Física Teórica 3 — segundo cuatrimestre de 2023

Guía 3: *Procesos estocásticos - Cadenas de Markov*

I. Procesos de Markov en general

Para fijar la notación, $p(x_i, t_i|x_j, t_j)$ significa: la probabilidad de que el estado del proceso sea x_i a tiempo t_i dado que fue, o será, x_j en t_j, dependiendo de cuál tiempo sea el mayor. Abreviaremos $A_k \equiv (x_k, t_k)$. Se entiende siempre que los tiempos están ordenados de acuerdo a sus índices: si $i \leqslant j$ entonces $t_i \leqslant t_j$. En los procesos en tiempo discreto, el estado del proceso es función de una variable temporal discreta que toma un conjunto numerable de valores, usualmente los enteros. En los procesos continuos, el estado es función de una variable temporal que toma valores en un intervalo real. En esta guía estudiaremos ambos tipos de procesos, pero siempre con una cantidad numerable de estados.

1. Por definición, en un proceso de Markov la probabilidad condicional satisface

$$p(A_n|A_{n-1}, A_{n-2}, \ldots, A_0) = p(A_n|A_{n-1}), \tag{1}$$

donde $t_n \geqslant t_{n-1} \geqslant \ldots \geqslant t_0$. Esto significa que predicciones sobre el estado presente, x_n, dependen sólo de la información más reciente que se tenga, y no de la información sobre lo haya pasado antes.

a) Demostrar que todas las probabilidades conjuntas de n tiempos, $p_n(A_n, A_{n-1}, \ldots, A_1)$, pueden construirse a partir de $p(A_i)$ y de $p(A_j|A_i)$, con $t_j \geqslant t_i$.

b) Demostrar que la condición markoviana es simétrica respecto de la inversión temporal, en el siguiente sentido: inferencias sobre el estado pasado del proceso dependen sólo del conocimiento de su estado actual, y no de la información sobre lo haya pasado después:

$$p(A_{n-1}|A_n, A_{n+1}, \ldots) = p(A_{n-1}|A_n). \tag{2}$$

c) Suponga que el sistema es observado en t_0 en el estado x_0, y en $t_n \geqslant t_0$ en el estado x_n. Los estados intermedios no son conocidos. Interesa hacer inferencias acerca del camino que siguió el sistema entre los dos estados observados. Para eso, dé explícitamente $p(A_k|A_n, A_0)$, donde $t_0 \leqslant t_k \leqslant t_n$, en términos de las probabilidades de transición directas, $p(A_j|A_i)$ con $t_j \geqslant t_i$. Generalice incluyendo $n-1$ estados intermedios entre t_0 y t_n. Es decir, encuentre

$$p(A_k|A_n, \ldots, A_{k+1}, A_{k-1}, \ldots, A_1, A_0), \tag{3}$$

donde $t_0 \leqslant t_1 \leqslant \ldots \leqslant t_{k-1} \leqslant t_k \leqslant t_{k+1} \leqslant \ldots \leqslant t_n$.

II. Procesos de Markov en tiempo discreto y con un número finito de estados

2) **Proceso binario I**. El estado de un proceso de Markov en pasos discretos puede ser a o b. Las probabilidades de transición en pasos consecutivos, $p(i, n|j, n-1)$, entre uno y otro estado están dadas esquemáticamente por

$$\begin{bmatrix} p(a \to a) & p(a \to b) \\ \\ p(b \to a) & p(b \to b) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-\alpha & \alpha \\ \\ \beta & 1-\beta \end{bmatrix}. \tag{4}$$

Por simplicidad se asume que α y β no son ni 0 ni 1.

a) Encuentre las ecuaciones que dan las probabilidades $p_a(n+1)$ y $p_b(n+1)$ luego de $n+1$ pasos en términos de las probabilidades $p_a(n)$ y $p_b(n)$ del paso anterior.

