec{N}, t)}{\partial t} = \frac{1}{N} \left(\sum_{i,j} \pi_{ij} E_j^+ E_i^- \Theta_{ij} P(\vec{N}, t) - \sum_{i,j} \pi_{ji} \Theta_{ji} P(\vec{N}, t) \right). \quad (3.12)$$

Un'approssimazione della distribuzione stazionaria può essere ottenuta considerando la combinazione lineari della distribuzioni ottenute precedentemente per i due casi distinti

$$P^s(\vec{N}) \propto C_N^{-1} \prod_{k=1}^n (v_k^1)^{N_k} + K_N^{-1} \prod_{k=1}^n (w_k^1)^{q-N_k}. \quad (3.13)$$

Quello che si attende quindi per la distribuzione marginale nel caso generale è un andamento bimodale delle fluttuazioni all'equilibrio.

3.2 Simulazione di un Random Walk Vincolato

Aggiungendo una coppia di vincoli al modello si cambia notevolmente la dinamica su network. Infatti l'assunzione di capacità di trasporto finita implica, nel limite inferiore, che la probabilità di un nodo di avere 0 particelle non è più trascurabile. Ciò accade perché, quando in un nodo i si ha lo stato $N_i = 0$, cominciano necessariamente una sequenza di scambi affinché il nodo i possa tornare a scambiare particelle con i suoi vicini, che a loro volta tendono a svuotarsi.

La transizione da capacità di trasporto infinita a finita del network risulta quindi un passaggio al caso di particelle non indipendenti, sebbene queste continuino ad essere non interagenti.

Si ha una situazione analoga quando si assume una capacità di immagazzinamento finita sui nodi del network: i nodi adiacenti a quelli in cui la capacità massima q è stata raggiunta si trovano impossibilitati a passare particelle ai vicini, e di conseguenza tendono a riempirsi a loro volta.

Come si è visto inoltre, la distribuzione stazionaria marginale cambia da una binomiale ad una combinazione di due esponenziali: tale transizione può essere pensata come il risultato di un cambiamento della probabilità degli stati di rete dovuto agli effetti di capacità finita e non a forze esterne, spostando la distribuzione verso i vincoli e causando un passaggio da un andamento monomodale ad uno bimodale. Da un punto di vista fisico si parla di *forze entropiche*, in quanto si tratta di fenomeni emergenti risultanti dalla tendenza statistica dell'intero sistema ad aumentare la propria entropia. Come noto infatti, sotto la condizione di bilancio dettagliato verificata successivamente, lo stato stazionario massimizza una funzione entropia cioè rappresenta lo stato più probabile a livello macroscopico tra tutti i possibili. Di conseguenza una forza entropica esprime il fatto che il sistema tende allo stato più probabile in assenza di esplicite forze esterne.

Per effettuare la simulazione spostiamoci su un network più semplice ma con struttura non banale, cioè un *grafo 2-regolare* o cerchio di $n = 100$ nodi, schematizzato in Fig. 3.1.

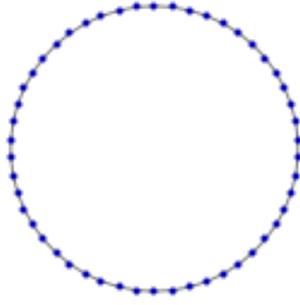


Figura 3.1: Esempio di grafo 2-regolare utilizzato per le simulazioni con vincoli sulla capacità. La regolarità è determinata dallo stesso valore del grado $k = 2$ per ogni nodo.

Dal punto di vista computazionale si sottolinea che nel caso delle particelle indipendenti, trattato in precedenza, il punto di vista centrato sulle particelle o sui nodi è lo stesso, dal momento che ogni walker dà il suo contributo di probabilità di spostarsi. Diversamente accade quando si tratta una dinamica di trasporto finita che consiste nella possibilità per ogni nodo di inviare una sola particella: in tal caso il punto di vista è necessariamente centrato sul nodo.

