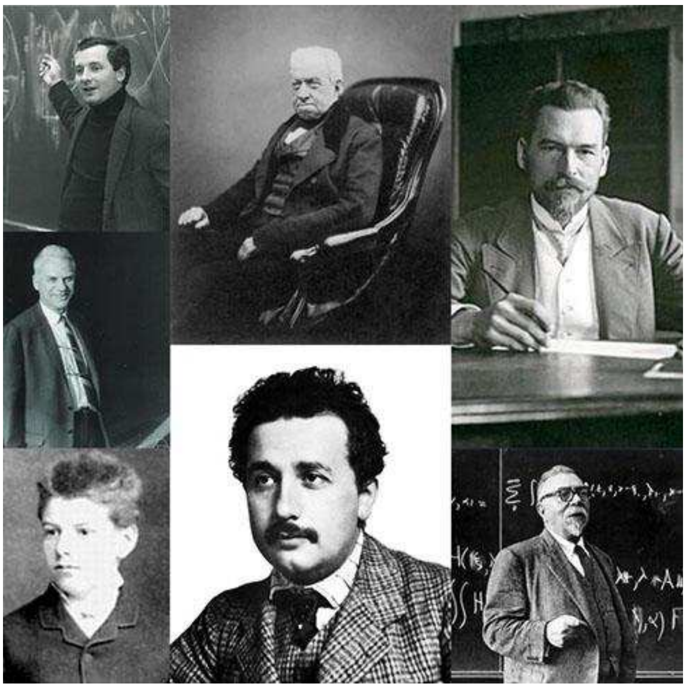
Matematica Open Source – http://www.extrabyte.info
Quaderni di Fisica Teorica – 2019

Matematica Open Source

$$\frac{d}{dx}f\left(x\right) \quad \sum_{k=0}^{+\infty}a_k \quad \int f\left(x\right)dx \quad \oint_{\Gamma}\left(Xdx+Ydy+Zdz\right)$$

Moto browniano ed equazione di Langevin

Marcello Colozzo



Indice

1 Impostazione del problema

Consideriamo un sistema dinamico costituito da una particella di massa m che si muove in un fluido viscoso. Per semplicità consideriamo uno scenario bidimensionale in cui il moto si svoge nel piano cartesiano Oxy, come illustrato in fig. 1, in cui è riportato il diagramma delle forze agenti sulla particella in un generico istante t.

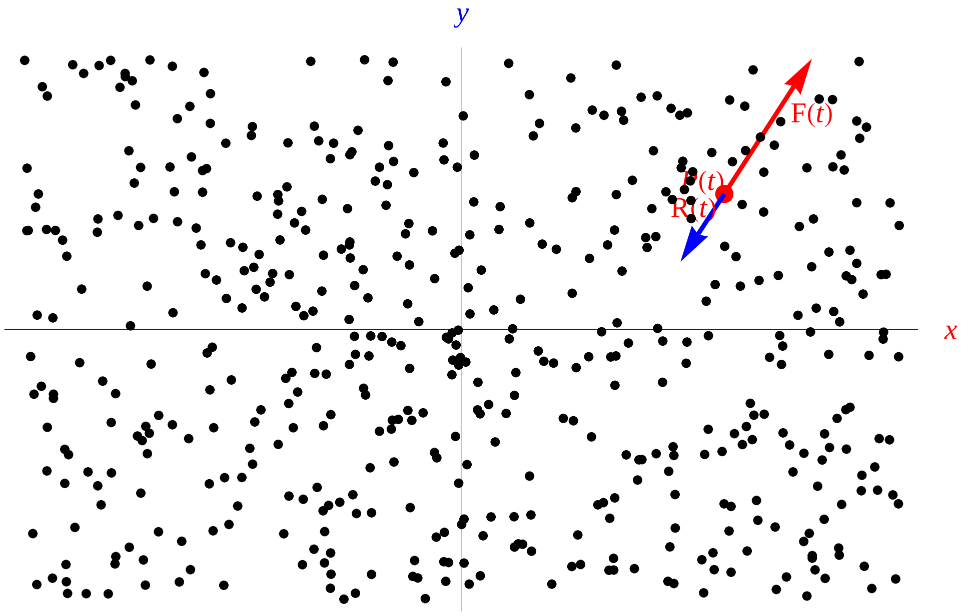


Figura 1: *Schematizzazione di un fluido viscoso 2-dimensionale in cui si muove una particella di posizione istantanea $P(t)$. La forza $\mathbf{F}(t)$ nasce dagli urti con le molecole del fluido. Tale forza è variabile istante per istante e determina la traiettoria della particella. La forza $\mathbf{R}(t)$ è invece la resistenza passiva dovuta alla viscosità del fluido.*

Precisamente, le forze agenti sono:

1. Una forza $\mathbf{F}(t)$ dovuta agli urti tra la particella e le molecole che costituiscono il fluido.
2. Una resistenza passiva $\mathbf{R}(t)$ dovuta alla viscosità.

Riguardo alla forza $\mathbf{R}(t)$ ci riferiamo al valor medio nel tempo che denotiamo semplicemente con $\mathbf{R}$. Per la seconda legge di Newton:

$$m\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{R} + \mathbf{F}(t), \tag{1}$$

dove $\mathbf{v}$ è la velocità della particella. La resistenza passiva è un vettore orientato in verso opposto alla velocità $\mathbf{v}$ (cfr. fig. 1). Per velocità non troppo elevate, la relazione che lega la forza $\mathbf{R}$ al vettore velocità è lineare:

$$\mathbf{R} = -b\mathbf{v} \tag{2}$$

Qui $b > 0$ è un coefficiente di proporzionalità. È preferibile riferirsi al suo reciproco, la cosiddetta *mobilità* $\beta = b^{-1}$.

