

12 Tempo di primo passaggio

Introduzione al MFPT	12.1, p. 44
MFTP in 1D	12.2, p. 44
MFPT per fuga da buca di potenziale	12.3, p. 46
MFPT in più dimensioni	12.4, p. 47
Calcolo numerico del MFTP	12.5, p. 47

12.1 Introduzione al MFPT

Ipotizziamo di avere un fenomeno stocastico e di osservarne l'andamento temporale. Possiamo ipotizzare anche che questo fenomeno presenti dei picchi randomici in maniera irregolare.

Tempo di primo passaggio

Dato un fenomeno stocastico che presenta delle anomalie ricorrenti nel tempo si definisce tempo di primo passaggio **MFPT** l'intervallo temporale medio che intercorre tra le anomalie.

L'analisi di tale quantità ha molta importanza in vari campi di ricerca, ad esempio l'analisi sismica, l'analisi delle forti piogge e la dinamica neuronale. Per calcolare il MFPT è necessario:

- Creare un modello del fenomeno in termini stocastici.
- Derivare una qualche quantità del modello che ci permetta di calcolare il tempo medio tra gli eventi.

Ad esempio possiamo avere una certa distribuzione iniziale di oggetti (o camminatori):

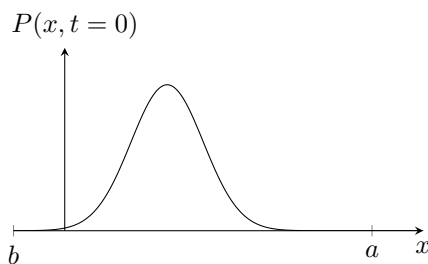


Figura 1.13: Distribuzione iniziale di camminatori.

Ciascuno di questi camminatori si muove secondo l'equazione differenziale stocastica del modello. Possiamo chiederci quanto tempo impiegheranno questi a raggiungere il punto a .

Possiamo notare subito che il tempo di passaggio dipenderà dalle condizioni al bordo su a : per condizioni assorbenti tale tempo sarà maggiore (i camminatori spariscono in a), per condizioni riflettenti il tempo

sarà minore (i camminatori rimbalzano ed hanno altri step, altre possibilità di raggiungere a).

Per procedere possiamo seguire i passaggi:

- Si calcola la probabilità che la distribuzione non esca dal dominio (nell'esempio il domino era $[a, b]$).
- Si scrive una equazione differenziale per la probabilità.
- Si risolve l'equazione differenziale.

12.2 MFTP in 1D

Prendiamo un ensemble di camminatori stocastici (sostanzialmente immaginiamo un processo di diffusione dei camminatori) nell'intervallo unidimensionale $a \leq x \leq b$ con condizioni al contorno assorbenti:

$$P(a, t|x, 0) = P(b, t|x, 0) = 0.$$

La probabilità di essere ancora all'intervallo al tempo t se al tempo $t = 0$ i camminatori si trovavano in x è $G(x, t)$:

$$G(x, t) = \int_a^b P(x', t|x, 0) dx'.$$

Si tratta sostanzialmente della probabilità condizionata di stare in un punto tra a e b al tempo t .

Sia T il tempo di uscita del camminatore dal segmento, la probabilità che $T \geq t$ con t arbitrario vale:

$$\text{Prob}(T \geq t) = \int_a^b P(x', t|x, 0) dx' = G(x, t).$$

Poiché se al tempo t il camminatore sta ancora dentro l'intervallo allora sicuramente il tempo di uscita è maggiore di t .

Cerchiamo l'equazione differenziale alla quale soddisfa l'oggetto del moto.

Il problema è che l'equazione di FP che abbiamo visto per ora ci dice come evolve il propagatore, quindi in questo caso coinvolge la variabile x' . Noi vorremmo invece lasciar libera la variabile di integrazione x' e far agire la FK su x .

