

1 Processi di Markov e Master Equation

| | | |
|-----|-----------------------------------|---|
| 1.1 | Ipotesi di Markov | 5 |
| 1.2 | Master equations | 6 |
| 1.3 | Metodo della funzione generatrice | 7 |

1.1 Ipotesi di Markov

Moto Browniano Il conte Brown nel 1827 pensò di aver scoperto la vita osservando particelle di polline in acqua che si muovevano in modo casuale, ne concluse che le particelle fossero vive. Successivamente fu Einstein a dare una descrizione collisionale con i seguenti punti chiave:

- Impatti frequenti.
- Descrizione probabilistica.
- Dinamica discreta (tempo discretizzato).

Mettiamoci in un sistema unidimensionale e ipotizziamo che il tempo caratteristico di impatto tra due palline sia τ e che $n(t)$ sia il numero delle palline. Sempre per ipotesi per ogni pallina si ha la proprietà:

$$x(t=0) = x \implies x(t=\tau) = x + \Delta.$$

Dove Δ varia da pallina a pallina, possiamo definire una distribuzione pari di questi Δ : $f(\Delta)$

$$\int f(\Delta) d\Delta = 1; \quad f(\Delta) = f(-\Delta).$$

Primo esempio di equazione di Fokker-Plank Possiamo trovare il numero dn di palline che si muovono di una quantità ξ : $\Delta < \xi < \Delta + d\Delta$.

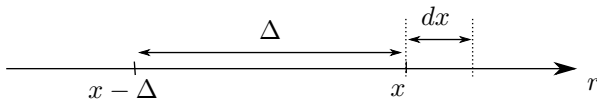


Figura 1.1: Particelle che si muovono di ξ , dove Δ è la variabile stocastica per le palline.

$$dn = n f(\Delta) d\Delta.$$

La probabilità che una pallina si trovi nel punto x al tempo $t + \tau$ per dx è:

Equazione di Chapman-Kolmogorov

$$P(x, t + \tau) dx = dx \int P(x - \Delta, t) f(\Delta) d\Delta \quad (1.1)$$

Ipotesi di Markov

Un processo stocastico che evolve indipendentemente dal tempo si dice Markoviano. L'ipotesi di Markov afferma che l'espressione per la $P(x, t + \tau)$ non dipende da t .

Espandendo in serie (di Kramers-Moyal) le probabilità:

$$P(x, t + \tau) = P(x, t) + \frac{\partial P}{\partial t} \tau$$

$$P(x - \Delta, t) = P(x, t) - \frac{\partial P}{\partial x} \Delta + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \Delta^2.$$

Si nota che lo sviluppo in x viene troncato al secondo ordine mentre quello in t solo al primo. Inserendo nella 1.1 infatti si ha che (per la parità della funzione f) il primo ordine in x si annulla. Il risultato finale è un primo esempio di equazione del tipo Fokker-Plank:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \quad (1.2)$$

Nella quale D vale:

$$D = \frac{1}{2\tau} \langle \Delta^2 \rangle.$$

Integrando la 1.2 si ottiene, con le condizioni iniziali: $P(x, t=0) = \delta(x)$

$$P(x, t) = \frac{n}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right).$$

Dinamica mesoscopica di Langevin Per dinamica mesoscopica si intende una dinamica intermedia tra quella globale del sistema e quella "puntuale" (in questo caso della singola pallina di polline).

Invece che scrivere una equazione per la probabilità P Langevin propose di partire dall'equazione di moto delle palline tenendo conto di:

- Attrito: $-6\pi\eta d\dot{x}$ (Approccio alla Stokes)
- Impatti random tra le altre particelle: ξ .
- Temperatura: $\langle mv^2/2 \rangle = kT/2$.

Si può scrivere la seguente equazione modello

$$m\ddot{x} = -6\pi\eta d\dot{x} + \xi. \quad (1.3)$$

Che è un primo esempio di equazione differenziale stocastica.

Se moltiplichiamo a destra e sinistra per x possiamo riscriverla nel seguente modo:

$$\frac{1}{2} m \frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle - m \dot{x}^2 = -3\pi\eta d \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle + \langle \xi x \rangle.$$

Possiamo mediare su tutte le possibili realizzazioni della ξ , se introduciamo l'ipotesi che gli impatti random siano scorrelati rispetto alla posizione dell'acqua x si ha che:

$$\langle \xi x \rangle = \langle \xi \rangle \langle x \rangle = 0$$

Questa ipotesi emerge sempre da una visione Markoviana secondo cui gli urti precedenti non incidono sugli urti successivi, il sistema così definito è un sistema senza memoria.

$$\frac{m}{2} \frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle - kT = -3\pi\eta d \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle.$$

Si risolve con metodi noti:

$$\frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = \frac{kT}{3\pi\eta d} + C \exp\left(\frac{-6\pi\eta d t}{m}\right).$$

Osservando solo la dinamica asintotica si trascura il termine esponenziale decrescente:

Equazione di diffusione

$$\langle x^2 \rangle_t - \langle x^2 \rangle_0 = \frac{kT}{3\pi\eta d} \cdot t \quad (1.4)$$

Confrontando questa con l'equazione di Fokker-Plank della sezione precedente si ha una relazione tra D ed i coefficienti di questa equazione:

Coefficiente di Einstein

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta d}.$$

Detto anche coefficiente di diffusione.