2 L'equazione di Langevin

Sostituendo queste relazioni nella (1) otteniamo l'**equazione di Langevin**:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt}+\frac{\mathbf{v}}{\tau_r}=\boldsymbol{\alpha}\left(t\right), \tag{3}$$

avendo introdotto la costante $\tau_r=\beta m$ denominata *tempo di rilassamento*, mentre

$$\boldsymbol{\alpha}\left(t\right)=\frac{\mathbf{F}\left(t\right)}{m} \tag{4}$$

è l'accelerazione dovuta agli urti particella-molecole. Proiettando la (3) sugli assi coordinati:

$$\begin{cases}\frac{dv_x}{dt}+\frac{v_x}{\tau_r}=\alpha_x\left(t\right)\\ \frac{dv_y}{dt}+\frac{v_y}{\tau_r}=\alpha_y\left(t\right)\end{cases}, \tag{5}$$

I termini noti sono le componenti cartesiane della funzione vettoriale (4). Le (5) costituiscono un sistema di equazioni differenziali disaccoppiate, per cui possiamo focalizzare la nostra attenzione sulla prima (la seconda si risolverà allo stesso modo). Riguardo al significato fisico del tempo di rilassamento, osserviamo che

$$\begin{aligned}&\beta=0\ \ \text{(fluido infinitamente viscoso)}\Longrightarrow\tau_r=0\\ &\beta\to+\infty\ \ \text{(fluido non viscoso)}\Longrightarrow\tau_r\to+\infty\end{aligned} \tag{6}$$

In altri termini, la costante τ_r fissa la scala dei tempi in cui agisce la resistenza passiva dovuta alla viscosità del fluido. Infatti, dalla prima delle (6) vediamo che in un fluido infinitamente viscoso, il moto della particella è istantaneamente smorzato. Di contro, in assenza di viscosità il moto risulta smorzato dopo un tempo infinito, cioè mai.

Assumiamo le seguenti condizioni iniziali:

$$\text{istante iniziale } t_0=0\Longrightarrow\begin{cases}x\left(0\right)=y\left(0\right)=0\\ \mathbf{v}\left(0\right)=\mathbf{v}_0=v_{0x}\mathbf{i}+v_{0y}\mathbf{j}\end{cases} \tag{7}$$

Cioè la particella "parte" dall'origine con una velocità assegnata $\mathbf{v}_0$. Matematicamente ciò implica il seguente problema di Cauchy per la componente $v_x\left(t\right)$ della velocità:

$$\mathcal{P}:\begin{cases}\frac{dv_x}{dt}+\frac{v_x}{\tau_r}=\alpha_x\left(t\right)\\ v_x\left(0\right)=v_{0x}\end{cases} \tag{8}$$

Innanzitutto integriamo l'equazione differenziale. È lineare del primo ordine, per cui va calcolato il fattore integrante:

$$I\left(t\right)=e^{\frac{1}{\tau_r}\int dt}=e^{t/\tau_r} \tag{9}$$

Quindi:

$$e^{t/\tau_r}\frac{dv_x}{dt}+e^{t/\tau_r}\frac{v_x}{\tau_r}=e^{t/\tau_r}\alpha_x\left(t\right) \tag{10}$$

Cioè

$$\frac{d}{dt}\left[e^{t/\tau_r}v_x\left(t\right)\right]=\alpha_x\left(t\right)e^{t/\tau_r} \tag{11}$$

Integrando primo e secondo membro da 0 a t:

$$\int_0^t \frac{d}{dt'}\left[e^{t'/\tau_r}v_x(t')\right]dt' = \int_0^t \alpha_x(t')\,e^{t'/\tau_r}dt'$$
$$\Longleftrightarrow e^{t/\tau_r}v_x(t) - v_x(0) = \int_0^t \alpha_x(t')\,e^{t'/\tau_r}dt'$$

Tenendo conto della condizione iniziale $v_x(0) = v_{0x}$:

$$v_x(t) = v_{0x}e^{-t/\tau_r} + e^{-t/\tau_r}\int_0^t \alpha_x(t')\,e^{t'/\tau_r}dt' \tag{12}$$

Dal momento che la seconda delle (5) ha la stessa forma della prima, si ha:

$$v_y(t) = v_{0y}e^{-t/\tau_r} + e^{-t/\tau_r}\int_0^t \alpha_y(t')\,e^{t'/\tau_r}dt' \tag{13}$$

Quindi:

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}(t) &= v_x(t)\,\mathbf{i} + v_y(t)\,\mathbf{j} \\
&= \left[v_{0x}e^{-t/\tau_r} + e^{-t/\tau_r}\int_0^t \alpha_x(t')\,e^{t'/\tau_r}dt'\right]\mathbf{i} + \left[v_{0y}e^{-t/\tau_r} + e^{-t/\tau_r}\int_0^t \alpha_y(t')\,e^{t'/\tau_r}dt'\right]\mathbf{j} \\
&= v_{0x}e^{-t/\tau_r}\mathbf{i} + v_{0y}e^{-t/\tau_r}\mathbf{j} + e^{-t/\tau_r}\int_0^t \mathbf{i}\alpha_x(t')\,e^{t'/\tau_r}dt' + e^{-t/\tau_r}\int_0^t \mathbf{j}\alpha_y(t')\,e^{t'/\tau_r}dt' \\
&= \mathbf{v}_0e^{-t/\tau_r} + e^{-t/\tau_r}\left[\int_0^t \mathbf{i}\alpha_x(t')\,e^{t'/\tau_r}dt' + \int_0^t \mathbf{j}\alpha_y(t')\,e^{t'/\tau_r}dt'\right] \\
&= \mathbf{v}_0e^{-t/\tau_r} + e^{-t/\tau_r}\int_0^t \left[\alpha_x(t')\,\mathbf{i} + \alpha_y(t')\,\mathbf{j}\right]dt'
\end{aligned}$$

