Caminatas aleatorias

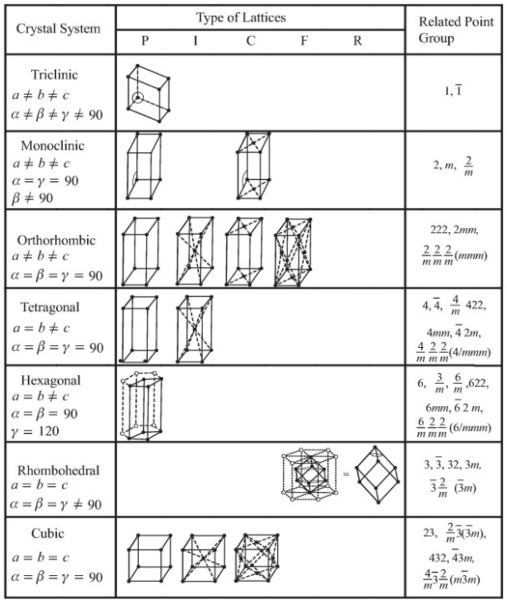
Giovanni Ramírez García, PhD

Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas
Universidad de San Carlos de Guatemala

Guatemala, 27 de abril de 2021

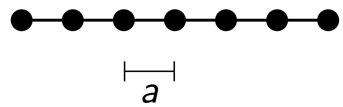
Redes de Bravais

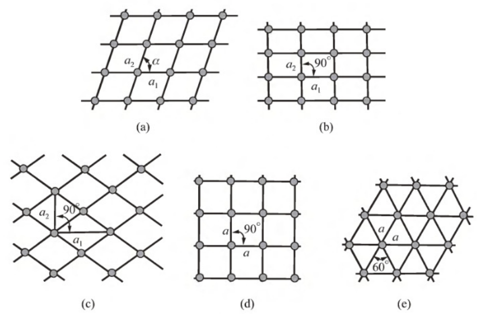
- Hay que recordarse de los tipos de red o grilla (o *lattice*) que estudiamos en el curso de Física de Materia Condensada.
- Redes de Bravais



Crystal System	Type of Lattices: P, I, C, F, R	Related Point Group
Triclinic $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90$		$1, \bar{1}$
Monoclinic $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90$ $\beta \neq 90$		$2, m, \frac{2}{m}$
Orthorhombic $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$		$222, 2mm, \frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}(mmm)$
Tetragonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$		$4, \bar{4}, \frac{4}{m}$ $422,$ $4mm, \bar{4}2m,$ $\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}(4/mmm)$
Hexagonal $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90$ $\gamma = 120$		$6, \frac{3}{m}, \frac{6}{m}, 622,$ $6mm, \bar{6}2m,$ $\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}(6/mmm)$
Rhombohedral $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90$		$3, \bar{3}, 32, 3m,$ $\bar{3}\frac{2}{m}$ $(\bar{3}m)$
Cubic $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90$		$23, \frac{2}{m}\bar{3}(\bar{3}m),$ $432, \bar{4}3m,$ $\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}(m\bar{3}m)$

P (Primitive) , I (Body Center) , C (Bottom Center), F (Face Center), R (Rhombohedron)





The 2D Bravais lattices: (a) Oblique; (b) rectangular; (c) rhombic; (d) square; (e) hexagonal.

[Duan y Guojun. *Introduction to Condensed Matter*. Vol 1. World Scientific, 2005.]

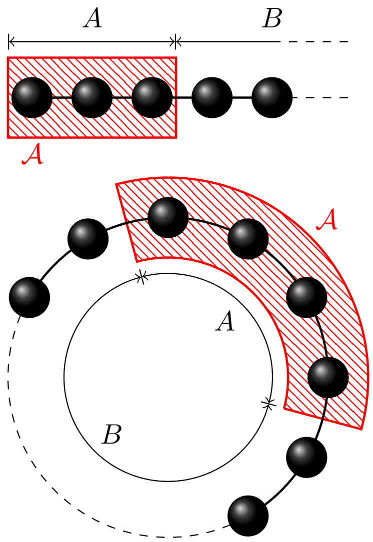
Caminatas aleatorias en una red (I)

