



Università degli Studi di Padova
Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”
Corso di Laurea Triennale in Fisica

SULL’APPROSSIMAZIONE DIFFUSIVA DELLA MASTER EQUATION

Relatore: Dott. Gianluigi Serianni

Correlatore: Dott. Fabio Sattin

Laureando: Andrea Tononi

Matricola: 1069480

Anno accademico: 2015/2016

Riassunto

La Master Equation è un'equazione integrodifferenziale che descrive l'evoluzione temporale di un ampio spettro di sistemi stocastici. Spesso se ne considera l'approssimazione diffusiva, valida nel limite di grandi lunghezze d'onda, che la trasforma in una pura equazione differenziale alle derivate parziali. Nel regime opposto, in presenza di forti discontinuità spaziali o pareti materiali, ci si attende quindi una discrepanza tra le predizioni ricavate risolvendo la Master Equation completa e quelle ottenute dalla sua approssimazione diffusiva. Il lavoro di tesi è consistito nell'evidenziare questa discrepanza attraverso l'investigazione numerica di alcuni semplici modelli costruiti *ad hoc*. Contrariamente alle aspettative, i risultati hanno mostrato che la dinamica diffusiva è anche in queste situazioni un'ottima approssimazione della Master Equation. E' stata identificata a posteriori -dall'analisi della letteratura- una spiegazione di questo fatto; nell'ultima parte del lavoro viene fornita una nuova versione della dimostrazione.

Introduzione

Si consideri un sistema unidimensionale di particelle immerse in un substrato e interagenti con esso. I dettagli dell'interazione sono noti solo in senso statistico. Sia Γ_i lo stato del sistema: si supponga che esso sia univocamente definito dalla conoscenza delle posizioni $\{x\}_i$ di ognuna delle particelle all'istante di tempo t_i , ovvero $\Gamma_i = \Gamma_i(\{x\}_i, t_i)$. L'evoluzione temporale del sistema quindi può essere scritta come la progressione degli stati che esso assume $\Gamma_1(\{x\}_1, t_1) \rightarrow \Gamma_2(\{x\}_2, t_2) \rightarrow \Gamma_3(\{x\}_3, t_3), \dots$. Si supponga che i tempi t_1 e t_2 , così come tutte le coppie consecutive seguenti, distino di un tempo fisso τ , ovvero che l'evoluzione temporale avvenga tramite salti discreti da uno stato all'altro. Questo tempo, concordemente con l'analisi di Einstein del moto browniano, è piccolo rispetto ai tempi sperimentali, ma sufficientemente grande affinché il moto della singola particella al tempo $t_i + \tau$ possa essere considerato indipendente da quello al tempo t_i .

Si definisca la probabilità di transizione $P(\{x\}_{i+1}, t_{i+1} | \{x\}_i, t_i, \dots, \{x\}_1, t_1)$ come la probabilità che nel tempo τ lo stato passi da $\Gamma_i(\{x\}_i, t_i)$ a $\Gamma_{i+1}(\{x\}_{i+1}, t_{i+1})$, avendo assunto in precedenza tutti gli stati noti fino a $\Gamma_1(\{x\}_1, t_1)$: a priori la probabilità di transizione dipende da tutti gli stati assunti in precedenza dal sistema. Nel seguito si ipotizza invece che la probabilità di transizione sia $P(\{x\}_{i+1}, t_{i+1} | \{x\}_i, t_i)$, ovvero che la probabilità che lo stato del sistema sia $\Gamma_{i+1}(\{x\}_{i+1}, t_{i+1})$ al tempo t_{i+1} , dipenda solamente dallo stato $\Gamma_i(\{x\}_i, t_i)$ al tempo precedente t_i . Un processo per il quale valga questa ipotesi è detto markoviano. Nella trattazione seguente ci si limita per semplicità a considerare il caso di un processo markoviano nel quale la probabilità di transizione è $P(x', x) := P(\{x\}_{i+1} | \{x\}_i)$, omogenea nel tempo.

Un sistema stocastico con queste caratteristiche, definita la densità $n(x, t)$ delle particelle nella posizione x ed al tempo t , è descritto dalla Master Equation (ME), ovvero dall'equazione integrodifferenziale

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -\frac{n(x, t)}{\tau} + \int dx' n(x', t) \frac{P(x', x)}{\tau} \quad (1)$$

Essa descrive la variazione temporale della densità $n(x, t)$ come la somma di due contributi. Il primo è un termine di perdita, parametrizzato dal tempo di rilassamento τ . Il secondo termine considera l'eventualità che le particelle in posizione x' saltino -nel tempo τ - nella posizione x , transizione che avviene con probabilità $P(x', x)$. L'integrale è la somma di tutti questi contributi¹.

Esprimendo x' come $x' = x + \Delta$, dove Δ è lo spostamento compiuto dalle particelle nel tempo τ , si può riscrivere la ME nella forma equivalente

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -\frac{n(x, t)}{\tau} + \frac{1}{\tau} \int d\Delta n(x + \Delta, t) P(x + \Delta, -\Delta) \quad (2)$$

Non esiste un apparato matematico per risolvere le equazioni integrodifferenziali sviluppato come per le equazioni differenziali, di conseguenza si considera spesso la sua approssimazione diffusiva sviluppandone l'argomento dell'integrale attorno a x in serie di potenze di Δ ottenendo lo sviluppo di Kramers-Moyal

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = -\frac{n(x, t)}{\tau} + \frac{1}{\tau} \int d\Delta n P + \frac{1}{\tau} \int d\Delta \Delta \frac{\partial(nP)}{\partial x} + \frac{1}{\tau} \int d\Delta \frac{\Delta^2}{2} \frac{\partial^2(nP)}{\partial x^2} + \dots \quad (3)$$

¹ Si noti che nulla impedisce a τ di essere a sua volta una funzione della posizione (o del tempo). Per semplicità, questo lavoro si limita a considerare il caso in cui τ è una costante.

