

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA TRE
FACOLTÀ DI SCIENZE M.F.N.

Le equazioni di reazione e diffusione come limite di dinamiche stocastiche

Sintesi della tesi di Laurea in Matematica
di Giulio Dal Savio

Relatore: Prof. Alessandro Pellegrinotti

In questa tesi si mostra quale possa essere il legame tra la realtà microscopica e quella macroscopica in alcuni fenomeni studiati dalla fisica. La magnetizzazione di un materiale, una reazione chimica tra due gas, sono fenomeni naturali che affascinano e che hanno sempre interessato generazioni di studiosi. Cosa avviene nella profondità della materia? E come poter studiare il suo comportamento? Un tentativo di risposta a queste domande sarà un modello in grado di relazionare la caotica realtà microscopica e il mondo macroscopico, quello visibile e tangibile, dove il dettaglio del molto piccolo deve essere necessariamente perso.

In entrambi i problemi affrontati il risultato macroscopico sarà un'equazione di reazione e diffusione ovvero della forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial r^2} - V'(\rho) \quad (1)$$

Nel primo capitolo richiameremo concetti generali per studiare processi microscopici; il più importante per evidenziare il legame tra la realtà delle particelle e quella macroscopica è il generatore della dinamica, una applicazione che individua univocamente l'evoluzione del processo stesso.

Sia $\mathbb{N}^{\mathbb{Z}}$ (o equivalentemente $\{0, 1\}^{\mathbb{Z}}$ o $\{-1, 1\}^{\mathbb{Z}}$) lo spazio delle configurazioni del processo e sia η un suo elemento. Introduciamo le funzioni sulle quali agisce tale applicazione:

Definizione 1. *Una funzione su $\mathbb{N}^{\mathbb{Z}}$ si dice cilindrica se la sua dipendenza da η avviene attraverso un numero finito di siti.*

Definizione 2. *Il generatore per un processo microscopico è*

$$Lf(\eta) = \sum_T [f(\eta'_T) - f(\eta)] c(\eta, T)$$

dove f è una qualsiasi funzione cilindrica, T è un sottinsieme finito di \mathbb{Z} e $c(\eta, T)$ è l'intensità del processo. Con η'_T si è indicata la configurazione uguale ad η ovunque tranne che sui siti di T .

Inoltre, per trattare il legame tra microscopico e macroscopico, sarà opportuno introdurre ancora un concetto fondamentale. Indichiamo con (x, t) , $x \in \mathbb{Z}$ e $t \geq 0$, le coordinate microscopiche dello spazio e del tempo, mentre $(\varepsilon x, \varepsilon^2 t)$ corrispondono alle coordinate macroscopiche. Nel corso della tesi $r = \varepsilon x$. Quindi:

Definizione 3. *La famiglia $\rho_\varepsilon(x)$, $x \in \mathbb{Z}$, $\varepsilon > 0$, è una approssimazione nel reticolo della funzione continua $\rho(r)$, $r \in R$, se*

$$\forall r \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \rho_\varepsilon([\varepsilon^{-1}r]) = \rho(r).$$

$\rho(r)$ è un profilo di densità se è non negativa, continua, uniformemente limitata e con derivate continue e uniformemente limitate. La famiglia di misura μ^ε approssima il profilo di densità $\rho(r)$ se $\mathbb{E}_{\mu^\varepsilon}(\eta(x))$ è una approssimazione nel reticolo di $\rho(r)$.

In entrambi i problemi affrontati considereremo una distribuzione iniziale delle particelle tale che $\mathbb{E}_{\mu^\varepsilon}(\eta(x)) = \rho(\varepsilon x) \forall x \in \mathbb{Z}$.

Nel secondo capitolo si studierà la dinamica microscopica di Glauber-Kawasaki per gli spin, ossia un processo nel quale lo spazio delle configurazioni è $\{-1, +1\}^{\mathbb{Z}}$, che può essere pensato come successioni di frecce rivolte verso il basso (-1) o verso l'alto ($+1$), con una distribuzione μ^ε prodotto di misure di Bernoulli di parametro m_0 , dove quest'ultima è la magnetizzazione iniziale del materiale. Ossia approssima il profilo di densità $m_0(r)$.

