Probabilidad de regreso al origen del caminante aleatorio en 1,2 y 3 dimensiones

Juan José Gómez Navarro

9 de junio de 2005

1. Cálculo de p_l en dos dimensiones.

p_l se define como la probabilidad de que un caminante aleatorio, partiendo del origen regrese a éste exactamente en l pasos. Del estudio detallado del caminante aleatorio hecho en clase, obtuvimos que el número de caminos posibles cerrados con l pasos es

$$n_l = \frac{2^l}{L^2}\sum_{i=0}^{L-1}\sum_{j=0}^{L-1}(\cos\frac{2\pi}{L}i + \cos\frac{2\pi}{L}j)^l,$$

de manera que la probabilidad p_l será el cociente entra casos favorables y posibles:

$$p_l = \frac{n_l}{\gamma^l}$$

donde el denominador es el número de caminos totales posibles con l pasos, γ es el número de coordinación de la red, que tomaremos 4 para la red cuadrada.

Si estamos interesados en redes muy grandes $L \gg 1$, podemos substituir los sumatorios por integrales, ya que en este caso es legítimo el cambio

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{2\pi i}{L} \longrightarrow \theta_i \quad (\theta_i \in [0, 2\pi]) \\ \sum_i \longrightarrow \frac{L}{2\pi}\int d\theta \end{array} \right.$$

De esta manera, la expresión aproximada para la probabilidad es

$$p_l = \frac{2^l L^2}{(2\pi)^2 L^2 4^l}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} d\theta_i\, d\theta_j\,(\cos\theta_i + \cos\theta_j)^l = \frac{1}{(2\pi)^2 2^l}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} d\theta_i\, d\theta_j\,(\cos\theta_i + \cos\theta_j)^l$$

Esta expresión puede ser reescrita fácilmente como:

$$p_l = 2\frac{1}{(2\pi)^2}\int_{\pi/2}^{-\pi/2}\int_{\pi}^{-\pi} d\theta_i\, d\theta_j\,(\frac{\cos\theta_i + \cos\theta_j}{2})^l$$

donde he usado la paridad de la función coseno. sta expresión todabía es difícil de calcular, pero podemos aproximarla para un número de pasos l muy grande. En este caso, $(\frac{\cos\theta_i + \cos\theta_j}{2})^l$ es prácticamente nulo salvo cuando θ_i y θ_j son muy próximos a cero. De esta manera podemos desarrollar en torno al cero:

$$p_l = 2\frac{1}{(2\pi)^2}\int_{\pi/2}^{-\pi/2}\int_{\pi}^{-\pi} d\theta_i\, d\theta_j\, e^{l\log(\frac{\cos\theta_i + \cos\theta_j}{2})}$$

pero recordando los desarrollos del coseno y del logaritmo:

$$\cos x = 1 - x^2/2 \quad , \quad \log(1-x) = -x \quad \text{si } x \text{ pequeño}$$

aplicados a nustro problema dan:

$$\log(\frac{\cos\theta_i + \cos\theta_j}{2}) = \frac{\theta_i^2 + \theta_j^2}{4}$$

Y sustituyendo en la ecuación de p_l tenemos

$$p_l = 2\frac{1}{(2\pi)^2}\int_{\pi/2}^{-\pi/2}\int_{\pi}^{-\pi} d\theta_i\, d\theta_j\, e^{\frac{l}{4}(\theta_i^2+\theta_j^2)}$$

Puesto que la función exponencial decae rápidamente, podemos extender los límites de la integral hasta el infinito, lo que no supone un error excesivo y de esa manera podemos calcular la integral, ya que

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, dy\, e^{-\alpha(x^2+y^2)} = \frac{\pi}{\alpha}$$

De esta manera encontramos para dos dimensiones:

$$\boxed{p_l = \frac{2}{l\pi}}$$

2. Cálculo de p_l en una dimensión.

La generalización del problema es trivial, la única diferencia es que las integrales cambian, pero las expresiones son totalmente equivalentes. p_l en una dimensión viene dado por

$$p_l = \frac{2^l}{2^l L}\sum_{i=0}^{L-1}(\cos\frac{2\pi}{L}i)^l$$

donde hay que tener en cuenta que ahora el número de coordenación de la red es dos: $\gamma = 2$. Si como antes, estamos interesados en el caso $L \gg 1$ son queda una integral que nuevamente podemos combertir en gausiana utilizando el desarrollo del coseno y el logaritmo:

$$p_l = \frac{2L}{2\pi L}\int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta\, e^{l\log\cos\theta} = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta\, e^{-l\theta^2/2}$$

la integral es fácil, ya que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}.$$

