1 INTEGRALI DI CAMMINO

1.1 UN TERZO APPROCCIO

1.1.1 Probabilità dei cammini

Si studia ora un terzo approccio, quello degli integrali di cammino. Se con il propagatore si lavora in termini di probabilità che la particella arrivi in x_f partendo da x_0, sostanzialmente "disinteressandosi" di quello che succede in mezzo, un approccio alla Langevin consiste nel costruire le possibili traiettorie e poi farne una statistica. Gli integrali di cammino uniscono, in un certo senso, questi due concetti, nel senso che l'oggetto di studio diventa la probabilità di una certa traiettoria, date le condizioni al contorno. A questo proposito, l'oggetto statistico diventa appunto la singola traiettoria X e l'obiettivo sarà quello di scrivere una probabilità condizionata del tipo

$$p(X\,|\,x_0, t_0)$$

fissati la partenza e l'arrivo. Ora, la probabilità congiunta

$$p(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1\,|\,x_0, t_0)$$

condizionata all'essere partiti all'istante iniziale in x_0, può essere riscritta per il teorema di Bayes come prodotto di due propagatori

$$p(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_2, t_2\,|\,x_1, t_1; x_0, t_0) \cdot p(x_1, t_1\,|\,x_0, t_0)$$

Sfruttando ora il fatto che il processo è markoviano e che, quindi, in t_n dipende solo dal passo in t_{n-1}, questa densità di probabilità si può mettere in forma di prodotto di n propagatori

$$\prod_{k=1}^{n} p(x_k, t_k\,|\,x_{k-1}, t_{k-1})$$

Siccome il processo è diffusivo, si conosce la forma del propagatore, per cui si ha

$$= \prod_{k=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{4\pi D\Delta t}} e^{-\frac{(x_k - x_{k-1})^2}{4D\Delta t}}$$

Essendo il denominatore costante, questa produttoria può essere facilmente trasformata nella sommatoria ad esponente

$$= \frac{1}{\left[\sqrt{4\pi D\Delta t}\right]^n} e^{-\frac{1}{4D}\sum_{k=1}^{n}\frac{(\Delta x_k)^2}{(\Delta t)^2}\cdot\Delta t}$$

dove nella frazione ad esponente è stato fatto comparire $(\Delta t)^2$ a denominatore per poter evidenziare un termine $\dot{X}^2$. Tralasciando per un attimo il fattore di normalizzazione e prendendo il limite per $n \to \infty$ si ottiene che

$$p(X\,|\,x_0, t_0) \propto e^{-\frac{1}{4D}\int_{t_0}^{t_f} \dot{X}^2(t')\,dt'}$$

Indicando ora con $\mathcal{D}X$ il limite continuo di $\prod_{k=1}^{n} dx_k$, si ottiene la densità di probabilità normalizzata della traiettoria

$$p(X\,|\,x_0, t_0) = \frac{\exp\left[-\frac{1}{4D}\int_{t_0}^{t_f} \dot{X}^2(t')\,dt'\right]}{\int \exp\left[-\frac{1}{4D}\int_{t_0}^{t_f} \dot{X}^2(t')\,dt'\right] \mathcal{D}X}$$

Nella relazione così ricavata si riconosce immediatamente l'azione classica

$$S = \frac{1}{4D}\int_{t_0}^{t_f} \dot{X}^2(t')\,dt'$$

Allora, per trovare la traiettoria più probabile, sarà sufficiente minimizzare S, usando il calcolo variazionale:

$$\begin{cases} X(t) \to X(t) + \delta X(t) \\ \\ \delta(X_0) = \delta(X_f) = 0 \end{cases}$$

dove, come unico vincolo, si richiede che gli estremi siano fissati. Per minimizzare l'azione occorre dunque scrivere

$$\delta S = \frac{1}{4D}\int_{t_0}^{t_f} \delta\dot{X}^2(t')\,dt' = \frac{1}{2D}\int_{t_0}^{t_f} \dot{X}(t')\delta\dot{X}(t')\,dt' = 0$$