Per brevità si sono omesse nella (3) le dipendenze di n e P , che sono $P = P(x, -\Delta)$ e $n = n(x, t)$. Lo sviluppo (3) è stato troncato al secondo ordine. Il troncamento della serie è giustificato postulando l'esistenza di un raggio di convergenza finito: i termini di ordine superiore forniscono un contributo trascurabile al totale.

A questo riguardo esiste un importante teorema dovuto a Pawula [1]; esso afferma che “per garantire che la densità n rimanga definita positiva dovunque ed in ogni istante, è necessario che lo sviluppo in serie (3) sia troncato all'ordine Δ^1 o Δ^2 o -in alternativa- che sia considerata l'intera serie infinita”.

Dal momento che n non dipende da Δ e che P è normalizzata all'unità, l'integrale $\frac{1}{\tau} \int d\Delta n P$ nella (3) si elide con il termine $\frac{n(x,t)}{\tau}$. Si ottiene quindi lo sviluppo diffusivo della ME:

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 (D(x)n(x,t))}{\partial x^2} - \frac{\partial (U(x)n(x,t))}{\partial x},$$

$$D(x) = \frac{1}{\tau} \int d\Delta \frac{\Delta^2}{2} P(x, -\Delta), \quad (4)$$

$$U(x) = \frac{1}{\tau} \int d\Delta \Delta P(x, -\Delta)$$

Il teorema di Pawula fornisce una condizione necessaria affinché la soluzione $n(x, t)$ abbia le caratteristiche attese per una densità fisica.

Dal momento che P può essere scelta ad arbitrio -soggetta alle sole condizioni di essere normalizzabile e definita positiva- è facile immaginare scenari nei quali i termini oltre il secondo sono in realtà nient'affatto trascurabili. L'argomento di questo lavoro di tesi è lo studio numerico di alcuni sistemi di questo tipo, presi come riferimento, per evidenziare come si presentino le difformità tra le soluzioni dell'equazione completa (1) e della sua approssimazione (4).

Tuttavia, lo studio di sistemi fortemente disomogenei o con elevati gradienti spaziali, nei quali i termini oltre il secondo ordine dello sviluppo (3) non sono trascurabili, evidenzierà che la dinamica della Master Equation non differisce dalla sua approssimazione diffusiva. Nella letteratura scientifica si trova una dimostrazione dovuta a Ryskin [2] del fatto che l'equazione di diffusione è una buona approssimazione della (1) anche in presenza di forti gradienti, se si considerano scale temporali lunghe rispetto al tempo di rilassamento τ . Una versione rielaborata della dimostrazione, la cui validità è limitata a un sistema omogeneo, sarà riportata alla fine della tesi.

Costruzione di un modello numerico per la risoluzione della ME e confronto con l'equazione di diffusione.

Consideriamo i più semplici sistemi a disposizione: sistemi unidimensionali confinati da pareti impermeabili. La ME consente di descrivere la dinamica stocastica di questi sistemi, permettendo di calcolare la loro densità spaziale e di conoscerne l'evoluzione temporale.

La risoluzione della ME avverrà attraverso una sua versione particellare e approssimando la dinamica reale delle particelle con una sua versione discretizzata nel tempo e nello spazio. Lo spazio è modellizzato da un array unidimensionale, alle cui cellette si associa il numero di particelle contenute tra gli estremi spaziali di ognuna di esse. Ad ogni passo temporale pari al tempo di rilassamento $\tau = 1$, discretizzazione del tempo, le particelle "saltano" secondo leggi stocastiche da una cella all'altra.

L'algoritmo simula singolarmente il moto di ogni particella, secondo l'ipotesi che le particelle si muovano in maniera indipendente l'una dall'altra. La particella è posta inizialmente al centro del sistema e compie ogni tempo τ un salto casuale Δ scelto con probabilità di transizione $P(\Delta, x)$ uniforme nell'intervallo $[-l(x); l(x)]$, ovvero

$$P(\Delta, x) = \begin{cases} \frac{1}{2l(x)}, & |\Delta| < l(x) \\ 0, & |\Delta| > l(x) \end{cases} \quad (5)$$

La funzione $l(x)$ è la lunghezza di salto massimo nella posizione x ; essendo lo spazio discreto ne andrà considerata la parte intera. In seguito sarà definita la forma della funzione $l(x)$; ci si limita per il momento a dire che -avendo scelto come dimensione per lo spazio $N_{celle} = 2048$ cellette spaziali- la sua espressione dovrà soddisfare il vincolo che il rapporto $\frac{l(x)}{N_{celle}}$ non sia infinitesimo. Infatti, affinché possano emergere dinamiche non diffusive, i termini di ordine successivo al secondo dello sviluppo (3) dovranno essere confrontabili coi precedenti, condizione soddisfatta se $l(x)$ è paragonabile alla dimensione N_{celle} del sistema.

Le pareti del sistema sono riflettenti: se il valore del salto è tale che la particella oltrepassa la prima o l'ultima cella dell'array di una certa quantità, essa viene riflessa di quella stessa quantità verso l'interno del sistema.