La dinamica sugli spin è il risultato delle somma di due processi differenti: il primo è un processo di Kawasaki, ovvero un “frenetico” scambio di valori tra siti vicini che abbiano differenti numeri di occupazione, analogo ad un processo di esclusione sullo spazio $\{0, 1\}^{\mathbb{Z}}$; dal punto di vista grafico ci sono frecce vicine ed opposte in verso che si scambiano. Si aggiunge a questo un altro processo, quello di Glauber, cioè una dinamica sulle configurazioni che fa cambiare la magnetizzazione dei siti (dal punto di vista grafico le frecce corrispondenti a tali siti cambiano di verso). Il cambiamento si basa sul confronto tra un sito ed i due adiacenti ed avviene molto raramente rispetto agli scambi del processo di Kawasaki: eppure il risultato sarà molto rilevante nella realtà macroscopica, infatti la dinamica di Glauber originerà il termine polinomiale nell' equazione di reazione e diffusione.

I generatori dei due processi sono:

$$L_0 f(\eta) = \sum_x \sum_{b=\pm 1} \frac{1}{2} \eta(x) [1 - \eta(x+b)] [f(\eta^{(x, x+b)}) - f(\eta)]$$

e

$$L_G f(\sigma) = \sum_x c(x, \sigma) [f(\sigma^{(x)}) - f(\sigma)].$$

dove:

$$\eta^{(x,y)}(z) = \begin{cases} \eta(z) & \text{se } z \neq x, y \\ \eta(y) & \text{se } z = x \\ \eta(x) & \text{se } z = y \end{cases}$$

$$\sigma^{(x)}(z) = \begin{cases} \sigma(z) & \text{se } z \neq x \\ -\sigma(x) & \text{se } z = x \end{cases}$$

$$c(\sigma, x) = 1 - \gamma\sigma(x)[\sigma(x+1) + \sigma(x-1)] + \gamma^2[\sigma(x+1)\sigma(x-1)]$$

Quindi il generatore della dinamica è:

$$L^\varepsilon = \varepsilon^{-2}L_0 + L_G.$$

Dunque le configurazioni cominciano ad evolvere e conseguentemente cambia la loro distribuzione: dimostreremo che questa sarà una misura con valore medio non più uguale alla magnetizzazione iniziale m_0 , ma alla sua evoluzione secondo una determinata equazione di reazione e diffusione.

Quindi μ_t^ε (l'evoluzione della distribuzione attraverso il processo) sarà un' approssimazione del profilo di densità $m_t(r)$ soluzione di (1) con dato iniziale m_0 e $-V'(m) = \alpha m - \beta m^3$. Dimostrare questo sarà l'obiettivo del seguente teorema:

Teorema 1. $\forall n \geq 1$ ed $L > 0$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sup_{\substack{x_1 \neq \dots \neq x_n \\ |x_i| \leq \varepsilon^{-1}L}} \left| \mathbb{E}_{\mu^\varepsilon} \left(\prod_{i=1}^m \sigma(x_i, t) \right) - \prod_{i=1}^n m(\varepsilon x_i, t) \right| = 0$$

dove $m(r, t)$ risolve l'equazione di reazione e diffusione con

$-V'(m) = \mathbb{E}_{\nu_m}(L_G \sigma(0)) = \alpha m - \beta m^3$ e μ_m è un prodotto di misure di Bernoulli tali che $\mathbb{E}_{\mu_m}(\sigma(x)) = m(\varepsilon x)$.