1.2 Master equations

Le master equations si utilizzano per modellizzare processi "a salto" che coinvolgono variabili discrete, esempi di questi sistemi sono: la dinamica delle popolazioni o l'evoluzione del numero di infetti in un'epidemia.

Sistema di Lotka-Volterra Prendiamo un sistema in cui coesistono preda e predatore:

- Conigli: x
- Volpi: y

L'evoluzione di (x, y) può essere schematizzata con il seguente sistema (di Lotka-Volterra):

$$\begin{cases} x + \text{food} \rightarrow 2x \\ x + y \rightarrow 2y \\ y \rightarrow \text{death} \end{cases}.$$

Si introduce il parametro "food" come c e si scrivono due equazioni differenziali per la variazione del numero di individui di ciascuna specie x, y :

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = k_1 xc - k_2 xy \\ \frac{dy}{dt} = k_2 xy - k_3 y \end{cases}.$$

Integrando numericamente tali equazioni emerge un andamento oscillatorio caratteristico di questo tipo di problemi (Figura 1.2).

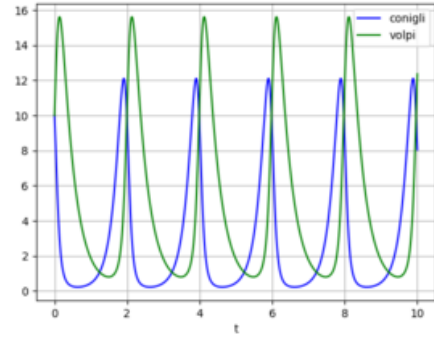


Figura 1.2: Andamento delle soluzioni (Link al codice)

Per una trattazione più rigorosa è necessario notare che le variabili in gioco non sono continue ma bensì discrete (numero di individui di popolazioni). Si passa quindi ad una descrizione probabilistica del sistema che ci porta alla relativa Master Equation.

$P(\sigma, t) \in \mathbf{R}$: Probabilità di avere $\sigma \equiv (x, y) \in \mathbf{N}^2$ al tempo t .

Inseriamo l'ipotesi di Markov, ovvero che la probabilità che avvenga una transizione tra gli stati del sistema $\sigma \rightarrow \sigma'$ non dipenda dal tempo.

$P_r(\sigma \rightarrow \sigma')$: Probabilità di transizione indipendente da t .

Dato il sistema al tempo t le probabilità di transizione in un intervallo Δt sono:

$$\begin{aligned} P_r(x \rightarrow x+1, y) &= k_1 cx \Delta t \\ P_r(x \rightarrow x-1, y \rightarrow y+1) &= k_2 xy \Delta t \\ P_r(x \rightarrow x, y \rightarrow y-1) &= k_3 y \Delta t \\ P_r(x \rightarrow x, y \rightarrow y) &= 1 - \Delta t (k_1 cx + k_2 xy + k_3 y). \end{aligned}$$

Possiamo esprimere la variazione nel tempo della distribuzione di probabilità P tramite le quantità P_r :

Esempio di Master Equation

Si usa la semplificazione $x^\pm \equiv x \pm 1$.

$$\begin{aligned} \frac{P(x, y, t + \Delta t) - P(x, y, t)}{\Delta t} = & \\ & P_r(x^- \rightarrow x, y) \cdot P(x^-, y, t) + \\ & P_r(x^+ \rightarrow x, y^- \rightarrow y) \cdot P(x^+, y^-, t) + \\ & P_r(x \rightarrow x, y^+ \rightarrow y) P(x, y^+, t) + \\ & - [1 - P_r(x \rightarrow x, y \rightarrow y)] \cdot P(x, y, t) \end{aligned} \quad (1.5)$$

Il termine di destra esprime la probabilità di ingresso nello stato $\sigma = (x, y)$ meno la probabilità di uscita da tale stato.

Modello SIR Il modello SIR può essere utilizzato per descrivere una situazione pandemica. Gli individui di una popolazione presi in analisi sono:

- Suscettibili: S .