Dopo che la particella ha compiuto un numero prefissato di salti si registra la sua posizione al tempo finale. Iterando l'algoritmo descritto per tutte le $N_{particelle} = 400000$ si ottiene un array spaziale di dimensione N_{celle} , contenente in ogni celletta il numero di particelle che hanno occupato quella posizione al tempo finale. Il valore di $N_{particelle}$ è stato scelto da un lato in maniera tale da mantenere i tempi computazionali entro limiti accettabili per lo svolgimento di questo lavoro, dall'altro al fine di ottenere un rapporto segnale/rumore sufficientemente alto da ricavare risultati non ambigui. Infatti, essendo ottenuta da un processo statistico, la distribuzione delle posizioni finali delle particelle avrà uno spessore proporzionale a $\frac{1}{\sqrt{N_{particelle}}}$.

Nelle simulazioni svolte sono state scelte le seguenti espressioni per la funzione $l(x)$, la cui forma analitica utilizzata nelle simulazioni è stata riportata nei grafici in Fig. 1:

$$a) \quad l(x) = l_{min}^2 + (l_{max}^2 - l_{min}^2) \left(\frac{x}{N_{celle}} \right)^2$$

$$b) \quad l(x) = l_{min} + \frac{1}{2N_{celle}} (l_{max} - l_{min}) \left(1 + \text{Tanh} \left(\frac{x - N_{celle}/2}{width} \right) \right)$$

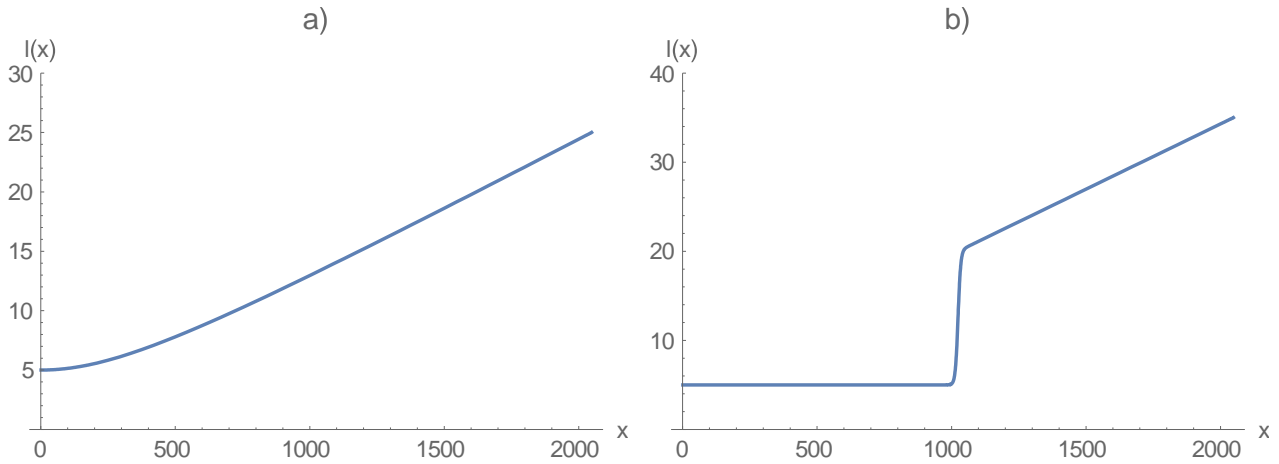


Fig. 1 grafico della funzione $l(x)$ nei due casi. Nel caso a) si è scelto un andamento parabolico con $l_{min} = 5$ ed $l_{max} = 25$, nel caso b) è stato costruito un andamento a gradino, con $l_{min} = 5$ ed $l_{max} = 35$, con $width = 10$.

I valori di l_{min} ed l_{max} definiscono il salto minimo e massimo del sistema e $width$ è la larghezza del gradino al centro della funzione $l(x)$ nel caso b). In entrambi i casi $l(x)$ è stata costruita in maniera tale da produrre sistemi fortemente disomogenei, nei quali i termini oltre il terzo ordine della (3) sono paragonabili ai primi.

Si può verificare questo fatto per i due casi, stimando numericamente all'istante iniziale $t = 0$ i vari termini della (3) e considerando che per confrontarli -dal momento che essi dipendono da x - occorrerà calcolarli per degli specifici valori. Si consideri una densità iniziale di particelle gaussiana $n(x, t = 0) = \frac{N_{particelle}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-1024)^2}{2}\right)$, normalizzata al numero di particelle del sistema. Per avere una funzione più semplice da derivare ed integrare numericamente rispetto alla (5), si è presa poi come probabilità di transizione una gaussiana normalizzata nella variabile Δ di larghezza $l(x)$, ovvero $P(\Delta, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi l(x)^2}} \exp\left(-\frac{\Delta^2}{2 l(x)^2}\right)$.

Nelle Fig. 2 e Fig. 3 sono riportati i grafici dei termini dello sviluppo (3), rappresentati come funzioni di x al tempo $t = 0$. Si è utilizzata per brevità la notazione $M_i = \int d\Delta \frac{\Delta^i \partial^i(nP)}{i! \partial x^i}$ e sono stati omessi i grafici dei termini M_i con i dispari perché danno contributo nullo allo sviluppo (3). Infatti, se l'indice i è dispari, la funzione $\Delta^i \frac{\partial^i(nP)}{\partial x^i}$ è una funzione dispari che, integrata su un dominio simmetrico, è identicamente nulla.