Strumento fondamentale nella dimostrazione del teorema saranno le funzioni di correlazione:

Definizione 4. La funzione di correlazione per il processo è:

$$u^\varepsilon(\xi, t | \mu^\varepsilon) = \mathbb{E}_{\mu^\varepsilon}(D(\xi, \sigma_t))$$

dove

$$\underline{x} \in M_n, \quad \xi = U(\underline{x}) \quad D(\xi, \sigma) = \prod_{i=1}^n \sigma(x_i)$$

$$M_n \equiv \{\underline{x} \in \mathbb{Z}^n : x_i \neq x_j \forall i \neq j\}$$

e $U(\underline{x})$ è la mappa da M_n in $N_n \equiv \{\xi \in \{0, 1\}^{\mathbb{Z}} : |\xi| = n\}$ che associa ad ogni vettore di M_n la configurazione corrispondente ignorando la disposizione delle particelle.

Per semplicità scriveremo $u^\varepsilon(x, t)$. Vogliamo dimostrare la convergenza delle funzioni di correlazione mediante il teorema di Ascoli-Arzelà (si veda [2]):

Teorema di Ascoli Arzelà

Sia K uno spazio metrico compatto e sia \mathbb{H} un sottinsieme limitato di $C(K)$. Supponiamo che \mathbb{H} sia uniformemente equicontinuo, cioè

$$\forall \varepsilon > 0 \exists \delta > 0 \text{ tale che } d(x_1, x_2) < \delta \Rightarrow |f(x_1) - f(x_2)| < \varepsilon \forall f \in \mathbb{H}$$

Allora \mathbb{H} ha chiusura compatta in $C(K)$.

L'equilimitatezza delle funzioni di correlazione ci apparirà ovvia, mentre qualche difficoltà riserverà la loro equicontinuita:

Proposizione 2.

$$\text{Dati } \underline{x}, \underline{y} \in M_n, \text{ sia } \|\underline{x} - \underline{y}\| = \max_{i=1, \dots, n} |x_i - y_i|;$$

allora fissati $T > 0$ e $\xi > 0$, $\exists \delta > 0$ tale che,

$$\sup_{\substack{|t-t'| \leq \delta \\ t, t' \leq T}} \sup_{\|\underline{x}-\underline{y}\| \leq \varepsilon^{-1}\delta} |u^\varepsilon(\underline{x}, t | \mu^\varepsilon) - u^\varepsilon(\underline{y}, t | \mu^\varepsilon)| \leq \xi.$$

Nel corso della dimostrazione $P_t^\varepsilon(\underline{x} \rightarrow \underline{z})$ indicherà la probabilità di transizione nel processo etichettato. Per la dimostrazione necessiteremo di due lemmi:

Lemma 3. $\forall l^* > 0$ e $\xi^* > 0 \exists \tau^* > 0$ tale che $\forall t \leq \tau^*$, $\underline{x} \in M_n$

$$\sum_{\underline{z}} P_t^\varepsilon(\underline{x} \rightarrow \underline{z}) 1 \{ \|\underline{z} - \underline{x}\| > \varepsilon^{-1} l^* \} < \xi^*.$$

Lemma 4. Esiste una costante c_2 cosicchè $\forall \underline{x}, \underline{y} \in M_n, t > 0$ ed $\varepsilon > 0$

$$\sum_{\underline{z}} |P_t^\varepsilon(\underline{x} \rightarrow \underline{z}) - P_t^\varepsilon(\underline{y} \rightarrow \underline{z})| \leq c_2 \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^{-2}t}} \|\underline{y} - \underline{x}\|.$$

Dunque esiste una sottosuccessione convergente $u^{\varepsilon k}(x, t)$. Proveremo che ogni sottosuccessione convergente $u^{\varepsilon k}(x, t)$ ha lo stesso limite, e questo concluderà il teorema. Ricordiamo che (si veda [6]):

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sup_{\underline{x} \in M_n} \sum_{\underline{y}} \left| P_t^\varepsilon(\underline{x} \rightarrow \underline{y}) - \prod_{i=1}^n (G_{\varepsilon^{-2}t}(x_i - y_i)) \right| = 0 \quad (2)$$

dove

$$G_t(r) = \frac{e^{-\frac{r^2}{2t}}}{\sqrt{2\pi t}}.$$

Definiamo

$$\gamma_t(r) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u^\varepsilon(x, t).$$

