



Universitat
de les Illes Balears

TREBALL FI DE GRAU

**GENERACIÓ NUMÈRICA DE TRAJECTÒRIES
ESTOCÀSTIQUES RARES**

Xisca Melià Vives

Grau de Física

Facultat de Ciències

Any Acadèmic 2022-23

GENERACIÓ NUMÈRICA DE TRAJECTÒRIES ESTOCÀSTIQUES RARES

Xisca Melià Vives

Treball de Fi de Grau

Facultat de Ciències

Universitat de les Illes Balears

Any Acadèmic 2022-23

Paraules clau del treball:

Procés estocàstic, trajectòries rares, backtracking, mètodes numèrics i probabilitat

Nom Tutor/Tutora del Treball : Raül Toral

Nom Tutor/Tutora (si escau)

S'autoritza la Universitat a incloure aquest treball en el Repositori Institucional per a la seva consulta en accés obert i difusió en línia, amb finalitats exclusivament acadèmiques i d'investigació

Autor		Tutor	
Sí	No	Sí	No
<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Resum

El coneixement de l'estadística d'esdeveniments estocàstics poc probables és de gran interès. Exemples d'esdeveniments rars són l'extinció d'espècies, crisis econòmiques o guerres, aquests, tenen grans impactes a la societat i al planeta. Existeixen models matemàtics per reproduir sistemes estocàstics, no obstant aquests mecanismes requereixen gran cost computacional per a la simulació d'esdeveniments poc freqüents.

En aquest treball es presentarà el mètode *backtracking*, un mètode numèric eficient per a la representació de trajectòries estocàstiques rars. Aquest reconstrueix el camí desitjat utilitzant pesos estadístics apropiats per cada pas de temps. Finalment, comprovarem que representa correctament el sistema objectiu realitzant comparatives entre distribucions de probabilitat extretes de les trajectòries obtingudes a partir dels dos mètodes.

Abstract

The knowledge of rare stochastic events statistics is relevant in many situations. Rare events such as species' extinction, economic crisis and wars among others, have large impact on society and Earth. There are numerical methods for sampling stochastic systems, however, reproducing rare events with those mechanisms requires too much computational cost.

The backtracking method is presented in this work for the sampling of rare trajectories. This numerical method traces the target process using appropriate statistical weights for each step. Finally, we prove that this method preserves the statistics of the target process comparing probability distributions coming from the set of the results from the two methods.

Resumen

El conocimiento de la estadística de eventos estocásticos poco probables es de gran interés. Eventos raros como, por ejemplo, la extinción de especies, crisis económicas o guerras, tienen grandes impactos a la sociedad i al planeta. Existen modelos matemáticos para reproducir sistemas estocásticos, sin embargo, estos mecanismos requieren gran coste computacional para reproducir trayectorias raras.

En este trabajo se presentará el método *backtracking*, un método numérico eficiente para la simulación de trayectorias estocásticas raras. Este reconstruye el camino deseado utilizando pesos estadísticos apropiados para cada paso de tiempo. Finalmente, comprobaremos que representa correctamente al sistema objetivo realizando comparativas entre distribuciones de probabilidad extraídas de las trayectorias obtenidas a partir de los dos métodos.

Contingut

Resum.....	5
1. Introducció.....	7
2. Moviment brownià	7
3. Procés estocàstic	10
3.1. Trajectòria estocàstica discreta (caminant aleatori)	11
3.2. Trajectòria estocàstica contínua (procés gaussià)	13
4. Renou blanc i procés de Wiener	14
5. Equacions estocàstiques.....	16
5.1. Mètodes numèrics per resoldre equacions diferencials estocàstiques.....	17
6. Esdeveniments rars i <i>backtracking</i>	20
6.1. Backtracking en discret.....	23
6.2. Backtracking en contínua	25
7. Comparació de distribucions de probabilitat.....	27
7.1. Probabilitat general de temps de primer pas.....	31
7.2. Probabilitat general en funció de la posició per un temps fixat	33
8. Conclusions	34
9. Annex	37
9.1. Revisió de conceptes de probabilitat	37
9.1.1. Valors mitjans i variància	37
9.1.2. Distribucions de probabilitats conegudes	37
9.1.3. Teorema de Bayes	38
9.2. Nombres aleatoris	38
9.3. Comparació de distribucions	39
10. Referències	41

