

## 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<sup>1</sup>) que puede tomar valores  $y_1, y_2, \dots$

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

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

Para  $N$  pasos es

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

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

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

**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 caminos que comunican  $y_1, y_2$  del subconjunto de los que parten de  $y_1$ .

---

<sup>1</sup>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
- $\int P_{1/1}(y_1|y_2)dy_1 = 1$       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

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

### 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 anterior 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

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

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

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  $P_1(y_1, t)$

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

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

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

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

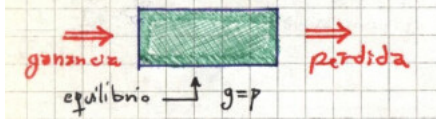
$$\frac{dP_1(y, t)}{dt} = \int dy_1 P_1(y_1, t) W(y_1, y_2) - \int dy P_1(y_2, t) W(y_2, y)$$

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

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).

$W(y_1, y_2) \equiv$  Transiciones  $y_1 \rightarrow y_2$  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  $\ell, T$  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,

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

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

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  $Y = \{y_1, y_2, y_3, \dots, y_\ell\}$  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

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

y entonces las filas son vectores de probabilidad<sup>2</sup>

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

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

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

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  $n > s$

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

$$\lambda_\alpha \overbrace{\hat{P}^\alpha}^{1 \times L} = \overbrace{\hat{P}^\alpha}^{1 \times L} \overbrace{\hat{Q}}^{L \times L} \rightarrow 0 = \bar{P}^\alpha (Q - \lambda_\alpha \mathbb{1})$$

$$\lambda_\beta \overbrace{\hat{P}^\beta}^{1 \times L} = \overbrace{\hat{P}^\beta}^{1 \times L} \overbrace{\hat{Q}}^{L \times L} \rightarrow 0 = (Q - \lambda_\beta \mathbb{1}) \bar{P}^\beta$$

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

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

<sup>2</sup>Tenía anotado que si la suma de las filas es 1 entonces la matriz se llama estocástica

y tenemos autovalores a izquierda

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

### 1.2.1 Solución general a través de descomposición espectral

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

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  $s \rightarrow \infty$  entonces  $\lambda_1 = 1$  y  $\psi^1 = (1, 1, \dots, 1)^t$ , mientras que  $\lambda_\alpha^s$  tiende a cero puesto que  $|\lambda_i| \leq 1$ , 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.**

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

entonces

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

Luego  $T$  tiene como filas al autovector que cumple

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

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  $\ell$  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  $Q$ .