Finalmente:

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0e^{-t/\tau_r} + e^{-t/\tau_r}\int_0^t \boldsymbol{\alpha}(t')\,e^{t'/\tau_r}dt', \tag{14}$$

da cui vediamo che la velocità iniziale della particella è sottoposta a un termine di smorzamento e^{-t/τ_r} dovuto alla viscosità, con costante di tempo pari al tempo di rilassamento τ_r:

$$\lim_{t\to+\infty}\left(\mathbf{v}_0e^{-t/\tau_r}\right) = \mathbf{0} \tag{15}$$

Pertanto

$$\mathbf{v}(t \gg \tau_r) \simeq e^{-t/\tau_r}\int_0^t \boldsymbol{\alpha}(t')\,e^{t'/\tau_r}dt', \tag{16}$$

che è la soluzione a regime.

Il problema che si apre con la soluzione (14) o se vogliamo con quella a regime (16), deriva dalla non conoscenza della funzione $\boldsymbol{\alpha}(t)$, ovvero della forza istantanea per unità di massa derivante dagli urti particella-molecole del fluido. D'altra parte la dinamica degli urti particella-molecola è manifestamente un processo aleatorio, per cui dobbiamo considerare una famiglia $\Phi_{\boldsymbol{\alpha}} = \{\boldsymbol{\alpha}(t)\}$ di funzioni definita in un appropriato spazio di probabilità. Ciò si esprime dicendo che l'equazione di Langevin (3) è un'*equazione differenziale stocastica*. Per una generica variabile aleatoria $y(t)$ di cui conosciamo la densità di probabilità, denotiamo con $\langle y(t)\rangle$ il suo valore medio che nel caso di un processo ergodico, equivale alla media temporale della medesima grandezza:

$$\langle y(t)\rangle = \int_Y yP(y)\,dy \tag{17}$$

Qui Y è l'insieme dei valori assunti da $y(t)$ e $P(y)$ è la densità di probabilità. Il passo successivo consiste nel definire una grandezza che sia in grado di quantificare in media l'allontanamento di $y(t)$ da $\langle y(t)\rangle$. La differenza $y(t) - \langle y(t)\rangle$ non è affidabile, giacché nel caso di una grandezza $y(t)$ di segno alternante si ha $\langle y(t) - \langle y(t)\rangle\rangle \sim 0$ anche in presenza di oscillazioni ampie. Allora è preferibile assumere:

$$\left\langle [y(t) - \langle y(t)\rangle]^2 \right\rangle, \tag{18}$$

in quanto

$$\left\langle [y(t) - \langle y(t)\rangle]^2 \right\rangle > 0, \quad \forall y(t) \text{ aleatoria} \tag{19}$$

e $\left\langle [y(t) - \langle y(t)\rangle]^2 \right\rangle \to 0$ se e solo se la probabilità di trovare $y(t)$ "distante" da $\langle y(t)\rangle$ è trascurabilmente piccola. Tale grandezza si chiama *deviazione quadratica media* o *varianza* di $y(t)$. Risulta:

$$\begin{aligned} \left\langle [y(t) - \langle y(t)\rangle]^2 \right\rangle &= \left\langle y(t)^2 - 2y(t)\langle y(t)\rangle + \langle y(t)\rangle^2 \right\rangle \\ &= \left\langle y(t)^2 \right\rangle - 2\langle y(t)\rangle^2 + \langle y(t)\rangle^2 \end{aligned} \tag{20}$$

Cioè

$$\left\langle [y(t) - \langle y(t)\rangle]^2 \right\rangle = \left\langle y(t)^2 \right\rangle - \langle y(t)\rangle^2, \tag{21}$$

che nel caso di media nulla si riduce a $\left\langle y(t)^2 \right\rangle$. La varianza misura la "potenza media" della $y(t)$, avendosi:

$$\left\langle y(t)^2 \right\rangle = \int_0^{+\infty} w(f)\, df, \tag{22}$$

ove $w(f)$ è lo spettro di potenza che è a sua volta legato alla funzione di autocorrelazione

$$\varphi(t' - t) = \langle y(t)\, y(t')\rangle \underset{\tau = t' - t}{\Longleftrightarrow} \varphi(\tau) = \langle y(t)\, y(t+\tau)\rangle, \tag{23}$$

attraverso la trasformata di Fourier (*Teorema di Wiener – Khintchine*):

$$\begin{cases} w(f) = 4\displaystyle\int_0^{+\infty} \varphi(\tau)\cos(2\pi f\tau)\, d\tau \\ \varphi(\tau) = \displaystyle\int_0^{+\infty} w(f)\cos(2\pi f\tau)\, df \end{cases} \tag{24}$$

Dal momento che la soluzione (14) è inutilizzabile per ciò che riguarda l'espressione analitica di $\mathbf{v}(t)$, dobbiamo cercare di trovare la varianza

