

## 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

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

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

## Cosa è $\xi$ ?

- 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  $\xi$

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

è distribuita come una gaussiana se  $N$  è abbastanza grande

- $\xi$  allora può essere calcolata con Box-Müller

## Collegamento con la temperatura

L'equazione di Langevin

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

può essere moltiplicata per  $x$

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

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

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

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

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

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  $\xi$ ,  $\sqrt{2D}\xi$  con  $\langle \xi^2 \rangle = 1$

## Tempo di Kramers

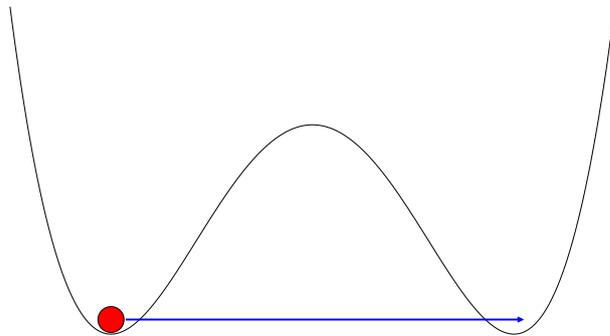
L'equazione sovrasmorzata per una particella in un potenziale  $V(x)$  assume la forma

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

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  $\xi$  la porterà, dopo un certo tempo, nell'altro minimo



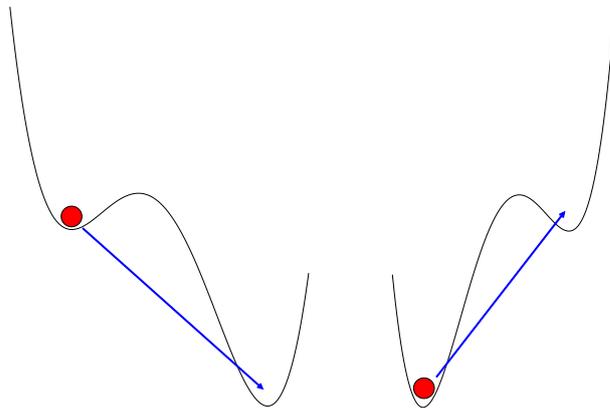
Il tempo medio per questa transizione è il *tempo di Kramers*  $T_K$

## Sincronizzazione

Posso ora perturbare il sistema con una forzante periodica

$$F(t) = A \cos(\omega t)$$

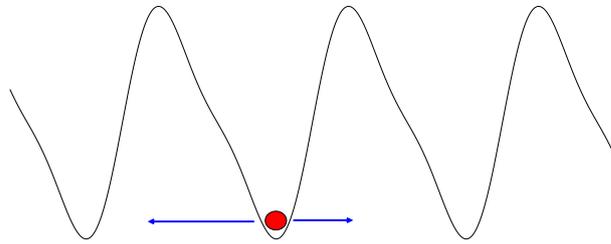
e vedere come cambia il numero di transizioni. Si osserva che per un certo valore di  $\omega$  il tempo di Kramers è minimo, quindi le transizioni tra due stati sono più veloci, e che esiste una precisa relazione tra il periodo  $T_\omega = 2\pi/\omega$  della forzante e il tempo di Kramers; questo fatto permette di “pilotare” un sistema quando si voglia accelerare una transizione o rallentarla.



## 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 ( $f(x, t) = -V'(x, t)$ )

$$\bar{x} = x_0 + \sqrt{2D}Z_1(h) + hf(x_0, t)$$

$$x = x_0 + \sqrt{2D}Z_1(h) + \frac{1}{2}h(f(x_0, t) + f(\bar{x}, t+h))$$

Va notato che  $x^2 \sim t$ , quindi espandere in  $x$  vuol dire espandere in  $\sqrt{t}$ . Lo stesso si vede dal termine  $Z_1(h)$ .