Ci viene in aiuto allora la **Backward Fokker Plank**, si riesce ad ottenere una equazione per la quantità $P(x, t|y, t')$. Si riporta adesso l'equazione completa (sul Gardiner si trova il conto completo):

Backward FK

$$\begin{aligned} \partial_{t'} P(x, t|y, t') &= \\ &= - \sum A_i(y, t') \partial_{y_i} P(x, t|y, t') + \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij}(y, t') \partial_{y_i} \partial_{y_j} P(x, t|y, t') + \\ &\quad + \int dz \omega(z|y, t') [P(x, t|y, t') - P(x, t|z, t')]. \end{aligned}$$

L'ultimo membro della Backward FP riguarda la parte dei processi a salto che trascuriamo in questa analisi 1D:

$$\partial_{t'} P(x', t|x, t') = -A(x) \partial_x P(x', t|x, t') + \frac{1}{2} B(x) \partial_{x^2}^2 P(x', t|x, t').$$

Possiamo notare che per processi omogenei nel tempo deve valere la proprietà (traslazione temporale):

$$P(x', t|x, 0) = P(x', 0|x, -t).$$

Quindi il termine a sinistra dell'uguale nella BFK si scrive come:

$$\partial_{t'} P(x', t|x, t') = -\partial_t P(x', t-t'|x, 0) = -\partial_{t''} P(x', t''|x, 0).$$

E l'equazione completa diventa ($t'' \rightarrow t$):

$$\partial_t P(x', t|x, 0) = A(x) \partial_x P(x', t|x, 0) + \frac{1}{2} B(x) \partial_{x^2}^2 P(x', t|x, 0).$$

Notiamo che la dipendenza temporale è stata spostata tutta sul termine "finale" del propagatore (x', t). Inoltre le derivate temporali sono applicate sul primo argomento del propagatore, quelle spaziali invece sul secondo argomento.

Integrando quest'ultima equazione tra a e b si ottiene una equazione per $G(x, t)$:

$$\partial_t G(x, t) = A(x) \partial_x G(x, t) + \frac{1}{2} B(x) \partial_{x^2}^2 G(x, t) \quad (12.1)$$

Inserendo le solite condizioni iniziali:

$$P(x', 0|x, 0) = \delta(x-x') \implies G(x, 0) = \begin{cases} 1 & a \leq x \leq b \\ 0 & \text{Altrove} \end{cases}$$

Inoltre se un camminatore raggiunge il bordo allora significa che la probabilità che esca ad un tempo superiore è nulla (poiché è appena uscito):

$$\text{Prob}(T \geq t) = 0 \quad \text{se } x = a \text{ oppure } x = b.$$

Quindi anche:

$$G(a, t) = G(b, t) = 0.$$

Visto che il nostro insieme di camminatori, al passare del tempo, avrà una probabilità sempre maggiore di uscire dal segmento sarà vero che:

$$G(x, t+dt) < G(x, t).$$

Il numero di camminatori usciti tra t e $t+dt$ è proporzionale alla variazione di $G(x, t)$:

$$dG = G(x, t) - G(x, t+dt) = -\frac{d}{dt}(G(x, t))dt.$$

Questa quantità ci permette di calcolare tutti i valori medi di funzioni dipendenti dal tempo in questo intervallo:

$$\langle f(t) \rangle_x = -\int_0^\infty f(t) \frac{d}{dt} [G(x, t)] dt.$$

In particolare il tempo medio di uscita, supponendo di essere in x a $t = 0$:

MFPT

$$T(x) \equiv \text{MFPT} = -\int_0^\infty t \partial_t G(x, t) dt.$$

Integrando per parti:

$$\begin{aligned} T(x) &= -tG(x, t)|_0^\infty + \int_0^\infty G(x, t) dt = \\ &= \int_0^\infty G(x, t) dt \end{aligned} \quad (12.2)$$

