

PASEO ALEATORIO EN UNA Y DOS DIMENSIONES

G. Gutiérrez-Gutiérrez
Universidad de Antioquia

Resumen

Consideramos dos problemas clásicos en la física estadística: El paseo aleatorio y el modelo de Ising. Algoritmos básicos que se desarrollan en diferentes contextos de la ciencia, tanto en la física como la economía, biología geología, etc. Las simulaciones canónicas se desarrollan en el lenguaje de programación python logrando buenos ajustes a la teoría en relación a el número de experimentos lanzados en cada caso.

1. Paseo aleatorio

Difusión de una molécula, intensidad de luz incoherente, momento magnético de los átomos en un campo magnético no uniforme son ejemplos de problemas que se resuelven a través del estudio del camino aleatorio o movimiento browniano, así como modelos de consumo, hipótesis de camino aleatorio, redistribución de la población animal o quimiotaxia son ejemplos en otras áreas de la ciencia.

En este caso trataremos con las formas idealizadas más simples.

Para el caso unidimensional tenemos que un borracho comienza a caminar desde un poste de luz, cada paso es de la misma longitud (1 en nuestro caso) y tiene una probabilidad p de ser hacia adelante y q hacia atrás que no necesariamente son iguales ya que el camino puede estar un poco inclinado, la cuestión a tratar es entonces ¿cuál es la probabilidad de encontrar al borracho en la posición $x=m$ después de N pasos? Donde m es la distancia desde el poste de luz.

Podemos extender este enunciado al caso bidimensional agregando que las probabilidades p_1, p_2, p_3, p_4 corresponden a dar un paso hacia el frente, atrás, a la derecha o izquierda

1.1. Caso unidimensional

Debemos entonces calcular la probabilidad de encontrar la partícula (borracho) en la posición $x=m$ (ya que la longitud de cada paso vale 1) después de N pasos donde

$$\begin{aligned} -N < m < N \\ N &= n_1 + n_2 \end{aligned}$$

Con n_1 el número de pasos que dio hacia adelante y n_2 el número de pasos que dio hacia atrás, luego el desplazamiento

$$m = n_1 - n_2 = n_1 - (N - n_1) = 2n_1 - N$$

La probabilidad de dar n_1 pasos hacia el frente y n_2 pasos hacia atrás es

$$p \cdot p \cdot p \cdot p \cdot p \dots q \cdot q \cdot q \cdot q \dots = p^{n_1} \cdot q^{n_2}$$

Y el número total de posibilidades es

$$\frac{N!}{n_1! n_2!}$$

Concluimos que la probabilidad de tener n_1 pasos hacia adelante y n_2 pasos hacia atrás de un total de N pasos es

$$\frac{N!}{n_1!n_2!} p^{n_1} q^{n_2} = \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1}$$

Que reconocemos como una distribución binomial, finalmente sustituimos la expresión para m

$$P_N(m) = \frac{N!}{[(N+m)/2]![(N-m)/2]!} p^{(N+m)/2} q^{(N-m)/2}$$

Nuestra simulación toma un arreglo de n números aleatorios entre 0 y 1 y va sumando o restando 1 si estos números caen en los intervalos $[0,p)$ o $[p,1)$ respectivamente, y almacenamos la posición final. El proceso se repite N veces y se extrae la gráfica de las frecuencias (histograma) con la que encontramos una posición final determinada y la comparamos con la función Gaussiana donde hemos hallado la media μ y la desviación estandar σ haciendo uso de la función fit de la clase stats del paquete scipy que ya se encuentran optimizadas.

$$f(x; \mu, \sigma) \propto e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