La funzione di correlazione si può riscrivere:

$$\begin{aligned} u^\varepsilon(\underline{x}, t | \mu^\varepsilon) &= \sum_{\xi'} P_t^\varepsilon(\xi \rightarrow \xi') u^\varepsilon(\xi', 0 | \mu^\varepsilon) + \int_0^t ds \sum_{\xi'} P_{t-s}^\varepsilon(\xi \rightarrow \xi') \mathbb{E}_{\mu^\varepsilon}^\varepsilon(L_G D(\xi', \sigma_s)) = \\ &= \sum_{\xi'} P_t^\varepsilon(\xi \rightarrow \xi') u^\varepsilon(\xi', 0 | \mu^\varepsilon) + \int_0^t ds \sum_{\xi'} P_{t-s}^\varepsilon(\xi \rightarrow \xi') \mathbb{E}_{\mu^\varepsilon}^\varepsilon \chi [n\alpha D(\xi', \sigma_s)] + \\ &= \int_0^t ds \sum_{\xi'} P_{t-s}^\varepsilon(\xi \rightarrow \xi') \mathbb{E}_{\mu^\varepsilon}^\varepsilon \chi \left[2\gamma \sum_{i=1}^n \Delta_i D(\xi', \sigma_s) \right] - \\ &= \int_0^t ds \sum_{\xi'} P_{t-s}^\varepsilon(\xi \rightarrow \xi') \mathbb{E}_{\mu^\varepsilon}^\varepsilon \chi \left[\gamma^2 \sum_{i=1}^n D(\xi + \delta x_i + 1 + \delta x_i - 1, \sigma_s) \right] + \\ &= \int_0^t ds \sum_{\xi'} P_{t-s}^\varepsilon(\xi \rightarrow \xi') \Gamma(\xi, \sigma_s) ds. \end{aligned}$$

Con un abuso di notazione sostituiamo \underline{x} a ξ e \underline{y} a ξ' ed applichiamo la (2).

$$\begin{aligned} \gamma_t(\underline{x}) &= \prod_{i=1}^n \left[\int G_t(r_i - r) m_0(r) \right] \\ &+ \int_0^t ds \int \left[\prod_{i=1}^n dr'_i G_{t-s}(r_i - r'_i) \right] \sum_{j=1}^n \sum_{l \in \{1,3\}} (A_{j,l} \gamma_s)(r'_1, \dots, r'_n) \quad (3) \end{aligned}$$

Dove:

$$\begin{aligned}(A_{j,1}\gamma_s)(\underline{x}) &= (4\gamma - 2)\gamma_s(\underline{x}). \\ (A_{j,3}\gamma_s)(\underline{x}) &= -2\gamma^2\gamma_s(r_1, \dots, r_{j-1}, r_j, r_j, r_j, r_{j+1}, \dots, r_n)\end{aligned}$$

e quest' ultima è proprio la soluzione dell' equazione (1). Ma un' altra soluzione per la (3) è anche

$$\bar{\gamma}_t(\underline{x}) = \prod_{i=1}^n m_t(r_i).$$

Quindi, per l'unicità della soluzione, si conclude il teorema.

Nel terzo capitolo volgeremo lo sguardo verso dinamiche di particelle: lo spazio delle configurazioni questa volta sarà $\mathbb{N}^{\mathbb{Z}}$ e le particelle saranno libere di muoversi secondo random-walk simmetrico; non ci saranno limitazioni sul numero di occupazione dei siti, ma un secondo processo ci garantirà di non avere accumuli infiniti di particelle: una dinamica di nascita e morte; ovvero i siti otterranno particelle o ne perderanno in base a quante già ne possiedono: ovviamente la perdita sarà favorita.