Como hay sólo dos estados, p_b puede eliminarse del problema, ya que $p_b = 1 - p_a$. Entonces, en todo lo que sigue es suficiente con escribir y resolver las ecuaciones para p_a.

b) Encuentre la distribución estacionaria, es decir, aquella para la cual

$$p_a(n+1) = p_a(n) \equiv P_a. \tag{5}$$

c) Suponga que la probabilidad se parametriza del siguiente modo:

$$p_a(n) = P_a + \Delta(n). \tag{6}$$

Encuentre y resuelva la ecuación de evolución para $\Delta(n)$ a partir de una condición inicial $\Delta(0)$ en $t_0 = 0$. Estudie la convergencia a la distribución estacionaria. ¿Qué sucede si $\alpha = \beta = \frac{1}{2}$?

d) Calcule las cuatro probabilidades de transición de n pasos, $p(i, k+n|j, k)$. *Sugerencia*: puesto que las probabilidades de transición no dependen del tiempo,

$$p(i, k+n|j, k) = p(i, n|j, 0). \tag{7}$$

Estas cuatro probabilidades condicionales se obtienen fijando de manera adecuada las condiciones iniciales en los resultados de los ítems anteriores.

e) Como aplicación del problema 1c, suponga que $\alpha = 1/8$ y $\beta = 1/2$. El sistema parte del estado a, y es observado luego de diez pasos en el mismo estado a. Dada esta información, calcule exactamente las probabilidades de que el sistema haya pasado por uno u otro estado en el quinto paso.

f) Grafique $p(i, k|a, 0; a, n)$, con $0 \leqslant k \leqslant n$, como función de k, para valores fijos de n. ¿Qué pasa a medida que k se aleja de 0 o de n?

3) **Proceso binario II**. El problema anterior puede resolverse siguiendo un método más general que no depende de que el sistema tenga únicamente dos estados. Las probabilidades de transición en pasos consecutivos para un proceso discreto con N estados pueden representarse mediante una matriz $\mathbf{M}$ de $N \times N$, con elementos

$$M_{ji} = p(i, n+1|j, n). \tag{8}$$

En general, $\mathbf{M}$ podría depender de n; supondremos que no. Para el proceso binario, por ejemplo,

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1-\alpha & \alpha \\ \beta & 1-\beta \end{bmatrix}. \tag{9}$$

a) Demuestre que si $\mathbf{p}(n)$ es el vector cuyas componentes dan la probabilidad de cada estado luego de n pasos, entonces $\mathbf{p}(n+1) = \mathbf{p}(n) \cdot \mathbf{M}$ y, por lo tanto,

$$\mathbf{p}(n) = \mathbf{p}(0) \cdot \mathbf{M}^n. \tag{10}$$

¿Qué ecuación satisfacen las distribuciones estacionarias?

Como $\mathbf{M}$ no es necesariamente simétrica, sus autovectores no tienen por que ser ortogonales. Sin embargo, puede demostrarse que los autovectores por izquierda y derecha, $\boldsymbol{v}_r$ y $\boldsymbol{w}_r$, definidos respectivamente por $\boldsymbol{v}_r \cdot \mathbf{M} = \lambda_r \boldsymbol{v}_r$ y $\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{w}_r = \lambda_r \boldsymbol{w}_r$, sí lo son; es decir $\boldsymbol{v}_r \cdot \boldsymbol{w}_s \propto \delta_{rs}$. (Notar que los dos conjuntos de autovectores comparten el mismo conjunto de autovalores. ¿Por qué?)

b) Encuentre los autovectores y autovalores para la matriz (9) del proceso binario y verifique la propiedad de ortogonalidad $\boldsymbol{v}_r \cdot \boldsymbol{w}_s \propto \delta_{rs}$.

c) Usando la condición de suma de probabilidades igual a 1, muestre que $\lambda = 1$ es un autovalor, para cualquier matriz de transición, y que un autovector por derecha es $\boldsymbol{w} \propto (1, 1, \ldots, 1)$. De los N autovectores, puede elegirse que éste sea el primero. Tomaremos $\boldsymbol{w}_1 = (1, 1, \ldots, 1)$.

