

Diffusione e reazione: dal moto Browniano alla diffusione delle epidemie

MAURIZIO SERVA

Università dell'Aquila
E-mail: serva@univaq.it

DAVIDE VERGNI

CNR di Roma
E-mail: davide.vergni@cnr.it

ANGELO VULPIANI

Università di Roma
E-mail: angelo.vulpiani@roma1.infn.it

Sommario: *I fenomeni di trasporto, e la loro generalizzazione ai casi con reazione, costituiscono un capitolo molto importante della matematica applicata e trovano utilizzo in ambiti molto vari, che vanno dalla diffusione di sostanze inquinanti in atmosfera e in mare, ai processi industriali, alla biomatematica, alla propagazione di epidemie.*

Oltre alla loro rilevanza pratica, lo studio di tali fenomeni ha portato contributi molto importanti nella storia della fisica e della matematica. Possiamo ricordare lo studio di Einstein sul moto browniano che è stato fondamentale per dare un'evidenza sperimentale definitiva della reale esistenza degli atomi. E, in generale, i processi di diffusione hanno costituito il punto di partenza per la costruzione della teoria matematica dei processi stocastici (a cominciare dal lavoro di Langevin)

Analogamente lo studio dei fenomeni con diffusione e reazione, nati dal contributo di due giganti della scienza del 20-mo secolo (Ronald A. Fisher e Andrej N. Kolmogorov) nell'ambito della modellizzazione matematica di problemi biologici, ha poi portato a sviluppi interessanti sia nell'ambito applicativo che per le proficue connessioni tra processi stocastici ed equazioni alle derivate parziali.

In questo articolo oltre a presentare alcuni tra i risultati generali sviluppati in questi ambiti, discuteremo anche aspetti più moderni legati al crescente interesse per i fenomeni di trasporto e reazione/diffusione su strutture discrete (grafi), una tematica questa di grande attualità (basti pensare alla diffusione delle informazioni su internet o alla propagazione delle epidemie per mezzo del network dei trasporti aerei) sviluppata attraverso una matematica raffinata.

Abstract: *Diffusion and transport processes constitute a very important field of applied mathematics. They are useful in many different problems ranging from the diffusion of pollutants in the atmosphere and the sea, to the spreading of epidemics.*

Aside from their practical relevance, such processes have been very important in the history of physics and mathematics. We can recall Einstein's study of Brownian motion which was fundamental to give definitive experimental evidence of the existence of atoms. Moreover diffusion processes have been the starting point for the building of the mathematical theory of stochastic processes (starting from the work of Langevin).

Similarly the study of reaction and diffusion phenomena, starting from the seminal contribution of two 20th-century science giants (Ronald A. Fisher and Andrej N. Kolmogorov) has led to interesting developments both for applications and for the fruitful connections between stochastic processes and partial differential equation.

In this article we discuss some general results developed in these areas, including few modern topics, as transport and reaction/diffusion on discrete structures (graphs). Such a theme has a great relevance, e.g. for the dissemination of information through the internet or the spreading of epidemics through the air transport network.

Accettato: il 29 giugno 2018.

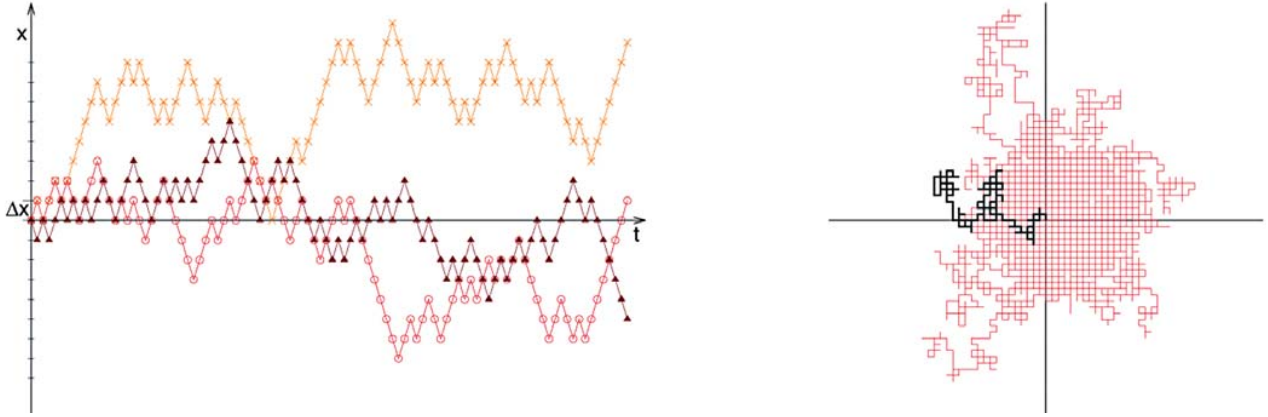


FIGURA 1 – Nel grafico di sinistra sono riportati tre esempi di random walk su reticolo unidimensionale di passo Δx per ogni tempo Δt . Nel grafico di destra è riportata l'evoluzione di 50 walker in un reticolo bidimensionale che partono tutti dall'origine e con evidenziato il cammino di un walker specifico (in neretto).

1. – Introduzione alla diffusione

Il più semplice (e probabilmente anche il più noto) processo diffusivo è il random walk su reticolo: un camminatore, posto inizialmente nella posizione $x_0 = 0$, ad ogni tempo $t = k\Delta t$ (con $k = 1, 2, 3, \dots$) può effettuare, in modo equiprobabile, un passo a destra o a sinistra di ampiezza Δx .