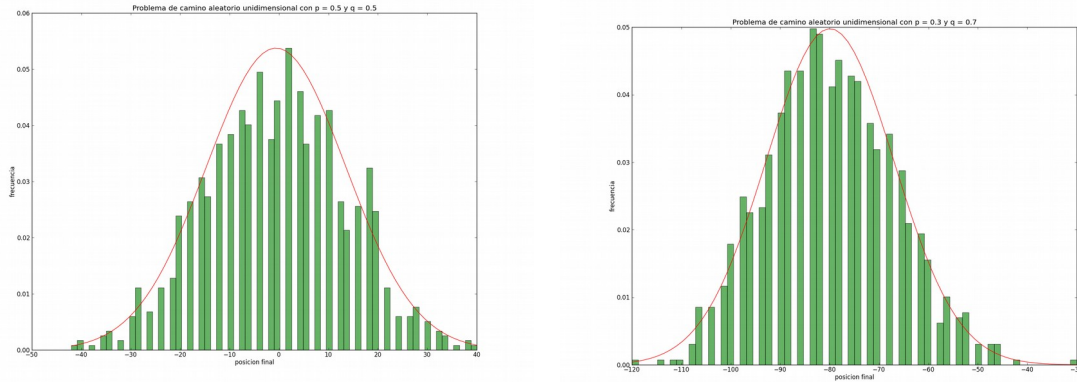


Fig 1. Camino aleatorio unidimensional con $p=q=0.5$ (Izq) y $p=0.3$ y $q=0.7$ (Der).

En la fig 1. podemos observar que al ser un problema de 2 posibilidades se describen las probabilidades a través de una distribución binomial y ésta es modulada por una función Gaussiana.

Vemos además que en el caso en que $p \neq q$ con $p=0.3$ y $q=0.7$ el valor máximo o más probable se encuentra cerca a -80, este valor corresponde a la media de la posición final que es:

$$\bar{m} = \bar{n}_1 - \bar{n}_2$$

Pero

$$\bar{n}_1 = \sum_{n_1=0}^N P(n_1) n_1 = \sum_{n_1=0}^N \cdot \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1} n_1 = \sum_{n_1=0}^N \cdot \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} [p \partial_p (p^{n_1})] q^{N-n_1}$$

Intercambiamos la suma y la derivada

$$\bar{n}_1 = p \partial_p \sum_{n_1=0}^N \cdot \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1} = p \partial_p (p+q)^N = pN(p+q)^{N-1} = pN$$

$$\bar{n}_1 = pN$$

Donde hemos usado la condición de que $p+q = 1$. Similarmente

$$\bar{n}_2 = qN$$

Y finalmente

$$\bar{m} = N(p-q)$$

Para nuestro caso con $p=0.3$, $q=0.7$ y $N=200$ tenemos que $\bar{m} = -80$ como se observa. Para el caso particular de que las probabilidades sean iguales la media se debe encontrar cerca a cero.

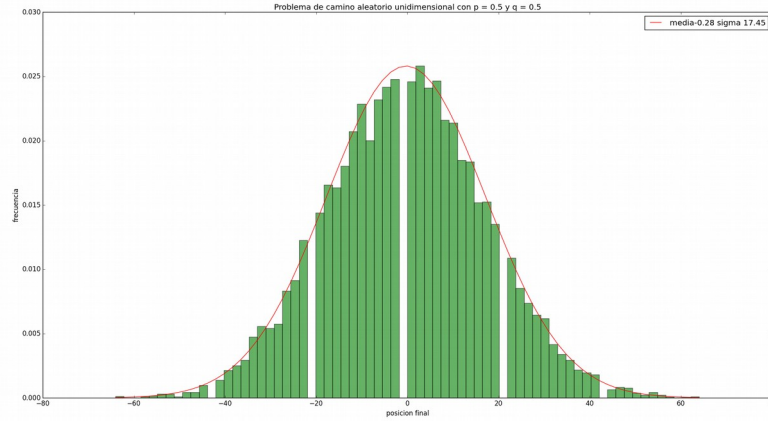


Fig 2. Camino aleatorio unidimensional con $p=q=0.5$.