1. Introducció

L'aleatorietat està present en moltes situacions de la vida quotidiana. Per modelitzar aquest tipus de situacions és necessari una descripció probabilística. En contraposició, els sistemes deterministes són aquells en els que el resultat de l'evolució és sempre l'esperat donades unes condicions inicials. És a dir, amb les mateixes condicions inicials el sistema respon sempre igual, el comportament d'aquest és previsible. La descripció probabilística no ens assegura un futur completament determinat per al sistema, sinó que ens proveeix un ventall de possibles esdeveniments cada un amb una probabilitat associada.

Un sistema complex està format per un gran nombre de components interrelacionats de manera que el seu comportament en conjunt no és evident a partir dels comportaments individuals, ja que, per aquests sistemes tenim una gran quantitat de variables a determinar, seria impossible tenir coneixement de totes elles per cada una de les partícules que el formen. Per tant, per sistemes complexos no és possible proveir una descripció determinista, hem de recórrer a descripcions probabilístiques. Un exemple de sistema complex és un fluid que conté partícules interactuant constantment entre elles. Un sistema similar és el d'una societat humana formada per individus que, com a l'exemple anterior, també estan en constant interacció. Els exemples de sistemes complexos poden anar des dels valors dels índexs borsaris fins a un conjunt de partícules en materials ferromagnètics als quals volem estudiar la fluctuació de l'espí.

Quan l'ocurrència d'un esdeveniment de caràcter probabilístic és molt baixa se l'anomena esdeveniment rar. Això és, hem d'esperar molt temps per a que un fet d'aquest tipus ocorri. És interessant estudiar els esdeveniments rars que tenen grans impactes a la societat o els que simplement tenen efectes captivadors. Exemples d'esdeveniments rars de tipus social son crisis econòmiques, guerres, canvis d'opinió a grups socials; naturals son erupcions de volcans, terratrèmols. Amb la implementació de mètodes numèrics directes per modelar sistemes aleatoris, hauríem d'esperar molt de temps per a l'ocurrència d'un esdeveniment rar. Per millorar l'estudi d'aquests esdeveniments hem de recórrer a mètodes més eficients.

2. Moviment brownià

Un exemple paradigmàtic de sistema aleatori és un sistema de partícules brownianes [2], [5]. El nom prové de les observacions del botànic escocès Robert Brown relatives al moviment de diminutes partícules immerses en un fluid que va observar mentre estudiava la suspensió de pol·len dins aigua. El moviment brownià s'observa a la trajectòria erràtica d'aquestes partícules sòlides que les considerem molt més grans que les que formen el fluid. Langevin al 1908, va proposar una equació per descriure el moviment de les partícules brownianes:

$$m\dot{\vec{v}} = -6\pi\mu a\vec{v} + \vec{\eta}, \quad (1)$$

definim $v(t) = \dot{x}(t)$ on $x(t)$ és la posició de la partícula, μ és la viscositat del medi i a és el radi de la partícula browniana. Si ens quedem només amb el terme de la dreta que acompanya a la velocitat l'equació esdevé determinista, prové de la segona llei de Newton $\vec{F} = m\vec{a}$. En aquest cas, només es tenen en compte les forces de fregament viscoses que, com és sabut, són proporcionals a la velocitat de la partícula. No obstant, s'ha de considerar el moviment erràtic, per això, s'afegeix el terme $\vec{\eta}$. Aquest, és una força de fluctuació de la trajectòria determinista de la partícula. Representa el moviment aleatori degut a les forces que actuen sobre la partícula provinents dels incessants i imprevisibles xocs amb les molècules del fluid. Langevin va establir que la mitjana de les fluctuacions fos zero i que no hi hagués correlació entre la posició de la partícula, $\vec{x}(t)$, i la fluctuació que experimenta:

$$\langle \vec{\eta}(t) \rangle = 0, \quad \langle \vec{x} \cdot \vec{\eta} \rangle = \langle \vec{x} \rangle \cdot \langle \vec{\eta} \rangle = 0. \quad (2)$$

Que la mitjana de les fluctuacions sigui nul·la, significa que les col·lisions no tenen una direcció preferida per empènyer a les partícules brownianes. La segona propietat significa que les fluctuacions són indiferents de la localització de la partícula, en totes les posicions de l'espai tenen les mateixes característiques.