- En 1900 Louis Bachelier propone las caminatas aleatorias como modelo para series temporales del mercado financiero. [Bachelier, L. Ann. scient. de l'École Normale Supérieure, 3(17):21–86. 1900.]
- En 1905 Karl Pearson propone el término *random walk* en un modelo para describir la población de mosquitos en un bosque. [Pearson, K. Nature, 72, 294 (1905).]
- En 1905 Albert Einstein publica su trabajo sobre el movimiento browniano de una molécula pesada rodeada por un gas. [Brown, R. Phil. Mag. Series 2, 6: 161. (1829). Einstein, A. Ann. der Phys. 322(8):549. (1905).]
- Las caminatas aleatorias en una red son un caso especial de las caminatas aleatorias.
- Las caminatas aleatorias consisten en una trayectoria conexa formada al ir añadiendo aleatoriamente nuevos enlaces (*links* o *bonds*) al final de una caminata ya existente.
- El modelo de caminata define la forma en la que esos nuevos enlaces se van añadiendo a la caminata.

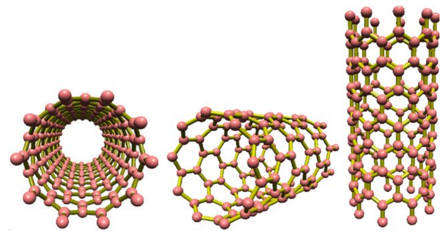
Caminatas aleatorias en una red (II)

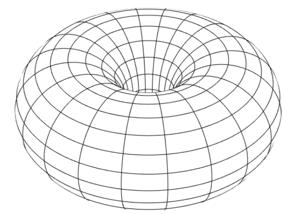
God made the bulk; surfaces were invented by the devil. – W. Pauli.

- Las condiciones de frontera de la red también imponen restricciones.

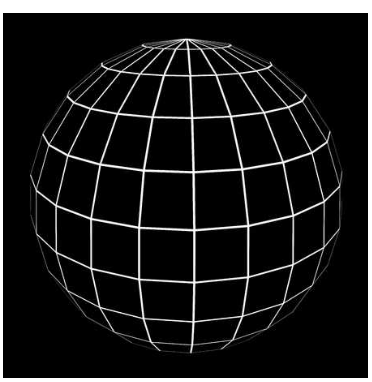


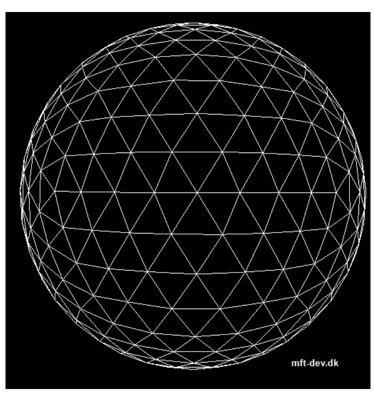
[Ramirez, G. 2015.]


[Akbari et al. Sensors 2014, 14 (3), 5502]

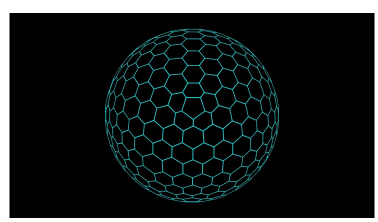

[Mathematica Stak Exchange.]

Caminatas aleatorias en una red (III)


[123RF.com]



[mft-dev.dk]


[Sketchfab.com]

Medidas en una caminata aleatoria

- El desplazamiento cuadrático medio para una caminata de N pasos diverge a infinito de la forma

$$\langle R^2(N) \rangle = aN^{2\nu}(1 + bN^{-\Delta} + \cdots),$$

donde ν es un exponente crítico que determina la clase de universalidad, las constantes a y b son no universales y Δ es un exponente de corrección de escala.

- La forma de $\langle R^2(N) \rangle$ hace que se asocien estos procesos con fenómenos de percolación o transiciones de fase térmicas en sistemas de partículas con interacción.
- Otra medida importante es el tiempo medio de retorno que se define como el promedio del tiempo necesario para que el caminante aleatorio vuelva por primera vez a un punto dado.