- Infetti: I .
- Immuni (dopo la malattia): R .

$$\begin{cases} S_{n+1} = S_n - \alpha S_n I_n \Delta t \\ I_{n+1} = I_n + (\alpha S_n I_n - \gamma I_n) \Delta t \\ R_{n+1} = R_n + \gamma I_n \Delta t \end{cases}$$

Per scrivere la Master Equation si osserva quali sono i termini guidano le transizioni tra i vari stati del sistema:

$$\begin{aligned} P_r(S \rightarrow S^-, I \rightarrow I^+, R) &= \alpha S I \Delta t \\ P_r(S, I \rightarrow I^-, R \rightarrow R^+) &= \gamma I \Delta t. \end{aligned}$$

In modo analogo a quanto fatto per l'esempio precedente si arriva alla seguente equazione:

$$\begin{aligned} P(\sigma, t + \Delta t) &= P(\sigma, t) + \\ &+ \Delta t [P(S^+, I^-, R, t) P_r(S^+ \rightarrow S, I^- \rightarrow I, R) + \\ &+ P(S, I^+, R^-, t) P_r(S, I^+ \rightarrow I, R^- \rightarrow R)] + \\ &- \Delta t P(\sigma, t) [P_r(S \rightarrow S^-, I \rightarrow I^+, R) + \\ &+ P_r(S, I \rightarrow I^-, R \rightarrow R^+)]. \end{aligned}$$

A differenza del caso precedente questo sistema ha una configurazione di equilibrio (quando tutti hanno preso il COVID-19 ad esempio).

Rumore shot Ipotizziamo di avere un cavo di rame attraversato da corrente elettrica J e chiamiamo σ una sezione di tale cavo ortogonale alla direzione di J . Il numero di elettroni che attraversano σ sarà soggetto a fluttuazioni, tali fluttuazioni caratterizzano il rumore Shot.

La variabile stocastica del problema è t_k : il tempo di arrivo di un elettrone su σ . Ogni elettrone contribuisce alla corrente (misurata su σ) di una quantità che possiamo schematizzare come una scarica di condensatore $F(t - t_k)$:

$$F(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ q \exp(-\alpha t) & t \geq 0 \end{cases}$$

La corrente totale sarà data dalla somma degli elettroni che arrivano su σ all'istante t_k :

$$I(t) = \sum_{t_k} F(t - t_k).$$

Cerchiamo la Master equation per questo sistema, partiamo dall'ipotesi che in un dato intervallo di tempo Δt la probabilità che il numero di elettroni che attraversano σ passi da n a $n + 1$ sia:

$$P(n \rightarrow n + 1, \text{nell'intervallo } \Delta t) = \lambda \Delta t.$$

Notiamo che gli elettroni scorrono in un'unica direzione, quindi il numero di elettroni che attraversa σ può solo aumentare.

Il termine della Master Equation $P(n, t + \Delta t)$ si scrive come somma di:

- Probabilità di avere già n elettroni al tempo t e che nell'intervallo Δt non succeda niente:

$$(1 - \lambda \Delta t) P(n, t)$$

- La probabilità che al tempo t si hanno $n - 1$ elettroni e che nell'intervallo Δt ne arrivi un altro:

$$\lambda \Delta t P(n - 1, t)$$

Quindi mettendo tutto insieme:

$$P_n(t + \Delta t) = (1 - \lambda \Delta t) P_n(t) + \lambda \Delta t P_{n-1}(t) \implies$$

$$\frac{P(n, t + \Delta t) - P(n, t)}{\Delta t} = \lambda [P(n - 1, t) - P(n, t)].$$

Che è proprio l'equazione cercata. Vediamo adesso un metodo di risoluzione di questo tipo di equazione.

1.3 Metodo della funzione generatrice

Per risolvere il problema introduciamo la funzione generatrice $G(s, t)$:

$$G(s, t) = \sum_n s^n P(n, t).$$

Sostituendo nella master equation del problema precedente nel limite di $\Delta t \rightarrow 0$ si ha:

$$\frac{\partial G(s, t)}{\partial t} = \lambda(s - 1)G(s, t).$$

$$\implies G(s, t) = \exp(\lambda(s - 1)t) G(s, 0).$$

Gli elettroni arrivano per $t \geq 0$, infatti si deve avere che:

$$\begin{cases} P(0, 0) = 1 \\ P(n, 0) = 0 \end{cases} \forall n \implies G(s, 0) = 1.$$

$$G(s, t) = e^{\lambda(s-1)t} = \sum_n s^n P(n, t) \implies$$

$$\sum_n e^{-\lambda t} e^{\lambda s t} = \sum_n e^{-\lambda t} \frac{(\lambda t s)^n}{n!} = \sum_n s^n P(n, t).$$

In cui si è sfruttato la serie dell'esponenziale $e^{\lambda s t}$.