L'equazione che descrive la dinamica della probabilità di trovare il walker nell' n -esimo punto del reticolo al k -esimo istante di tempo è data dalla master equation

$$(1) \quad P(n\Delta x, k\Delta t) = \frac{1}{2}(P((n-1)\Delta x, (k-1)\Delta t) + P((n+1)\Delta x, (k-1)\Delta t))$$

che esprime matematicamente il fatto che la probabilità di trovare il walker nel punto $n\Delta x$ al tempo $k\Delta t$ è data dalla somma delle probabilità al tempo precedente $(k-1)\Delta t$ di avere il walker nel punto $(n-1)\Delta x$ oppure nel punto $(n+1)\Delta x$ moltiplicate per la probabilità di fare il salto nella giusta direzione per arrivare al punto $n\Delta x$. Nel limite $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta x^2/\Delta t \rightarrow 2D$, (dove D è il coefficiente di diffusione) si ha l'equazione di diffusione

$$(2) \quad \partial_t P(x, t) = D \partial_{xx}^2 P(x, t).$$

Con regole un po' diverse dalla (1), ad esempio se la probabilità di saltare a destra o sinistra è $1/2 - a$ e

la probabilità di non saltare è $2a$ (con $a < 1/2$), facendo il limite $\Delta x \rightarrow 0$ e $\Delta t \rightarrow 0$, si ottiene ancora la (2) ove ora il coefficiente di diffusione D vale $(1/2 - a)\Delta x^2/\Delta t$.

Estendendo l'equazione (2) nel caso di dimensione maggiore di uno si ottiene

$$(3) \quad \partial_t P(\mathbf{x}, t) = D \Delta P(\mathbf{x}, t).$$

L'equazione precedente implica che la densità di probabilità di trovare il walker nella posizione \mathbf{x} al tempo t (partendo in $x_0 = 0$ al tempo $t = 0$) è data dalla distribuzione Gaussiana

$$(4) \quad P(\mathbf{x}, t) = \left(\frac{1}{\sqrt{4D\pi t}} \right)^d e^{-\frac{|\mathbf{x}|^2}{4Dt}}$$

ove d è la dimensionalità dello spazio. In figura 1 si possono vedere due esempi di random walk, nel lato sinistro è mostrata l'evoluzione di alcuni walker su reticolo unidimensionale in funzione del tempo, mentre nel lato destro è mostrata la dinamica di alcuni walker su reticolo bidimensionale. Dalle dinamiche degli walker mostrate in figura 1 si può passare alle densità di probabilità effettuando una media sull'evoluzione di moltissimi walker, come rappresentato in figura 2.

L'equazione (4) è anche una buona approssimazione per tempi lunghi nel caso di una generica densità di probabilità iniziale, $P(\mathbf{x}, 0)$, centrata intorno all'origine e con valor medio zero. Dall'equazione (4) si ricava che la distanza quadratica media

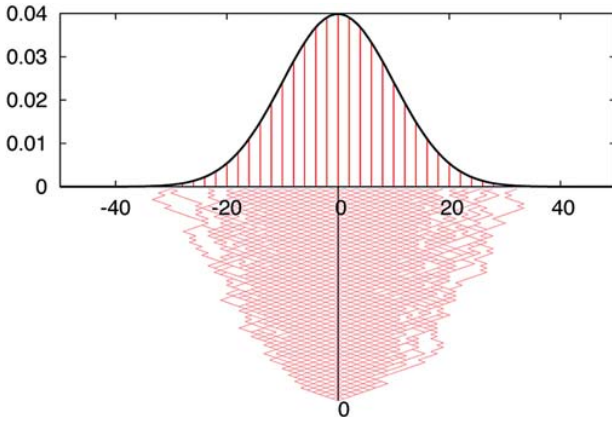


FIGURA 2 – Lo 0 situato in basso è il punto di partenza di moltissimi walker. La dinamica viene interrotta al tempo $t = 100$ e si calcola l'istogramma delle frequenze delle posizioni di arrivo dei walker (righe rosse nel grafico superiore) e lo si confronta con la formula (4) (grafico nero), l'accordo è perfetto.

del walker dalla sua posizione iniziale è asintoticamente lineare in t

$$(5) \quad \langle (x(t) - x(0))^2 \rangle \simeq 2Dt,$$

tale comportamento è la firma distintiva di un processo diffusivo.

È significativo il fatto che la (3) sia stata ricavata da Einstein nel suo studio sul moto Browniano di una particella colloidale in un fluido. Particolarmente importante è la relazione

$$(6) \quad D = \frac{\mathcal{R}T}{6N_A\pi\eta a}$$

ove \mathcal{R} , η , T , a ed N_A sono rispettivamente la costante dei gas, la viscosità del fluido, la sua temperatura, il raggio della particella colloidale ed il numero di Avogadro. Il moto Browniano è una magnifica lente di ingrandimento del mondo microscopico, permettendo di trovare un legame tra quantità macroscopiche (accessibili sperimentalmente) come D , T , \mathcal{R} , η ed a , e una quantità microscopica come il numero di Avogadro N_A .

In casi più “complicati” in cui il coefficiente di diffusione non è omogeneo ma può variare nello spazio, oppure quando è presente una “corrente” (ossia un flusso di un qualche tipo che trascina il walker), l'equazione (3) si complica, diventando

$$(7) \quad \partial_t P = \Delta(D(\mathbf{x})P),$$

nel caso di coefficiente di diffusione dipendente dallo spazio, $D(\mathbf{x})$, oppure

$$(8) \quad \partial_t P + \nabla \cdot (\mathbf{u}(\mathbf{x})P) = D\Delta P$$

nel caso di una sostanza trasportata da un campo di velocità \mathbf{u} . $P(\mathbf{x}, t)$, oltre che come distribuzione di probabilità, può essere vista anche come concentrazione di una qualche sostanza (esempio particelle di fumo). L'equazione (8), in cui si assume che la concentrazione trasportata non influenzi il campo di velocità, descrive fenomeni di trasporto di grande interesse applicativo ad esempio in geofisica e in ingegneria. Sotto opportune condizioni, a grandi scale spaziali e tempi lunghi, la (8) è approssimata da un'equazione efficace identica alla (3) ove ora D è rimpiazzato da un coefficiente di diffusione efficace, D_{eff} , che dipende dal campo di velocità $\mathbf{u}(\mathbf{x})$.

