Capítulo 1

Introducción al estudio de procesos de relajación

1.1 Procesos de Markov

Sea Y una variable estocástica (aquellas que provienen de experimentos, donde no se tiene información dinámica determinista[1]) que puede tomar valores $y_1, y_2, ...$

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

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

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

Para N pasos es

$$P_N(y_1, t_1; y_2, t_2; ...; y_N, t_N)$$

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

Es importante que la condicional implica que se sabe algo con certeza.

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 cminos que comunican y_1, y_2 del subconjunto de los que parten de y_1.

[1] No tengo información para predecir nada.

Además
$$P_2(y_1;y_2) = P_1(y_1)P_{1/1}(y_1|y_2),$$
que es el caso de $P(B)P(B/A) = P(A)$, cumpliéndose 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

La integral de normalización implica sumar todos los caminos de (y_1, t_1) a (y_2, t_2).

La reducción se puede definir en general para N pasos y $N-1$. Cuando la densidad de probabilidad es invariante ante una traslación temporal se dice que es estacionaria. En ese caso se da que

$$P_N(y_1, t_1; y_2, t_2; ...; y_N, t_N) = P_N(y_1, t_1 + \tau; y_2, t_2 + \tau; ...; y_N, t_N + \tau)$$

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". Se clasifican los procesos en función de la memoria; en el caso de Markov nos preocupamos del último anerior y requeriré la probabilidad de un evento y la probabilidad de transición: estas dos cosas definen los procesos de Markov.

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

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

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

luego, conociendo
$$\begin{cases} P_1(y,t) \\ P_{1/1}(y_{n-1}, t_{n-1}|y_n t_n) \end{cases}$$
ya conozco todo lo que necesito.

Se puede demostrar una ecuación de Chapman-Kolmogorov

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

que se interpreta como la suma en todos los caminos. Se tiene el constraint de que la norma debe conservarse en el tiempo.

1.1.1 Ecuación maestra

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

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

Usando que

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

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

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

que se puede escribir de modo que

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

y entonces

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

$$\frac{dP_1(y,t)}{dt} = \int dy_1 P_1(y_1,t)W(y_1,y_2) - \int dy_1 P_1(y_1,t)\int dyW(y_1,y)\delta(y_1-y_2)$$

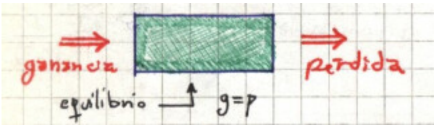
$$\frac{dP_1(y,t)}{dt} = \int dy_1 P_1(y_1,t)W(y_1,y_2) - \int dyP_1(y_2,t)W(y_2,y)$$

$$\frac{dP_1(y,t)}{dt} = \int dy_1 P_1(y_1,t)W(y_1,y_2) - P_1(y_2,t)\int dyW(y_2,y)$$

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

$$W(y_1,y_2) \equiv \text{Transiciones } y_1 \to y_2 \text{ por la unidad de tiempo}$$

Si la densidad de probabilidad es nula puede ser que haya un balance entre lo IN y OUT. Equilibrio no significa necesariamente que no pase nada; puede ser ese balance.



1.1.2 Camino aleatorio y ecuación de difusión

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

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

Quiero saber cuáles son las chances de estar en $n_2\ell$ al tiempo $s\mathrm{T}$ sumando todas las transiciones desde diferentes lugares $n_1\ell$.

Si la probabilidad es uniforme

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

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

y sumando y restando convenientemente,

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

$$\frac{P_1(n_2\ell, s\mathrm{T}) - P_1(n_2\ell, s\mathrm{T})}{\mathrm{T}} = \frac{\ell^2}{2\mathrm{T}}\left[\frac{P_1([n_2-1]\ell, [s-1]\mathrm{T}) - 2P_1(n_2\ell, [s-1]\mathrm{T}) + P_1([n_2+1]\ell, [s-1]\mathrm{T})}{\ell^2}\right] \tag{1.1}$$

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

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

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 $Y = \{y_1, y_2, y_3, ..., y_\ell\}$ de dimensión L y donde medimos el tiempo en pasos. Se tiene una ecuación de evolución dada por

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

que es la probabilidad de llegar a un estado específico desde todos los otros posibles y donde la información sobre las transiciones se introduce en la matriz Q tal que

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

que es la matriz estocástica. Se verifica

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

y entonces las filas son vectores de probabilidad[2]

$$\overbrace{\vec{P(1)}}^{1\times L} = \overbrace{\vec{P(0)}}^{1\times L} \overbrace{Q}^{L\times L}$$

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

La matriz Q tiene probabilidades de transición fijas en el tiempo, de modo que Q es independiente del tiempo.

$$\vec{P(s)} = \vec{P(s-1)} Q = \vec{P(s-2)} QQ = ... = \vec{P(0)} Q^s$$

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

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

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

Si $n > s$

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

$$\lambda_\alpha \overbrace{\vec{P}^\alpha}^{1\times L} = \overbrace{\vec{P}^\alpha}^{1\times L} \overbrace{Q}^{L\times L} \quad \to \quad 0 = \vec{P}^\alpha (Q - \lambda_\alpha \mathbb{1})$$

$$\lambda_\beta \overbrace{\vec{P}^\beta}^{1\times L} = \overbrace{\vec{P}^\beta}^{1\times L} \overbrace{Q}^{L\times L} \quad \to \quad 0 = (Q - \lambda_\beta \mathbb{1}) \vec{P}^\beta$$