d) El autovector $\boldsymbol{v}_1$ asociado a $\boldsymbol{w}_1$ se normaliza de manera que sus componentes sumen 1. Verificar entonces que $\boldsymbol{w}_1 \cdot \boldsymbol{v}_1 = 1$. El resto de los autovectores puede normalizarse de modo que $\boldsymbol{w}_i \cdot \boldsymbol{v}_j = \delta_{ij}$, en la forma que resulte más conveniente. En los ítems siguientes se asume esa normalización.

e) La propiedad de ortogonalidad entre los dos conjuntos de autovectores asegura que cada conjunto $\{\boldsymbol{v}_r\}$ y $\{\boldsymbol{w}_r\}$ es linealmente independiente. Asumiendo que es posible encontrar N autovectores $\boldsymbol{w}$ distintos, demuestre que cualquier vector $\mathbf{u}$ en N dimensiones puede escribirse como

$$\mathbf{u} = \sum_{r=1}^{N} (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{w}_r)\, \boldsymbol{v}_r, \tag{11}$$

y que, entonces,

$$\mathbf{p}(n) = \sum_{r=1}^{N} \mathbf{p}(0)\cdot\boldsymbol{w}_r\, \lambda_r^n\, \boldsymbol{v}_r \quad \text{y} \quad (\boldsymbol{M}^n)_{ij} = \sum_{r=1}^{N} \lambda_r^n (\boldsymbol{w}_r)_i (\boldsymbol{v}_r)_j. \tag{12}$$

El par de ecuaciones anteriores dan una manera práctica de calcular $\mathbf{p}(n)$ y $\boldsymbol{M}^n$.

f) Por fin, como aplicación, escriba los autovectores normalizados para el proceso binario con la matriz de transición (9) y verifique que la ecuación (12) reproduce para $\mathbf{p}(n) = \big(p_a(n), p_b(n)\big)$ los resultados obtenidos siguiendo el método más elemental del problema anterior.

4) En este problema hay que usar el método matricial descripto en el problema anterior. Se recomienda hacer los cálculos en la computadora. Hay dos fichas blancas y cuatro rojas. En la urna $\mathcal{A}$ se colocan dos de esas fichas, mientras que en la urna $\mathcal{B}$ se colocan cuatro. A cada paso del proceso se selecciona al azar una ficha de cada urna y se intercambian. El estado del proceso luego de n pasos se caracteriza por el número m de fichas blancas en la urna $\mathcal{A}$, y su probabilidad por $p_m(n)$, con $m = 0, 1$ y 2.

a) Escriba la matriz de transición y encuentre sus autovalores y autovectores. Normalícelos según el criterio del problema anterior.

b) Exprese el vector probabilidad $\mathbf{p}(n)$ en términos de los autovectores a izquierda y derecha, para una condición inicial arbitraria $\mathbf{p}(0) = \big(p_0(0), p_1(0), p_2(0)\big)$.

c) Grafique $p_m(n)$ como función de n, para $m = 0, 1$ y 2, considerando separadamente las tres condiciones iniciales $m = 0, 1$ o 2 en $n = 0$.

III. Ejemplo de un proceso en tiempo discreto con un número infinito de estados

5) **Caminata al azar discreta.** Considere el problema de una persona cuya posición puede asumir los valores enteros entre menos y más infinito. Cada segundo, la persona da un paso hacia adelante con probabilidad p, o hacia atrás con probabilidad $q = 1 - p$. Sea $p_m(n)$ la probabilidad de que la persona ocupe la posición m luego de n pasos. La caminata empieza en $t_0 = 0$. En general, $t_n = n$.

a) La manera más sencilla de resolver este problema consiste en usar un poco de combinatoria, sumando las probabilidades de caminos disjuntos que llevan, desde el origen, a una misma posición m luego de n pasos: de los n pasos, habrá n_+ hacia adelante y n_- hacia atrás, de modo que $n_+ + n_- = n$. Por otro lado, la posición m será la diferencia $n_+ - n_-$. Note, entonces, que n y m determinan unívocamente n_+ y n_-. Lo que resta por averiguar es de cuántas maneras pueden ordenarse los n pasos, dado que n_+ fueron hacia adelante y n_- hacia atrás, y cuál es la probabilidad de cada ordenamiento. De este modo, encuentre $p(m, t_n|0, t_0)$ y escriba $p_m(n)$ para cualquier condición inicial $p_m(0)$.