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{v}(t)^2 \right\rangle &= \left\langle v_x(t)^2 + v_y(t)^2 \right\rangle \\ &= \left\langle v_x(t)^2 \right\rangle + \left\langle v_y(t)^2 \right\rangle \end{aligned} \tag{25}$$

Siccome $v_x(t)$ e $v_y(t)$ hanno formalmente la stessa espressione analitica, concentriamoci su $\left\langle v_x(t)^2 \right\rangle$:

$$\begin{aligned} \left\langle v_x(t)^2 \right\rangle &= \left\langle \left[v_{0x} e^{-t/\tau_r} + e^{-t/\tau_r} \int_0^t \alpha_x(t')\, e^{t'/\tau_r} dt' \right]^2 \right\rangle \\ &= \left\langle v_{0x}^2 e^{-2t/\tau_r} + 2v_{0x} e^{-2t/\tau_r} \int_0^t \alpha_x(t')\, e^{t'/\tau_r} dt' + e^{-2t/\tau_r} \left[\int_0^t \alpha_x(t')\, e^{t'/\tau_r} dt' \right]^2 \right\rangle \\ &= v_{0x}^2 e^{-2t/\tau_r} + 2v_{0x} e^{-2t/\tau_r} \int_0^t \langle \alpha_x(t')\rangle\, e^{t'/\tau_r} dt' + e^{-2t/\tau_r} \left\langle \left[\int_0^t \alpha_x(t')\, e^{t'/\tau_r} dt' \right]^2 \right\rangle \end{aligned} \tag{26}$$

Per un processo aleatorio stazionario e a media nulla:

$$\langle \alpha_x(t) \rangle = 0,$$

per cui:

$$\left\langle v_x(t)^2 \right\rangle = v_{0x}^2 e^{-2t/\tau_r} + e^{-2t/\tau_r} \left\langle \left[\int_0^t \alpha_x(t') e^{t'/\tau_r} dt' \right]^2 \right\rangle$$

Calcoliamo a parte:

$$\begin{aligned} I(t) &= \left\langle \left[\int_0^t \alpha_x(t') e^{t'/\tau_r} dt' \right]^2 \right\rangle = \left\langle \int_0^t \alpha_x(t') e^{t'/\tau_r} dt' \cdot \int_0^t \alpha_x(t'') e^{t''/\tau_r} dt'' \right\rangle \\ &= \left\langle \int_0^t dt' e^{t'/\tau_r} \int_0^t dt'' \alpha_x(t') \alpha_x(t'') e^{t''/\tau_r} \right\rangle \\ &= \int_0^t dt' e^{t'/\tau_r} \int_0^t dt'' \langle \alpha_x(t') \alpha_x(t'') \rangle e^{t''/\tau_r} \end{aligned} \tag{27}$$

Se $\tau_u > 0$ fissa la scala dei tempi dei processi d'urto particella-molecole, ci aspettiamo:

$$\tau_u \ll \tau_r \tag{28}$$

Cioè gli urti sono istantanei nella scala fissata dal tempo di rilassamento. Riguardo alla media $\langle \alpha_x(t') \alpha_x(t'') \rangle$ si ha:

$$\langle \alpha_x(t') \alpha_x(t'') \rangle = \begin{cases} 0, & \text{se } \alpha_x(t') \text{ e } \alpha_x(t'') \text{ sono scorrelati} \\ \neq 0, & \text{altrimenti} \end{cases} \tag{29}$$

Più precisamente, per $t'' > t'$ se $\langle \alpha_x(t') \alpha_x(t'') \rangle \neq 0$ significa che la probabilità di misurare un assegnato valore di α_x all'istante t'', dipende dal valore assunto da α_x al tempo t'. Ciò si realizza se e solo se

$$t' < t'' < t' + \tau_u \tag{30}$$

Viceversa se

$$t'' > t' + \tau_u \tag{31}$$

la particella perde memoria dell'urto avvenuto al tempo t', per cui $\alpha_x(t')$ e $\alpha_x(t'')$ sono scorrelati. Rimuovendo il vincolo $t'' > t'$ si ha:

$$\langle \alpha_x(t') \alpha_x(t'') \rangle \neq 0 \Longleftrightarrow t'' = t' \pm \tau_u \tag{32}$$

E tenendo conto della (28):

$$\langle \alpha_x(t') \alpha_x(t'') \rangle \neq 0 \Longleftrightarrow t'' \simeq t' \tag{33}$$

Riprendiamo la varianza:

$$\left\langle v_x(t)^2 \right\rangle = \left[v_{0x}^2 + I(t) \right] e^{-2t/\tau_r}, \tag{34}$$

per quanto detto, l'integrale $I(t)$ si scrive:

$$I(t) = \iint_{D_t} \langle \alpha_x(t') \alpha_x(t'') \rangle e^{\frac{t'+t''}{\tau_r}} dt' dt'', \tag{35}$$

essendo:

$$D_t = \left\{ (t', t'') \in \mathbb{R}^2 \mid 0 \leq t' \leq t, \ 0 \leq t'' \leq t \right\}, \tag{36}$$

cioè un dominio quadrato del piano $t't''$ il cui lato ha lunghezza t. La presenza di $e^{\frac{t'+t''}{\tau_r}}$ suggerisce il cambio di variabili:

$$\xi = t' + t'', \quad \eta = t' - t'', \tag{37}$$

cosicchè l'integrale diventa:

$$I(t) = \iint_{D'_t} \left\langle \alpha\left(\frac{\xi+\eta}{2}\right) \alpha\left(\frac{\xi-\eta}{2}\right) \right\rangle e^{\xi/\tau_r} \left| \frac{\partial(t',t'')}{\partial(\xi,\eta)} \right| d\xi d\eta, \tag{38}$$

dove:

$$D'_t = \left\{ (\xi,\eta) \in \mathbb{R}^2 \mid 0 \le \xi \le 2t, \ -t \le \eta \le t \right\} \tag{39}$$