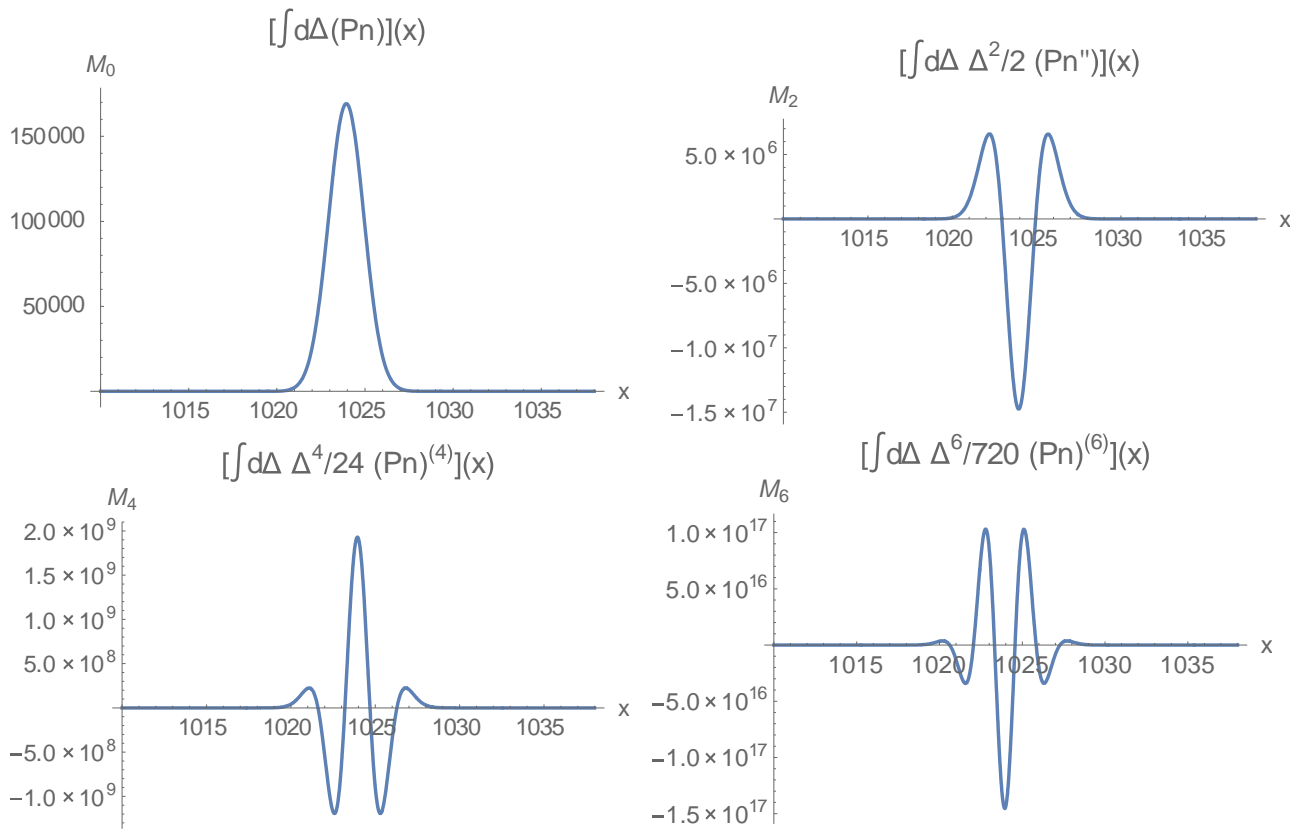


Fig. 2 Valore a $t = 0$ dei momenti M_i della distribuzione in funzione di x per $l(x)$ definita nel caso a).