In generale il "momento" n -esimo di primo passaggio vale:

$$T^n(x) = \langle T^n(x) \rangle = \int_0^\infty t^{n-1} G(x, t) dt.$$

Notando che si ha la relazione banale:

$$\int_0^\infty dt \partial_t G(x, t) = G(x, \infty) - G(x, 0) = -1.$$

Si possono sfruttare la 12.2 e la 12.1 per ricavare una equazione differenziale per il tempo di primo passaggio, infatti integrando nel tempo la 12.1 si ottiene:

$$-1 = A \partial_x T(x) + \frac{1}{2} B \partial_{x^2}^2 T(x).$$

L'equazione si risolve imponendo delle condizioni al contorno, ad esempio:

$$T(a) = T(b) = 0.$$

La soluzione si ottiene in termini del seguente fattore integrante:

$$\phi(x) = \exp\left(\int_a^x \frac{2A}{B} dx'\right).$$

che ci porta ad una equazione integrabile per $T(x)$:

$$\frac{d}{dx} [T' \phi(x)] = -\frac{2}{B} \phi(x).$$

Tale equazione si risolve integrando in x , successivamente dividendo per ϕ . . . La soluzione è:

Forma analitica di $T(x)$

Dato un intervallo $X = [a, b]$ (quindi con $a < b$) il tempo medio di primo passaggio si esprime come:

$$T(x) = \frac{\Omega(x, b) - \Omega(a, x)}{\int_a^b \frac{dy}{\phi(y)}}.$$

In cui si definisce Ω come:

$$\begin{aligned} \Omega(x_1, x_2) &= \\ &= \int_a^x \frac{dy}{\phi(y)} \int_{x_1}^{x_2} dy' \left[\frac{1}{\phi(y')} \int_a^{y'} dz \frac{\phi(z)}{B(z)} \right]. \end{aligned}$$

Cambiando le condizioni al contorno cambia anche il risultato, i passaggi invece restano i medesimi.

Esempio 12.2.1 (a riflette e b assorbe). Le condizioni ci dicono che:

$$\partial_x G(x, t)|_a = 0.$$

E si può arrivare a:

$$T(x) = 2 \int_x^b \frac{dy}{\phi(y)} \int_a^y \frac{\phi(z)}{B(z)} dz \quad (12.3)$$

12.3 MFPT per fuga da buca di potenziale

Prendiamo una buca di potenziale del seguente tipo:

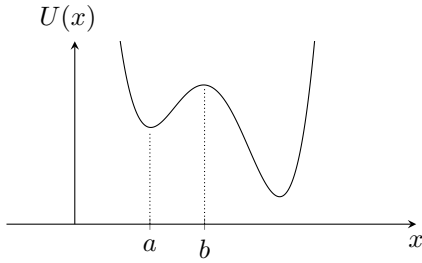


Figura 1.14: Potenziale al quale sono soggetti i camminatori.

Ipotizziamo di preparare il sistema nell'intervallo tra minimo e massimo del potenziale $[a, b]$, l'equazione dell'evoluzione del propagatore sarà:

$$\partial_t P = \partial_x (U'(x)P) + D\partial_{xx}^2 P \quad (12.4)$$

In cui abbiamo cambiato notazione: $A(x) \rightarrow U'(x)$. Nella sezione precedente si è trovata la distribuzione di equilibrio della 12.4:

$$P_s \approx N \exp \left[-\frac{U(x)}{D} \right].$$

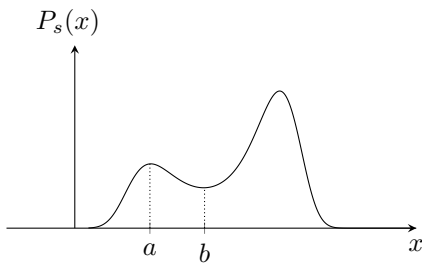


Figura 1.15: Distribuzione di probabilità stazionaria.