A questo punto si risolve integrando per parti

$$\delta S = \frac{1}{2D}\left[\dot{X}(t)\delta X(t)\right]_{t_0}^{t_f} - \frac{1}{2D}\int_{t_0}^{t_f} - \frac{1}{2D}\int_{t_0}^{t_f} \ddot{X}(t')\delta X(t')\,dt' =$$

$$= -\frac{1}{2D}\int_{t_0}^{t_f} \ddot{X}(t')\delta X(t')\,dt' = 0$$

dove il termine integrato è nullo per i vincoli richiesti al contorno. Ora, dovendo quanto scritto valere per ogni δX, deve necessariamente essere

$$\ddot{X}_{cl}(t) = 0 \tag{1}$$

Questo non basta, ovviamente, per dire che si è trovato davvero un minimo, però è possibile dimostrare che si ha $\delta^2 S > 0$. Quindi bisogna risolvere la (1), che ha come soluzione la retta che va da (x_0, t_0) a (x_f, t_f). Quindi la traiettoria classica, cioè quella che minimizza S, è semplicemente

$$X_{cl} = x_0 + \frac{t - t_0}{t_f - t_0}(x_f - x_0)$$

1.1.2 Dispersione delle traiettorie

Per vedere quindi la dispersione delle traiettorie intorno ad X_{cl} si può scrivere la generica traiettoria come somma di X_{cl} e un contributo di fluttuazione $\tilde{X}$:

$$X(t) = X_{cl}(t) + \tilde{X}(t)$$

A questo punto, quello che si vuole ottenere è una densità di probabilità della traiettoria, per cui si inizia ad esprimere S in funzione di $\tilde{X}$:

$$\dot{X}(t) = \frac{x_f - x_0}{t_f - t_0} + \dot{\tilde{X}}(t)$$

$$\dot{X}^2(t) = \left(\frac{x_f - x_0}{t_f - t_0}\right)^2 + 2\frac{x_f - x_0}{t_f - t_0}\dot{\tilde{X}}(t) + \dot{\tilde{X}}^2(t)$$

e quindi l'azione si può riscrivere come

$$S = \frac{1}{4D}\int_{t_0}^{t_f}\left(\frac{x_f - x_0}{t_f - t_0}\right)^2 dt' + \frac{2}{4D}\int_{t_0}^{t_f}\frac{x_f - x_0}{t_f - t_0}\dot{\tilde{X}}(t')\,dt' +$$

$$+\frac{1}{4D}\int_{t_0}^{t_f}\dot{\tilde{X}}^2(t')\,dt' =$$

$$= \frac{(x_f - x_0)^2}{4(t_f - t_0)} + 0 + \frac{1}{4D}\int_{t_0}^{t_f}\dot{\tilde{X}}^2(t')\,dt'$$

dove il secondo integrale si è annullato per i soliti vincoli agli estremi. Quindi anche l'azione si può riscrivere come il contributo di un termine classico ed uno di fluttuazione

$$S = S_{cl} + \tilde{S} \qquad \text{dove} \qquad \tilde{S} = \frac{1}{4D}\int_{t_0}^{t_f}\dot{\tilde{X}}^2(t')\,dt'$$

Allora la densità di probabilità diventa

$$p(X|x_0, t_0) = \frac{e^{-S}}{\int e^{-S}\mathcal{D}X} = \frac{\exp\left[-\frac{1}{4D}\frac{(x_f - x_0)^2}{t_f - t_0} - \frac{1}{4D}\int_{t_0}^{t_f}\dot{\tilde{X}}^2(t')\,dt'\right]}{\int \exp\left[-\frac{1}{4D}\frac{(x_f - x_0)^2}{t_f - t_0} - \frac{1}{4D}\int_{t_0}^{t_f}\dot{\tilde{X}}^2(t')\,dt'\right]\mathcal{D}X}$$