Negli ultimi anni ci sono stati interessanti progressi nello studio dei processi di diffusione in sistemi con struttura discreta. Consideriamo un grafo, cioè un sistema costituito da N elementi (nodi) e da un insieme di connessioni (link) che uniscono coppie di elementi. Per semplicità consideriamo il caso di connessioni bidirezionali, in cui se il nodo i è connesso al nodo j allora è vero anche il contrario. Introduciamo la matrice delle adiacenze, A_{ij} , che vale 1 se esiste un link tra i e j , e vale 0 in assenza di connessione; nel caso di link bidirezionali la matrice delle adiacenze è simmetrica, ossia $A_{ij} = A_{ji}$. Una quantità molto importante nello studio dei grafi è il numero di connessioni che raggiungono ogni nodo i e viene detta grado del nodo, $k_i = \sum_j A_{ij}$. Chiaramente se un nodo è molto connesso riceve e trasmette molto facilmente le “informazioni” che circolano nel grafo.

Nel caso inizialmente discusso di random walk, il reticolo sul quale avviene il moto può essere visto come un grafo in cui i nodi sono i punti del reticolo ed i link sono le connessioni a primi vicini, ossia $A_{ij} = 1$ solo se $|i - j| = 1$; in questo caso in ogni nodo il grado è 2. Situazioni più interessanti si hanno con grafi più complessi, come quello del network dei trasporti aerei in cui i nodi sono costituiti dagli aeroporti ed i link dai voli: $A_{ij} = 1$ se esiste un volo che collega gli aeroporti i e j . In questo caso k_i può variare di ordini di grandezza (centinaia di connessioni per i grandi aeroporti come Francoforte, Parigi, Fiumicino, mentre pochissime connessioni per i piccoli centri)

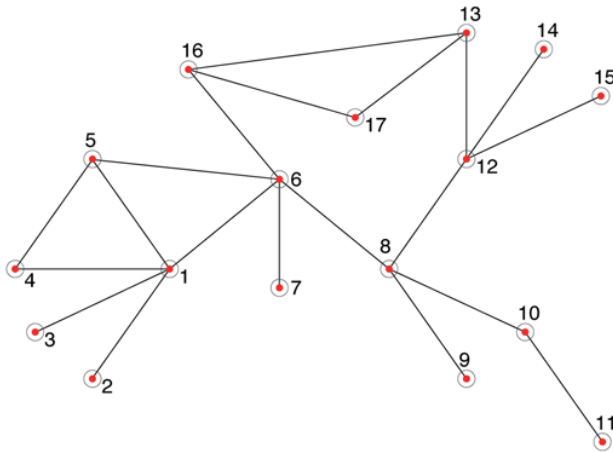


FIGURA 3 – Un esempio di grafo con 17 nodi e 20 link bidirezionali. Il grado di ogni nodo si ottiene contando i link che escono da ogni nodo. Per esempio il grado del nodo 1 è 5, mentre il grado del nodo 17 è 2.

e la dinamica di diffusione su strutture di questo tipo è altamente non banale.

Un processo di diffusione (a tempo discreto) che generalizza il random walk su reticolo è il seguente: al tempo t il viaggiatore che si trova nel sito j effettua un salto, con identica probabilità, su uno dei k_j siti con cui è connesso

$$(9) \quad P_i(t+1) = \sum_j W_{j \rightarrow i} P_j(t), \quad W_{j \rightarrow i} = \frac{A_{ij}}{k_j}.$$

Nel limite di tempo continuo si ha un'equazione del tipo

$$(10) \quad \frac{dP_i(t)}{dt} = D \sum_j \Delta_{ij} P_j(t)$$

ove $\Delta_{ij} = W_{j \rightarrow i} - \delta_{ij}$ e δ_{ij} è la matrice identità i cui elementi sono tutti nulli tranne quelli sulla diagonale



FIGURA 4 – Il grafo dei trasporti aerei mondiale (estratto dal sito openflights.org).

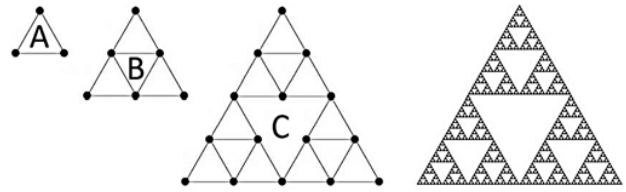


FIGURA 5 – Esempio di un grafo frattale, il Sierpinski Gasket. A sinistra sono riportati i primi tre passi (A, B e C) della costruzione ricorsiva del grafo associato al Sierpinski Gasket, mentre a destra è riportato il risultato del processo iterativo dopo un alto numero di passi (frattale Sierpinski Gasket). La struttura self simile del grafo è resa evidente dalla procedura iterativa di costruzione. La dinamica di diffusione su questo grafo segue la legge non lineare: $\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle \sim t^{2 \log(2)/\log(5)}$.

per i quali $\delta_{ii} = 1$. Nel caso in cui il grafo sia costituito da punti su un reticolo regolare e i link siano solo tra primi vicini è facile riconoscere nell'equazione precedente la versione discretizzata dell'equazione (3). In generale non sempre un grafo può essere immerso in uno spazio Euclideo, pertanto non sempre esiste un limite continuo della (9). Nel caso in cui sia possibile immergere un grafo in uno spazio Euclideo, allora si hanno processi diffusivi con densità di probabilità in genere non gaussiana (cosa che invece accade nel caso omogeneo, vedi l'equazione (4)). In conseguenza di ciò, lo scarto quadratico medio non cresce più linearmente con il tempo (come in (5)) ma presenta un andamento a potenza

$$(11) \quad \langle (x(t) - x(0))^2 \rangle \sim t^v \quad \text{dove} \quad v = \frac{d_s}{d_f} \leq 1,$$

ove d_s è la dimensione spettrale sempre definibile in quanto dipende solo dalla struttura topologica del grafo (data dalla matrice delle adiacenze A) mentre d_f è la dimensione frattale del grafo, definibile solo per grafi immersi in uno spazio Euclideo (si veda l'Appendice per i dettagli). Come esempio di diffusione su frattale possiamo considerare il caso del Sierpinski Gasket in due dimensioni in cui si ha $d_s = 2 \log(3)/\log(5)$ e $d_f = \log(3)/\log(2)$ in modo che $v = d_s/d_f = 2 \log(2)/\log(5) \simeq 0.861353$.