A questo punto dobbiamo scegliere le condizioni al contorno su a e b , prendiamo ad esempio le seguenti:

- $b \equiv x_0$ bordo assorbente: le particelle che arrivano qui spariscono.

- $a \equiv -\infty$ come dire bordo riflettente poiché a $-\infty$ c'è un muro di potenziale divergente.

A questo punto possiamo prendere l'espressione 12.3 e specializzarla per il nostro problema. Si ottiene che il tempo di primo passaggio per andare da a a x_0 vale:

$$T(a \rightarrow x_0) = \lim_{a \rightarrow -\infty} \frac{1}{D} \int_a^{x_0} dy \left[e^{\frac{U(y)}{D}} \int_a^y e^{-\frac{U(z)}{D}} dz \right]. \quad (12.5)$$

Per risolvere analiticamente è comodo disaccoppiare i due integrali. Mettiamoci nel limite in cui la barriera di potenziale è molto maggiore del coefficiente di diffusione:

$$\Delta U = U(b) - U(a); \quad \frac{\Delta U}{D} \gg 1.$$

Concentrandoci in un intorno di b possiamo notare che:

$$\exp \left(\frac{U}{D} \right) \text{ ha max in } b.$$

Inoltre ipotizzando che $U(x=a) = 0$ e se $x \rightarrow b$ si ha che:

$$-\frac{U(b)}{D} \rightarrow -\infty \Rightarrow \exp \left(-\frac{U}{D} \right) \rightarrow 0.$$

Tale esponenziale decrescente è contenuto dell'integrale interno della 12.5, allora si approssima tale integrale estendendone fino a b l'estremo di integrazione.

$$\int_{-\infty}^y \exp \left(-\frac{U(z)}{D} \right) dz \sim \int_{-\infty}^b \exp \left(-\frac{U(z)}{D} \right) dz.$$

L'approssimazione consiste quindi nell'assumere che i termini della somma provenienti da un intorno di b contino poco. I due integrali sono adesso disaccoppiati:

$$T \approx \frac{1}{D} \int_{-\infty}^b \exp \left(-\frac{U(z)}{D} \right) dz \int_{-\infty}^{x_0} dy \exp \left(\frac{U(y)}{D} \right).$$

In conclusione si può risolvere per la $T(x)$ ipotizzando una forma parabolica per la $U(x)$ intorno a a e b :

$$U(x) \approx U(b) - \frac{1}{2} \frac{(x-b)^2}{\delta^2} \quad \text{vicino a } b$$

$$U(x) \approx U(a) + \frac{1}{2} \frac{(x-a)^2}{\alpha^2} \quad \text{vicino ad } a.$$

La soluzione prende la forma della famosa legge di Arrhenius:

Legge di Arrhenius

$$T(a \rightarrow x_0) \approx 2\alpha\delta\pi \exp \left(\frac{U(b) - U(a)}{D} \right).$$

È una espressione simile alla legge di Arrhenius per le reazioni chimiche se poniamo $D = k_B T$.

12.4 MFPT in più dimensioni

Quando andiamo a studiare il caso multidimensionale si ha a che fare con questa equazione:

$$\sum_i A_i(x) \delta_i T(x) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij} \partial_i \partial_j T(x) = -1 \quad (12.6)$$

Un modo elegante per risolvere è vederla come un problema agli autovalori.

Introduciamo il set di autofunzioni $Q_\lambda(x)$:

$$T(x) = \sum_\lambda t_\lambda Q_\lambda(x).$$

Il problema si risolve reinserendo questa nella equazione 12.6 e mettendo le opportune condizioni al contorno sulle Q_λ .

Procedendo in questo modo ... si può dimostrare che il tempo di primo passaggio prende la forma:

$$T(x) = \sum_\lambda \frac{1}{\lambda} Q_\lambda(x) \int dx' P_\lambda(x').$$

Nei problemi tipici gli autovalori sono "separati esponenzialmente" l'uno dall'altro, quindi conta soltanto l'autovalore più basso (...).