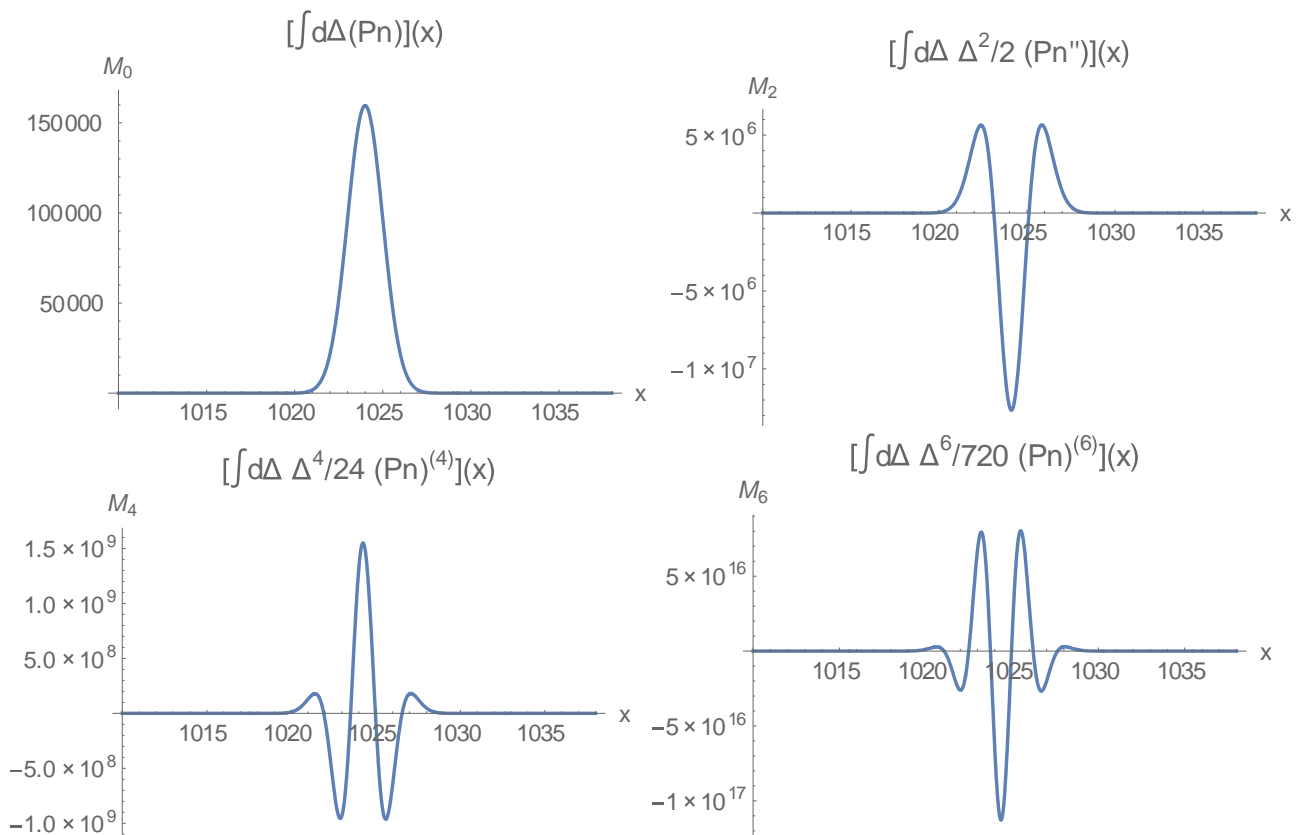


Fig. 3 Valore a $t = 0$ dei momenti M_i della distribuzione in funzione di x per $l(x)$ definita nel caso b).

Nei grafici in Fig. 2 e Fig. 3 è riportata solamente la regione centrale del sistema perché la distribuzione iniziale delle particelle $n(x, t = 0)$ è una gaussiana con $\sigma^2 = 1$: essa si annullerà, così come le sue derivate, dopo qualche multiplo di σ .

Successivamente le soluzioni numeriche dell'equazione di diffusione di Fokker-Planck sono state confrontate con le simulazioni della ME. Si ricordi l'equazione di Fokker-Planck (FP):

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2(D(x) n(x,t))}{\partial x^2} \quad (6)$$

Il coefficiente di diffusione della (6) vale $D(x) = \frac{\langle \Delta^2 \rangle}{2\tau}$, dove $\langle \Delta^2 \rangle$ è il salto quadratico medio, ottenuto come valor medio di Δ^2 sulla densità di probabilità $P(\Delta, x)$: $\langle \Delta^2 \rangle = \frac{1}{2l(x)} \int_{-l(x)}^{l(x)} \Delta^2 d\Delta = \frac{l(x)^2}{3}$. Sostituendo $\langle \Delta^2 \rangle$ nella espressione della diffusività, si ricava $D(x) = \frac{l(x)^2}{6}$.

La condizione iniziale e le condizioni al contorno imposte nella risoluzione della (6) sono state scelte in maniera tale da ottenere una soluzione coerente con la simulazione della ME. Se in quest'ultima la posizione iniziale di tutte le particelle era il centro del sistema, nella risoluzione della (6) è stata utilizzata una gaussiana con media pari a $\frac{N_{celle}}{2}$ e larghezza unitaria: $n(x, t = 0) = \frac{N_{particelle}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-1024)^2}{2}\right)$, la cui normalizzazione è pari a $N_{particelle}$. Inoltre, il vincolo di pareti riflettenti è espresso dalla condizione analitica che il flusso ai bordi del sistema si debba annullare, ovvero che $\frac{\partial(Dn)}{\partial x}(1, t) = \frac{\partial(Dn)}{\partial x}(N_{celle}, t) = 0 \forall t$. In questo modo il numero di particelle si conserva nel tempo, come si può verificare facilmente integrando la (6) su tutto lo spazio.

Si riportano in Fig. 4 le simulazioni della ME e della equazione di FP nei casi a) e b), relativamente a tempi differenti.