Per avvicinarsi al limite inferiore sono state inserite $N = 1000$ particelle sul network, 10 per ogni nodo, mentre per il limite superiore $q = 100$ la simulazione è stata ripetuta con $N = 9000$, cioè 90 walkers per nodo. Entrambi i random walk, le cui distribuzioni marginali medie su ogni nodo sono riportate in Fig. 3.2, sono state realizzate considerando 1 milione di scambi elementari nel sistema. Inoltre tali distribuzioni marginali sono in perfetto accordo con gli andamenti descritti rispettivamente da Eq. (3.7) e (3.11).

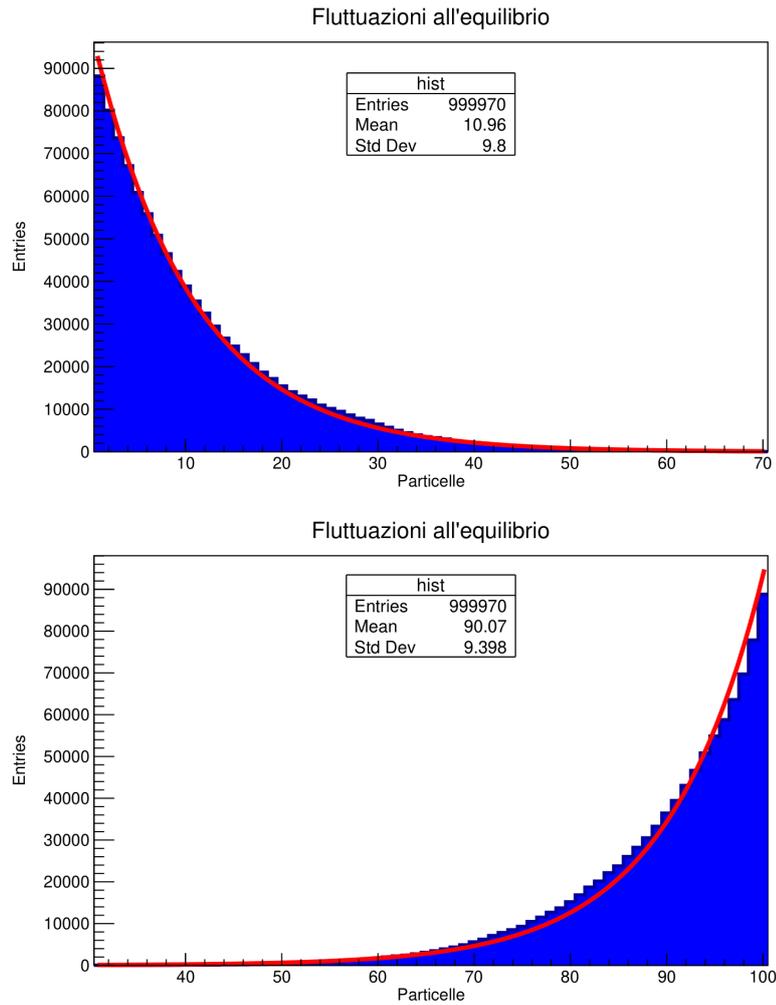


Figura 3.2: Distribuzioni marginali all'equilibrio mediate su tutti i nodi nel caso di vincolo inferiore 0 (sopra) e vincolo superiore $q = 100$ (sotto) su grafo 2-regolare. In entrambi i casi la condizione iniziale del sistema corrisponde a particelle equamente distribuite su ciascun nodo, 10 nel primo caso e 90 nel secondo. I relativi fit esponenziali mostrano un evidente accordo sperimentale con i dati della simulazione.

Per esplorare entrambi i casi sono state introdotte $N = 5000$ particelle nel sistema, 90 su 50 nodi e 10 su gli altri 50, con 2 milioni di scambi elementari. La distribuzione marginale media del network ottenuta è riportata in Fig. 3.3 e il relativo fit corrisponde ad una combinazione dei due casi precedenti, in accordo con Eq. (3.13).