Por tanto,

$$\boxed{p_l = \sqrt{\frac{2}{l\pi}}}$$

3. Cálculo de p_l en tres dimensiones.

La expresión genral sin aproximaciones es trivialmente generalizable:

$$p_l = \frac{2^l}{6^l L^3} \sum_{i=0}^{L-1} \sum_{j=0}^{L-1} \sum_{j=0}^{L-1} (\cos \frac{2\pi}{L} i + \cos \frac{2\pi}{L} j + \cos \frac{2\pi}{L} k)^l,$$

donde ahora $\gamma = 3$. Tomando $L \gg 1$ llegamos como antes a

$$p_l = \frac{1}{3^l (2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_i \, d\theta_j \, d\theta_k (\cos \theta_i + \cos \theta_j + \cos \theta_k)^l$$

Realizando la aproximación gausiana de antes:

$$p_l = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_i \, d\theta_j \, d\theta_k \; e^{l \log(\frac{\cos \theta_i + \cos \theta_j + \cos \theta_k}{3})} =$$

$$= 2 \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta_i \, d\theta_j \, d\theta_k \; e^{-l/6(\theta_i^2 + \theta_j^2 + \theta_k^2)}$$

Ahora integramos en esféricas:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx \, dy \, dz \; e^{-l/6(x^2+y^2+z^2)} = \int_0^{\infty} d\rho \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \rho^2 \sin \theta e^{-l\rho^2} = 4\pi \frac{6}{2l} \sqrt{\frac{\pi}{l}}$$

De esta manera

$$p_l = 4\pi \frac{6}{2l} \sqrt{\frac{\pi}{l}} \frac{2}{(2\pi)^3} = \frac{3}{(l\pi)^{3/2}}$$

4. Cálculo de P_l en una dimensión.

Definimos P_l como la probabilidad de que alguna vez al menos se haya pasado por el origen pasados l pasos del caminante aleatorio. Se trata de una probabilidad acumulada. Según la definición, se obtiene la ley de recurrencia:

$$P_{l+1} = P_l + (1 - p_l) p_{l+1}.$$

Estamos interesados en el comportamiento cuando $l \gg 1$, de manera que $P_{l+1} \sim P_l$ y por tanto podemos sustituir la ecuación anterior por una ecuación diferencial

$$\frac{dP_l}{dl} = (1 - P_l) p_l$$

con las condiciones iniciales $P(l_0) = P_0$. La ecuación es integrable directamente y resulta:

$$\int_{l_0}^{l} p_l dl = \int_{P_0}^{P_l} \frac{dP_l}{1 - P_l} = -\log \frac{1 - P_l}{1 - P_0}.$$

En el caso unidimensional tenemos explícitamente

$$\int_{l_0}^{l} p_l \, dl = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{l_0} l^{-1/2} \, dl = A(\sqrt{l} + \sqrt{l_0}).$$

Sólo nos interesa la dependencia de P_l con l, ya que con tanta aproximación, no podemos esperar obtener más que el orden de magnitud, no el valor exacto. Sustituyento esta expresión en la solución de la ecuación diferencial obtenemos:

$$-\log\frac{1-P_l}{1-P_0} = A(\sqrt{l}+\sqrt{l_0}) \Rightarrow 1-P_l = (1-P_0)e^{A(\sqrt{l}+\sqrt{l_0})}.$$

Lo importante encuanto a esta expresión es que nos dice que cuando el número de pasos es grande, la probabilidad de que el caminante regrese al origen tiende a uno. Esto significa que en una dimensión, el caminante SIEMPRE vuelve al origen.

5. Cálculo de P_l en dos dimensiones.

Lo único que cambia en este caso es la expresión para p_l. Como antes, nos olvidamos de constantes y buscamos el comportamiento cualitativo. De esta forma

$$\int_{l_0}^{l} p_l\,dl = \frac{2}{\pi}\int_{l_0}^{l} l^{-1}\,dl = B\log\frac{l}{l_0},$$

y la ecuación resultante es

$$-\log\frac{1-P_l}{1-P_0} = B\log\frac{l}{l_0} \Rightarrow 1-P_l = (1-P_0)(l_0/l)^B.$$

Nuevamente vemos que esta fórmula nos dice que con un número suficiente de pasos, $P_l \longrightarrow 1$ ya que B es una constante positiva y por tanto es seguro que el caminante regresa.

6. Cálculo de P_l en tres dimensiones.

Vamos a ver que este caso es diferente. Si planteamos la ecuación:

$$\int_{l_0}^{l} p_l\,dl = \frac{3}{\pi^{3/2}}\int_{l_0}^{l} l^{-3/2}\,dl = C(1/\sqrt{l}-1/\sqrt{l_0}),$$

de manera que la ecuación diferencial tiene la solución:

$$-\log\frac{1-P_l}{1-P_0} = C(1/\sqrt{l}-1/\sqrt{l_0}) \Rightarrow 1-P_l = (1-P_0)e^{-C(1/\sqrt{l}-1/\sqrt{l_0})}.$$

Ahora podemos observar que cuando $l\to\infty$, $1-P_l$ tiende a una constante, por lo tanto no es seguro que el caminante regrese a su origen.