I due generatori, rispettivamente del processo indipendente e del processo di nascita e morte, sono:

$$L_1 f(\eta) = \sum_x \eta(x) [f(\eta + \delta_{x+1} - \delta_x) + f(\eta + \delta_{x-1} - \delta_x) - 2f(\eta)]$$

e

$$L_c f(\eta) = \sum_x (q_+(\eta(x)) [f(\eta + \delta_x) - f(\eta)] + q_-(\eta(x)) [f(\eta - \delta_x) - f(\eta)]).$$

Dunque, ancora una volta il generatore della dinamica microscopica sarà:

$$L^\varepsilon = \varepsilon^{-2} L_1 + L_c.$$

dove δ_x è la configurazione con solo una particella sul sito x .

La distribuzione iniziale μ^ε sarà il prodotto di misure di Poisson di parametro ρ_0 , densità iniziale delle particelle. Analogamente al primo capitolo,

l'evoluzione del modello microscopico porterà ad una nuova distribuzione delle particelle sul reticolo \mathbb{Z} : il suo valore medio sarà l'evoluzione del dato iniziale secondo una equazione di reazione e diffusione con parte di reazione dipendente dal processo di nascita e morte.

Le nascite e le morti avvengono in tempi molto lunghi rispetto al movimento libero delle particelle.

Dunque μ_t^ε , evoluzione della distribuzione iniziale mediante il processo, approssimerà il profilo di densità $\rho_t(r)$ soluzione dell'equazione (1) dove

$$\rho(r, 0) = \rho_0(r)$$

$$r \in \mathbb{R}, t \geq 0$$

$$V'(\rho) = F_+(\rho) - F_-(\rho)$$

F_+ ed F_- sono polinomi a coefficienti non negativi i cui gradi sono tali che $\deg(F_+) < \deg(F_-)$ e $F_\pm(0) = 0$.

$\rho_0(r)$ è una funzione non negativa $\in C^2(\mathbb{R})$, uniformemente limitata con le sue derivate.

Nella realtà fisica questo modello può rappresentare un problema di combustione: c'è un serbatoio di molecole di gas che si muovono liberamente; poi vengono immesse, ad intervalli di tempo molto lunghi, particelle di un reagente. La densità di particelle nel serbatoio comincia a variare e si hanno nascite, dovute all'immissione, e morti, dovute all'unione degli elementi.

Ancora una volta saranno fondamentali le funzioni di correlazione, per definire le quali, avremo bisogno dei polinomi di Poisson:

Definizione 5. *I polinomi di Poisson di ordine k sono:*

$$D_k(n) = n(n-1) \cdots (n-k+1)$$

Definizione 6. *La funzione di correlazione per il processo è:*

$$u^\varepsilon(\xi, t | \mu^\varepsilon) = \mathbb{E}_{\mu^\varepsilon}^\varepsilon(D(\xi, \eta_t))$$

dove

$$\underline{x} \in M_n, \quad \xi = U(\underline{x})$$

$$D(\xi, \eta) = \prod_{i=1}^n D_{\xi(x_i)}(\eta(x_i))$$

$D_{\xi(x_i)}(\eta(x_i))$ sono i polinomi di Poisson di ordine $\xi(x_i)$

$$M_n \equiv \{\underline{x} \in \mathbb{Z}^n : x_i \neq x_j \forall i \neq j\}$$

e $U(\underline{x})$ è la mappa da M_n in $N_n \equiv \{\xi \in \{0, 1\}^{\mathbb{Z}} : |\xi| = n\}$ che ignora i labelli delle particelle in M_n .

A questo punto introduciamo il risultato principale:

Teorema 5. Sia μ^ε il prodotto di misure di Poisson con $\mathbb{E}_{\mu^\varepsilon}(\eta(x)) = \rho_0(\varepsilon x)$ dove ρ_0 è una funzione C^2 limitata con tutte le sue derivate. Sia

$$\Omega_{n,L} = \{\xi \in \Omega \text{ t.c. } |\xi| = n \text{ e } \xi(x) = 0 \text{ se } |x| > \varepsilon^{-1}L\}.$$

Allora per ogni L, T ed n ,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sup_{\xi \in \Omega_{n,L}} \sup_{0 \leq t \leq T} \left| \mathbb{E}_{\mu^\varepsilon}^\xi(D(\xi, \eta_t)) - \prod_x \rho_t(\varepsilon x)^{\xi(x)} \right| = 0$$

dove $\rho_t(r)$ risolve l'equazione (1) e $F_\pm(\rho) = \mathbb{E}_{\nu_\rho}(q_\pm(n))$ con ν_ρ misura di Poisson su \mathbb{N} con media $\rho(r)$.