2. – Introduzione ai processi di reazione

Un processo di reazione è una dinamica in cui differenti elementi interagiscono tra loro. Il termine reazione può indicare sia reazioni chimiche vere e

proprie, sia interazioni tra sistemi biologici come nel caso del modello preda/predatore, sia regole per il cambiamento dello stato degli elementi come nel caso della propagazione delle epidemie in cui gli individui che costituiscono il sistema possono passare dallo stato di “sano” a quello di “malato”.

Nel caso in cui si abbiano N elementi diversi con concentrazioni $\theta_1, \dots, \theta_N$, l'evoluzione temporale delle stesse sarà regolata da un insieme di equazioni differenziali ordinarie: $d\theta_i/dt = f_i(\theta_1, \dots, \theta_N)$. Dalla chimica elementare ci si aspetta che, dopo un transiente, si abbia una soluzione stazionaria stabile, anche se ci sono delle eccezioni con comportamenti oscillanti o caotici (la più famosa è la reazione di Belousov-Zhabotinsky); non discuteremo queste possibilità limitandoci ai casi più comuni.

La descrizione più semplice di un processo di reazione, motivata dalla legge di azione di massa che descrive le reazioni chimiche, prevede che il tasso di creazione dei prodotti di reazione sia proporzionale alle concentrazioni dei reagenti. Ad esempio dalla legge di azione di massa applicata alla reazione autocatalitica $A + B \rightarrow 2A$ si ha

$$\frac{d\theta_A}{dt} = \alpha\theta_A\theta_B, \quad \frac{d\theta_B}{dt} = -\alpha\theta_A\theta_B,$$

dove α è la misura della velocità di reazione. Poiché $\theta_A + \theta_B = C$, dove C è la concentrazione massima, fissando $\theta = \theta_A$ abbiamo

$$\frac{d\theta}{dt} = \alpha\theta(C - \theta).$$

Se per semplicità fissiamo $C = 1$, la soluzione della precedente equazione risulta

$$\theta(t) = \frac{\theta_0}{(1 - \theta_0)e^{-\alpha t} + \theta_0},$$

dove θ_0 è la concentrazione iniziale dei prodotti di reazione, si ha $\lim_{t \rightarrow \infty} \theta(t) = 1$, ossia su tempi lunghi la reazione si estingue e restano solo prodotti di reazione.

3. – Processi di reazione e diffusione nello spazio

Quando gli elementi che costituiscono il sistema oltre a diffondere nell'ambiente interagiscono tra di loro è necessario considerare nella dinamica sia un termine di diffusione che un termine di reazione (per il pro-

cesso di interazione tra gli elementi). In questo caso invece di equazioni differenziali ordinarie, come nel caso della reazione semplice, si hanno equazioni alle derivate parziali che contengono un termine lineare (per la diffusione) ed uno non lineare (per la parte reattiva) e si parla di dinamiche di reazione/diffusione.

Il primo esempio di equazione di reazione/diffusione risale al 1937, è la famosa dinamica FKPP, che prende il nome dalle iniziali degli scienziati che hanno introdotto indipendentemente tale equazione, ossia R. A. Fisher, e A. N. Kolmogorov, I. Petrovskij e N. Piskunov. In una dimensione l'equazione FKPP è

$$(12) \quad \partial_t \theta(x, t) = D \partial_{xx}^2 \theta(x, t) + \alpha \theta(x, t)(1 - \theta(x, t)),$$

ove $\theta(x, t)$ è la densità di popolazione in x al tempo t . I termini nell'equazione FKPP descrivono la combinazione di:

- a) migrazione in regioni a bassa concentrazione per effetto del termine diffusivo;
- b) incremento locale della popolazione per effetto del termine di crescita lineare a piccole concentrazioni ($\theta \simeq 0$);
- c) rallentamento alla crescita della popolazione dovuto al termine non lineare che vincola la concentrazione massima accettabile (in questo caso è $\theta_{\max} = 1$).

Questa equazione rappresenta la base modellistica per molte applicazioni biologiche, chimiche, fisiche e ingegneristiche. Discuteremo due applicazioni di base dell'equazione FKPP, una ai sistemi chiusi e un'altra ai sistemi aperti, inoltre, visto l'acceso interesse verso i processi dinamici su sistemi eterogenei (network e grafi) discuteremo una generalizzazione dell'equazione FKPP ai processi di reazione e diffusione su grafi.

3.1 – Sopravvivenza di una specie

Tra le molte applicazioni dell'equazione FKPP consideriamo il problema del minimal-patch-size, ossia quale dimensione minima debba avere un ecosistema “chiuso” per permettere la sopravvivenza di una specie. È intuitivo che una popolazione con un dato tasso di riproduzione che si trovi a vivere in un piccolo ambiente con risorse limitate possa facilmente trovarsi in difficoltà. L'equazione FKPP ci può aiutare a stabilire la dimensione minima dell'ambiente in grado di garantire la sopravvivenza.

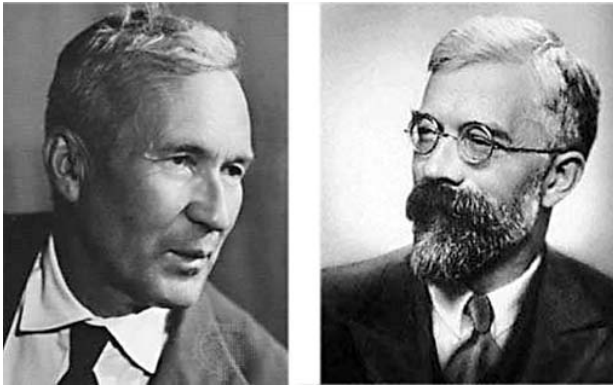


FIGURA 6 – Andrej Nikolaevich Kolmogorov (sinistra) e Ronald Aylmer Fisher (destra) i due grandi scienziati che hanno contemporaneamente e indipendentemente introdotto l'equazione di diffusione/reazione. Entrambi hanno apportato dei contributi fondamentali alla matematica moderna. Difficilmente può essere sovrastimato il contributo di Kolmogorov alla matematica ed alla fisica moderna: è stato uno dei fondatori della teoria moderna delle probabilità e della teoria della complessità algoritmica, con i suoi studi ha dato notevole impulso allo studio della turbolenza e dei sistemi Hamiltoniani (teorema KAM). Anche Fisher, da parte sua, ha portato differenti contributi fondamentali in vari ambiti, a partire dalla statistica moderna (è lui che ha introdotto i test di verifica di ipotesi nell'analisi statistica dei dati) fino ad arrivare alla teoria dell'evoluzione introducendo la teoria genetica della selezione naturale e la formulazione matematica delle regole di Mendel per i caratteri genetici.