Il determinante jacobiano della trasformazione (37) è:

$$\frac{\partial(t',t'')}{\partial(\xi,\eta)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial t'}{\partial \xi} & \frac{\partial t''}{\partial \xi} \\ \frac{\partial t'}{\partial \eta} & \frac{\partial t''}{\partial \eta} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{vmatrix} = -\frac{1}{2}, \tag{40}$$

onde:

$$I(t) = \frac{1}{2} \int_0^{2t} d\xi e^{\xi/\tau_r} \int_{-t}^{t} d\eta \left\langle \alpha\left(\frac{\xi+\eta}{2}\right) \alpha\left(\frac{\xi-\eta}{2}\right) \right\rangle \tag{41}$$

La (33) implica:

$$\left\langle \alpha\left(\frac{\xi+\eta}{2}\right) \alpha\left(\frac{\xi-\eta}{2}\right) \right\rangle \neq 0 \Longleftrightarrow \frac{\xi+\eta}{2} \simeq \frac{\xi-\eta}{2} \Longleftrightarrow \eta \simeq 0 \tag{42}$$

In altri termini, il contributo all'integrale tra $-t$ e t proviene dai valori dell'integrando per $\eta \simeq 0$:

$$\int_{-t}^{t} d\eta \left\langle \alpha\left(\frac{\xi+\eta}{2}\right) \alpha\left(\frac{\xi-\eta}{2}\right) \right\rangle \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \left\langle \alpha\left(\frac{\xi+\eta}{2}\right) \alpha\left(\frac{\xi-\eta}{2}\right) \right\rangle \tag{43}$$

In virtù della stazionarietà del processo aleatorio, è lecito ritenere indipendente dalla variabile temporale ξ l'integrale:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \left\langle \alpha\left(\frac{\xi+\eta}{2}\right) \alpha\left(\frac{\xi-\eta}{2}\right) \right\rangle = A > 0 \tag{44}$$

In tal modo possiamo calcolare facilmente l'integrale (41):

$$I(t) = \frac{A}{2} \int_0^{2t} e^{\xi/\tau_r} d\xi = \frac{A\tau_r}{2} \left(e^{2t/\tau_r} - 1 \right) \tag{45}$$

Sostituendo nella (34):

$$\left\langle v_x(t)^2 \right\rangle = v_{0x}^2 e^{-2t/\tau_r} + K \left(1 - e^{-2t/\tau_r} \right), \tag{46}$$

dove $K = \frac{A\tau_r}{2} > 0$ è una costante indeterminata. Dalla (46) vediamo che

$$t \ll \tau_r \Longrightarrow e^{-2t/\tau_r} \simeq 1 \Longrightarrow \left\langle v_x(t)^2 \right\rangle \simeq v_{0x}^2, \tag{47}$$

in quanto a tempi brevi la resistenza passiva non ha avuto il tempo di smorzare il moto della particella. Viceversa, a tempi lunghi:

$$t \gg \tau_r \Longrightarrow e^{-2t/\tau_r} \simeq 0 \Longrightarrow \left\langle v_x(t)^2 \right\rangle \simeq K \tag{48}$$

Assumendo che il sistema particella+fluido sia in equilibrio termodinamico alla temperatura T, si ha dalla Meccanica statistica che il valor medio dell'energia cinetica per singolo grado di libertà è:

$$\left\langle \frac{1}{2} m v_x^2 \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T \Longleftrightarrow m \left\langle v_x^2 \right\rangle = k_B T, \tag{49}$$

dove k_B è la costante di Boltzmann. Segue

$$\left\langle v_x (t)^2 \right\rangle = \frac{k_B T}{m}, \tag{50}$$

e la (46) si scrive:

$$\left\langle v_x (t)^2 \right\rangle = v_{0x}^2 e^{-2t/\tau_r} + \frac{k_B T}{m} \left(1 - e^{-2t/\tau_r}\right) \tag{51}$$

Alla stessa maniera si giunge a

$$\left\langle v_y (t)^2 \right\rangle = v_{0y}^2 e^{-2t/\tau_r} + \frac{k_B T}{m} \left(1 - e^{-2t/\tau_r}\right), \tag{52}$$

da cui vediamo che il contributo alla varianza della velocità proviene da due termini. Il primo è il termine "viscoso":

$$v_{0k}^2 e^{-2t/\tau_r} \quad (k = x, y) \tag{53}$$

Il secondo

$$\frac{k_B T}{m} \left(1 - e^{-2t/\tau_r}\right), \tag{54}$$

proviene dalla dinamica degli urti particella-molecola ed agisce a tempi lungi, giacché è una salita esponenziale con costante di tempo τ_r:

$$\frac{k_B T}{m} \left(1 - e^{-2t/\tau_r}\right) \underset{t \gg \tau_r}{\longrightarrow} \frac{k_B T}{m} \tag{55}$$

Cioè a tempi lunghi prevale la dinamica dovuta all'agitazione termica:

$$\left\langle v_k (t)^2 \right\rangle \underset{t \gg \tau_r}{\longrightarrow} \frac{k_B T}{m} \quad (k = x, y) \tag{56}$$