b) La manera complicada de resolver este problema, pero de aplicación más general, empieza por escribir la ecuación de evolución para $p_m(n)$. Esto es: escriba la ecuación que da $p_m(n+1)$ en términos de $p_m(n)$.

c) A partir de la ecuación de evolución para p_m, escriba y resuelva las ecuaciones de evolución para el valor medio de m y la desviación cuadrática media,

$$\begin{aligned} \overline{m}(n) &= \langle m(n) \rangle\,, \\ \sigma^2(n) &= \left\langle \left[m(n) - \overline{m}(n)\right]^2 \right\rangle = \left\langle m^2(n) \right\rangle - \overline{m}(n)^2. \end{aligned} \tag{13}$$

d) Calcule $\overline{m}(n)$ y $\sigma^2(n)$ para la caminata simétrica, $p = q = \frac{1}{2}$, cuando la persona parte del origen..

La ecuación de evolución da una relación de recurrencia en las dos variables, m y n. Para resolverla, puede aplicarse el método de la función generatriz.

e) Defina $F(z,n) = \sum_m p_m(n) z^m$ y escriba su ecuación de evolución. Las probabilidades $p_m(n)$ siempre se leen como los coeficientes que acompañan a z^m en el desarrollo de $F(z,n)$ en potencias de z.

f) Encuentre $F(z,n)$ para una condición inicial arbitraria $p_m(0)$.

g) En el caso particular en el que la persona parte del origen, encuentre $F(z,n)$ y $p_m(n)$.

h) Note que las derivadas respecto de z de la función generatriz, evaluadas en $z = 1$, permiten calcular valores medios. Cuando la persona parte del origen, calculando las derivadas adecuadas, determine $\overline{m}(n)$ y $\sigma^2(n)$ a partir de la función generatriz.

IV. Procesos de Markov continuos en el tiempo

6) **Proceso binario III**. Esta es la versión continua de los problemas 2) y 3). Considere un proceso estocástico $X(t)$ que puede tomar los valores $\mathbf{a}$ y $\mathbf{b}$. Las probabilidades de transición por unidad de tiempo son $W_{ab} = A$, y $W_{ba} = B$. Sean

$$p_a(t) = p[X(t) = a], \qquad p_b(t) = p[X(t) = b]. \tag{14}$$

a) Escriba la ecuación maestra y encuentre $p_i(t)$ para $t \geqslant 0$ con una condición inicial arbitraria en $t = 0$. ¿Cuál es la distribución de equilibrio?

b) La variable $Z(X)$ es 0 si $X = a$ y 1 si $X = b$. Calcule la función de autocorrelación

$$r(t,\tau) = \langle Z(t) Z(t+\tau) \rangle\,, \tag{15}$$

con $0 \leqslant t$ y $0 \leqslant \tau$. Analice el límite $t \to \infty$.

7) Las ecuaciones maestras que dependen de variables estocásticas discretas usualmente son más fáciles de resolver usando la función generatriz, que ya hemos introducido en otros problemas y que, en el contexto de procesos continuos en el tiempo, se define como

$$F(z,t) = \sum_n p_n(t) z^n, \tag{16}$$

donde $p_n(t)$ es la probabilidad regida por la ecuación maestra en cuestión. Demostrar que, tanto si el proceso es discreto o continuo en el tiempo,

$$F(1,t) = 1, \tag{17}$$

$$\frac{\partial F}{\partial z}(1,t) = \langle n \rangle_t\,, \tag{18}$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial z^2}(1,t) = \left\langle n^2 \right\rangle_t - \langle n \rangle_t\,. \tag{19}$$