Dal punto di vista matematico, nel caso unidimensionale, si deve risolvere il sistema

$$\begin{cases} \partial_t \theta(x, t) = D \partial_{xx}^2 \theta(x, t) + \alpha \theta(x, t) (1 - \theta(x, t)) \\ \theta(0, t) = \theta(L, t) = 0 \end{cases},$$

dove abbiamo supposto che il nostro “ambiente” sia il segmento $[0, L]$ dell'asse reale e che fuori da tale segmento non sia possibile la sopravvivenza (questo è il significato delle condizioni al bordo $\theta(0, t) = \theta(L, t) = 0$). Un approccio naturale alla soluzione di tale problema è la linearizzazione dell'equazione FKPP intorno alla soluzione stazionaria spazialmente omogenea $\theta(x, t) = 0$. In questo modo il problema si riduce allo studio degli autovalori associati all'operatore $[D \partial_{xx}^2 + \alpha]$ che emerge dalla linearizzazione dell'equazione FKPP. Infatti è attraverso gli autovalori che si riesce a stabilire se una soluzione stazionaria è destinata a sopravvivere (se l'autovalore associato è maggio-

re o uguale a zero) o a scomparire (se l'autovalore associato è minore di zero). Tali autovalori sono

$$\lambda_n = \alpha \left[1 - n^2 \left(\frac{L_c}{L} \right)^2 \right], \quad n = 1, 2, \dots$$

con $L_c = \pi \sqrt{D/\alpha}$. Come conseguenza, la popolazione può sopravvivere se e solo se almeno uno degli autovalori è non negativo, per cui deve essere $L \geq L_c$. Questa conclusione, ottenuta per l'equazione linearizzata, continua a valere anche per l'equazione completa.

Questo risultato sebbene sia stato ottenuto usando un modello estremamente stilizzato, può essere utilizzato, con piccoli aggiustamenti (che in ogni caso non ne alterano la sostanza) per la progettazione di oasi ecologiche.

3.2 – Propagazione di fronti

Una tra le più importanti caratteristiche dell'equazione FKPP in sistemi estesi è lo sviluppo e la propagazione di fronti. Un fronte è una zona di raccordo tra parti del sistema che hanno proprietà qualitativamente diverse, per esempio “alberi bruciati” vs “alberi intatti” nella propagazione di un incendio, oppure “popolazione malata” vs “popolazione sana” nel caso della propagazione di una malattia infettiva. Quando tale zona di confine si sposta con una certa velocità si dice che ha luogo la propagazione di un fronte; lo spostamento della zona di confine si dice “travelling wave”, ossia onda viaggiante. Dal punto di vista matematico, partendo da una condizione iniziale $\theta(x, 0) = 1$ per $x < 0$ (“alberi bruciati” o “popolazione malata” per riprendere gli esempi citati sopra) e $\theta(x, 0) = 0$ per $x \geq 0$ (“alberi intatti” o “popolazione sana”) nella dinamica dell'equazione FKPP si instaura velocemente una soluzione di tipo travelling wave della forma

$$\theta(x, t) = F(x - v_f t)$$

ove $F(z)$, funzione monotona, decresce da 1 (per $z \rightarrow -\infty$) a 0 (per $z \rightarrow \infty$). La $\theta(x, t) = F(x - v_f t)$ viene detta onda viaggiante perché presenta la stessa configurazione del campo θ in posizioni sempre più distanti al passare del tempo. Se fissiamo il tempo t e cerchiamo la nuova posizione in cui $\theta(x, t) = \theta_0$ si ha

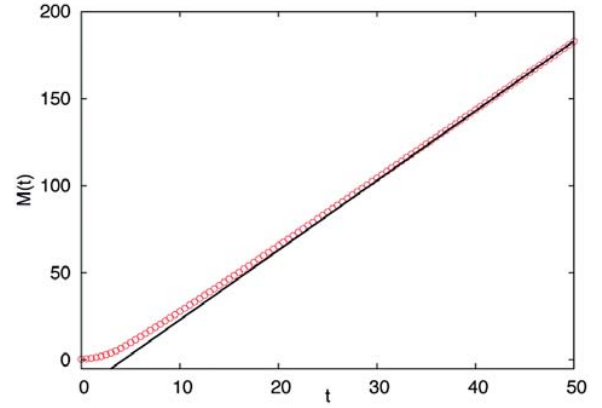
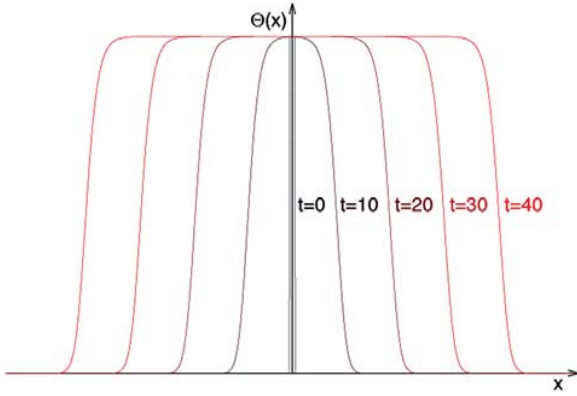


FIGURA 7 – Propagazione di un fronte nel caso dell’equazione FKPP in ambiente omogeneo. Nel grafico di sinistra è mostrata l’evoluzione del fronte viaggiante a differenti tempi, mentre nel grafico di destra è mostrata l’evoluzione della quantità di prodotti di reazione al variare nel tempo (pallini rossi) con l’andamento atteso $M(t) \simeq 2v_f t$.

