Temas avanzados de termodinámica y física estadística − 1er. cuatrimestre de 2015

Guía 3: *Algunos procesos estocásticos y un ejercicio con integrales de caminos*

1. Para un proceso de Markov, demostrar que todas las densidades de probabilidad conjunta de n tiempos, $p_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \ldots; x_n, t_n)$, pueden construirse a partir de $p(x, t)$ y $p(x, t|x', t')$, con $t \geq t'$. [Para fijar la notación, $p(x, t|x', t')$ significa "la probabilidad (o densidad, según el caso) de que el estado del sistema sea x a tiempo t dado que era x' en el tiempo anterior t'.]

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

$$p(x_n, t_n|x_{n-1}, t_{n-1}; x_{n-2}, t_{n-2}; \ldots; x_0, t_0) = p(x_n, t_n|x_{n-1}, t_{n-1}), \qquad \text{donde } t_n \geq t_{n-1} \geq \ldots \geq t_0.$$

Esto significa que inferencias sobre el estado actual del proceso dependen sólo del pasado inmediato.

   (a) Aunque esto parece distinguir una dirección del tiempo privilegiada, demostrar que vale la propiedad recíproca: inferencias sobre el estado actual del proceso dependen sólo del conocimiento de su futuro inmediato; es decir:

$$p(x_n, t_n|x_{n+1}, t_{n+1}; x_{n+2}, t_{n+2}; \ldots; x_{n+m}, t_{n+m}) = p(x_n, t_n|x_{n+1}, t_{n+1}),$$

   donde $t_n \leq t_{n+1} \leq \ldots \leq t_{n+m}$.

   (b) Suponga que el sistema es observado en t_0 en el estado x_0, y en t_n 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 $p(x_k, t_k|x_0, t_0; x_n, t_n)$, donde $t_n \geq t_k \geq t_0$, en términos de las probabilidades de transición directas, es decir de pasado a futuro. Generalice a $n-1$ estados intermedios entre t_0 y t_n.

3. (a) Demostrar que las densidades de probabilidad condicional de tipo gaussiano y de Cauchy,

$$p_{\mathrm{G}}(x, t|x', t') = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t')}} \exp\left[-\frac{(x-x')^2}{2(t-t')}\right],$$

$$p_{\mathrm{C}}(x, t|x', t') = \frac{(t-t')/\pi}{(t-t')^2 + (x-x')^2}, \tag{1}$$

   satisfacen la ecuación de Chapman−Kolmogorov,

$$p(x_2, t_2|x_0, t_0) = \int dx_1\; p(x_2, t_2|x_1, t_1) p(x_1, t_1|x_0, t_0), \qquad (t_0 < t_1 < t_2),$$

   y que para $t' \to t$ ambas tienden a $\delta(x - x')$.

   (b) Demostrar que las densidades condicionales anteriores son compatibles con las siguientes densidades de probabilidad de un tiempo, según el caso,

$$p_{\mathrm{G}}(x, t) = \frac{e^{-x^2/2t}}{\sqrt{2\pi t}}, \qquad p_{\mathrm{C}}(x, t) = \frac{t/\pi}{t^2 + x^2}.$$

   Compatibles significa que

$$p(x_2, t_2) = \int dx_1\; p(x_2, t_2|x_1, t_1) p(x_1, t_1).$$

(c) Demostrar que para el proceso gaussiano definido por $p_{\mathrm{G}}(x,t|x',t')$ y $p_{\mathrm{G}}(x,t)$, resulta

$$\langle x(t_1)x(t_2)\rangle = \min(t_1,t_2).$$

(d) Para hacer en la computadora. Bastan unas pocas líneas para generar caminatas al azar de acuerdo a las dos distribuciones anteriores. Suponga que una partícula parte del origen en $t=0$. A partir de un generador de números aleatorios obtenga la posición en tiempos sucesivos, Δt, $2\Delta t$, etc. (Muchos programas ya tienen definido el generador gaussiano. En todo caso, cualquier distribución puede obtenerse a partir de la distribución uniforme en el intervalo $\overline{0,1}$. Ver la Guía 1.) El paso temporal no necesita ser pequeño, porque se usan las densidades condicionales exactas, (1). Variando el paso, lo que uno consigue es construir trayectorias con mayor o menor definición temporal, lo que equivale a filmar a la partícula con mayor o menor cantidad de cuadros por segundo. Note que no importa qué tan pequeño sea el paso temporal, las trayectorias nunca se suavizan. ¿Qué característica muy clara distingue la caminada según Gauss de la caminata según Cauchy?