Ora si può scrivere $X = (x_f, X)$ e

$$\mathcal{D}X = dx_f\,\mathcal{D}\tilde{X}$$

quindi, siccome si ottiene a denominatore l'integrale gaussiano

$$\int e^{-\frac{1}{4D}\frac{(x_f - x_0)^2}{t_f - t_0}}\,dx_f\,e^{-\tilde{S}}\mathcal{D}\tilde{X} = \sqrt{4\pi D(t_f - t_0)}\int e^{-\tilde{S}}\mathcal{D}\tilde{X}$$

allora si ha che

$$p(x_f, \tilde{X} | x_0, t_0) = \frac{e^{-\frac{1}{4D}\frac{(x_f - x_0)^2}{t_f - t_0}} \cdot e^{-\tilde{S}}}{\sqrt{4\pi D(t_f - t_0)} \int e^{-\tilde{S}} \mathcal{D}\tilde{X}}$$

Quindi si è riusciti a fattorizzare la probabilità della singola traiettoria come il prodotto di un propagatore gaussiano e la probabilità di una fluttuazione attorno alla traiettoria classica, che era quanto si voleva ottenere:

$$p(X | x_0, t_0) = p(x_f, \tilde{X} | x_0, t_0) = p(x_f, t_f | x_0, t_0) p(\tilde{X})$$

1.1.3 Momenti

Ci sono due conseguenze piuttosto evidenti in quanto appena ricavato:

- integrando la relazione appena trovata su tutte le traiettorie, si ritrova il propagatore gaussiano;
- la probabilità delle fluttuazioni è simmetrica, per cui $< \tilde{X} >= 0$

Si può ora passare a valutare il secondo momento. Innanzitutto occorre dire che $\tilde{X}(t)$ è un processo gaussiano che ad ogni tempo ha come condizioni $\tilde{X}(t_0) = \tilde{X}(t_f) = 0$. Per questo viene detto **ponte browniano**, in quanto collega due estremi fissati con una traiettoria che in tutte le realizzazioni cambia di forma. Si può scrivere

$$\tilde{X}(t) = X(t) - X_{cl}$$

e, siccome sia $X(t)$ che x_f si possono scrivere usando un processo di Wiener

$$X(t) = x_0 + \sqrt{2D} W_{t-t_0} \qquad \text{e} \qquad x(t_f) = x_0 + \sqrt{2D} W_{t_f - t_0}$$

allora si ha che

$$\tilde{X}(t) = x_0 + \sqrt{2D} W_{t-t_0} - x_0 - \frac{t - t_0}{t_f - t_0} \left(x_0 + \sqrt{2D} W_{t_f - t_0} - x_0 \right)$$

e quindi

$$\tilde{X}(t) = \sqrt{2D} \left[W_{t-t_0} - \frac{t - t_0}{t_f - t_0} W_{t_f - t_0} \right]$$

Grazie a questa espressione il secondo momento (che coincide con la varianza, essendo nulla la media) si può calcolare molto facilmente:

$$\begin{aligned} < \tilde{X}^2(t) > = 2D \Bigg[&< W_{t-t_0}^2 > -2 \frac{t - t_0}{t_f - t_0} < W_{t-t_0} W_{t_f - t_0} > + \\ &+ \left(\frac{t - t_0}{t_f - t_0} \right)^2 < W_{t_f - t_0}^2 > \Bigg] = \end{aligned}$$

Ora si sa che

- $< W^2_{t-t_0} >= t - t_0$
- $< W_{t-t_0} W_{t_f-t_0} >= \min(t - t_0, t_f - t_0) = t - t_0$
- $< W^2_{t_f-t_0} >= t_f - t_0$

e quindi

$$
\begin{aligned}
< \tilde{X}^2(t) > &= 2D \left[t - t_0 - 2\frac{(t-t_0)^2}{t_f - t_0} + \frac{(t-t_0)^2}{t_f - t_0} \right] = \\
&= 2D \left[\frac{(t_f - t_0)(t - t_0) - (t - t_0)^2}{t_f - t_0} \right] = \\
&= 2D \frac{t - t_0}{t_f - t_0} [t_f - t_0 - t + t_0] = \\
&= 2D \frac{(t - t_0)(t_f - t)}{t_f - t_0}
\end{aligned}
$$

Si è quindi trovato che l'aprirsi delle traiettorie intorno a X_{cl} è rappresentato da una parabola con la concavità rivolta verso il basso. Il vertice di questa parabola si ha in $t = (t_0 + t_f)/2$, a cui corrisponde il massimo di $< \tilde{X}^2(t)$. Questo non è sorprendente, perché si tratta di un processo diffusivo senza una forzante esterna, le cui traiettorie si aprono secondo la sua tipica dinamica, ma poi devono convergere a x_f. La cosa notevole è che l'apertura della parabola, e quindi delle traiettorie, è proporzionale a D, che gioca lo stesso ruolo di $\hbar$ in meccanica quantistica.

