

Capítulo 1

Introducción al estudio de procesos de relajación

1.1 Procesos de Markov

Sea Y una variable estocástica que puede tomar valores y_1, y_2, \dots

$$P_1(y_1, t) \equiv \text{Prob. de tomar } y_1 \text{ en } t \text{ (1 paso)}$$

$$P_2(y_1, t_1; y_2, t_2) \equiv \text{Prob. conjunto de tomar } y_1 \text{ en } t_1 \text{ y } y_2 \text{ en } t_2$$

$$P_{1/1}(y_1, t_1 | y_2, t_2) \equiv \text{Prob. condicional de tomar } y_2 \text{ en } t_2 \text{ habiendo tomado } y_1 \text{ en } t_1 \text{ (certeza de } y_1)$$

Abreviaremos obviando el tiempo. Además se tiene

$$P(y_1; y_2) \leq P(y_1 | y_2)$$

donde el lhs evalúa los caminos que comunican y_1, y_2 del total y el rhs evalúa los caminos que comunican y_1, y_2 del subconjunto de los que parten de y_1 .

Además

$$P_2(y_1; y_2) = P_1(y_1)P_{1/1}(y_1 | y_2)$$

cumpléndose lo siguiente

- $\int P_1(y_1) dy_1 = 1$ normalización
- $\int P_{1/1}(y_1 | y_2) dy_2 = 1$ normalización
- $\int P_2(y_1; y_2) dy_1 = \int P_1(y_1) P_{1/1}(y_1 | y_2) dy_1 = P_1(y_2)$ reducción

Las P son densidades de probabilidad, cuando el espacio muestral sea continuo.

Ejemplito numérico

$$P(y_1; y_2) = P(y_1)P(y_1|y_2) = \frac{4}{4} \frac{1}{2} = \frac{2}{7}$$

$$P(y_2; y_1) = P(y_2)P(y_2|y_1) = \frac{3}{7} \frac{2}{3} = \frac{2}{7}$$

Notemos que $P(A|B) \neq P(B|A)$ aunque $P(A; B) = P(B; A)$

Las densidades de muchos pasos: $P(y_1; y_2; y_3)$ son relevantes cuando el sistema tiene “memoria”.

Un proceso es de Markov cuando el estado del sistema depende del paso inmediato anterior únicamente. Se define por

$$P_1(y_1), \quad P_{1/1}(y_1|y_2) \equiv \text{Probabilidad de transición}$$

$$P_{3/1}(y_1, y_2, y_3|y_4) \underset{\text{Markov}}{\rightrightarrows} P_{1/1}(y_3|y_4)$$

Se puede demostrar una ecuación de Chapman-Kolmogorov

$$P_{1/1}(y_1|y_3) = \int P_{1/1}(y_1|y_2)P_{1/1}(y_2|y_3)dy_2$$

1.1.1 Ecuación maestra

Queremos ver la evolución de la $P_1(y_1, t)$

$$\frac{dP_1(y, t)}{dt} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{P_1(y, t + \tau) - P_1(y, t)}{\tau}$$

Usando que

$$P_1(y_2, t + \tau) = \int dy_1 P_1(y_1, t) P_{1/1}(y_1, t|y_2, t + \tau)$$

$$P_1(y_2, t) = \int dy_1 P_1(y_1, t) P_{1/1}(y_1, t|y_2, t)$$

$$\frac{dP_1(y, t)}{dt} = \int dy_1 P_1(y_1, t) \left[\lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\tau} (P_{1/1}(y_1, t|y_2, t + \tau) - P_{1/1}(y_1, t|y_2, t)) \right]$$

que se puede escribir de modo que

$$\frac{1}{\tau} \left\{ [1 - \tau \int dy W(y_1, y)] \delta(y_1 - y_2) + \tau W(y_1, y_2) - \delta(y_1 - y_2) \right\}$$

y entonces

$$\begin{aligned}\frac{dP_1(y, t)}{dt} &= \int dy_1 P_1(y_1, t) \left[- \int dy W(y_1, y) \delta(y_1 - y_2) + W(y_1, y_2) \right] \\ \frac{dP_1(y, t)}{dt} &= \int dy_1 P_1(y_1, t) W(y_1, y_2) - \int dy_1 P_1(y_1, t) \int dy W(y_1, y) \delta(y_1 - y_2) \\ \frac{dP_1(y, t)}{dt} &= \int dy_1 P_1(y_1, t) W(y_1, y_2) - \int dy P_1(y_2, t) W(y_2, y) \\ \frac{dP_1(y, t)}{dt} &= \int dy_1 P_1(y_1, t) W(y_1, y_2) - P_1(y_2, t) \int dy W(y_2, y)\end{aligned}$$

donde el primer término en el rhs se interpreta como ganancia (lo que entra) y el segundo pérdida (pues la integral es lo que sale).