$\theta_0 = \theta(x, t) = F(x - v_f t) = F(x_0) = \theta_0$ e quindi si ottiene $x = x_0 + v_f t$, ossia il punto x nel quale si ha una concentrazione del campo pari a θ_0 si sposta nel tempo con velocità v_f (vedi figura 7).

Gli aspetti qualitativamente importanti sono due: la velocità del fronte v_f e la sua larghezza, cioè l’estensione della zona di raccordo tra 1 e 0. Nei lavori del 1937 Fisher, Kolmogorov, Petrovskij e Piskunov mostrarono che, nel caso di condizioni iniziali localizzate, ossia $\theta(x, 0) \neq 0$ solo in una regione finita dello spazio, la velocità del fronte è $v_f = 2\sqrt{\alpha D}$ e che la configurazione del fronte per valori piccoli di concentrazione è esponenziale: $F(z) = \exp(-z/\xi)$ dove $\xi = \sqrt{D/\alpha}$ è proporzionale all’ampiezza del fronte.

È interessante notare che per la propagazione del fronte la forma specifica del termine di reazione non è rilevante a patto di avere una funzione convessa con derivata positiva nell’origine e negativa in $\theta = 1$. Sostituendo il termine di reazione $\theta(1 - \theta)$ con una generica funzione $f(\theta)$, con $f(0) = 0, f(1) = 0, f'(0) > 0, f'(1) < 0$ e $f''(\theta) < 0$ e si hanno sempre delle soluzioni travelling wave con velocità $v_f = 2\sqrt{\alpha D f'(0)}$.

Per misurare la velocità del fronte si può studiare l’evoluzione della quantità complessiva dei prodotti di reazione, definita come

$$(13) \quad M(t) = \int \theta(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}.$$

Come si può vedere nel pannello di destra della figura 7 si ha $M(t) \simeq 2v_f t$, ossia una crescita lineare nel tempo dei prodotti di reazione. In questo caso è presente il fattore 2 perchè si hanno due fronti distinti, uno che si propaga verso destra ed uno che si propaga verso sinistra.

Concludiamo questo paragrafo facendo notare che anche se l’equazione FKPP è una semplice modellizzazione matematica di un processo di reazione e diffusione essa è stata applicata con successo alla propagazione di fronti in casi reali che vanno dalla propagazione di batteri alla propagazione dei geni umani nelle popolazioni, dalla diffusione dei linguaggi alla propagazione di malattie infettive (come nel caso dell’epidemia di peste nera nel medioevo).

3.3 – Reazione su network

Visto il crescente interesse per le dinamiche su reti, discutiamo brevemente alcuni aspetti dei processi di reazione e diffusione su grafi. La generalizzazione dell’equazione FKPP per sistemi eterogenei è possibile attraverso l’operatore di diffusione su grafo (vedi equazione (9)) con l’aggiunta di un termine di reazione

$$(14) \quad \frac{d\theta_i(t)}{dt} = D \sum_j \Delta_{ij} \theta_j(t) + \alpha f(\theta_i(t)).$$

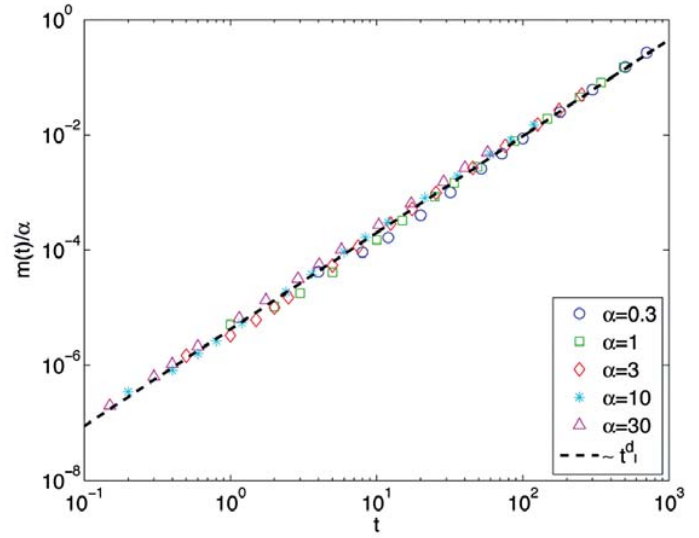
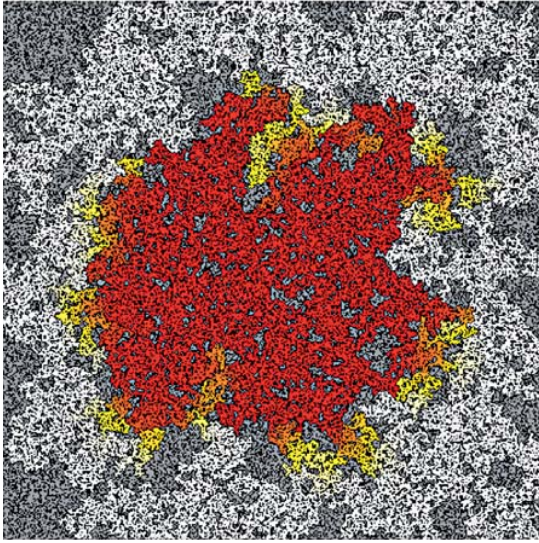


FIGURA 8 – Propagazione di un fronte nel caso dell’equazione FKPP in ambiente eterogeneo. Il grafo su cui avviene la dinamica di reazione/diffusione è un reticolo quadrato di percolazione nel quale ogni sito è collegato o meno (con probabilità p) ai siti vicini. Se p è maggiore di un valore critico, p_c , allora nel limite di sistema arbitrariamente grande con probabilità uno si realizza la percolazione, cioè esiste un percorso che attraversa il sistema (backbone di percolazione). Il grafico di sinistra è stato ottenuto nel caso $p = p_c \simeq 0.592746\dots$. Con il colore rosso sono rappresentati quei siti nei quali è avvenuta la reazione ($\theta \sim 1$), con il giallo la zona di transizione e con il bianco quelli nei quali la reazione non è praticamente ancora avvenuta ($\theta \sim 0$). Con il grigio sono rappresentati i siti non connessi al backbone di percolazione. Nella figura di destra è mostrata l’evoluzione della quantità di prodotti di reazione al variare nel tempo e per diversi valori della velocità di reazione α . La linea tratteggiata mostra l’andamento a potenza con la dimensione di connessione $M(t) \sim t^{d_l}$ con $d_l = 1.67$.