En la fig 2. podemos

Para conocer la desviación estandar hallamos la dispersión de n_1 y posteriormente la de

$$\bar{m}$$

$$(\Delta \bar{n}_1)^2 = \overline{(n_1 - \bar{n}_1)^2} = \bar{n}_1^2 - (\bar{n}_1)^2$$

pero

$$\bar{n}_1^2 = \sum_{n_1=0}^N P(n_1) n_1^2 = \sum_{n_1=0}^N \cdot \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1} n_1^2 = \sum_{n_1=0}^N \cdot \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} [(p \partial_p)^2 (p^{n_1})] q^{N-n_1}$$

$$\bar{n}_1^2 = (\bar{n}_1)^2 + Npq$$

$$(\Delta \bar{n}_1)^2 = Npq$$

$$(\Delta \bar{m})^2 = (m - \bar{m})^2 = (2n_1 - N - 2\bar{n}_1 + N)^2 = 4(\Delta n_1)^2 = 4Npq$$

Luego la dependencia de el número de pasos de la desviación estandar es lineal. Para el caso en que $p=q=0.5$ la pendiente de la línea es 1 (Fig. 3).

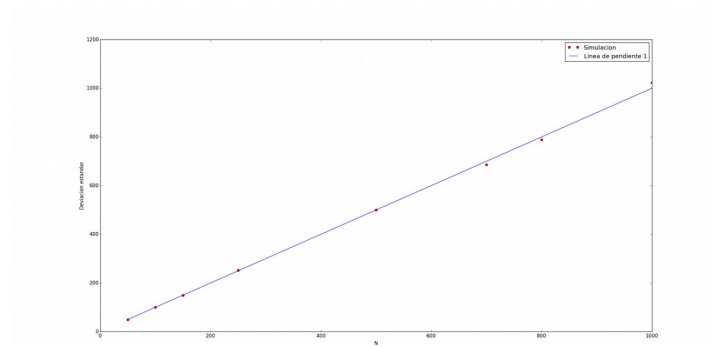


Fig 3. Desviación estandar numérica y teórica.

1.2. Caso bidimensional

En este caso se partió el intervalo en 4 partes dependiendo de las probabilidades asignadas, se hace un record de las posiciones finales en x y en y y la distancia $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ desde el punto inicial así como el último de los caminos con fines ilustrativos.

Las simulaciones con la misma probabilidad para todas las posibles direcciones (adelante, atrás, derecha, izquierda) nos producen la salida:

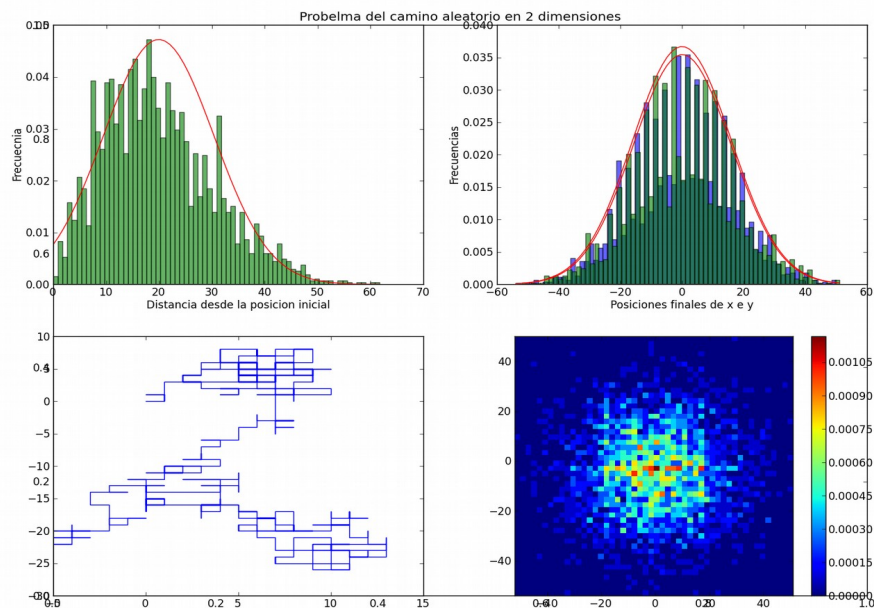


Fig 4. Camino aleatorio bidimensional con $p=q=0.5$.

En Fig 4. superior derecha podemos observar que la probabilidad para las posiciones finales en x y en y siguen una distribución binomial y son envueltas por una función de tipo gaussiana.