Caminata aleatoria libre

- En este tipo de caminata la posición media del caminante en todo el tiempo es cero. Es decir, los pasos tienen la misma probabilidad de avanzar que de retroceder.
- Este tipo de movimiento es el observado por Brown en las partículas de polen dispersas en agua. El movimiento errático que se observa en una partícula de polen solamente se debe a los choques con otras partículas y por el medio.
- La caminata aleatoria libre se puede ver en una red 1D donde el caminante tiene la probabilidad $p = 0.5$ de moverse tanto al nodo de la izquierda como al nodo de la derecha.
- La probabilidad de encontrar a una partícula en la posición k después de n pasos está dada por la distribución binomial

$$p(k, n) = \left(\frac{1}{2}\right)^n \binom{n}{(n-k)/2}$$

Caminata aleatoria (RW)

- El caminante puede ir por toda la red, finita o infinita sin restricciones. En este caso $\nu = 1/2$ por lo que

$$\sqrt{\langle R^2(N) \rangle} \propto N^{1/2}.$$

- La clase de universalidad de la RW incluye fenómenos de difusión donde el número de pasos se asocia al tiempo.
- En esta misma clase de universalidad se encuentra la caminata aleatoria no reversible (NRRW) donde se prohíbe un *retorno inmediato*.
- En este caso, se debe guardar memoria del último paso.
- La clase de universalidad de la NRRW incluye la modelación de configuraciones de polímeros en fusión densa.

Caminata aleatoria auto-excluyente (SAW)

- En este caso la caminata aleatoria termina cuando el caminante toca un nodo de la red por donde ya ha pasado antes.
- Hay mucho interés en este modelo porque permite probar propiedades estadísticas a gran escala de sistemas coloidales o en la descripción de polímeros.
- Se necesitan muchos recursos computacionales para su implementación.
- Una forma de obtener el exponente ν es por la linealización de la gráfica $\langle R^2(N) \rangle$ vrs. N. Y, en el límite $N \to \infty$

$$\nu(N) = \nu - \frac{1}{2} b N^{-\Delta} + \cdots$$

- Los valores estimados por Kremer y Binder (1988) son $\nu = 3/4$ para 2D, $\nu \approx 0.588$ para 3D y $\nu = 1/2$ para dimensión 4 o mayor.

Caminatas aleatorias con sesgo

- También se conocen como caminatas aleatorias con deriva.
- A diferencia de las caminatas libres, existe una preferencia para el movimiento, esto implica que el valor medio de la caminata evoluciona en el tiempo.
- En un sistema 2D, este movimiento podría representar a una partícula en un fluido con velocidad constante.
- La deriva puede aparecer como una función determinista que elige el siguiente paso o también puede aparecer como una función estocástica que elige el próximo paso con una función de densidad de probabilidad no uniforme.
- Este modelo se usa en el análisis estructural de grafos no dirigidos, también en el análisis de transporte y de publicidad en redes sociales.
- Además, se aplica al estudio de dispersión y redistribución de animales y microorganismos

Caminatas aleatorias correlacionadas

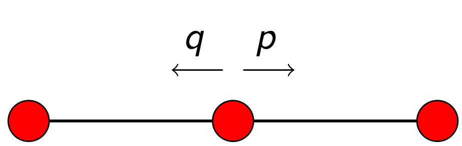
- En los modelos anteriores no existía una correlación entre los pasos. En este modelo se considera que el siguiente paso depende una correlación entre pasos anteriores.
- La correlación puede ser determinada por muchos factores de los pasos anteriores, por ejemplo el siguiente paso depende de la dirección del movimiento de los pasos anteriores o también del número de pasos consecutivos realizados previamente.
- En algunos casos se usan funciones de correlación que pueden incluir características desde el inicio de la caminata, en otras ocasiones también se define un tiempo de *decorrelación* para poner un corte en esas funciones de correlación.
- Este modelo se usa en la descripción del movimiento estocástico de animales que buscan alimento en un medio [Bovet P. y S. Benhamou, J. of Theor. Bio. 131 (4), 419. (1988); Kareiva, P.M. y N. Shigeseda, Oecologia. 56, 234. (1983)].