Il tempo di primo passaggio diventa quindi:

$$T(x) \approx \frac{1}{\lambda_1} Q_1 \int P_1 dx \approx \frac{1}{\lambda_1}.$$

12.5 Calcolo numerico del MFPT

Prendiamo la SDE per un set di camminatori:

$$dx = f(x)dt + g(x)d\omega.$$

Quindi per piccoli tempi possiamo scrivere che:

$$x_{n+1} = x_n + f(x_n)\Delta t + g(x_n)\Delta\omega_n.$$

Quindi mettiamoci in un punto x_n e valutiamo la probabilità che x_{n+1} sia fuori dal dominio considerato (a, b) . Ad esempio consideriamo la probabilità che x_{n+1} sia oltre b .

Prendiamo il potenziale a doppia buca della sezione precedente, ipotizziamo che il camminatore elementare abbia fatto abbastanza passaggi da arrivare oltre il massimo b e cadere nella seconda buca.

Possiamo chiederci quale sia la storia degli step effettuati da questo camminatore elementare, andando a vedere l'intensità del processo di Wiener in funzione della posizione si scopre che:

Per superare il massimo del potenziale il processo di Wiener che spinge il camminatore deve essere sistematicamente diverso da zero.

Ipotizziamo di avere l'andamento del processo stocastico per un camminatore $\omega(x)$, dimostriamo che tramite questo possiamo risalire al MFPT.

$$x_{n+1} = x_n + f_n \Delta t + \sqrt{D} \Delta\omega_n.$$

Esplicitando tale relazione ricorsiva possiamo esprimere il passo n -esimo in funzione del passo 0:

$$x_n = x_0 + \sum f_i \Delta t + \sqrt{D} \sum \Delta\omega_i.$$

Dalla prima possiamo estrarre $\Delta\omega_n$:

$$\Delta\omega_n = \frac{1}{\sqrt{D}} [x_{n+1} - (x_n + f_n \Delta t)].$$

Sappiamo che la forma del processo di Wiener (la soluzione) è la seguente:

$$P(\Delta\omega_n) \sim \exp\left(-\frac{(\Delta\omega_n)^2}{D\Delta t}\right).$$

Per effettuare un salto da a ad oltre il massimo b abbiamo bisogno di una sequenza di salti giusti $\Delta\omega_i$, ovvero tali che:

$$x_0 = a; \quad x_n = b.$$

Quindi la probabilità di andare da a a b sarà la probabilità che tutti i processi di Wiener adeguati si verifichino:

$$P(a \rightarrow b) \sim \prod_i \exp\left(-\frac{(\Delta\omega_i)^2}{D\Delta t}\right).$$

Ed inserendo la forma di $\Delta\omega_i$ ricavata in precedenza:

$$\begin{aligned} P(a \rightarrow b) &\sim \prod_i \exp\left(-\frac{(x_{i+1} - (x_i + f_i \Delta t))^2}{D\Delta t}\right) = \\ &= \exp\left(-\sum_i \frac{(x_{i+1} - (x_i + f_i \Delta t))^2}{D\Delta t}\right) = \\ &= \exp\left[-\sum_i \frac{\Delta t}{D} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta t} - f_i\right)^2\right] \rightarrow \\ &\rightarrow \exp\left[-\frac{1}{D} \int dt (\dot{x} - f)^2\right]. \end{aligned}$$

Per massimizzare la probabilità di passaggio da $a \rightarrow b$ è necessario minimizzare l'argomento dell'esponenziale, quindi si ricava il tempo minimo di primo passaggio tramite un problema di minimo:

$$\min \int_a^b (\dot{x} - f)^2 dt.$$

Che rappresenta proprio la minimizzazione della Lagrangiana del sistema!