Fluttuazioni all'Equilibrio

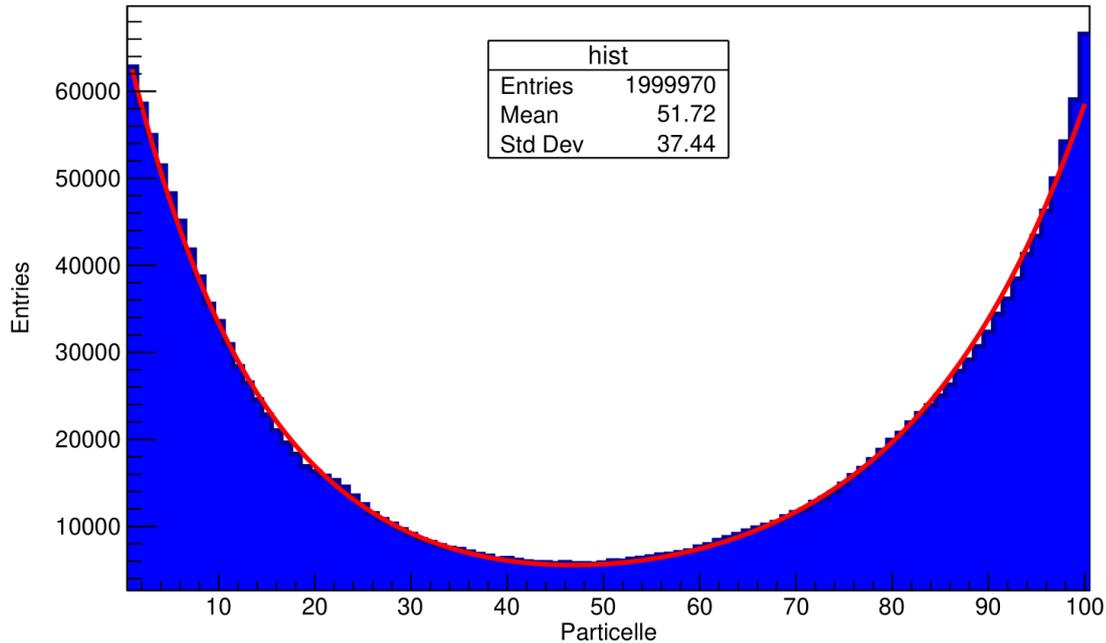


Figura 3.3: Distribuzione marginale media per i due vincoli di capacità sul nodo per grafo 2-regolare. L'andamento bimodale dei dati è confermato con attimo accordo dal relativo fit, combinazione lineare dei due casi precedenti.

Tale andamento è da confrontare con l'analoga distribuzione per network ITSC, trattata per grafo di Erdos in Fig. 2.8, mostrando in maniera evidente l'effetto delle forze entropiche che causano il passaggio da un andamento monomodale a bimodale.

Ulteriori grafici per i random walk con e senza vincoli sono riportati per completezza in Appendice A, confermando la correttezza degli algoritmi implementati.

3.3 Principio di Massima Entropia su Network q-FSC

Trattando i network 1-FTC+q-FSC perdiamo la vera indipendenza delle particelle, dal momento che la possibilità di muoversi di una è condizionata dalla presenza delle altre sui nodi. Nonostante ciò si ha comunque l'indipendenza dei nodi ed è quindi possibile trovare una soluzione stazionaria per la master equation, come già discusso.

Un risultato importante che si può ottenere è che, nonostante si introducano dei limiti di capacità di trasporto sui link e storage sui nodi, la condizione di bilancio dettagliato continua a valere. Per mostrare ciò seguiamo un approccio di meccanica statistica in modo separato: per il modello q-FSC si ricava la distribuzione stazionaria con il principio di massima entropia; mentre per il modello 1-FTC, nella sezione seguente, si derivano le relazioni reciproche di Onsager dalla corrispondente master equation.