La gráfica superior izquierda que representa la distancia desde el punto inicial sigue una distribución normal sólo si el número de pasos es lo suficientemente grande, esto es,

$$R^2 = (\Delta x_1 + \Delta x_2 + \Delta x_3 + \dots)^2 + (\Delta y_1 + \Delta y_2 + \Delta y_3 + \dots)^2$$

Con $i=1,2,3,\dots$ cada uno de los pasos, expandiendo tenemos:

$$R^2 = \Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \dots + \Delta x_1 \Delta x_2 + \Delta x_1 \Delta x_3 + \dots$$

Si tomamos un número de pasos lo suficientemente grande podemos despreciar los términos cruzados, y obtenemos:

$$R^2 \approx \Delta x_1^2 + \Delta x_2^2 + \dots + \Delta y_1^2 + \Delta y_2^2 + \dots = N \langle R^2 \rangle$$

finalmente

$$R \approx \sqrt{N} \sigma$$

Cuando $p_1 \neq p_2 \neq p_3 \neq p_4$ observamos claramente que cada una de las componentes de la posición siguen una distribución binomial (Fig. 5)

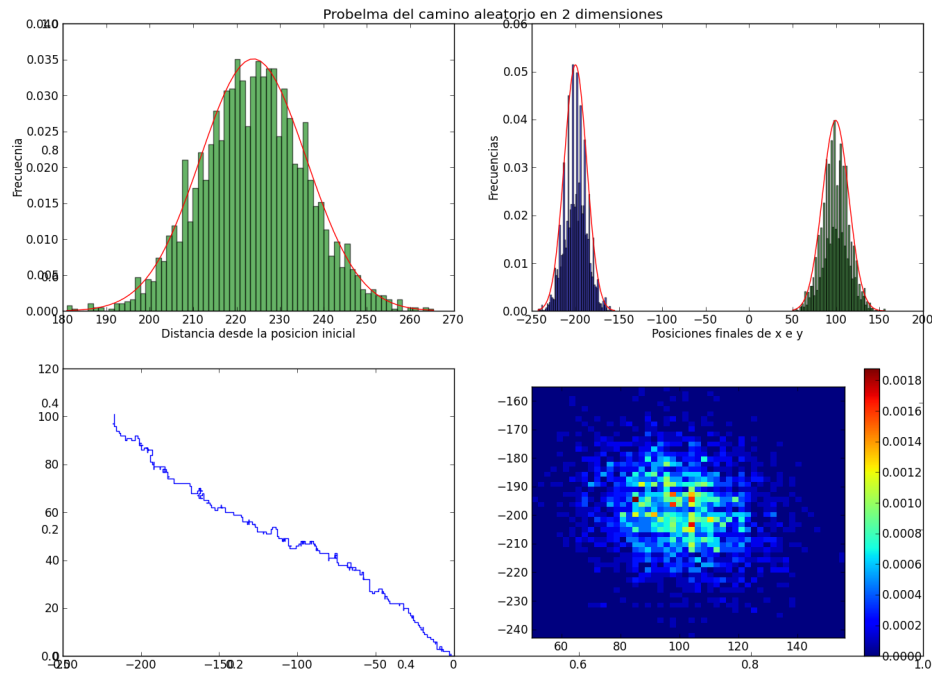


Fig 5. Camino aleatorio unidimensional con $p_1=0.05, p_2=0.45, p_3=0.35, p_4=0.15$

2. Paramagneto tipo Ising

Uno de los problemas más importantes de la física del estado sólido y recientemente de áreas multidisciplinarias como la biofísica y la dinámica social es el Modelo de Ising. Propuesto inicialmente como un modelo ferromagnético por Lenz, quien le dejó la tarea a su estudiante Ising de resolver analíticamente el caso unidimensional. Ising se dio cuenta que no existían transiciones de fase en dicho caso y asumió erróneamente que para dimensiones superiores tampoco existían.

