Equazioni differenziali stocastiche

- Sono partite dallo studio del moto Browniano

- sono in grado di fare previsioni solo per i valori medi delle grandezze interessate

- equazione di Langevin

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\gamma\frac{dx}{dt} + \xi(t)$$

- applicazioni in fisica, biologia,. . . nei fenomeni di trasporto e dove esiste rumore

Cosa è ξ?

- la forza stocastica (noise) agisce molte volte tra due osservazioni di una variabile

- vale il teorema del limite centrale: sotto ipotesi molto generali sulla distribuzione di ξ

  $$\xi_1 + \xi_2 + \cdots \xi_N$$

  è distribuita come una gaussiana se N è abbastanza grande

- ξ allora può essere calcolata con Box-Müller

Collegamento con la temperatura

L'equazione di Langevin

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\gamma\frac{dx}{dt} + \xi(t)$$

può essere moltiplicata per x

$$mx\frac{d^2x}{dt^2} = m\frac{d}{dt}\left(x\frac{dx}{dt}\right) - m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 =$$
$$\frac{m}{2}\frac{d^2(x^2)}{dt^2} - m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 =$$
$$= -\frac{\gamma}{2}\frac{d(x^2)}{dt} + x\xi$$

Prendo ora il valor medio e osservo che $\langle x\xi\rangle = 0$

$$\frac{m}{2}\frac{d^2\langle x^2\rangle}{dt^2} - m\langle v^2\rangle = -\frac{\gamma}{2}\frac{d\langle x^2\rangle}{dt}$$

Dalla teoria cinetica so che $m\langle v^2\rangle = kT$ e quindi

$$m\frac{d^2\langle x^2\rangle}{dt^2} + \gamma\frac{d\langle x^2\rangle}{dt} = 2kT$$

La soluzione di quest'equazione è

$$\frac{d\langle x^2(t)\rangle}{dt} = \frac{2kT}{\gamma} + \exp(-\frac{\gamma}{m}t)$$

che per tempi grandi implica

$$\langle x^2(t)\rangle = \frac{2kT}{\gamma}t$$

In molti problemi fisici lo smorzamento è così grande che il termine con inerziale può essere trascurato, e l'equazione di Langevin diventa

$$\gamma\frac{dx}{dt} = \xi$$

Elevando il quadrato e facendo il valore medio ottengo

$$\gamma^2\frac{kT}{m} = \langle \xi^2\rangle = 2D$$

Per comodità d'ora in avanti scriverò, al posto di ξ, $\sqrt{2D}\xi$ con $\langle \xi^2\rangle = 1$

Tempo di Kramers

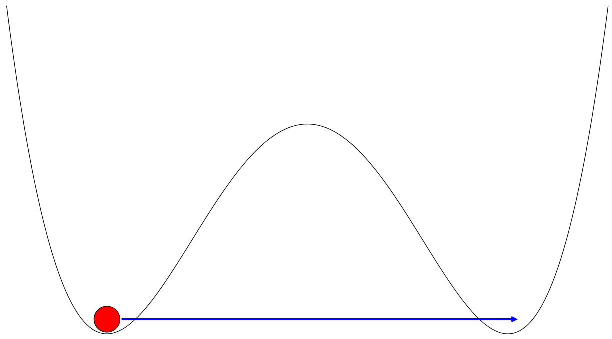
L'equazione sovrasmorzata per una particella in un potenziale $V(x)$ assume la forma

$$\dot{x}(t) = -V'(x) + \sqrt{2D}\xi(t) \qquad \langle \xi^2 \rangle = 1$$

suppongo di avere il potenziale di una doppia buca definito da

$$V(x) = x^4/4 - x^2/2$$

che ha due minimi in $x = \pm 1$. Se una particella si trova inizialmente in un minimo, una combinazione favorevole delle forze stocastiche ξ la porterà, dopo un certo tempo, nell'altro minimo

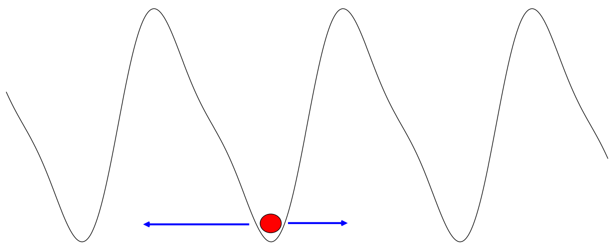


Il tempo medio per questa transizione è il *tempo di Kramers* T_K

Ratchets

Se il potenziale non è simmetrico, come per esempio il potenziale

$$V(x) = \sin(x) + \frac{1}{4}\sin(2x)$$



i tempi di Kramers per andare a destra e a sinistra sono diversi. Di conseguenza, anche se $\langle \xi \rangle = 0$ una particella si può muovere a destra o a sinistra. Data l'analogia col funzionamento della ruota dentata, sistemi di questo tipo si chiamano *ratchets*. È possibile modellare come ratchets i canali ionici delle cellule.

Metodi numerici Non si può risolvere l'equazione di Langevin così come è stata scritta: va riformulata come un'equazione integrale. Da

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

integrando tra 0 e h ottengo

$$x(t+h) = x(t) - \int_t^{t+h} V(x(u), u)\, du + \sqrt{2D} Z_1(h)$$

dove $Z_1(h)$ è una gaussiana (perché somma di gaussiane) ed ha $\langle Z_1^2(h) \rangle = h$. Questa equazione è in realtà un po' ambigua, perché l'integrale di una variabile stocastica può essere definito in vari modi; in uno di questi vale la regola di Leibnitz per le derivate e quindi l'integrazione per parti. Si trova che un buon metodo di integrazione è quello di Heun per le SDE ($f(x,t) = -V'(x,t)$)

$$\begin{aligned} \bar{x} &= x_0 + \sqrt{2D} Z_1(h) + h f(x_0, t) \\ x &= x_0 + \sqrt{2D} Z_1(h) + \frac{1}{2} h \left(f(x_0, t) + f(\bar{x}, t + h) \right) \end{aligned}$$