Richiamiamo l'entropia di Gibbs di Eq. (2.25), dove $w(\vec{N})$ è il peso statistico del network ovvero il numero di modi o microstati con cui posso realizzare lo stato \vec{N} , differente da quello calcolato per network ISTC.

Se il nostro network ha n nodi, N particelle e una capacità di storage massima q su ciascun nodo, allora la capacità massima dell'intero network è qn ed il numero totale di lacune o antiparticelle sarà

$$N^* = qn - N. \quad (3.14)$$

Sapendo che N è fissato conviene adottare infatti il punto di vista delle lacune scrivendo lo stato con la n -upla N_1^*, \dots, N_n^* e calcolando $w^*(\vec{N})$, corrispondente al numero di microstati nello stato del network \vec{N} visto dalle antiparticelle, date le relazioni

$$N_i^* + N_i = q \quad \forall i \quad \sum_{i=1}^n N_i^* = N^* = qn - N. \quad (3.15)$$

Calcoliamo quindi il numero di modi per sistemare $qn - N$ lacune su n nodi. Cominciando con il primo nodo, si hanno $qn - N$ modi per mettere una antiparticella, $qn - N - 1$ per mettere una seconda e così via, fino alla N_1^* -esima, avendo $qn - N - N_1^* + 1$ modi diversi di scegliere tra le rimanenti antiparticelle. Dunque nel primo nodo si avrà

$$\#_{primo} = \frac{(qn - N)(qn - N - 1)\dots(qn - N - N_1^*)}{N_1^*!} = \frac{(qn - N)!}{N_1^*(qn - N - N_1^*)!}. \quad (3.16)$$

Trattando il secondo nodo, si hanno $qn - N - N_1^*$ modi diversi di scegliere la prima lacuna e così via, fino a $qn - N - N_1^* - N_2^*$ modi per la N_2^* -esima. Con calcoli analoghi otteniamo per il secondo nodo

$$\#_{secondo} = \frac{(qn - N - N_1^*)!}{N_2^*(qn - N - N_1^* - N_2^*)!}. \quad (3.17)$$

Si ripete il ragionamento per un generico nodo i -esimo, fino all'ultimo nodo per cui si ha

$$\#_{n-esimo} = \frac{(qn - N - \sum_{i=1}^{n-1} N_i^*)!}{N_n^*(qn - N - \sum_{i=1}^n N_i^*)!} = \frac{(qn - N - \sum_{i=1}^{n-1} N_i^*)!}{N_n^*!}. \quad (3.18)$$

Finalmente, moltiplicando tra loro i risultati sui singoli nodi ed effettuando alcune semplificazioni tra fattori, è possibile ottenere il numero dei microstati delle lacune

$$w^*(\vec{N}) = \frac{(qn - N)!}{\prod_{i=1}^n N_i^*!}, \quad (3.19)$$

che forniscono un'espressione esplicita dell'entropia per il network q-FSC

$$\mathcal{S}_G[P] = - \sum_{\vec{N} \in \Gamma} P(\vec{N}) \log \left(\frac{P(\vec{N})}{(qn - N)! \prod_{i=1}^n N_i^*!} \right). \quad (3.20)$$

Effettuiamo quindi il calcolo variazionale per ottenere la distribuzione stazionaria, introducendo innanzitutto n moltiplicatori di Lagrange β_i , ottenuti fissando il numero medio di antiparticelle sul nodo i . Si ha quindi

