

15 Da ME a FK

Introduzione	15.1, p. 58
Derivazione di Kramers Moyal	15.2, p. 58
Derivazione di Van Kampen	15.3, p. 59
Differenze tra le derivazioni	15.4, p. 60

15.1 Introduzione

Abbiamo visto in precedenza che a stazionarietà (o mandando a zero il passo del reticolo) un processo a salti poteva esser scritto con una FK. Il passaggio in generale può esser fatto sotto alcune condizioni, prendiamo la ME:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \int dx' [\omega(x|x')P(x') - \omega(x'|x)P(x)] \quad (15.1)$$

Possiamo scrivere una FK per questo processo della seguente forma:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \left[-\partial_x A_1(x) + \frac{1}{2} \partial_x^2 A_2(x) \right] P(x).$$

Se vale che ¹³ :

$$\omega_\delta(x'|x) = \phi \left(\frac{x' - x - A(x)\delta}{\sqrt{\delta}}, x \right).$$

Ed inoltre, definito l'integrale:

$$Q = \int dy \phi(y, x).$$

Si deve avere che i 3 seguenti integrali rimangono finiti (A_1 e A_2 entrano nella FK):

$$A_0(x) = \int dx' \omega_\delta(x'|x) = \frac{Q}{\delta}$$

$$A_1(x) = \int dx' (x' - x) \omega_\delta(x'|x) = A(x)Q$$

$$A_2(x) = \int dx' (x' - x)^2 \omega_\delta(x'|x) = \int dy y^2 \phi(y, x).$$

Esempio 15.1.1 (Random Walk). Nel caso del random walk si aveva:

$$x = nl.$$

$$\omega(x, x') = d(\delta_{x', x-1} + \delta_{x', x+1}).$$

Risolvendo per i momenti Q_i si ha:

$$A_0(x) = 2d$$

$$A_1(x) = 0$$

$$A_2(x) = 2l^2 d.$$

Se assumiamo $\delta = l^2$ e $D = l^2 d$ e mandiamo $l \rightarrow 0$ e $\delta \rightarrow 0$ si ha che

¹³scrivendo l'equazione per un processo di Wiener appare naturalmente una forma di questo tipo per ω

• $\omega \rightarrow \infty$.

• A_1 e A_2 rimangono finiti.

Di conseguenza come avevamo visto questo esempio si esprime tramite una FK:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}.$$

Esempio 15.1.2 (Distribuzione di Poisson). Nel caso della distribuzione di Poisson invece (lo sharp noise) quello che si ha è:

$$x = nl.$$

$$\omega(x|x') = d\delta_{x, x'+1}.$$

Quindi i momenti sono:

$$A_0(x) = d$$

$$A_1(x) = ld$$

$$A_2(x) = l^2 d.$$

Quindi non è possibile fissare finita né la quantità ld né la quantità $l^2 d$, in entrambi i casi uno tra Q_1 e Q_2 non è definito.

In questo secondo esempio non è possibile scrivere una Fokker Plank per il sistema. In precedenza infatti per risolvere questo caso abbiamo inserito il rumore ω sopra ad una funzione, tuttavia così facendo si risolve un altro problema e non quello in questione.

15.2 Derivazione di Kramers Moyal

Partiamo dalla ME di equazione 15.1:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \int dx' [\omega(x|x')P(x') - \omega(x'|x)P(x)].$$

Prendiamo il primo termine nella quadra e interpretiamolo come una funzione di x' :

$$\omega(x|x')P(x') = f(x').$$

Ipotizziamo che la ω sia un oggetto "stretto" ¹⁴, ovvero che la probabilità di fare salti "grandi" sia trascurabile. In questo modo possiamo espandere la $f(x')$ per piccoli x' (intorno a x):

$$f(x') = f(x) + (x' - x) \partial_x f(x)|_x \dots$$

Effettuiamo adesso un cambio di variabili:

$$x' = x - y \quad x = x' + y.$$

e riscriviamo l'espansione di $f(x')$ in funzione delle nuove:

$$\begin{aligned} \omega(x|x')P(x') = & \omega(x+y|x)P(x) + \\ & - y \partial_x \omega(x+y|x)P(x) + \\ & + \frac{1}{2} (-y)^2 \partial_x^2 \omega(x+y|x)P(x) \dots \end{aligned}$$