La strategia della dimostrazione sarà la stesa del primo capitolo, utilizzeremo il teorema di Ascoli-Arzelà e lo applicheremo alle funzioni di correlazione. Per farlo avremo bisogno di due lemmi.

Lemma 6. Per ogni ξ^* ed l^* positivi esiste t^* tale che:

per ogni $t \leq t^*$, ε, x si ha:

$$\sum_{x'} P_t^\varepsilon(x \rightarrow x') \mathbb{1}\{|x - x'| > \varepsilon^{-1}l^*\} < \xi^*. \quad (4)$$

Lemma 7. *Esiste una costante c tale che $\forall x, y, t$ ed ε si ha:*

$$|P_t^\varepsilon(x \longrightarrow z) - P_t^\varepsilon(y \longrightarrow z)| \leq \frac{c}{\sqrt{\varepsilon^{-2}t}} |x - y|. \quad (5)$$

Quindi, analogamente al primo capitolo, dimostrata l'esistenza di una sottosuccessione convergente, sarà sufficiente verificare l'unicità del limite per ogni sottosuccessione. Definiamo

$$\gamma_t(r) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u^\varepsilon(x, t).$$

Dimostreremo che:

$$\begin{aligned} \gamma_t(\underline{x}) = & \prod_{i=1}^n \left[\int G_t(r_i - r) \rho_0(r) dr \right] + \\ & \int_0^t ds \int \prod_{i=1}^n [G_{t-s}(r_i - r'_i) dr'_i] \sum_{j=1}^n \sum_l \{ (A_{j,l}^+ \gamma_s)(\underline{r}') - (A_{j,l}^- \gamma_s)(\underline{r}') \} \end{aligned} \quad (6)$$

dove:

$$\begin{aligned} (A_{i,l}^\pm \gamma_s)(\underline{x}) &= a_l^\pm \gamma_s(\underline{x}_{i,l}) \\ \underline{x}_{i,l} &= (r_1, \dots, r_{i-1}, r_i, \dots, r_i, r_{i+1}, r_n) \text{ con } r_i \text{ ripetuto } l \text{ volte} \end{aligned}$$

e

a_l^+ , $l \leq \deg(q_+)$, e a_l^- , $l \leq \deg(q_-)$, sono coefficienti tali che:

$$q_\pm(\cdot) = \sum_l a_l^\pm D_l(\cdot).$$

Ma notiamo che una soluzione di (6) è anche:

$$\bar{\gamma}_t(\underline{x}) = \prod_{i=1}^n \rho_t(r_i).$$

Per l'unicità della soluzione il teorema è dimostrato.

Bibliografia

- [1] P. Billingsley, *Convergence of probability measures*, Wiley, New York 1968.
- [2] H. Brezis, *Analisi funzionale*, Liguori Editore, Napoli, 1986.
- [3] Y. S. Chow, E. Teicher, *Probability Theory*, Springer-Verlag, 1988.
- [4] J. Doob, *Stochastic processes*, Wiley, New York 1953.
- [5] A. De Masi, E. Presutti, *Mathematical Methods for Hydrodynamic Limits*, Springer-Verlag, 1991.
- [6] W. Feller, *An introduction to probability theory and its applications*, Vol I, Wiley, New York, 1957; Vol II, 1966.
- [7] G. Koch, *La matematica del probabile*, Aracne, Roma 1997.
- [8] T. M. Liggett, *Interacting particle systems*, Springer-Verlag, New York, 1985.
- [9] P. Revesz, *Random walk in random and non-random environments*, ed. World scientific, 1990.
- [10] K. Yosida, *Functional analysis*, Springer, 1965.