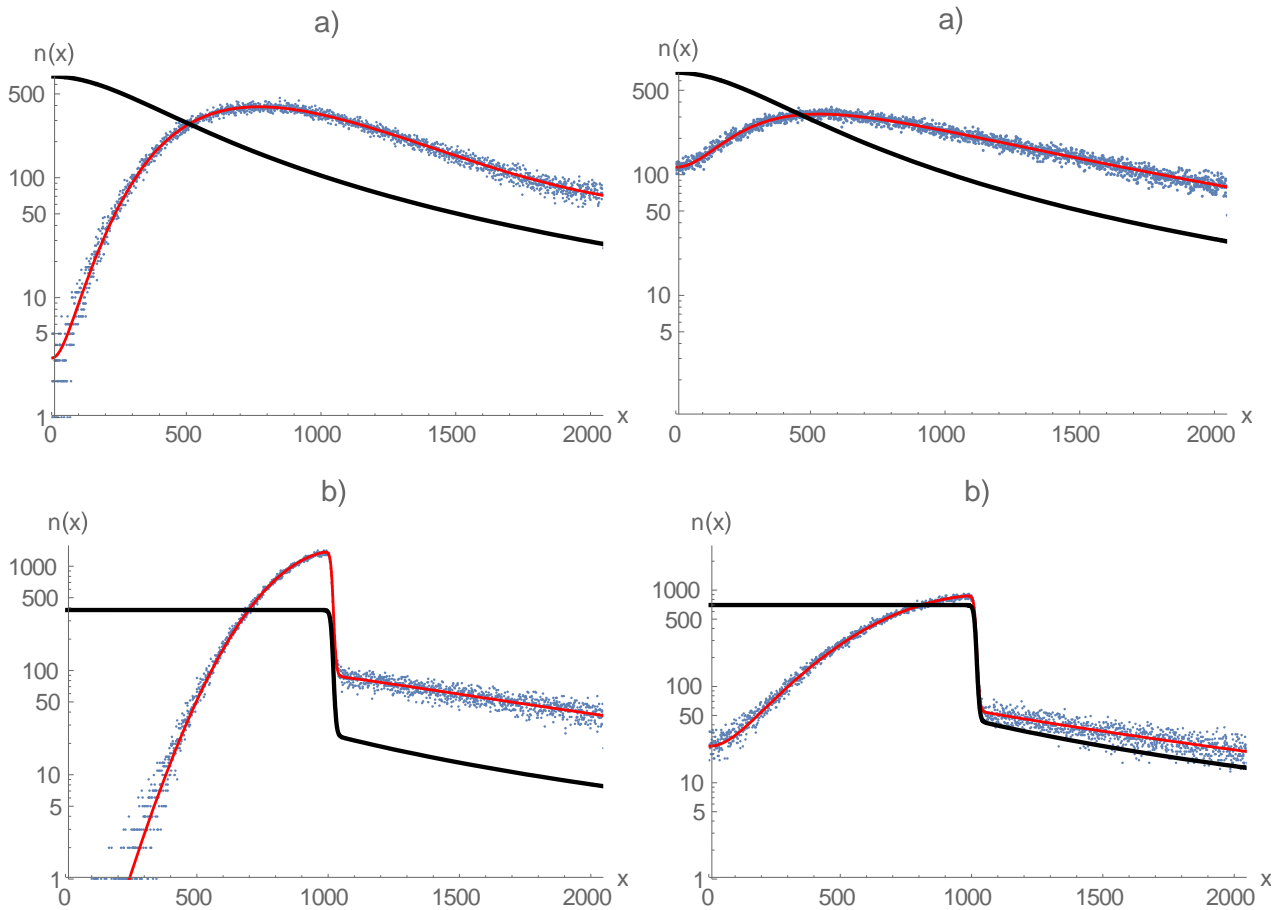


Fig. 4 Nei quattro grafici i punti blu sono la simulazione della ME, la linea rossa è la risoluzione dell'equazione di FP, mentre quella nera è la soluzione di equilibrio dell'equazione di FP. Nel caso a) si è usato $l_{min} = 5$ ed $l_{max} = 25$. Le due simulazioni sono relative al tempo 4000 ed al tempo 10000. Nel caso b) si sono usati $l_{min} = 5$ ed $l_{max} = 35$, con $width = 10$. Le simulazioni sono state interrotte rispettivamente al tempo 5000 ed al tempo 15000.

Le simulazioni riprodotte in Fig. 4 non evidenziano le discrepanze attese tra la simulazione della ME e la sua approssimazione diffusiva. La curva nera rappresentata nei grafici è la soluzione di equilibrio della equazione di FP: presa quest'ultima come riferimento temporale e confrontando tra loro i grafici della coppia a) e quelli della coppia b) si vede che l'accordo è ottimo anche per tempi diversi delle simulazioni.

Nel capitolo seguente viene fornita una dimostrazione che giustifica i risultati ottenuti, rielaborando un risultato dovuto a Ryskin. Preliminarmente, però, si ricorda la modalità di soluzione di equazioni differenziali lineari mediante la trasformata di Fourier, strumento che verrà adoperato più tardi.

Soluzione via Trasformata di Fourier dell'equazione di diffusione con diffusività omogenea.

L'equazione di diffusione più semplice è quella con diffusività omogenea D , ovvero

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 (D n(x,t))}{\partial x^2} \quad (7)$$

Si risolva la (7) tramite la Trasformata di Fourier (TF), ricordando che per linearità la costante D può essere portata fuori dagli integrali:

$$\frac{\partial \tilde{n}(k,t)}{\partial t} = -D k^2 \tilde{n}(k,t) \quad (8)$$

L'equazione precedente è una ODE del primo ordine in $\tilde{n}(k,t)$ nella variabile temporale t , che ha come soluzione

$$\tilde{n}(k,t) = \tilde{n}(k,t=0) \times \exp(-Dk^2 t) \quad (9)$$

Infine, per ottenere la densità nello spazio diretto, sarà necessario calcolare la Antitrasformata di Fourier (ATF) della $\tilde{n}(k,t)$. Questa operazione non è sempre possibile analiticamente, dato che la ATF di una funzione è nota solamente in casi specifici. Si restringa perciò lo studio della (9) ad un sistema analogo a quello costruito per la simulazione della ME. Aver posto tutte le particelle nell'origine si traduce nella condizione analitica che la condizione iniziale della equazione di diffusione è una delta di Dirac $n(x,0) = \delta(x)$. La TF della condizione iniziale vale $\tilde{n}(k,t=0) = \int \delta(x) \cdot e^{-ikx} dx = 1$ e la (9) si riduce a

$$\tilde{n}(k,t) = \exp(-Dk^2 t) \quad (10)$$

La ATF della (10) vale $n(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$, dal momento che la Antitrasformata di una gaussiana è ancora nella forma di una gaussiana. Questo semplice esercizio permette di mostrare che, in un sistema omogeneo, l'evoluzione temporale della densità di un sistema, le cui particelle sono inizialmente disposte nell'origine, avrà la forma di una gaussiana.

Validità dell'approssimazione diffusiva della ME per tempi $t \gg \tau$

L'approssimazione diffusiva della ME rappresenta efficacemente la dinamica del sistema, anche in presenza di forti gradienti, a patto di considerare tempi lunghi rispetto a τ . Come si può giustificare questo risultato? La dimostrazione matematica è stata presentata in un lavoro del 1997 [2]. Qui si presenta una versione della dimostrazione, per ragioni di semplicità limitata a sistemi spazialmente omogenei. Si ipotizza cioè che la probabilità di transizione della ME sia omogenea ed invariante per riflessione $P(|\Delta|) = P(x - x') = P(x' - x)$

Si consideri la trasformata di Fourier della (1), che semplifica la trattazione, dal momento che al posto di una equazione integrodifferenziale si ottiene l'equazione differenziale:

$$\frac{\partial \tilde{n}(k,t)}{\partial t} = -\frac{\tilde{n}(k,t)}{\tau} + \frac{\tilde{n}(k,t)\tilde{P}(k)}{\tau} \quad (11)$$

Il secondo addendo è ricavato calcolando la TF del termine integrale della ME. Dal momento che, per le ipotesi di simmetria fatte sulla P , esso è il prodotto convolutivo $\frac{1}{\tau} \int dx' n(x', t)P(x' - x)$, la sua trasformata di Fourier è nota e vale $\frac{\tilde{n}(k,t)\tilde{P}(k)}{\tau}$.