Conseguentemente, il sistema perde memoria dello stato iniziale. Per determinare la varianza del vettore posizione $\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j}$ della particella, dobbiamo innanzitutto risolvere il seguente problema di Cauchy:

$$\begin{cases} \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} + \frac{1}{\tau_r} \frac{dr}{dt} = \boldsymbol{\alpha}(t) \\ \mathbf{r}(0) = 0, \quad \left.\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right|_{t=0} = \mathbf{v}_0 \end{cases}, \tag{57}$$

la cui equazione differenziale è ottenuta dalla (3). Al solito, ci concentriamo solo sulla componente x, giacché:

$$\left\langle \mathbf{r} (t)^2 \right\rangle = \left\langle x (t)^2 \right\rangle + \left\langle y (t)^2 \right\rangle \tag{58}$$

L'ascissa $x(t)$ risolve il problema:

$$\begin{cases} \frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{1}{\tau_r} \frac{dx}{dt} = \alpha_x (t) \\ x(0) = 0, \quad \left.\frac{dx}{dt}\right|_{t=0} = v_{0x} \end{cases}, \tag{59}$$

Trattandosi di un'equazione differenziale lineare del secondo ordine non omogenea, il suo integrale generale si scrive:

$$x(t, C_1, C_2) = \xi(t, C_1, C_2) + x_0(t), \tag{60}$$

dove: $\xi(t, C_1, C_2)$ è l'integrale generale dell'equazione omogenea associata, $x_0(t)$ è un integrale particolare dell'equazione non omogenea, e C_1, C_2 sono costanti di integrazione. Un sistema completo di integrali dell'omogenea è:

$$\left\{x_1(t) = 1,\ x_2(t) = e^{-t/\tau_r}\right\}, \tag{61}$$

onde l'integrale generale dell'omogenea si scrive:

$$\xi(t, C_1, C_2) = C_1 + C_2 e^{-t/\tau_r} \tag{62}$$

Per determinare un integrale particolare dell'equazione non omogenea, applichiamo il metodo di Cauchy. Quindi:

$$x_0(t) = \int_0^t K(t, t')\, \alpha_x(t')\, dt', \tag{63}$$

dove $K(t, t')$ è il nucleo risolvente:

$$K(t, t') = \frac{1}{W(t')} \begin{vmatrix} x_1(t') & x_2(t') \\ x_1(t) & x_2(t) \end{vmatrix}, \tag{64}$$

essendo $W(t')$ il wronskiano del sistema di integrali (61). Risulta:

$$\begin{aligned} W(t) &= \begin{vmatrix} x_1(t) & x_2(t) \\ x_1'(t) & x_2'(t) \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} 1 & e^{-t/\tau_r} \\ 0 & -\frac{1}{\tau_r} e^{-t/\tau_r} \end{vmatrix} \end{aligned}$$

Cioè

$$W(t) = -\frac{1}{\tau_r} e^{-t/\tau_r}, \tag{65}$$

cosicché

$$K(t, t') = \tau_r \left(1 - e^{-\frac{t-t'}{\tau_r}}\right) \tag{66}$$

Sostituendo in (63):

$$x_0(t) = \tau_r \int_0^t \left(1 - e^{-\frac{t-t'}{\tau_r}}\right) \alpha_x(t')\, dt' \tag{67}$$

Otteniamo quindi l'integrale generale dell'equazione non omogenea

$$x(t, C_1, C_2) = C_1 + C_2 e^{-t/\tau_r} + \tau_r \int_0^t \left(1 - e^{-\frac{t-t'}{\tau_r}}\right) \alpha_x(t')\, dt' \tag{68}$$

Passiamo ora ad applicare le condizioni iniziali. Per calcolare la derivata di $x_0(t)$ è conveniente lasciare inespresso il nucleo risolvente. Poniamo

$$x_0(t) = \int_0^t f(t, t')\, dt', \tag{69}$$

dove

$$f(t, t') = K(t, t')\, \alpha_x(t') \tag{70}$$

Per un noto teorema[1]:

$$\frac{d}{dt}x_0(t) = f(t,t)\cdot 1 + f(t,0)\cdot 0 + \int_0^t f_t(t,t')\,dt' \tag{71}$$
$$= f(t,t) + \int_0^t f_t(t,t')\,dt'$$

Esplicitiamo $f_t(t,t')$:

$$f_t(t,t') = \frac{\partial}{\partial t}\left[K(t,t')\,\alpha_x(t')\right] = K_t(t,t')\,\alpha_x(t'), \tag{72}$$

mentre

$$f(t,t) = K(t,t)\,\alpha_x(t) = 0, \tag{73}$$

giacché $K(t,t) = 0$. Segue

$$\frac{d}{dt}x_0(t) = \int_0^t K_t(t,t')\,\alpha_x(t')\,dt' \tag{74}$$

Dalla (66) determiniamo $K_t(t,t')$, cosicché

$$\frac{d}{dt}x_0(t) = \int_0^t e^{-\frac{t-t'}{\tau_r}}\alpha_x(t')\,dt' \tag{75}$$

Finalmente:

$$\frac{d}{dt}x(t,C_1,C_2) = -\frac{1}{\tau_r}C_2 e^{-t/\tau_r} + \int_0^t e^{-\frac{t-t'}{\tau_r}}\alpha_x(t')\,dt' \tag{76}$$

