

## 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):

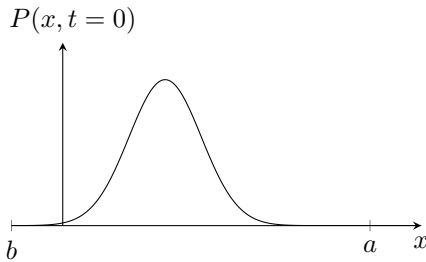


Figura 1.13: Distribuzione iniziale di camminatori.

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 dominio 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  $\phi$ . . 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  $\Omega$  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:

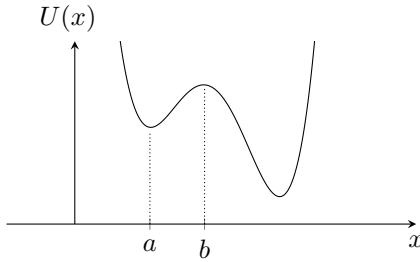


Figura 1.14: Potenziale al quale sono soggetti i camminatori.

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

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

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

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

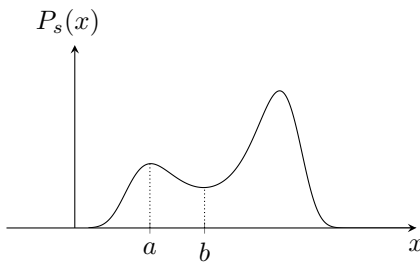


Figura 1.15: Distribuzione di probabilità stazionaria.

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:

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

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

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

É 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  $Q_\lambda$ .

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!