Con la (11) si è ottenuta una ODE del primo ordine in $\tilde{n}(k, t)$ nella variabile temporale t risolvibile facilmente, dal momento che P non dipende dal tempo:

$$\tilde{n}(k, t) = \tilde{n}(k, t = 0) \times \exp\left(\int_0^t \frac{dt}{\tau} (\tilde{P}(k) - 1)\right) = \tilde{n}(k, t = 0) \times \exp\left(\frac{t}{\tau} (\tilde{P}(k) - 1)\right) \quad (12)$$

Si definisca il tempo a cui si calcola la soluzione $t = n dt$, con n intero sufficientemente grande e $dt \approx \tau$. Sotto questa ipotesi è possibile riscrivere la densità come

$$\tilde{n}(k, t) = \tilde{n}(k, t = 0) \times \exp\left[\frac{n dt}{\tau} (\tilde{P}(k) - 1)\right] = \tilde{n}(k, t = 0) \times \left[\exp\left(\frac{dt}{\tau} (\tilde{P}(k) - 1)\right)\right]^n \quad (13)$$

Per determinare la forma del secondo fattore della (12) è necessario calcolare in maniera esplicita la trasformata di Fourier $\tilde{P}(k)$

$$\tilde{P}(k) = \int d\Delta e^{ik\Delta} P(\Delta) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \int d\Delta \Delta^m P(\Delta) \quad (14)$$

La seconda uguaglianza si è ottenuta scrivendo l'esponenziale secondo la sua definizione in serie di potenze. Si considerino quindi i termini della serie, che saranno i momenti della densità di probabilità $P(\Delta)$. Eccone alcuni:

$$\int d\Delta P(\Delta) = 1 = \tilde{P}(k = 0) \quad (15.1)$$

$$\int d\Delta \Delta P(\Delta) = 0 \quad (15.2)$$

$$\int d\Delta \Delta^2 P(\Delta) = \sigma^2 \quad (15.3)$$

$$\int d\Delta \Delta^m P(\Delta) = \langle \Delta^m \rangle \equiv \mu_m \quad m \geq 3 \quad (15.4)$$

I momenti di ordine dispari della $P(\Delta)$ si annullano sempre in maniera esatta, perché si suppone che la probabilità di transizione sia invariante per riflessione. Sono stati poi definiti il generico momento μ_m di ordine m della densità di probabilità e la varianza σ^2 . In questa maniera, poiché vale $\tilde{P}(k = 0) = 1$, sostituendo al posto di $\tilde{P}(k)$ nella (13) lo sviluppo in serie appena scritto, si ricava

$$\tilde{n}(k, t) = \tilde{n}(k, t = 0) \times \left[\exp \left(\frac{dt}{\tau} \left(-\frac{k^2 \sigma^2}{2} + \sum_{m=3}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \mu_m \right) \right) \right]^n \quad (16)$$

Si definisce infine, per semplificare la trattazione, il parametro $\xi = \sqrt{n}k$, cosicchè si ottiene

$$\tilde{n}(k, t) = \tilde{n}(k, t = 0) \times \exp \left[\frac{dt}{\tau} \left(-\frac{\xi^2 \sigma^2}{2} + \sum_{m=3}^{\infty} \frac{1}{n^{\frac{m}{2}-1}} \frac{(i\xi)^m}{m!} \mu_m \right) \right] \quad (17)$$

A seconda del valore del parametro ξ si hanno due differenti casi. Se $\xi \leq 1$, dal momento che si considera $n \rightarrow \infty$ (ovvero tempi lunghi $t \gg \tau$) si staranno considerando soltanto le componenti di Fourier con $k \rightarrow 0$. In tal caso la serie di potenze nella (17) è trascurabile rispetto al termine quadratico, cioè

$$\tilde{n}(k, t) = \tilde{n}(k, t = 0) \times \exp \left[-\frac{t}{\tau} \frac{(k\sigma)^2}{2} \right] \quad (18)$$

Invece nel caso in cui $\xi > 1$ si stanno considerando le componenti di Fourier con $k \rightarrow \infty$. Si dimostra in Appendice che in tale limite $|\tilde{P}(k)| \rightarrow 0$ e quindi, ricordando la (13), si ottiene $\tilde{n}(k, t) = \tilde{n}(k, t = 0) \times \exp \left(-\frac{n}{\tau} dt \right)$ che tende a 0 nel limite finora assunto di $n \rightarrow \infty$.

Concludendo, le componenti di Fourier della densità $\tilde{n}(k, t)$ corrispondenti a numeri d'onda k elevati si annullano e non contribuiscono alla TF inversa, mentre le armoniche con $k \rightarrow 0$ si riducono alla (18). Il risultato ha la seguente interpretazione fisica: in un sistema con diffusività uniforme la diffusione smussa molto rapidamente le oscillazioni di densità di breve lunghezza d'onda (e quindi frequenza spaziale elevata), perché le particelle del sistema dovranno percorrere un tragitto molto breve per spostarsi dai picchi di densità ai ventri, mentre è necessario molto più tempo affinché le oscillazioni di grande lunghezza d'onda si smussino. Dal punto di vista della probabilità di transizione $\tilde{P}(k)$ si è dimostrato che le sue componenti fortemente oscillanti si annullano per tempi elevati ed essa può essere approssimata con una distribuzione di probabilità pari ad 1 per piccoli k , che tende rapidamente a zero con $k \rightarrow \infty$.