Applichiamo le condizioni iniziali:

$$x(0,C_1,C_2) = 0 \Longleftrightarrow C_1 + C_2 = 0 \tag{77}$$

$$\left.\frac{d}{dt}x_0(t,C_1,C_2)\right|_{t=0} = v_{0x} \Longleftrightarrow C_2 = -v_{0x}\tau_r \underset{\text{eq. (77)}}{\Longrightarrow} C_1 = v_{0x}\tau_r \tag{78}$$

Ora possiamo scrivere l'unica soluzione del problema di Cauchy (57):

$$x(t) = v_{0x}\tau_r\left(1 - e^{-t/\tau_r}\right) + \tau_r\int_0^t\left(1 - e^{-\frac{t-t'}{\tau_r}}\right)\alpha_x(t')\,dt' \tag{79}$$

A partire da questa espessione si calcola la varianza $\left\langle x(t)^2\right\rangle$. Per brevità, riportiamo solo il comportamento agli estremi dell'intervallo di integrazione:

$$\left\langle x(t)^2\right\rangle = \begin{cases} \langle v_x^2\rangle\, t^2, & \text{se } t \ll \tau_r \\ 2k_BT\beta t, & \text{se } t \gg \tau_r \end{cases} \tag{80}$$

La grandezza che ci interessa è $\Delta x = \sqrt{\left\langle x(t)^2\right\rangle}$:

$$\Delta x = \begin{cases} \langle v_x\rangle\, t, & \text{se } t \ll \tau_r \\ \sqrt{2k_BT\beta t}, & \text{se } t \gg \tau_r \end{cases} \tag{81}$$

Cioè a tempi brevi Δx è lineare in t, come previsto dalla meccanica classica, mentre per $t \gg t_r$ è proporzionale a $t^{1/2}$. Conclusione analoga per $\Delta y = \sqrt{\left\langle y(t)^2\right\rangle}$.

[1] Data la funzione $F(x) = \int_{\alpha(x)}^{\beta(x)} f(x,y)\,dy$, si ha: $F'(x) = f[x,\beta(x)]\,\beta'(x) - f[x,\alpha(x)]\,\alpha'(x) + \int_{a(x)}^{\beta(x)} f_x(x,y)\,dy$

3 Spettro di potenza della variabile aleatoria $\mathbf{v}(t)$

La funzione di autocorrelazione della variabile aleatoria $v_x(t)$ è:

$$\begin{aligned}\varphi(\tau) &= \langle v_x(t)\, v_x(t+\tau)\rangle \\ &= \left\langle \left[v_{0x}e^{-t/\tau_r} + e^{-t/\tau_r}\int_0^t \alpha_x(t')\, e^{t'/\tau_r}dt'\right]\left[v_{0x}e^{-(t+\tau)/\tau_r} + e^{-t/\tau_r}\int_0^{t+\tau} \alpha_x(t')\, e^{t'/\tau_r}dt'\right]\right\rangle\end{aligned} \tag{82}$$

Eseguendo i calcoli:

$$\varphi(\tau) = v_{0x}^2 e^{-\frac{2t+\tau}{\tau_r}} + \frac{k_B T}{m} e^{-\tau/\tau_r}\left(1 + e^{-2t/\tau_r}\right) \tag{83}$$

Per $t \gg \tau_r$

$$\varphi(\tau) = \frac{k_B T}{m} e^{-\tau/\tau_r} \tag{84}$$

Utilizzando il teorema di Wiener – Khintchine possiamo determinare lo spettro di potenza di $v_x(t)$:

$$\begin{aligned} w(f) &= 4\int_0^{+\infty} \varphi(\tau)\cos(2\pi f\tau)\, d\tau \\ &= 4\frac{k_B T}{m}\underbrace{\int_0^{+\infty} e^{-\tau/\tau_r}\cos(2\pi f\tau)\, d\tau}_{\overset{\text{def}}{=} I(f)}\end{aligned} \tag{85}$$

Calcoliamo per parti l'integrale $I(f)$:

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_0^{+\infty} e^{-\tau/\tau_r}\frac{d}{d\tau}\left[\frac{\sin(2\pi f\tau)}{2\pi f}\right] d\tau \\ &= \frac{1}{2\pi f}\left[\underbrace{e^{-\tau/\tau_r}\sin(2\pi f\tau)\Big|_{\tau=0}^{\tau=+\infty}}_{=0} + \frac{1}{\tau_r}\int_0^{+\infty} e^{-\tau/\tau_r}\sin(2\pi f\tau)\, d\tau\right] \\ &= \frac{1}{2\pi f\tau_r}\int_0^{+\infty} e^{-\tau/\tau_r}\frac{d}{d\tau}\left[-\frac{\cos(2\pi f\tau)}{2\pi f}\right] d\tau \\ &= -\frac{1}{(2\pi f)^2\tau_r}\left[\underbrace{e^{-\tau/\tau_r}\cos(2\pi f\tau)\Big|_{\tau=0}^{\tau=+\infty}}_{=-1} + \frac{1}{\tau_r} I(f)\right]\end{aligned} \tag{86}$$