$W(y_1, y_2) \equiv$ Transiciones $y_1 \rightarrow y_2$ por la unidad de tiempo

1.1.2 Camino aleatorio y ecuación de difusión

Si ℓ , T son escalas y n_2 , s un número entero de pasos

$$P_1(n_2\ell, sT) = \sum_{n_1} P_1(n_1\ell, [s-1]T) P_{1/1}(n_1\ell, [s-1]T | n_2\ell, sT)$$

Quiero saber cuáles son las chances de estar en $n_2\ell$ al tiempo sT sumando todas las transiciones desde diferentes lugares $n_1\ell$.

Si la probabilidad es uniforme

$$P_{1/1}(n_1\ell, [s-1]T | n_2\ell, sT) = \frac{1}{2} \delta(n_2 - [n_1+1]) + \frac{1}{2} \delta(n_2 - [n_1-1]) = \frac{1}{2} \begin{cases} \text{si } n_2 = n_1 + 1 \\ \text{si } n_2 = n_1 - 1 \end{cases}$$

$$P_1(n_2\ell, sT) = \sum_{n_1} P_1(n_1\ell, [s-1]T) \left\{ \frac{1}{2} \delta(n_2 - [n_1 + 1]) + \frac{1}{2} \delta(n_2 - [n_1 - 1]) \right\}$$

y sumando y restando convenientemente,

$$P_1(n_2\ell, sT) = -\frac{1}{2} P_1([n_2-1]\ell, [s-1]T) + \frac{1}{2} P_1([n_2+1]\ell, [s-1]T) + P_1(n_2\ell, [s-1]T) - P_1(n_2\ell, [s-1]T)$$

$$\begin{aligned}\frac{P_1(n_2\ell, sT) - P_1(n_2\ell, [s-1]T)}{T} &= \\ \frac{\ell^2}{2T} \left[\frac{P_1([n_2-1]\ell, [s-1]T) - 2P_1(n_2\ell, [s-1]T) + P_1([n_2+1]\ell, [s-1]T)}{\ell^2} \right] & \\ (1.1) &\end{aligned}$$

Pero esto no es otra cosa que expresiones de las derivadas, de manera que

$$\frac{\delta P(n_2 \ell, sT)}{\delta T} = \frac{\ell^2}{2T} \frac{\delta^2 P(n_2 \ell, [s-1]T)}{\delta \ell^2}$$

Esta es la ecuación de Fokker-Planck

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = C \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}$$

una ecuación de onda para la probabilidad (?)

1.2 Cadenas de Markov

Espacio muestral discreto (dimensión L) ; medimos el tiempo en pasos

$$P_1(y_j, 1) = \sum_i^L P_1(y_i, 0) P_{1/1}(y_i, 0 | y_j, 1)$$

donde la información sobre las transiciones se introduce en

$$Q : Q_{ij} \equiv P_{1/1}(y_i, 0 | y_j, 1)$$

que es la matriz estocástica. Se verifica

$$\sum_i^L Q_{ij} = 1 \quad \forall i$$

y entonces las filas son vectores de probabilidad

$$\overrightarrow{P(1)} = \overrightarrow{P(0)} \hat{Q}$$

$$P_j(1) = P_i(0) Q_{ij} \quad \text{Asumimos convención de Einstein}$$

$$\overrightarrow{P(s)} = \overrightarrow{P(s-1)} Q = \overrightarrow{P(s-2)} Q Q = \dots = \overrightarrow{P(0)} Q^s$$

y decimos que Q es estocástica regular si existe $k : [Q^k]_{ij} > 0 \forall i, j$.

Si Q es estocástica regular entonces existe $s : Q^{s+1} = Q^s \equiv T$ y por lo tanto

$$QT = Q^{s+1} = T$$

Si $n > s$

$$\overrightarrow{P(n)} = \overrightarrow{P(0)} Q^n = \overrightarrow{P(0)} Q^{n-s} Q^s = \overrightarrow{P(0)} T$$

**T es la solución de equilibrio,
pues $T = QT$**

$$\begin{aligned}\lambda_\alpha \widehat{\vec{P}}^\alpha &= \widehat{\vec{P}}^\alpha \widehat{Q} \quad \rightarrow \quad 0 = \vec{P}^\alpha (Q - \lambda_\alpha \mathbb{1}) \\ \lambda_\beta \widehat{\vec{P}}^\beta &= \widehat{\vec{P}}^\beta \widehat{Q} \quad \rightarrow \quad 0 = (Q - \lambda_\beta \mathbb{1}) \vec{P}^\beta \\ \lambda_\alpha \chi_j^\alpha &= \chi_{1i}^\alpha Q_{ij} \quad \vec{\chi} = (, , ,)\end{aligned}$$

donde los índices $j, 1i$ refieren a columnas y

$$\lambda_\beta \psi_{i1}^\beta = Q_{ij} \psi_{j1}^\beta \quad \vec{\chi} = \begin{pmatrix} \\ \\ \\ \end{pmatrix}$$

donde los índices $i1, j1$ refieren a filas.