La dimostrazione termina definendo $D = \frac{\sigma^2}{2\tau}$: in questo modo la TF della soluzione (18) della ME e l'analogo (9) per l'equazione di diffusione hanno la stessa forma e pertanto la dinamica diffusiva della ME è rappresentativa della equazione completa.

Ryskin fornisce una dimostrazione anche nel caso in cui la probabilità di transizione non sia omogenea, la cui controparte nell'equazione di diffusione è costituita dal fatto che la diffusività dipenda dalla posizione.

Appendice: Dimostrazione che $|\tilde{P}(\mathbf{k})| \rightarrow 0$ se $\mathbf{k} \rightarrow \infty$

Ricordando la definizione (13) della TF di $P(\Delta)$ e scrivendo l'esponenziale secondo la formula di Eulero si avrà

$$\tilde{P}(k) = \int d\Delta \cos(k \Delta) P(\Delta) + i \int d\Delta \sin(k \Delta) P(\Delta) =: C(k) + i S(k) \quad (\text{A1})$$

Si vuole dimostrare che $\tilde{P}(k) \rightarrow 0$ nel limite $k \rightarrow \infty$. Si possono sfruttare due ipotesi

- A) $P(\Delta)$ è simmetrica per riflessione. Questa ipotesi non è vincolante, ma semplifica il resto della dimostrazione.
- B) $P(\Delta)$ è a supporto finito, ovvero $P(\Delta) = 0$ per $|\Delta| > L$. Questa specifica forma, in relazione al lavoro presente, non costituisce una grande limitazione, essendo coerente con il modello numerico costruito.

In base all'ipotesi A) l'integrale del seno si annulla per parità:

$$S(k) = \int d\Delta \sin(k \Delta) P(\Delta) = \int_{-L}^L d\Delta \sin(k \Delta) P(\Delta) = 0$$

Si dimostra ora che nel limite $k \rightarrow \infty$ l'integrale del coseno $C(k) \rightarrow 0$. Quest'ultimo può essere espresso nella forma

$$C(k) = \int_{-L}^L d\Delta \cos(k \Delta) P(\Delta) = 2 \int_0^L d\Delta \cos(k \Delta) P(\Delta) = 2 \int_0^{N\lambda} d\Delta \cos(k \Delta) P(\Delta) + 2\mathcal{R}. \quad (\text{A2})$$

La prima uguaglianza si ottiene considerando che il prodotto $\cos(k \Delta) P(\Delta)$ è una funzione pari, pertanto il suo integrale su un dominio simmetrico è il doppio dell'integrale esteso alla sola regione positiva. Nella seconda uguaglianza si è introdotta la lunghezza d'onda dell'oscillazione di numero d'onda k , ovvero $\lambda = \frac{2\pi}{k}$, con N pari alla parte intera di $\frac{L}{\lambda}$ e si è definito $\mathcal{R} = \int_{N\lambda}^L d\Delta \cos(k \Delta) P(\Delta)$. Nel limite $k \rightarrow \infty$ $\mathcal{R} \rightarrow 0$, poiché il suo dominio di integrazione si annulla, infatti $L - N\lambda < \lambda \rightarrow 0$.

Si dimostra infine che $\int_0^{N\lambda} d\Delta \cos(k \Delta) P(\Delta) \rightarrow 0$ se $k \rightarrow \infty$, scrivendolo come somma di integrali su domini di integrazione di larghezza λ , ovvero $\sum_{n=0}^{N-1} \int_{n\lambda}^{(n+1)\lambda} d\Delta \cos(k \Delta) P(\Delta)$. Se si cambia la variabile di integrazione ponendo $y = \Delta - n\lambda$, considerando che il coseno è invariante per traslazioni di $nk\lambda = \frac{2\pi nk}{k} = 2\pi n$, si ottiene

$$C(k) = \sum_{n=0}^{N-1} \int_0^\lambda dy \cos(k y + nk\lambda) P(y + n\lambda) = \sum_{n=0}^{N-1} \int_0^\lambda dy \cos(k y) P(y + n\lambda) \quad (\text{A3})$$

Si sviluppi $P(y + n\lambda)$ in serie di potenze di y attorno a $n\lambda$:

$$\sum_{n=0}^{N-1} \int_0^\lambda dy \cos(k y) \left[P(n\lambda) + P'y + \frac{1}{2}P''y^2 + \dots \right] \quad (\text{A4})$$

Gli integrali dei primi termini si calcolano facilmente: $\int_0^\lambda dy \cos(k y) = 0$, $\int_0^\lambda dy y \cos(k y) = 0$ e $\int_0^\lambda dy y^2 \cos(k y) = \frac{4\pi}{k^3}$. Sostituendo, la (A3) diventa

$$\sum_{n=0}^{N-1} \left[P''(n\lambda) \frac{2\pi}{k^3} + O(k^{-3}) \right] \quad (\text{A5})$$

che si annulla nel limite $k \rightarrow \infty$, dal momento che $P''(n\lambda)$ è finita.

Pertanto $C(k) \rightarrow 0$ se $k \rightarrow \infty$, che dimostra il risultato cercato.

Bibliografia

- [1] R. F. Pawula, *Approximation of the Linear Boltzmann Equation by the Fokker-Planck Equation*, Physical Review, Vol 162, 186 (1967)
- [2] G. Ryskin, *Simple procedure for correcting equations of evolution: Application to Markov processes*, Physical Review E, Vol. 56, 5123 (1997)
- [3] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, 2nd ed., (Springer, Berlin, 1989)