Il problema generale della propagazione su grafi (che sia la propagazione di informazione su internet, oppure la propagazione di epidemie nel mondo attraverso il network degli aeroporti) è molto complicato e in generale dipende fortemente dal tipo di grafo sottostante.

Nel caso di grafi con struttura self-similare (vedi figura 5) si può mostrare come l’andamento della propagazione dipende da una specifica dimensione del grafo, detta dimensione di connessione, che misura il grado di crescita del numero di siti raggiungibili al crescere del numero di passi effettuati da un walker (vedi Appendice). In effetti si può vedere che, partendo da una condizione iniziale localizzata, il volume dello spazio occupato dai prodotti di reazione segue un andamento del tipo $M(t) \sim t^{d_l}$ dove in casi semplici d_l è un numero intero (per esempio nella propagazione in mezzi omogenei unidimensionali si ha $d_l = 1$, nella propagazione nello spazio omogeneo in tre dimensioni si ha $d_l = 3$) mentre nel caso di strutture eterogenee d_l è la dimensione di connessione del sistema che in

genere è non intera (nel caso di figura 8 si ha $d_l = 1.67$ che è la dimensione di connessione sul backbone di percolazione per un reticolo quadrato).

Un altro caso molto importante è quello della propagazione su grafi random. Esistono molti modi per costruire un grafo random ma quello più semplice consiste nell’inserire, con probabilità p , un link tra due degli N siti del grafo. Questa procedura dà luogo al cosiddetto grafo di Erdős/Renyi. In funzione del valore di p si hanno grafi con struttura qualitativamente molto differenti: se definiamo il numero medio di connessioni per ogni sito $\langle k \rangle = p(N - 1)$, si ha che se p è maggiore del valore critico $p_c = \log(N)/N$ allora si ha un grafo connesso, cioè, nel caso di N grandi, da ogni sito si può raggiungere ogni altro sito. Al contrario se $p < p_c$ il grafo è composto da diverse parti non connesse tra loro (vedi figura 9).

Per grafi di Erdős/Renyi completamente connessi e con un grandissimo numero di siti, il numero di siti raggiungibili in un certo numero di passi cresce esponenzialmente all’aumentare del numero di pas-

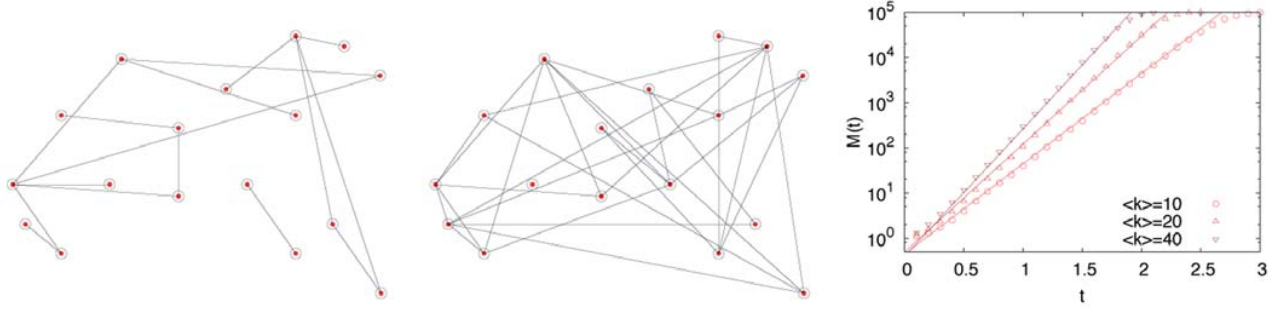


FIGURA 9 – I due grafici di sinistra e centrale sono esempi di grafi random con diverse probabilità di avere un link tra coppie di siti, in particolare nel grafico di sinistra si ha $p < p_c$ mentre nel grafico centrale si ha $p > p_c$. Nel grafico di destra è mostrata l'evoluzione esponenziale della quantità di prodotti di reazione per diversi grafi a diversi valori di p (tutti con $p > p_c$) a cui corrispondono diversi valori di $\langle k \rangle$.

si. Infatti, per ogni nuovo sito raggiunto, al passo successivo si possono visitare un numero di nuovi siti pari a $\langle k \rangle$. Come mostrato nel pannello di destra della figura 9 la quantità complessiva dei prodotti di reazione cresce esponenzialmente nel tempo, $M(t) \sim e^{at}$, con esponente a che dipende dal numero medio di connessioni, $a \sim \log(\langle k \rangle)$ (vedi figura 9).

Appendice

Dimensioni di un grafo

Consideriamo un generico grafo composto da N nodi, L connessioni e con matrice di adiacenza A_{ij} . In un processo di diffusione standard in uno spazio a d dimensioni (vedi equazioni (3) e (4)) la densità di probabilità del tempo di ritorno di un walker al punto iniziale è

$$P(t) \sim t^{-d/2}.$$

Nel caso di diffusione su un grafo si ha

$$P(t) \sim t^{-d_s/2},$$

ove d_s è la dimensione spettrale che è connessa alla densità degli autovalori dell'operatore di diffusione sul grafo $\Delta_{ij} = A_{ij}/k_j - \delta_{ij}$ (vedi formula (9)).