[2] Tenía anotado que si la suma de las filas es 1 entonces la matriz se llama estocástica

y tenemos autovalores a izquierda

$$\lambda_\alpha \chi_j^\alpha = \chi_{1i}^\alpha Q_{ij} \qquad \vec{\chi} = (,,,)$$

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

$$\lambda_\beta \psi_{i1}^\beta = Q_{ij} \psi_{j1}^\beta \qquad \vec{\chi} = \Big(\Big)$$

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

$$P(m,s) = \sum_n P(n,0) Q_{nm}^s \qquad \to \text{con } s = 1$$

$$P(m,1) = \sum_n P(n,0) Q_{nm}$$

y esto es

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

Siempre hay solución estacionaria $P = PQ$.

Para el autovector a derecha

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

Si $\vec{\psi}^\beta = (1, 1, ..., 1)^t \to$

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

y $\lambda_\beta = 1$ autovalor de

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

1.2.1 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, análoga a la de mecánica cuántica $\mathbb{1} = \sum_i |i\rangle \langle i|$. 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 $s \to \infty$ entonces $\lambda_1 = 1$ y $\psi^1 = (1, 1, ..., 1)^t$, mientras que λ_α^s tiende a cero puesto que $|\lambda_i| \leq 1$, de modo que

$$\lim_{s\to\infty} Q_{\ell i}^s = \overbrace{\psi_\ell^1}^{L\times 1} \overbrace{\chi_\ell^1}^{L\times 1} = \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ ... \\ 1 \end{pmatrix} (\chi_1^1 \chi_2^1 ... \chi_L^1) \right]_{\ell i} = \chi_i^1$$

Todas las filas son iguales.

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

entonces

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

Luego T tiene como filas al autovector que cumple

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

Por otro lado

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

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

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

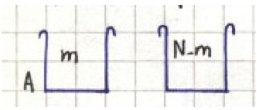
entonces resulta que

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

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

Los siguientes problemas aparecían en la página 14 de la carpeta, tal vez correspondan a algún capítulo inicial más que aquí.

EJEMPLO 2.1 Problema 4

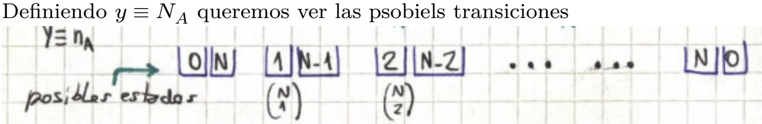


Se elige una bocha, y se cambia de urna. Las bochas se eligen completamente al azar; no sé de qué tarro las voy a tomar. La idea es que evolucionamos de $n' \to n$, entonces

$$T_{nn'} = \frac{n}{N}\delta_{n+1,n'} + \left[1 - \frac{n'}{N}\right]\delta_{n-1,n'}$$

que interpreta al primer término como el vaciamiento de A y al segundo como el llenado de A.

Definiendo $y \equiv N_A$ queremos ver las psobiels transiciones



No me precoupan las diferentes combinaciones de cada estado. No pienso en variaciones microscópicas.

$$T_{10} = 1 \qquad T_{01} = \frac{1}{N} \qquad T_{21} = \frac{N-1}{N} \qquad T_{12} = \frac{2}{N}$$

Entonces,

$$P(n, s+1) = \sum_{m=0}^{N} P(m, 0)Q^s_{mn} = \sum_{m=0}^{N} P(m, s)Q_{mn}$$

$$P(n, s+1) = \sum_{m=0}^{N} P(m, s)\left(\frac{m}{N}\delta_{n,m-1} + \left[1 - \frac{m}{N}\right]\delta_{n,m+1}\right)$$

$$P(n, s+1) = \frac{n+1}{N} P(n+1, s) + \left[1 - \frac{n-1}{N}\right] P(n-1, s)$$

para $1 \leq n \leq n - 1$. Como $P(0, s+1) = 1/NP(1, s)$ y $P(N, s+1) = 1/NP(N-1, s)$ si tomamos esta podemos ver que satisface la ecuación última. A tiempos muy grandes esperaríamos $P(n) = (m/n)1/2^N$ y se puede ver reemplazando y viendo que se plancha la evolución temporal.

EJEMPLO 2.2 Problema 6

Una bola de cada una y se intercambian

La matriz de transición sería algo como

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1/8 & 1/2 & 3/8 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

y los autovalores $\lambda_i = 1, 1/4, -1/4$ para $i = 1, 2, 3$. Los autovalores a derecha

$$\psi_1 = (1, 1, 1) \qquad \psi_1 = (2, -1/2, 1) \qquad \psi_1 = (1, -1/4, 1/6)$$

y los autovalores a izquierda

$$\chi_1 = (1/15, 8/15, 6/15) \qquad \chi_2 = (-1/2, -1, -3/2) \qquad \chi_3 = (7/6, -4/6, -7/6)$$

Se tienen además

$$P^{(3)} = P(0)Q^3$$

donde Q^3 será

$$Q^3 = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i^3 \psi_i \chi_i$$

sujeta a las condiciones iniciales

$$P(0) = \begin{cases} (1, 0, 0) \\ (0, 0, 1) \\ (0, 1, 0) \end{cases} .$$

El sistema está en equilibrio cuando olvidó el punto desde el cual partió.