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{S}_G &= - \sum_{\vec{N} \in \Gamma} \delta \left\{ P(\vec{N}) \log \left(\frac{P(\vec{N})}{w^*(\vec{N})} \right) - \sum_{i=1}^n \beta_i N_i^* P(\vec{N}) \right\} \\
&= - \sum_{\vec{N} \in \Gamma} \delta P(\vec{N}) \left\{ \log \left(\frac{P(\vec{N})}{w^*(\vec{N})} \right) - \sum_{i=1}^n \beta_i N_i^* \right\} = 0,
\end{aligned} \tag{3.21}$$

dove abbiamo usato $\sum_{\vec{N} \in \Gamma} P(\vec{N}) = 1$ dunque $\sum_{\vec{N} \in \Gamma} \delta P(\vec{N}) = 0$. Si ottiene dunque la distribuzione stazionaria

$$P^s(\vec{N}) \propto w^*(\vec{N}) \exp \left(- \sum_{i=1}^n \beta_i N_i^* \right) = \prod_{i=0}^n \frac{(qn - N)!}{(q - N_i)!} \exp \left(-\beta_i (q - N_i) \right), \tag{3.22}$$

che risulta fattorizzabile e che, riconoscendo $\beta_i = n/N$, ci fornisce proprio la distribuzione marginale per grandi N di Eq. (3.11)

$$P^s(N_i) \propto \exp \left(\frac{n}{N} (N_i - q) \right). \tag{3.23}$$

3.4 Relazioni di Onsager su Network 1-FTC

Per il modello 1-FTC procediamo in modo diverso, ma non meno fisico. Mostriamo infatti che dalla master equation (3.3) si possono derivare le relazioni di Onsager ipotizzando a priori la condizione di bilancio dettagliato, o equivalentemente la reversibilit  temporale.

In analogia con la trattazione effettuata nella sezione 2.4.1, se $q^A(\vec{N})$   un osservabile del sistema nella configurazione \vec{N} , il suo valore medio   dato da

$$\langle q^A \rangle = \sum_{\vec{N} \in \Gamma} q^A(\vec{N}) P(\vec{N}). \tag{3.24}$$

Essendo $P(\vec{N}) = P^e + \delta P(\vec{N})$ nelle vicinanze di uno stato di equilibrio, con P^e distribuzione stazionaria (3.4), possiamo scrivere le fluttuazioni di q^A intorno il suo valore medio

$$y^A = \sum_{\vec{N} \in \Gamma} \delta P(\vec{N}) q^A(\vec{N}). \tag{3.25}$$

Quindi, per riscrivere in modo relativamente semplice l'equazione di variazione per y^A , si vuole ridurre in forma simmetrica la sommatoria $\sum_{ij} \pi_{ij} \theta(N_j)$. Ci  risulta possibile per la condizione di bilancio dettagliato e considerando in termini fisici la distribuzione $P(\vec{N})$. Operando infatti la stessa trasformazione in Eq. (2.44) si ottiene l'equazione di evoluzione per le fluttuazioni

$$\frac{d}{dt} y^A = \frac{d}{dt} \langle q^A \rangle = \sum_{i,j} \delta P(\vec{N}) \tilde{\pi}_{ij} \left[q^A(\vec{N}) - E_j^+ E_i^- q^A(\vec{N}) \right]. \tag{3.26}$$

Reintroduciamo le forze termodinamiche γ^A , in modo che la forma approssimata dell'entropia vicino l'equilibrio assuma la sua forma fenomenologica

$$\frac{d}{dt}S = \sum_A \gamma^A \frac{d}{dt}y^A = \sum_A \sum_{\vec{N} \in \Gamma} \gamma^A q^A(\vec{N}) \frac{d}{dt} \delta P(\vec{N}). \quad (3.27)$$

Sviluppando in serie di potenze l'entropia di Gibbs (2.23) ed approssimandola alla sua forma quadratica, otteniamo

$$S = - \sum_{\vec{N} \in \Gamma} P^e \log P^e - \frac{1}{2P^e} \sum_{\vec{N} \in \Gamma} \delta P(\vec{N})^2, \quad (3.28)$$

e la sua derivata temporale diventa

$$\frac{d}{dt}S = - \frac{1}{P^e} \sum_{\vec{N} \in \Gamma} \delta P(\vec{N}) \frac{d}{dt} \delta P(\vec{N}). \quad (3.29)$$