Y entonces deducimos que

- Autovectores a izquierda $\vec{\chi}$ y a derecha $\vec{\psi}$ son ortogonales.
- Los autovalores son $|\lambda_\gamma| \leq 1$.
- $\lambda = 1$ es siempre autovalor.

Sabemos que

$$\begin{aligned}P(m, s) &= \sum_n P(n, 0) Q_{nm}^s \quad \rightarrow \text{con } s = 1 \\ P(m, 1) &= \sum_n P(n, 0) Q_{nm}\end{aligned}$$

y esto es

$$\chi_m = \sum_n \chi_n Q_{nm} \quad (\lambda = 1 \text{ autovalor de } \vec{\chi} \text{ estacionario})$$

Siempre hay solución estacionaria $P = PQ$.

Para el autovector a derecha

$$\lambda_\beta \psi_{\ell 1}^\beta = \sum_i Q_{\ell i} \psi_{i1}^\beta$$

$$\text{Si } \vec{\psi}^\beta = (1, 1, \dots, 1)^t \rightarrow$$

$$\lambda_\beta \psi_\ell^\beta = \lambda_\beta = \sum_i Q_{\ell i} \psi_i^\beta = \sum_i Q_{\ell i} = 1$$

y $\lambda_\beta = 1$ autovalor de

$$\vec{\psi}^\beta = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \dots \\ 1 \end{pmatrix}$$

1.3 Solución general a través de descomposición espectral

$$\lambda_\alpha \chi_i^\alpha = \sum_j \chi_j^\alpha Q_{ij}$$

$$\lambda_\alpha \psi_\ell^\alpha \chi_i^\alpha = \sum_j \psi_\ell^\alpha \chi_j^\alpha Q_{ij}$$

$$\sum_\alpha \lambda_\alpha \psi_\ell^\alpha \chi_i^\alpha = \sum_j \sum_\alpha \psi_\ell^\alpha \chi_j^\alpha Q_{ij} = \sum_j \delta_{\ell j} Q_{ji} = Q_{\ell i}$$

y entonces

$$Q_{\ell i} = \sum_\alpha \lambda_\alpha \psi_\ell^\alpha \chi_i^\alpha$$

es una descomposición espectral. De esta forma

$$Q_{\ell i}^s = \sum_\alpha \lambda_\alpha^s \psi_\ell^\alpha \chi_i^\alpha$$

por ortogonalidad de $(\vec{\chi}, \vec{\psi})$.

$$Q_{\ell i}^s = \lambda_1^s \psi_\ell^1 \chi_i^1 + \sum_{\alpha=2} \lambda_\alpha^s \psi_\ell^\alpha \chi_i^\alpha$$

Y si $s \rightarrow \infty$ entonces $\lambda_1 = 1$ y $\psi^1 = (1, 1, \dots, 1)^t$ de modo que

$$\lim_{s \rightarrow \infty} Q_{\ell i}^s = \widehat{\psi_\ell^1} \widehat{\chi_i^1} = \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \dots \\ 1 \end{pmatrix} (\chi_1^1 \chi_2^1 \dots \chi_L^1) \right]_{\ell i} = \chi_i^1$$

Todas las filas son iguales.

$$\lim_{s \rightarrow \infty} Q_{\ell i}^s = T_{\ell i} = \chi_i^1 \forall \ell$$

entonces

$$T = \begin{pmatrix} [\chi^1;] \\ [\chi^1;] \\ \dots \\ [\chi^1;] \end{pmatrix}$$

Luego T tiene como filas al autovector que cumple

$$\vec{\chi} = \vec{c} \chi Q \quad \text{El punto fijo de } Q$$

Por otro lado

$$\lim_{s \rightarrow \infty} Q_{\ell i}^s = \lim_{s \rightarrow \infty} P_{1/1}(\ell, 0|i, s) = P_1(i, 0)$$

La probabilidad de un estado i final, una vez dentro del régimen estacionario, no depende del estado ℓ desde el cual partimos.

La solución de equilibrio claramente es

$$\vec{P} = \vec{P}Q$$

pues si $\vec{P}(s+1) = \vec{P}(s)Q$ y obtenemos

$$\vec{P}(s+1) = \vec{P}(s) = \vec{P}(s)Q$$

entonces resulta que

$$\vec{P}(s) = \vec{P}(s)Q$$

es lo que hay que buscar. La moraleja es que \vec{P} de equilibrio es el punto fijo de Q .