De manera general escribimos el hamiltoniano de interacción entre los espines ubicados en una configuración discreta de la siguiente forma

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} s_i \cdot s_j - \sum_i \mu_i B_i s_i$$

Donde J_{ij} determina la fuerza y la forma en la que interaccionan los espines, el segundo término es de interacción con un campo magnético externo. Este caso general es llamado el modelo de Stanley, para partículas con estados de dos dimensiones es llamado el modelo de Heisenberg y para estados escalares de valores 1 y -1 es nuestro caso de interés, el modelo

de Ising. Asumiremos también que las partículas son idénticas, se encuentran ubicadas en una malla regular bidimensional, el campo magnético externo es uniforme en la configuración, que la interacción se da con primeros vecinos y las fronteras son periódicas. Escribimos entonces nuestro Hamiltoniano de la siguiente manera

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^N s_i s_j - \mu B \sum_i^N s_i$$

Este es un problema de optimización, se tiene que encontrar el estado de equilibrio, i.e. la energía mínima, en este caso, dado que el sistema se encuentra a una temperatura determinada. Para esto debemos simular el comportamiento microscópico del sistema descrito por el hamiltoniano a través del método de Montecarlo con dinámica de Metrópolis (Que bajo ciertas circunstancias es conocido también como Recocido Simulado).

Partimos de una configuración donde todas los espines son aleatorios ($\{-1,1\}$) luego el sistema evoluciona con el algoritmo de Metrópolis que asegura una distribución de Boltzmann, i.e. la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado W_i es

$$P(W_i) = \frac{e^{-E/k_B T}}{Z}$$

El método de montecarlo consiste en escoger una de los espines de manera aleatoria y cambiarlo. Calcular cuál es energía en esta nueva configuración; si es menor esta será el nuevo estado del sistema; si es mayor, se escogerá como el nuevo estado con probabilidad

$$P = e^{-\Delta E/k_B T} \quad (\text{Fig 6}).$$

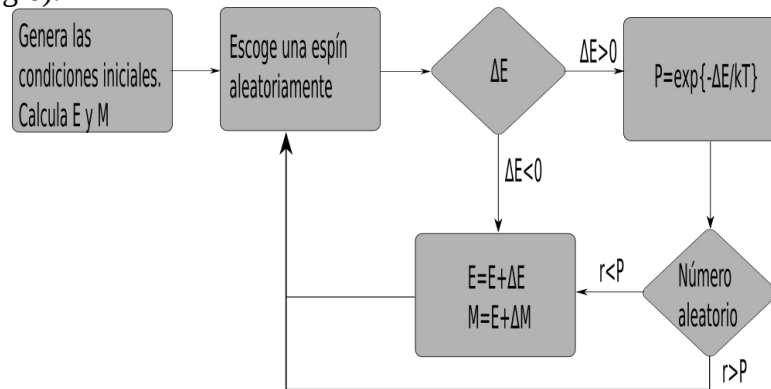


Fig 6. Diagrama de boques del algoritmo de Metrópolis.

Se lanzó la simulación en una malla de 20x20, tomando $J=1$ y $\mu=1$. Se obtuvo una transición de fase al rededor de $T = T_c = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})}$ (Fig. 8)