1.2 LA FORMULA DI FEYNMAN-KAC

Quale frazione di tempo un processo diffusivo trascorre sul semiasse positivo delle x? Sono più probabili le traiettorie che continuano ad oscillare intorno all'origine, oppure quelle che si dirigono verso valori grandi di x, per poi tornare verso il semiasse negativo? Per rispondere a questa domanda Kac si è concentrato su funzionali del processo di Wiener della forma

$$\alpha = \int_0^t V(X_\tau)\, d\tau$$

dove

$$\begin{cases} X_\tau = \sqrt{2D} W_\tau + z \\ V(X_\tau) \quad \text{tale che } \alpha \text{ sia finito} \end{cases}$$

Per studiare questo problema, Kac utilizzò l'approccio di Feynman degli integrali di cammino.

Avendo chiamato la condizione iniziale z, la probabilità di una traiettoria è

$$p(X \,|\, z, t_0) = \lim_{\Delta t \to 0} p(x_n, t_n; x_{N-1}, t_{N-1}; \ldots; x_1, t_1 \,|\, z, t_0) =$$

$$= \lim_{N \to \infty} \prod_{k=1}^{N} p(x_k, t_k \,|\, x_{k-1}, t_{k-1}) = \frac{e^{-S}}{\int e^{-S} \mathcal{D}X}$$

con

$$S = \frac{1}{4D} \int_{t_0}^{t_f} \dot{X}^2(t)\, dt$$

Kac si concentrò, dunque, sulle proprietà di α: evidentemente è un processo stocastico, dunque ha una densità di probabilità di cui è possibile calcolare i momenti. In generale, per calcolarli, si parte dalla funzione generatrice dei momenti $g(\lambda) =< e^{-\lambda\alpha} >$. Kac utilizzò, a questo scopo, gli integrali di cammino. Quindi, seguendo il suo lavoro, si può scrivere che

$$< e^{-\lambda\alpha} >= \frac{\int e^{-\lambda\alpha} e^{-S(X)} \mathcal{D}X}{\int e^{-S(X)} \mathcal{D}X} = \frac{\int e^{-S(X) - \lambda \int_0^\tau V(X_t)\, dt} \mathcal{D}X}{\int e^{-S(X)} \mathcal{D}X}$$

Come sempre, non si rimane nel continuo, bensì si passa al discreto e poi si prende il limite per $N \to \infty$:

$$g(\lambda) = \lim_{N \to \infty} \int e^{-\lambda \sum_{k=1}^{N} V(x_k) \Delta t} \prod_{k=1}^{N} p(x_k, t_k \,|\, x_{k-1, t_{k-1}}) \prod_{k=1}^{N} dx_k$$

Una sottigliezza: con questa discretizzazione si è definito $V(x_k)$ nel futuro. Si può dimostrare che comunque tutte le altre scelte, per esempio alla Stratonovich, sono equivalenti.