¹⁴questo è garantito dalla presenza di un momento secondo

Il vantaggio di questa scrittura è che il primo termine della somma cancella il secondo termine in quadra nella equazione 15.1. Quindi reinserendo all'interno dell'integrale si ottiene:

Espansione di Kramer-Moyal

$$\partial_t P = \sum_{n=1}^{\infty} \partial_{x^n} \frac{(-1)^n}{n!} A_n(x) P(x).$$

in cui:

$$A_n(x) = \int y^n \omega(x+y|x) dy.$$

Se ci fermiamo al secondo ordine otteniamo proprio la Fokker Plank citata nella scorsa lezione:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \left[-\partial_x A_1(x) + \frac{1}{2} \partial_{x^2}^2 A_2(x) \right] P(x).$$

Con questa derivazione non si capisce molto bene perché ci si debba fermare proprio al secondo ordine. Vediamo un modo più elegante per giungere alle stesse conclusioni.

15.3 Derivazione di Van Kampen

Riprendiamo un sistema unidimensionale che può fare salti discreti (tipo posizioni fisse su reticolo), l'idea di Van Kampen è quella di assumere che i salti che la variabile può fare siano molto più piccoli della dimensione caratteristica del sistema.

Esempio 15.3.1 (Reazione chimica). Sia la variabile a il numero di atomi che partecipano ad una determinata reazione in un sistema all'istante t . In un istante successivo $t + \Delta t$ l'incremento di a sarà discreto. Van Kampen assume che questo incremento debba essere molto minore del numero di Avogadro, la grandezza tipica di un sistema molecolare macroscopico.

Dovrà esistere in questo tipo di sistemi una variabile intensiva x che "governa" il moto, nel caso della reazione chimica questa sarà la concentrazione di atomi.

$$x = \frac{a}{\Omega}.$$

Nell'esempio della reazione Ω sarà il volume del sistema mentre a sarà il numero delle molecole. La probabilità che la reazione chimica avvenga sarà legata alla concentrazione x .

Quello che cerca di fare VK è di scrivere la ω in funzione, anziché del numero di molecole a , della concentrazione x .

Se il sistema ha un volume molto grande allora possiamo assumere che la concentrazione diventi un numero reale. L'idea chiave è quindi che i termini successivi al secondo nella equazione di KM spariscono perché c'è un termine al denominatore divergente che li divide (come il volume Ω in questo esempio).

Scriviamo la probabilità di transizione ω come una

quantità dipendente non dai due stati a e a' (a è sempre il numero di atomi nell'esempio) ma dallo stato iniziale a' e dall'incremento $\Delta a = a - a'$.

$$\omega(a|a') = \omega(a'; \Delta a).$$

A questo punto possiamo riscrivere la ω in funzione della concentrazione, dobbiamo tuttavia assumere una proporzionalità tra questa probabilità ed il volume. L'assunzione è fisicamente ragionevole: aumentando il volume aumenta anche la probabilità che avvenga la reazione:

$$\omega(a', \Delta a) = \Omega \psi\left(\frac{a'}{\Omega}, \Delta a\right).$$

A questo punto cambiamo variabili definendo la z tramite:

$$a = \Omega \varphi(t) + \sqrt{\Omega} z.$$

Questo cambio di variabili ha lo scopo di far tendere a zero le fluttuazioni della concentrazione¹⁵ quando il volume diverge:

$$x = \frac{a}{\Omega} = \varphi(t) + \frac{z}{\sqrt{\Omega}}.$$

In termini di x i momenti scritti in precedenza diventano¹⁶:

$$A_n(a) = \Omega \tilde{A}_n(x).$$

Visto che si è effettuato un cambio di variabile (e che la variabile z ha una dipendenza temporale) è necessario modificare l'espressione della derivata temporale:

$$\partial_t \rightarrow \partial_t + \frac{\partial z}{\partial t} \partial_z = \partial_t - \sqrt{\Omega} \dot{\varphi} \partial_z.$$