8) **Caminata al azar II.** Esta es la versión continua en el tiempo del problema 5). La probabilidad por unidad de tiempo de que una persona dé un paso hacia adelante es α, y de que dé un paso hacia atrás es β. Su posición puede asumir todos los valores enteros entre menos y más infinito. Sea $p_n(t)$ la probabilidad de que la persona ocupe la posición n a tiempo t.

a) Escribir la ecuación maestra para $p_n(t)$.
b) Verificar que la probabilidad total se conserva, $\sum_n \dot{p}_n(t) = 0$.
c) Escribir la ecuación de evolución para la función generatriz.
d) Escribir y resolver la ecuación de evolución para $\langle n \rangle$.
e) Mostrar que con una adecuada redefinición de la escala temporal, la ecuación maestra para la caminata simétrica ($\alpha = \beta$) puede escribirse en la forma

$$\dot{p}_n = p_{n+1} + p_{n-1} - 2p_n. \tag{20}$$

f) Para el caso de la caminata simétrica con la ecuación maestra dada en el ítem anterior, encontrar la función generatriz, tomando como condición inicial que la persona está en $n = 0$ en $t_0 = 0$. Expandiendo $F(z,t)$ en potencias de z, mostrar que

$$p_n(t) = e^{-2t} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{t^{2l+|n|}}{l!\,(l+|n|)!} = e^{-2t} I_n(2t), \tag{21}$$

donde I_n es la función de Bessel modificada de primera especie.

g) También es posible llegar al resultado anterior resolviendo directamente la ecuación maestra, teniendo a la vista la siguiente relación de recurrencia para la función I_n:

$$I'_n(x) = \tfrac{1}{2}\left[I_{n+1}(x) + I_{n-1}(x)\right]. \tag{22}$$

9) Sea un proceso de Markov cuyo rango consiste de enteros n y cuya matriz de transición es tal que sólo permite transiciones entre sitios adyacentes. Si r_n es la probabilidad por unidad de tiempo de que estando en n ocurra una transición hacia $n-1$, y g_n la correspondiente para que ocurra hacia $n+1$:

   a) Escriba la ecuación maestra correspondiente.
   b) Verificar que la probabilidad total se conserva, $\sum_n \dot{p}_n(t) = 0$.
   c) Encuentre una ecuación para la evolución temporal de $\langle n \rangle$.
   d) Si el rango está acotado a los enteros $n \geqslant 0$, resuelva la ecuación anterior para el caso $r_n = \alpha n$ y $g_n = \beta$ y halle la solución estacionaria. Discuta el caso $\beta = 0$.

10) Un recipiente tiene una pequeña abertura que lo conecta con la atmósfera. Si hay n partículas de gas en el recipiente, la probabilidad por unidad de tiempo de que una partícula escape a la atmósfera es n/Ω. La probabilidad por unidad de tiempo de que una partícula entre al recipiente es ρ.

   a) Escriba la ecuación maestra para la probabilidad $p_n(t)$ de encontrar n partículas en el recipiente a tiempo t.
   b) Verifique que la probabilidad total se conserva, $\sum_n \dot{p}_n(t) = 0$. (La insistencia en este tipo de verificación se debe a que permite detectar errores tempranamente).
   c) Escriba la ecuación diferencial que satisface la función generatriz $F(z,t)$. Verifique que la solución puede escribirse como $F(z,t) = e^{\alpha z} f\big[(1-z)e^{-t/\Omega}\big]$, y encuentre α.
   d) Escriba la solución $F(z,t)$ si la condición inicial es $F(z,0) = F_0(z)$.
   e) Encuentre la probabilidad $P_n = \lim_{t\to\infty} p_n(t)$ y el número medio de partículas $N = \lim_{t\to\infty} \langle n(t) \rangle$ en el equilibrio. Verifique que el proceso satisface la condición de balance detallado.
   f) Encuentre $F(z,t)$ si en $t = 0$ el número de partículas en el recipiente es $n = 0$. Obtenga $p_n(t)$ y muestre que se trata de una distribución de Poisson.