Il secondo passo è scrivere $g(\lambda)$ come l'integrale di una certa funzione Ψ tale per cui

$$g(\lambda) = \int \Psi(x_N, t_N)\, dx_N$$

il che è equivalente ad aver definito

$$\Psi(x_N, t_N) \equiv \int \prod_{k=1}^{N-1} dx_k \cdot e^{-\lambda \sum_{k=1}^{N} V(x_k) \Delta t} \prod_{k=1}^{N} p(x_k, t_k \,|\, x_{k-1}, t_{k-1})$$

Questo è d'aiuto perché allora è possibile definire una relazione ricorsiva per la Ψ:

$$\Psi(x_N, t_N) = \int e^{-\lambda V(x_N) \Delta} p(x_N, t_N \,|\, x_{N-1}, t_{N-1}) \Psi(x_{N-1}, t_{N-1})\, dx_{N-1}$$

La forma di quest'ultima relazione ricorda l'equazione di Chapman-Kolmogorov; allo stesso modo si può eseguire un'espansione come quella di Kramers-Moyal, per ottenere

$$\Psi(x_{N-1}, t_{N-1}) = \Psi(x_N, t_{N-1}) - (x_N - x_{N-1})\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x_N, t_{N-1}) +$$

$$+\frac{(x_N - x_{N-1})^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x_N, t_{N-1})$$

A questo punto, ricordando che

$$p(x_N, t_N \,|\, x_{N-1}, t_{N-1}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D\Delta t}} e^{-\frac{(x_N - x_{N-1})^2}{4D\Delta t}}$$

si ottiene

$$\Psi(x_N, t_N) = \frac{e^{-\lambda V(x_N)\Delta t}}{\sqrt{4\pi D\Delta t}} \int e^{-\frac{(x_N - x_{N-1})^2}{4D\Delta t}} \left[\Psi(x_N, t_{N-1}) + \right.$$

$$\left. -(x_N - x_{N-1})\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x_N, t_{N-1}) + \frac{(x_N - x_{N-1})^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x_N, t_{N-1})\right] dx_{N-1}$$

Questo è un integrale gaussiano che si può risolvere tralasciando i termini di ordine superiore al secondo

$$\Psi(x_N, t_N) = e^{-\lambda V(x_N)\Delta t}\left[\Psi(x_N, t_{N-1}) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x_N, t_{N-1}) \cdot 2D\Delta t\right]$$

dove il termine con la derivata prima, integrando, si annulla, poiché l'integrale del valor medio di un processo diffusivo è nullo. Ora si può sviluppare nel tempo l'esponenziale per ottenere

$$\Psi(x_N, t_N) = [1 - \lambda V(x_N)\Delta t + \ldots]\left[\Psi(x_N, t_{N-1}) + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x_N, t_{N-1})\Delta t\right]$$

La relazione così scritta si può quindi riscrivere, tenendo conto solo dei termini dell'ordine di dt:

$$\Psi(x_N, t_N) = \Psi(x_N, t_{N-1}) - \lambda V(x_N)\Psi(x_N, t_{N-1})\Delta t + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x_N, t_{N-1})\Delta t$$

Ora si può portare $\Psi(x_N, t_{N-1})$ a primo membro e prendere il limite per $\Delta t \to \infty$:

$$\lim_{\Delta t \to \infty} \frac{\Psi(x_N, t_N) - \Psi(x_N, t_{N-1})}{\Delta t} = -\lambda V(x_N)\Psi(x_N, t_{N-1}) + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x_N, t_{N-1})$$

e ricavare infine

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t}(x, t) = D\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}(x, t) - \lambda V(x)\Psi(x, t)$$

simile all'equazione di Schrodinger, oppure a quella del calore con un raffreddamento non omogeneo. Per trovare $g(\lambda)$ occorre a questo punto risolvere questa equazione, con condizioni $\Psi(x,0) = \delta(x-z)$ e $\Psi(\pm\infty, t) = 0$, poi integrare

$$g(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t)\,dx$$

Essendo poi

$$g(\lambda) = \int e^{-\lambda\alpha} p(\alpha)\,d\alpha$$

per trovare la densità di probabilità voluta occorre infine antitrasformare.