Distribuzione di Poisson

$$P(n, t) = e^{-\lambda t} \frac{(\lambda t)^n}{n!}.$$

Dove $P(n, t)$ è la probabilità che al tempo t ci siano $N(t) = n$ elettroni nel sistema.

Procediamo con il calcolo della corrente, se N è il numero di elettroni arrivati all'istante t allora possiamo definire la quantità:

$$\mu(t) \equiv \frac{dN}{dt} = \sum_k \delta(t - t_k)$$

Dove t_k è il tempo (random) in cui arriva un elettrone. Passiamo al continuo nei tempi di arrivo degli elettroni e riscriviamo la corrente come:

$$I(t) = \int dx F(t-x) \mu(x) = \int_{-\infty}^t q \exp(-\alpha(t-x)) \frac{dN}{dx} dx.$$

La difficoltà dell'espressione sta nel fatto che $N(t)$ è una funzione a salti irregolari.

Differenziando rispetto al tempo $I(t)$:

$$\begin{aligned} \frac{dI}{dt} &= q \exp(-\alpha(t-x)) \dot{N} \Big|_{x=t} + \\ &+ \int_{-\infty}^t (-\alpha q) \exp(-\alpha(t-x)) \dot{N} dx = \\ &= q\mu(t) - \alpha I(t). \end{aligned}$$

Equazione stocastica differenziale

$$\frac{dI}{dt} = -\alpha I(t) + q\mu(t).$$

Il termine in μ dipende dalla sequenza casuale di $\delta(t - t_k)$, ognuna di queste può dare soluzioni differenti.

Rispetto al moto Browniano visto in precedenza, in cui si aveva che $f(\Delta) = f(-\Delta)$, adesso abbiamo un processo che evolve solo in avanti.

L'idea per risolvere il problema è di interpolare l'andamento di N con un moto browniano, prendendo la media e le fluttuazioni del termine stocastico. Essendo il termine in μ la derivata di un processo poissoniano abbiamo le seguenti proprietà:

$$\begin{aligned} \langle \mu dt \rangle &= \langle dN \rangle = \lambda dt \\ \langle (\lambda dt - \mu dt)^2 \rangle &= \lambda dt. \end{aligned}$$

Si cerca di scrivere questo processo stocastico (unilaterale) come un processo di Langevin, quindi si definisce una nuova variabile stocastica $d\eta = dN - \lambda dt$.

$$dN = \lambda dt + d\eta.$$

Questo equivale a scomporre il processo a salti dN in un drift lineare (λdt) ed una fluttuazione stocastica ($d\eta$).

Il differenziale della corrente si scrive come:

$$dI(t) = (\lambda q - \alpha I) dt + q d\eta(t).$$

In questo modo la variabile stocastica $d\eta$ gode delle seguenti proprietà:

- $\langle d\eta \rangle = 0$
- $\langle d\eta^2 \rangle = \lambda dt$
- $\langle Id\eta \rangle = 0$

$$\frac{d}{dt} \langle I \rangle = \lambda q - \alpha \langle I \rangle.$$

Il risultato stazionario per l'equazione è:

$$\langle I \rangle_{\infty} = \frac{\lambda q}{\alpha}.$$

Procediamo con una ipotesi sbagliata: trascurare le fluttuazioni nel seguente termine

$$(I + dI)^2 \approx I^2 + 2IdI \quad (1.6)$$

Quindi con il risultato che dovrebbe esser noto sui differenziali: $d(I^2) = 2IdI$, se assumiamo questo e moltiplichiamo a destra e sinistra per $\langle I \rangle$ nella equazione per la corrente otteniamo:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle I^2 \rangle = \lambda q \langle I \rangle - \alpha \langle I^2 \rangle.$$

Che ci porta a concludere che:

$$\langle I^2 \rangle_{\infty} = \frac{\lambda q}{\alpha} \langle I \rangle_{\infty} = (\langle I \rangle_{\infty})^2.$$

Otteniamo quindi un paradosso, la corrente ha varianza nulla:

$$\langle I^2 \rangle - \langle I \rangle^2 = 0.$$

Questo significherebbe che la "larghezza" del moto Browniano è nulla, quindi la corrente sarebbe costante e continua.

L'errore è dovuto al differenziale 1.6, infatti il termine trascurato vale:

$$\langle dI^2 \rangle = \langle q^2 d\eta^2 \rangle = q^2 \lambda dt.$$

Che è anch'esso di prim'ordine nel tempo! L'equazione corretta sarebbe allora:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle I^2 \rangle = \lambda q \langle I \rangle - \alpha \langle I^2 \rangle + q^2 \lambda + O(dt).$$