Sostituendo tutto nella equazione di Kramers Moyal si ottiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(z, t) - \sqrt{\Omega} \dot{\varphi} \frac{\partial}{\partial z} P(z, t) &= \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Omega^{1-n/2}}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial z} \right)^n \tilde{A}_n \left[\varphi(t) + \frac{z}{\sqrt{\Omega}} \right] P(z, t). \end{aligned}$$

Visto che $\dot{\varphi}$ è ancora "libera", ovvero non è stata definita, possiamo sceglierla come:

$$\dot{\varphi} = \tilde{A}_1(\varphi).$$

Questa scelta permette di cancellare il primo termine della sommatoria che va come $\sim \sqrt{\Omega}$. La sommatoria parte adesso da $m = 2$.

A questo punto si procede espandendo in serie di $1/\sqrt{\Omega}$ la quantità:

$$\tilde{A}_n(\varphi + \frac{z}{\sqrt{\Omega}}).$$

¹⁵che la variabile z ha in pancia

¹⁶La notazione è un pò infelice: gli esempi precedenti parlavano di variabile del sistema come x , adesso x è la variabile intensiva del problema, l'analogia con le cose precedenti sta tra a di questo esempio ed x degli esempi precedenti.

reintroducendo l'espansione nella equazione di KM si ha:

$$\partial_t P(z, t) = \sum_{m=2}^{\infty} \frac{\Omega^{-(m-2)/2}}{m!} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{m!}{n!(m-n)!} \times \\ \times \tilde{A}_n^{(m-n)}[\varphi] \left(-\frac{\partial}{\partial z} \right)^n z^{m-n} P(z, t).$$

A questo punto quando il volume diverge l'unico termine che sopravvive è quello con $m = 2$:

$$\partial_t P(z, t) = -\tilde{A}_1[\varphi] \frac{\partial}{\partial z}(z, P(z, t)) + \\ + \frac{1}{2} \tilde{A}_2[\varphi(t)] \frac{\partial^2}{\partial z^2} P(z, t).$$

KM vs VK

L'espansione di Kramers Moyal di se per se è "brutta", inserita in un contesto fisico nel quale può esser definita una variabile intensiva come la concentrazione acquista di significato e permette di riscrivere una equazione di Fokker Plank anche per un processo a salti (sotto le opportune ipotesi).

Notiamo anche che l'espansione nella visione di Von Kampen, una volta riportata nella variabile originale x contiene un termine di volume in più rispetto alla equazione di Kramers Moyal al secondo ordine:

$$\partial_t P(x) = -\partial_x [\tilde{A}_1(x) P(x)] + \frac{1}{2\Omega} \partial_{x^2} [\tilde{A}_2(x) P(x)].$$

15.4 Differenze tra le derivazioni

Le due visioni sono identiche all'ordine $1/\sqrt{\Omega}$, per ordini successivi invece è necessario fare una distinzione tra il tipo di passaggio al continuo del sistema:

- Se $\delta \rightarrow 0$ (il salto) allora i termini nella KM superiori al secondo ordine diventano piccoli di conseguenza la Fokker-Plank generata da Kramers Moyal va più che bene, in questo caso i termini di tale equazione sono non lineari.
- Se $\Omega \rightarrow \infty$ allora serve la Fokker Plank generata dalla trattazione di Van Kampen, l'equazione in questo caso resta lineare.