1.3 TEOREMA DELL'ARCOSENO DI LEVY

Si può utilizzare la formula appena ricavata per calcolare il tempo che viene trascorso da un processo diffusivo sul semiasse positivo delle ascisse. A questo proposito si considera la variabile aleatoria T, il cosiddetto **tempo di residenza**, come un funzionale di un processo di Wiener

$$T = \int_0^t H(X_\tau)\,d\tau \qquad \text{con} \qquad X_\tau = \sqrt{2D}W_\tau$$

e H la funzione a gradino di Heavyside

$$H \equiv \begin{cases} 0 & \text{se} \quad t < 0 \\ \\ 1 & \text{se} \quad t \geqslant 0 \end{cases}$$

Per simmetria ci si aspetta ragionevolmente che sia $< T >= 1/2$ e che la frazione $f = T/t$ abbia la stessa densità di probabilità di $1-f$. Per trovare la densità di probabilità di T si può calcolare la funzione generatrice dei momenti

$$g(\lambda) =< e^{-\lambda T} >=< e^{-\lambda \int_0^t H(X_\tau\,d\tau)} >= \int_0^\infty e^{-\lambda T} p(T)\,dT$$

e poi antitrasformare, per trovare la $p(T)$. Per fare ciò si può risolvere il problema ausiliario, usando la formula di Feynman-Kac, e trovare una funzione Ψ tale per cui

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Psi}{\partial t} = D\dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \lambda H(x)\Psi \\ \\ \Psi(x,0) = \delta(x) \\ \\ \Psi(\pm\infty, t) = 0 \end{cases}$$

Questo si può risolvere attraverso il calcolo della trasformata di Laplace

$$\widehat{\Psi}(s) = \int_0^\infty e^{-st}\Psi(x,t)\,dt$$

che è soluzione dell'equazione

$$D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\widehat{\Psi}(s) - (\lambda H(x) + s)\,\widehat{\Psi}(s) = \delta(x)$$

Questa equazione va risolta separatamente a destra ed a sinistra dell'origine, vista la discontinuità indotta da $H(x)$ e poi opportunamente sistemata utilizzando anche la condizione di salto delle derivate. Da ciò si ricava

$$\widehat{\Psi}(x,s) = \begin{cases} \dfrac{e^{-\sqrt{\frac{\lambda+s}{D}}x}}{\sqrt{D}\left(\sqrt{\lambda+s}+\sqrt{s}\right)} \\[2ex] \dfrac{e^{\sqrt{\frac{s}{D}}x}}{\sqrt{D}\left(\sqrt{\lambda+s}+\sqrt{s}\right)} \end{cases}$$

Da qui è più conveniente calcolare dapprima

$$\widehat{g}(\lambda,s) = \int \widehat{\Psi}(x,s)\,dx = \frac{1}{\sqrt{s}\,\sqrt{\lambda+s}}$$

e da qui antitrasformare, scegliendo opportunamente il cammino γ in maniera tale da lasciare fuori i due poli in $s = 0$ e $s = -\lambda$, per ottenere

$$g(\lambda,t) = \frac{1}{2\pi i}\int_\gamma \frac{e^{st}}{\sqrt{s(\lambda+s)}}\,ds = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi/2} e^{-\lambda t\cos^2\vartheta}\,d\vartheta$$

Ora, ricordando che

$$g(\lambda) = \int_0^\infty e^{-\lambda T}p(T)\,dT$$

si può antitrasformare per arrivare ad avere

$$p(T) = \frac{1}{2\pi i}\int_\gamma e^{\lambda T}\,d\lambda\frac{2}{\pi}\int_0^{\pi/2} e^{-\lambda t\cos^2\vartheta}\,d\vartheta$$

Risolvendo, si giunge al risultato voluto, cioè

$$p(T) = \frac{1}{\pi\sqrt{T(t-T)}}$$

Questa è detta **legge dell'arcoseno di Lévy** perché la probabilità che la variabile T sia minore di un certo valore τ fissato è data dalla formula

$$P\left(T<\tau\right) = \int_0^\tau \frac{1}{\pi}\frac{1}{\sqrt{T(t-T)}}\,dT = \frac{2}{\pi}\arcsin\sqrt{\frac{\tau}{t}}$$

Dal grafico si nota subito il notevole fatto che la probabilità è concentrata su valori di tempo di residenza prossimi a $T = 0$ e a $T = t$, cioè le traiettorie che oscillano da un lato all'altro dell'origine sono molto meno probabili di quelle che permangono a lungo da un lato, oppure dall'altro.