Eguagliando l'espressione precedente con l'Eq. (3.27) si ottiene la variazione δP in funzione delle forze termodinamiche γ^A

$$\delta P(\vec{N}) = -P^e \sum_A \gamma^A q^A(\vec{N}) + \lambda \quad (3.30)$$

dove λ è una costante determinata dalla condizione $\sum_{\vec{N} \in \Gamma} \delta P(\vec{N}) = 0$. Allora l'equazione di evoluzione delle fluttuazioni diventa

$$\frac{d}{dt}y^A = \sum_{i,j} P^e \sum_B \gamma^B q^B(\vec{N}) \tilde{\pi}_{ij} \left[E_j^+ E_i^- q^A(\vec{N}) - q^A(\vec{N}) \right] = \sum_B \gamma^B \mathcal{L}^{B,A}. \quad (3.31)$$

dove i coefficienti fenomenologici di Onsager $\mathcal{L}^{B,A}$ valgono

$$\mathcal{L}^{B,A} = P^e \sum_{i,j} \tilde{\pi}_{ij} \left[q^B(\vec{N}) E_j^+ E_i^- q^A(\vec{N}) - q^B(\vec{N}) q^A(\vec{N}) \right] = \mathcal{L}^{A,B}, \quad (3.32)$$

e risultano simmetrici come volevasi dimostrare.

Conclusioni

I random walk su network possono simulare proprietà universali dei sistemi di trasporto, dalla biologia ai sistemi sociali. L'applicazione di metodi fisici per studiare le proprietà dinamiche e statistiche dei random walks possono aiutarci ad esplorare caratteristiche rilevanti per studiare le soluzioni stazionarie o il nascere di stati critici, come la congestione del traffico.

Abbiamo inizialmente studiato la dinamica di N particelle non interagenti su network con capacità infinita (ISTC) per ottenere dei risultati su un modello analitico. Si è potuto verificare che le soluzioni della master equation di campo medio, sotto il limite termodinamico, sono una buona approssimazione del random walk, poiché i grafici che riguardano i due fenomeni sono compatibili, ricordando comunque che il primo rappresenta un fenomeno continuo, mentre il secondo è un processo discreto. Si è poi potuto calcolare il tempo di rilassamento del sistema all'equilibrio, corrispondente al più piccolo autovalore non nullo della matrice laplaciana. Tramite una trattazione entropica è stata inoltre ricavata la distribuzione stazionaria, la quale segue un andamento monomodale con fluttuazioni intorno al valore medio.

Grazie alla derivazione delle relazioni di Onsager per il modello 1-FTC in prossimità dell'equilibrio, oltre all'ottenimento dello stato stazionario per il modello q-FSC tramite il principio di massima entropia, è stato possibile dimostrare che, nonostante l'introduzione di vincoli sulla capacità del sistema, la condizione di bilancio dettagliato tra i link del network continua ad essere soddisfatta. L'analisi delle fluttuazioni all'equilibrio per le particelle sui nodi del network rispecchia un andamento bimodale, somma di due esponenziali, perfettamente compatibile con i risultati teorici. L'effetto complessivo nell'introdurre una capacità di trasporto e storage finita nel network (1-FTC+q-FSC) consiste quindi in una forza entropica repulsiva che promuove i nodi soddisfacenti le condizioni al contorno stabilite dai vincoli stessi.

In conclusione, in questa tesi sono state realizzate simulazioni che rispecchiano e confermano le previsioni teoriche discusse e, contemporaneamente, si è mostrato come la termodinamica statistica, sotto la validità della condizione di bilancio dettagliato, sia un potente strumento di analisi per la dinamica su network.