Un'altra dimensione rilevante per i processi di trasporto su grafo è quella frattale d_f . Se un grafo può essere immerso in uno spazio Euclideo si considerari una sfera di raggio ℓ e si calcoli il numero di nodi del grafo, $N(\ell)$, che si trovano al suo interno: si ha il seguente scaling

$$N(\ell) \sim \ell^{d_f}.$$

Concludiamo con la dimensione di connettività d_l ; fissato un dato vertice x_0 , si calcoli il numero di vertici $N(x_0, \ell)$ che si possono connettere ad esso con un numero massimo di passi pari a ℓ : si ha il seguente scaling

$$N(x_0, \ell) \sim \ell^{d_l}.$$

$N(x_0, \ell)$ è anche il numero di vertici diversi che possono essere toccati da un numero arbitrariamente elevato di walker che partono dallo stesso nodo x_0 in ℓ passi. Ovviamente se il grafo è un reticolo regolare di dimensione d , con link a primi vicini si ha $d_f = d_s = d_l = d$.

Una considerazione importante da fare è che la dimensione spettrale e quella di connettività sono proprietà puramente topologiche, al contrario la dimensione frattale ha senso solo se il grafo è immerso in uno spazio.

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

Diffusione e trasporto:

- J. P. BOUCHAUD and A. GEORGES, *Anomalous diffusion in disordered media*. Phys. Rep., **195**, 127 (1990).
- A. CRISANTI, M. FALCIONI, G. PALADIN and A. VULPIANI, *Lagrangian chaos: transport, mixing and diffusion in fluids* Riv. Nuovo Cimento **14**, 1 (1991).
- J. KLAFTER and I. M. SOKOLOV, *First steps in random walks: from tools to applications* (Oxford University Press, New York, 2011).
- A. J. MAJDA and P. R. KRAMER, *Simplified models for turbulent diffusion: Theory, numerical modelling, and physical phenomena*. Phys. Rep., **314**, 237 (1999).
- J. B. WEISS and A. PROVENZALE (Curatori), *Transport and mixing in geophysical flows* (Springer-Verlag, 2007).

Reazione-diffusione e sue applicazioni:

- M. ABEL, A. CELANI, D. VERGNI and A. VULPIANI, *Front propagation in laminar flows*, Phys. Rev. E, **64**, 046307 (2001).
- R. A. FISHER, *The wave of advance of advantageous genes*. Ann. Hum. Genet., **7**, 355 (1937).
- A. N. KOLMOGOROV, I. G. PETROVSKII, N. S. PISKUNOV, *A study of the diffusion equation with increase in the quantity of matter, and its application to a biological problem*, Bull. Moscow Univ. Math., A **1**, 1 (1937).
- R. MANCINELLI, D. VERGNI and A. VULPIANI, *Front propagation in reactive systems with anomalous diffusion*. Physica D, **85**, 175 (2003).
- V. MENDEZ, S. FEDOTOV and W. HORSTHEMKE, *Reaction-Transport Systems: Mesoscopic Foundation, Fronts, and Spatial Instabilities* (Springer-Verlag, 2010).
- Z. NEUFELD and E. HERNÁNDEZ-GARCÍA, *Chemical and Biolo-*

gical Processes in Fluid Flows: A Dynamical Systems Approach (World Scientific, 2009).

- M. SERVA, D. VERGNI and A. VULPIANI, *Linear and anomalous front propagation in systems with non-Gaussian diffusion: The importance of tails* Physical Review E **94**, 012141 (2016).

Grafi, random walk e reazione-diffusione su strutture discrete:

- F. BIANCO, S. CHIBBARO, D. VERGNI and A. VULPIANI, *Reaction spreading on percolating clusters*, Phys. Rev. E, **87**, 062811 (2013).
- P. BLANCHARD and D. VOLCHENKOV, *Random Walks and Diffusions on Graphs and Databases* (Springer-Verlag, 2011).
- B. BOLLOBÁS, *Modern Graph Theory* (Springer-Verlag, 1998).
- R. BURIONI and D. CASSI, *Random walks on graphs: ideas, techniques and results* J Phys A **38**, R45 (2005).
- R. BURIONI, S. CHIBBARO, D. VERGNI and A. VULPIANI, *Reaction spreading on graphs*. Phys. Rev. E, **86**, 055101 (2012).



Maurizio Serva

Maurizio Serva è professore associato di Fisica Matematica presso il Dipartimento di Ingegneria e Scienze dell'Informazione e Matematica (DISIM) dell'Università dell'Aquila, attualmente è docente di Meccanica Classica e Analitica e di Meccanica Quantistica. I suoi interessi scientifici riguardano i cammini aleatori con memoria, la meccanica statistica classica e quantistica su reti, i fenomeni di reazione-diffusione, i processi evolutivi in biologia e la linguistica quantitativa.

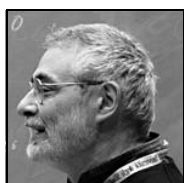
È stato visitatore presso diversi Istituti di Ricerca e Università in Madagascar, Danimarca, Francia, Germania, Brasile, Svezia e Svizzera.



Davide Vergni

Davide Vergni è ricercatore presso l'Istituto per le Applicazioni del Calcolo "Mauro Picone" del CNR (Roma).

I suoi interessi scientifici sono volti alla matematica applicata, in particolare riguardano modelli di diffusione e trasporto per sistemi reattivi in mezzo eterogenei, dinamica delle popolazioni, gestione e ottimizzazione di sistemi finanziari (debito pubblico, fondi pensione, mercato dell'energia).



Angelo Vulpiani

Angelo Vulpiani è professore ordinario di Fisica Teorica presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Roma "Sapienza"; attualmente è docente di Meccanica Statistica e Meccanica Statistica del Non Equilibrio.

I suoi interessi scientifici riguardano il caos e la complessità nei sistemi dinamici, la meccanica statistica di non-equilibrio e dei sistemi disordinati, la turbolenza sviluppata, i fenomeni di trasporto e reazione-diffusione.

È stato visitatore presso diversi Istituti di Ricerca e Università in Francia, Belgio, Svezia, Danimarca e Stati Uniti.

Tra i suoi libri non specialistici: *Determinismo e Caos* (Nuova Italia Scientifica, 1994, Carocci 2004) e *Caso, Probabilità e Complessità* (Ediesse, 2014).