Einstein al 1905, ja havia introduït una descripció matemàtica alternativa per partícules brownianes. A diferència de Langevin, no va basar el seu estudi en una sola partícula, sinó en el comportament d'un conjunt estadístic, la teoria d'Einstein tenia un caire probabilístic. Per desenvolupar la teoria va establir vàries hipòtesis. La primera és que diferents parts de la trajectòria separades un cert temps τ són independents. Va introduir una funció densitat de probabilitat $f(\vec{r})$ referent a la distància recorreguda en aquest temps τ , la qual compleix que $f(-\vec{r}) = f(\vec{r})$, és a dir, els xocs de les partícules sòlides amb les molècules de fluid no tenen una direcció preferent. Finalment, va definir una densitat de partícules, $n(\vec{x}, t)$, en funció de la posició i del temps.

Amb tot això, deduí que el comportament de la densitat de partícules brownianes es regeix per l'equació de difusió (3), que prediu com canviarà la concentració de partícules en funció del temps:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D\nabla^2 n, \quad (3)$$

on D és el coeficient de difusió i es defineix com: $D = \frac{1}{2\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \vec{r}^2 f(\vec{r}) d\vec{r}$. El valor del coeficient de difusió representa la facilitat en que les partícules sòlides, en aquest cas, es desplacen dins el fluid. Suposant que a l'estat inicial totes les N partícules estaven a l'origen, la solució d'aquesta equació esdevé:

$$n(\vec{x}, t) = \frac{N}{(4\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{\vec{x}^2}{4Dt}}. \quad (4)$$

Si dividim aquesta expressió pel nombre total de partícules, N , obtenim la funció densitat de probabilitat:

$$f(\vec{x}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{\vec{x}^2}{4Dt}}. \quad (5)$$

Aquesta distribució és gaussiana per cada una de les tres dimensions espacials. Amb aquesta expressió podem calcular la mitjana de la posició i la mitjana de la posició al quadrat:

$$\langle \vec{x}(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{x} f(\vec{x}, t) d\vec{x}, \quad (6)$$

$$\langle \vec{x}(t)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{x}^2 f(\vec{x}, t) d\vec{x}, \quad (7)$$

Per la trajectòria d'una partícula browniana en tres dimensions espacials, $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$, considerant que a temps inicial totes les partícules es situaven a un mateix punt de l'espai, es té:

$$\langle \vec{x}(t) \rangle = 0 \quad \text{i} \quad \langle \vec{x}(t)^2 \rangle = 6Dt. \quad (8)$$

Si consideréssim tan sols una dimensió espacial, la funció densitat de probabilitat esdevindria una distribució gaussiana de mitjana zero i variància, (A 4), $\sigma^2[x] = 2Dt$.

Relacionant les teories d'Einstein i Langevin, obtenim que la correlació entre dos temps del terme aleatori de l'equació (1) ve regida per una distribució gaussiana en funció del temps. L'amplada de la gaussiana serà de l'ordre, $t - t' \sim v^{-1}$. Llavors, degut a l'alta velocitat de les molècules del fluid, aquesta gaussiana s'aproxima a una delta de Dirac, reflectint que les fluctuacions no tenen correlacions en el temps $\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = cte\delta(t - t')$. Amb això i assumint que la mitjana de les fluctuacions és zero, el terme aleatori, $\eta(t)$, de l'equació de Langevin esdevé el que s'anomena *renou blanc* (Secció 4).