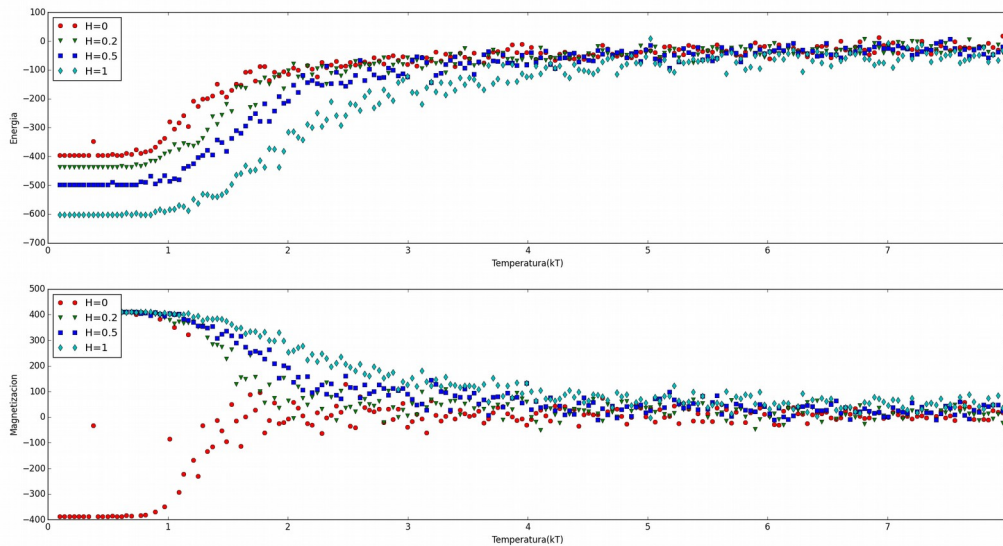


Fig 7. Temperatura vs Energía (Arriba), temperatura vs Magnetización (Abajo) para valores de $H=\{0,0.2,0.5,1\}$

En la Fig. 9 observamos que al escalar las curvas de la magnetización promedio en términos de H/kT obtenemos la misma curva para los 3 valores escogidos de kT . Esta curva se ajusta a una forma de \tanh .

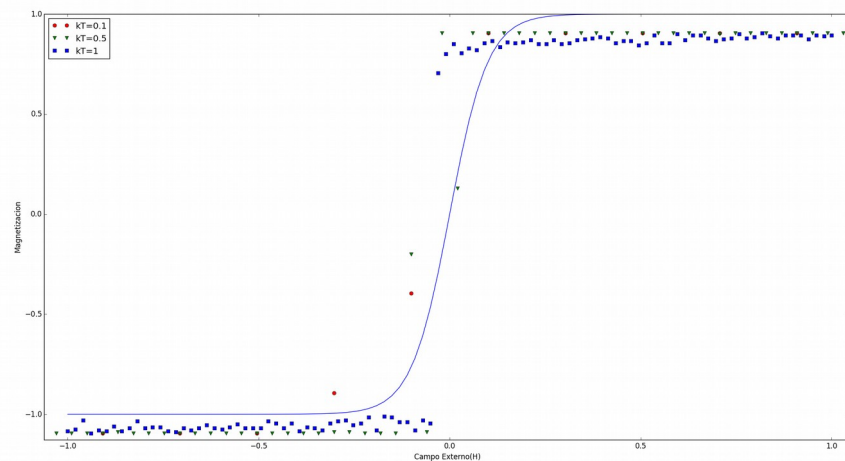


Fig 9. Campo externo vs Magnetización promedio para valores de $kT=\{0.1,0.5,1\}$

3. Conclusiones

En los casos estudiados podemos describir la probabilidad de encontrar una partícula que sigue un movimiento browniano discreto a través de una distribución binomial y observamos también que es posible estudiar el caso continuo a través de una distribución normal para un número de experimentos lo suficientemente grandes.

La dependencia de la desviación estándar con el número de pasos es lineal con pendiente $4pq$.

Las simulaciones concuerdan con los resultados esperados y calculados analíticamente en la literatura, la comparación con la gaussiana y el promedio en la posición final que equivale a la posición del máximo de frecuencias en el histograma así como la linealidad de la desviación estándar con el número de pasos.

Es posible disminuir la variación en los resultados de las simulaciones del modelo de Ising haciendo uso de un enmallado más grande.

Para garantizar que se cumpla el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ son necesarias las condiciones de frontera periódicas.

4. Bibliografía

- Reif, F. *Fundamentals of statistical and thermal physics*, McGraw Hill, Inc. 1965
- Reif, F. *Física estadística, berkeley physics course vol5*, Reverté S. A.: Barcelona. 1969
- Christensen, Kim, and Nicholas R. Moloney. *Complexity and criticality*. Vol. 1. London: Imperial College Press, 2005.
- Binder, Kurt, and Dieter Heermann. *Monte Carlo simulation in statistical physics: an introduction*. Springer Science & Business Media, 2010.