11) **Decaimiento radioactivo I: de la probabilidad condicional a la ecuación maestra.** Considere una muestra de material radioactivo que a tiempo t_0 contiene n_0 núcleos activos independientes. El número $N(t,t_0)$ de núcleos activos a tiempo $t > t_0$ es un proceso estocástico markoviano invariante frente a traslación temporal: las propiedades estadísticas de N dependen sólo de la diferencia $t - t_0$, de modo que muchos cálculos pueden hacerse suponiendo que los experimentos comienzan en $t_0 = 0$.

   a) Suponga que cada núcleo activo en $t_0 = 0$ tiene a tiempo $t > 0$ una probabilidad de seguir activo igual a $w(t)$. Sin importar la forma explícita de $w(t)$, encuentre la probabilidad $p_n(t) \equiv p(n,t|n_0,0)$ de que haya n núcleos activos a tiempo t si había n_0 a tiempo $t_0 = 0$.

b) Usando la invariancia frente a traslaciones en el tiempo, calcule la probabilidad $p(n_2, t_2|n_1, t_1)$ de que haya n_2 núcleos activos en t_2 si había n_1 en $t_1 \leqslant t_2$.

c) Experimentalmente se sabe que $w(t) = e^{-\lambda t}$, donde λ es una constante. Verifique la igualdad de Chapman–Kolmogorov,

$$p(n_2, t_2|n_0, t_0) = \sum_{n_1} p(n_2, t_2|n_1, t_1)p(n_1, t_1|n_0, t_0). \tag{23}$$

¿Cuál es la propiedad esencial de la función $w(t)$ que asegura la validez de esa igualdad?

d) Escriba el desarrollo de $p(n_2, t + \delta t|n_1, t)$ hasta orden δt. Identifique las probabilidades de transición por unidad de tiempo $W_{n_1 n_2}$,

$$p(n_2, t + \delta t|n_1, t) = \delta_{n_2 n_1} (1 - A_{n_1} \delta t) + W_{n_1 n_2} \delta t, \tag{24}$$

y en base a esto escriba la ecuación maestra a partir de su definición,

$$\frac{\partial}{\partial t_2} p(n_2, t_2|n_1, t_1) = \sum_{n} \Big[p(n, t|n_1, t_1)\, W_{n n_2} - p(n_2, t_2|n_1, t_1)\, W_{n_2 n}\Big]. \tag{25}$$

Interprete cada término de la ecuación resultante. (La principal dificultad de este ítem está en separar con cuidado los términos de orden δt, dependiendo de los valores de n_2 y n_1). Note que esta forma de la ecuación maestra se reduce a su forma más habitual si uno elige $n_1 = n_0$ y $t_1 = 0$, en cuyo caso $p(n, t|n_0, t_0)$ es lo que hemos definido como $p_n(t)$.

12) **Decaimiento radioactivo II: de la ecuación maestra a la probabilidad condicional.**

a) La probabilidad de que un núcleo activo decaiga en el intervalo de tiempo entre t y $t + dt$ es λdt, donde λ es una constante. Escriba la ecuación maestra para un núcleo y encuentre $w(t)$, la probabilidad de estar activo a tiempo t si estaba activo en $t_0 = 0$.

b) Suponga que hay n_0 núcleos activos a tiempo $t_0 = 0$. Sea $p_n(t)$ la probabilidad de que haya n núcleos activos a tiempo $t \geqslant 0$. Escriba la ecuación maestra en este caso. Verifique que la probabilidad total se conserva.

c) Encontrar la ecuación de evolución para la función generatriz $F(z, t)$.

d) Suponiendo que en $t_0 = 0$ hay n_0 núcleos activos, escribir la condición inicial $F(z, 0)$ y encontrar $F(z, t)$ proponiendo una solución de la forma $F(z, t) = \phi\big[(1 - z)\, e^{-\lambda t}\big]$.

e) A partir de F, calcular $\langle n \rangle$ y $\sigma^2 = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2$.

f) A partir de F, calcular $p_n(t)$ y, usando la invariancia de traslación en el tiempo, escribir $p(n_2, t_2|n_1, t_1)$.