Un ejercicio de integrales de caminos

Durante la práctica se calculó la integral de caminos

$$I = \left\langle \exp\left\{\int_0^t d\tau\; f[x(\tau),\tau]\right\}\right\rangle_{x(0)=0} = \int_{x(0)=0} \mathcal{D}x\; \mathcal{P}[x]\; \exp\left\{\int_0^t d\tau\; f[x(\tau),\tau]\right\},$$

donde x es un proceso de Wiener y la densidad de probabilidad respecto de la que se calcula el promedio está sujeta a la condición $x(0)=0$. Además, se consideraron exclusivamente funciones de la forma

$$f(x,\tau) = \lambda p(\tau) x^2.$$

En clase, la integral de caminos se calculó como un límite, discretizando la integral de $f[x(\tau),\tau]$ y dividiendo cada camino que va entre 0 y t, en n tramos,

$$(\tau_0,\tau_1),(\tau_1,\tau_2),\ldots,(\tau_{n-1},\tau_n),$$

con $\tau_0=0$, $\tau_1=\Delta$, $\tau_2=2\Delta$, ... , $\tau_n=n\Delta=t$, siempre con $\tau_{i+1}-\tau_i=\Delta$. Así

$$I = \lim_{n\to\infty} I_n,$$

donde

$$I_n = \int_{-\infty}^{\infty}\left(\prod_{i=1}^n dx_i\right)\; p(x_n,\tau_n;x_{n-1},\tau_{n-1};\ldots;x_1,\tau_1|x_0=0,\tau_0=0)\; \exp\left[\Delta\sum_{i=1}^n f(x_i,\tau_i)\right].$$

Aquí

$$p(x_n,\tau_n;x_{n-1},\tau_{n-1};\ldots;x_1,\tau_1|x_0,\tau_0) =$$

$$p(x_n,\tau_n|x_{n-1},\tau_{n-1})\; p(x_{n-1},\tau_{n-1}|x_{n-2},\tau_{n-2})\ldots p(x_1,t_1|x_0,\tau_0),$$

$$p(x_{i+1},\tau_{i+1}|x_i,\tau_i)=\frac{1}{(\pi\Delta)^{1/2}}\,\exp\left[-\frac{(x_{i+1}-x_i)^2}{\Delta}\right].$$

En clase se demostró que $I=D(0)^{-1/2}$, donde $D(\tau)$ es la solución del problema de contorno

$$D''(\tau)+\lambda p(\tau)D(\tau)=0,\qquad D(t)=1,\quad D'(t)=0.$$

La relación fundamental para llegar a este resultado es la fórmula de la integral gaussiana

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\prod_{i=1}^{n}dx_i\right)\,\exp\left(-\sum_{i,j=1}^{n}M_{ij}x_ix_j\right)=\left(\frac{\pi^n}{\det M}\right)^{1/2}.$$

Con pequeñas diferencias, el cálculo hecho en clase siguió el paper de I. M. Gel'fand y A. M. Yaglom: J. Math. Phys. **1**, 48 (1960).