Appendice A

Ulteriori Grafici per i Random Walk

Vengono riportati per completezza due grafici aggiuntivi, corrispondenti rispettivamente alla distribuzione monomodale per il grafo 2-regolare a 100 nodi e alla distribuzione bimodale per il grafo di Erdos $G(50, 0.2)$. Tali andamenti sono ovviamente compatibili con quelli riportati in Fig. 2.8 e 3.3, confermando la correttezza degli algoritmi per simulazione di random walks realizzati.

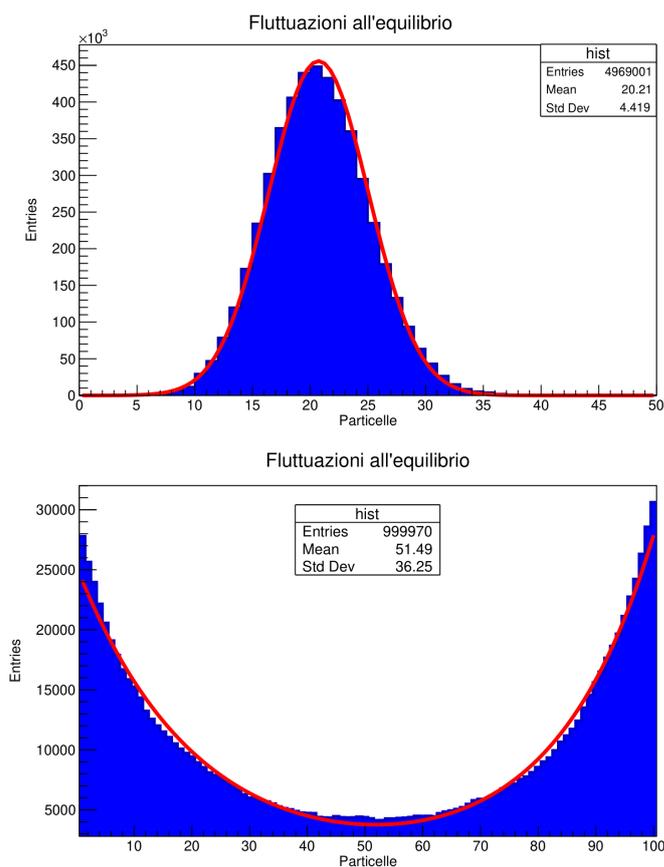


Figura A.1: Distribuzione media marginale su network 2-regolare ITSC (sopra) e su network di Erdos $G(50, 0.2)$ 1FTC+qFSC (sotto).

Bibliografia

- [1] A. Barrat, M. Barthélemy, A. Vespignani, *Dynamical Processes on Complex Networks*, Cambridge University Press, 2008.
- [2] A. Bazzani, *Random walks on Graphs, Master Equation and Maximal Entropy Principle*, Bologna, 20/02/2020.
- [3] P. Blanchard and D. Volchenkov, *Random Walks and Diffusions on Graphs and Databases*, Springer Series in Synergetics 10, 2011.
- [4] G. Caldarelli, A. Vespignani, *Large Scale Structure and Dynamics of Complex Networks: From Information Technology to Finance and Natural Science*, World Scientific Publishing Co Pte Ltd, 2007.
- [5] P. Erdos, A. Renyi, *On the Evolution of Random Graphs* , Publications of the Mathematical Institute of the Hungarian Academy of Sciences 5 : 17-61 , 1960.
- [6] E. T. Jaynes, *The Minimum Entropy Production Principle*, Annual Review of Physical Chemistry, 1980.
- [7] L. Lovasz, *Random Walk on Graph: a Survey*, YALEU/DCS/TR-1029, May 1994.
- [8] M. Moreau, *On the Derivation of the Onsager Relations from the Master Equation*, Letters in Mathematical Physics 1, 1975.
- [9] M. E. J. Newman, *Networks: An Introduction*, Oxford University Press, Inc.198 Madison Ave. New York, NY, United States, 2010.
- [10] N. G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, Elsevier Science & Technology Books, April 2007.