Cioè

$$I(f) = \frac{1}{(2\pi f)^2\tau_r}\left[1 - \frac{1}{\tau_r} I(f)\right]$$

Risolvendo rispetto a $I(f)$:

$$I(f) = \frac{\tau_r}{(2\pi f\tau_r)^2 + 1} \tag{87}$$

E quindi lo spettro di potenza:

$$w(f) = 4\frac{k_B T}{m}\frac{\tau_r}{(2\pi f\tau_r)^2 + 1} \tag{88}$$

Esprimendo in termini della mobilità $\beta = \tau_r/m$

$$w(f) = \frac{4k_B T\beta}{(2\pi f\tau_r)^2 + 1} \tag{89}$$

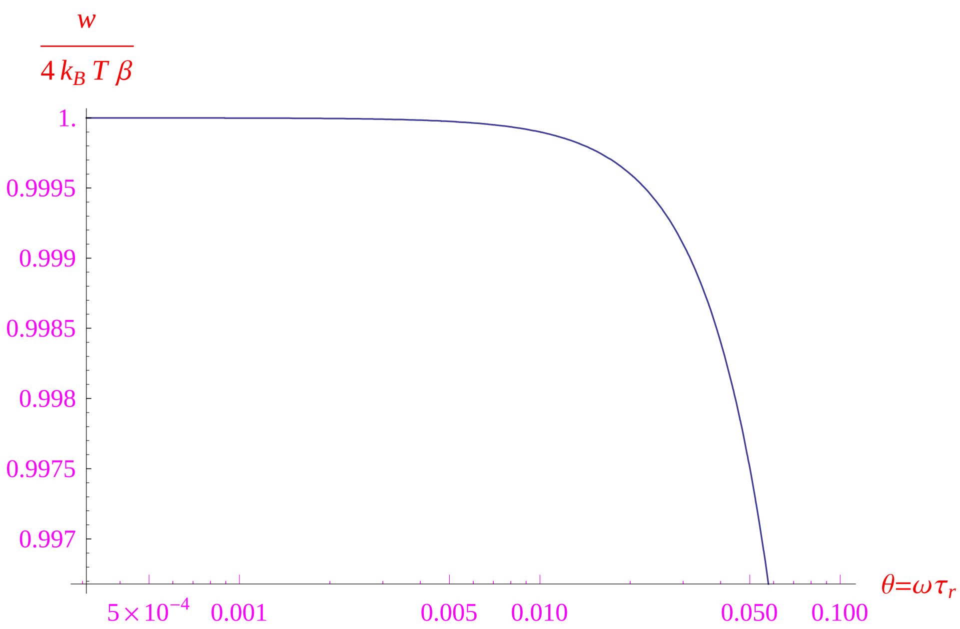


Figura 2: *Grafico in scala logaritmica dello spettro di potenza a regime (eq. (89)) in funzione della variabile adimensionale $\theta = \omega\tau_r$. Per $\theta \ll 1$ lo spettro di potenza è piatto.*

Si noti che tale espressione è lo spettro di potenza a regime ($t \gg \tau_r$), giacché abbiamo utilizzato il valore a regime di $\varphi(\tau)$. L'andamento di $w(f)$ è riportato in fig. 2.

Verifichiamo il risultato dell'integrazione della (89):

$$\begin{aligned}\left\langle v_x(t)^2\right\rangle &= \int_0^{+\infty} w(f)\,df = 4k_BT\beta\int_0^{+\infty}\frac{df}{(2\pi f\tau_r)^2+1}\\ &\underset{x=2\pi f\tau_r}{=} \frac{4k_BT\beta}{2\pi\tau_r}\int_0^{+\infty}\frac{dx}{x^2+1}\\ &= \frac{2k_BT\beta}{\pi\tau_r}\arctan x\Big|_{x=0}^{x=+\infty}\\ &= \frac{k_BT\beta}{\tau_r} = \frac{k_BT}{m}\end{aligned}$$

come appunto doveva essere. Svincoliamoci da τ_r adimensionalizzando la variabile indipendente nella (89) ponendo $\theta = \omega\tau_r = 2\pi f\tau_r$:

$$w(\theta) = \frac{4k_BT\beta}{\theta^2+1}, \qquad \forall\theta\in[0,+\infty) \tag{90}$$

Segue

$$w(\theta) = 4k_BT\beta \Longleftrightarrow \theta = 0 \Longleftrightarrow f = 0$$

e

$$w(\theta) \simeq 4k_BT\beta \Longleftrightarrow \theta \ll 1 \Longleftrightarrow f \ll \tau_r^{-1} \tag{91}$$

Cioè nel limite di bassa frequenza lo spettro di potenza è piatto, per cui la variabile aleatoria $v_x(t)$ (o $v_y(t)$) è un rumore bianco, come illustrato nel grafico di fig. 2. Dal momento che la velocità è la derivata della posizione, si suole dire che il rumore bianco è la derivata di un moto browniano.

Dalla $\left\langle v_x(t)^2\right\rangle = \int_0^{+\infty} w(f)\,df$ segue che per un'assegnata frequenza f_0, $w(f_0)\,df$ è la potenza media $\left\langle v_x(f)^2\right\rangle$ delle componenti spettrali di $\left\langle v_x(t)^2\right\rangle$ di frequenza $f\in[f_0, f_0+df]$:

$$\left\langle v_x(f)^2\right\rangle df = w(f_0)\,df \tag{92}$$

Nel limite $f_0 \ll \tau_r^{-1}$:

$$\left\langle v_x(f)^2 \right\rangle df = 4k_B T\beta df \tag{93}$$

E per un intervallo finito di frequenze:

$$\left\langle v_x(f)^2 \right\rangle \Delta f = 4k_B T\beta \Delta f \tag{94}$$

Nel limite delle alte frequenze $f \gg \tau_r^{-1}$ lo spettro è smorzato, per cui il contributo dominante a $\left\langle v_k(t)^2 \right\rangle$ (dove $k = x, y$) proviene dalle frequenze di "rumore bianco" corrispondenti a una dinamica generata dall'agitazione termica.