El ejercicio. La idea ahora es calcular el promedio fijando también el extremo final. Es decir, usar como densidad para los caminos de n tramos la densidad condicional

$$p(x_{n-1},\tau_{n-1};x_{n-2},\tau_{n-2};\ldots;x_1,\tau_1|x_0=0,\tau_0=0;x_n=X,\tau_n=t).$$

Las trayectorias parten del origen a tiempo igual a 0 y llegan a X a tiempo t. (Antes X se dejaba variar libremente.) Para mayor sencillez en los cálculos, y para poder comparar mejor con los resultados del paper, tomaremos como densidad una versión no normalizada de la anterior,

$$\tilde{p}(x_{n-1},\tau_{n-1};x_{n-2},\tau_{n-2};\ldots;x_1,\tau_1|x_0,\tau_0;X,t)=$$

$$p(x_{n-1},\tau_{n-1};x_{n-2},\tau_{n-2};\ldots;x_1,\tau_1|x_0,\tau_0;X,t)\;p(X,t|x_0,\tau_0).\qquad(2)$$

El último factor es una constante, de modo que es invisible para todas las integrales. Entonces, por definición, vamos a calcular

$$\tilde{I}=\left\langle\exp\left\{\int_{t_0}^{t}d\tau\;f[x(\tau),\tau]\right\}\right\rangle_{(x_0,t_0;X,t)}=\lim_{n\to\infty}\tilde{I}_n,$$

donde

$$\tilde{I}_n=\int_{-\infty}^{\infty}\left(\prod_{i=1}^{n-1}dx_i\right)\,\tilde{p}(x_{n-1},\tau_{n-1};x_{n-2},\tau_{n-2};\ldots;x_1,\tau_1|x_0,\tau_0;X,t)\;\exp\left[\Delta\sum_{i=1}^{n}f(x_i,\tau_i)\right].$$

Siempre es $t_0=\tau_0=0$ y $x_0=0$.

a) Demostrar, calculando las probabilidades condicionales escritas más arriba, que la única diferencia entre la expresión anterior y el cálculo hecho en clase es que, antes de tomar el límite, la variable $x_n=X$ no se integra,

$$\tilde{I}_n=\int_{-\infty}^{\infty}\left(\prod_{i=1}^{n-1}dx_i\right)\,p(x_1,\tau_1;x_2,\tau_2;\ldots;x_n,\tau_n|x_0=0,\tau_0=0)\;\exp\left[\Delta\sum_{i=1}^{n}f(x_i,\tau_i)\right].$$

Ahora bien: todos los caminos sobre los que se promedia parten de $x_0 = 0$ en $t = 0$ y terminan en $x_n = X$ en $\tau_n = t$. Como x_n está fijo, el término $(x_n - x_{n-1})^2$ que aparece en uno de los exponentes da lugar a un factor proporcional a Xx_{n-1} que es lineal, y no cuadrático, en las variables de integración. Deberá usarse entonces una generalización de la integral gaussiana dada antes, a saber

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{i=1}^{n} dx_i \right) \exp\left(-\sum_{i,j=1}^{n} M_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i \right) = \left(\frac{\pi^n}{\det M} \right)^{1/2} \exp\left[\frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j \left(M^{-1} \right)_{ij} \right].$$

Recordar la fórmula para la matriz inversa $(M^{-1})_{ij} = C_{ij} (\det M)^{-1}$, donde C_{ij} es el cofactor del elemento ij de M. Como casi todos los elementos de M y del vector $\boldsymbol{\alpha}$ son cero, calcular estas cosas no es demasiado complicado. El punto crucial para avanzar en el cálculo es absorber dentro de la definición de las matrices los factores Δ que no se cancelen. Por ejemplo, si aparece $\Delta \det M$, escribir eso como $\det \tilde{M}$, donde $\tilde{M}$ se obtiene multiplicando por Δ la última fila de M. De un modo muy parecido a lo que se hizo en clase, o a lo que figura en el primer ejemplo en el paper de Gel'fand y Yaglom, se demuestra que en el límite en que $\Delta \to 0$ el cálculo de la integral se reduce a la solución de un problema de contorno.

b) Completar todos los pasos que llevan a la ecuación (1.29) del paper de Gel'fand y Yaglom. Luego considerar en particular el caso $p = 1$, es decir, $f(x, \tau) = \lambda x^2$, y completar los pasos que llevan a la ecuación (1.31).

c) Mostrar explícitamente que si se integra en X se recupera el resultado al que se llegó en clase, que corresponde a la ecuación (1.18) del paper,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dX \; \tilde{I}_n = I_n.$$