Caminatas aleatorias de paso fijo y paso variable

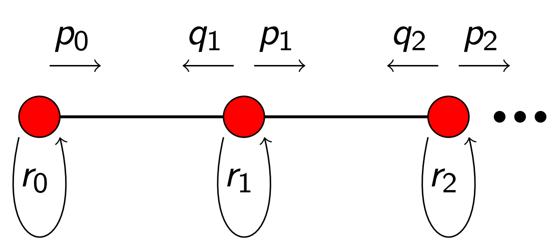
- Las caminatas de paso fijo también se conocen como *caminatas de Pearson*.
- En estas caminatas, en cada instante de tiempo el caminante se puede mover hacia uno de los próximos vecinos en la red subyacente, es decir su paso es fijo y del tamaño de la longitud característica de la red. El paso también puede ser más grande, pero es constante.
- En las caminatas de paso variable, un caminante se puede mover hacia uno de los puntos en el conjunto de sus próximos vecinos o en el conjunto de sus siguientes próximos vecinos. Esto hace que en algunas ocasiones se de un paso del tamaño de la longitud característica de la red y en otras ocasiones el paso sea más grande.

Estados y probabilidad de transición

- Supongamos que un caminante está en una posición dada en una red 1D y que se puede mover a la derecha con probabilidad p y a la izquierda con probabilidad $q = p - 1$.

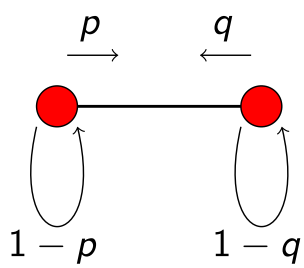


- Ahora usemos una red finita, que se extiende en una de las direcciones y que el caminante puede moverse a la derecha con probabilidad p, a la izquierda con probabilidad q y, con una probabilidad r puede quedarse en el mismo sitio.



Matriz de probabilidades de transición

- Asumamos que sólo hay dos estados



- y que podemos usar una matriz P cuyos elementos p_{ij} representan la probabilidad de pasar del i-ésimo punto al j-ésimo punto

$$P = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-p & p \\ q & 1-q \end{bmatrix}$$

- P es la *matriz de probabilidades de transición*; cuando existe un número finito de estados n

$$P = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & \cdots & p_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n1} & p_{n2} & \cdots & p_{nn} \end{bmatrix},$$

donde se debe cumplir

$$\sum_{j=1}^{n} p_{ij} = 1, \ \ \forall i \geq 1.$$

- Si P es una matriz estocástica, entonces después de m pasos, P^m, $\forall m \in \mathbb{N}$ también lo es.

Cadenas de Markov discretas

- Sea I un conjunto numerable y sea λ una medida de probabilidad sobre I, es decir

$$\lambda = \{\lambda_i, i \in I, 0 \leq \lambda_i < +\infty, \forall i \in I\},$$

además $\sum \lambda_i = 1$. A la medida λ también se le denomina *distribución* de X.

- Ahora consideremos que X es una variable aleatoria con valores sobre I. Entonces, la probabilidad de que la variable X tome el valor $i \in I$ es $\lambda_i = P(X = i)$.
- Ahora, $(X_n)_{n\geq 0}$ es una cadena de Markov discreta con distribución inicial λ_0 si $P(X_0) = \lambda_0$ y

$$P(X_{n+1} = i_{n+1} | X_0 = i_0, \ldots, X_n = i_n) = p_{i_n, i_{n+1}} = P_{i_n, i_{n+1}}$$

- Así que la probabilidad de encontrar el sistema en el j-ésimo sitio habiendo partido del i-ésimo sitio en n pasos es $(P^n)_{ij}$.

Aplicaciones de las cadenas de Markov

- Los sistemas markovianos aparecen en termodinámica y mecánica estadística.
- En la formulación de la integral de caminos, los caminos son cadenas de Markov.
- Las cadenas de Markov también se usan en las simulaciones de *lattice QCD*.
- Las cadenas de Markov también tienen aplicaciones en química, biología, estadística, en teoría de la información y ciencias de la computación, en las teorías de colas. El índice PageRank de Google se define como una cadena de Markov. También se aplican en economía y finanzas. Algunos algoritmos para composición musical también usan cadenas de Markov. También se usan en el análisis de estadísticas del béisbol, en generadores de texto y en predicciones probabilísticas.

¡Muchas gracias!

Contacto:
Giovanni Ramírez García, PhD
ramirez@ecfm.usac.edu.gt
http://ecfm.usac.edu.gt/ramirez