Podem relacionar aquest sistema de partícules brownianes amb un gas ideal. Si multipliquem a cada banda de l'equació de Langevin (1) per $\vec{x}(t)$ i utilitzem les propietats (2), obtenim una equació per la variància de les partícules brownianes:

$$\frac{m}{2} \frac{d^2 \langle \vec{x}^2 \rangle}{dt^2} = m \langle \vec{v}^2 \rangle - 3\pi\mu a \frac{d \langle \vec{x}^2 \rangle}{dt}. \quad (9)$$

Langevin suposà que en aquest punt s'ha arribat a l'equilibri tèrmic entre les partícules i el fluid dels voltants. Això implica que, per virtut del teorema d'equipartició, es pot igualar la mitjana de l'energia cinètica de les partícules brownianes amb l'equació de l'energia interna dels gasos ideals:

$$\frac{m}{2} \langle \vec{v}^2 \rangle = \frac{3kT}{2}, \quad (10)$$

on k és la constant de Boltzmann i T és la temperatura del fluid. Si resollem l'equació (9) obtenim un terme lineal en t i un altre exponencial decreixent en t . Llavors, si deixem al sistema relaxar més enllà del temps de transició, obtenim $\langle \vec{x}^2 \rangle = \frac{kT}{\pi\mu a} t$. Finalment, comparant amb l'equació (8), arribem a una relació entre magnituds macroscòpiques i el coeficient de difusió:

$$D = \frac{kT}{6\pi\mu a}. \quad (11)$$

En la interpretació de Langevin, D reflecteix la magnitud del renou. La força aleatòria de Langevin, així com la trajectòria en conjunt que dibuixa una partícula dins el fluid, són exemples de processos estocàstics, que ara passem a definir i estudiar.

3. Procés estocàstic

Un experiment que es pot descriure probabilísticament té associada, com a mínim, una variable aleatòria. Els valors possibles que pot prendre la variable aleatòria representen els diferents resultats de l'experiment. Encara que, els esdeveniments resultants no siguin nombres, és usual atribuir un valor numèric real a cada un d'ells, així donam lloc a una variable aleatòria. Un exemple típic és tirar un dau dues vegades, els resultats possibles són $\{(1, 1), (1, 2), \dots, (6, 5), (6, 6)\}$, en total obtenim 21 escenaris, per tant, la variable aleatòria prendria 21 valors possibles. Atorgarem la notació \hat{x} a les variables aleatòries, llavors, per presentar els valors possibles de l'experiment, per exemple, de tirar una moneda ho farem com $\hat{x} = \{\text{cara}, \text{creu}\}$ o els resultats de mesurar l'espí d'un electró com $\hat{x} = \{-\hbar/2, \hbar/2\}$.

A cada variable aleatòria li assignem una distribució de probabilitats pels diferents valors permesos de la variable aleatòria. Per exemple, pel cas de tirar una moneda, la funció de probabilitats atorgaria una probabilitat d' $1/2$ a cada un dels dos possibles esdeveniments, és a dir, si repetíssim un gran nombre de vegades l'experiment obtindríem un 50 % cara i un 50 % de les vegades creu.

Definim el concepte de procés estocàstic, $\hat{x}(t)$, com una successió de variables aleatòries dependents, generalment, del temps, t . Cada una de les variables aleatòries del procés té la seva pròpia distribució de probabilitats i poden, o no, estar correlacionades entre sí. Aquest tipus de processos permeten tractar sistemes dinàmics que contenen certa aleatorietat, la resposta del sistema dependrà de tot el conjunt de probabilitats a cada pas. Aleshores, si proposem una condició inicial pel sistema, no tenim coneixement absolut de on arribarà la trajectòria, tindrem diferents punts finals per cada una de les repeticions que duguem a terme de l'experiment. Per altre banda, els processos deterministes són tals que per cada una de les repeticions de l'experiment amb les mateixes condicions inicials s'obté el mateix resultat.

A priori, no sabem quin resultat obtindrem per un procés estocàstic, però la teoria de probabilitats ens permetrà una intuïció de la recurrència dels esdeveniments resultants de l'experiment.

Un procés estocàstic estarà completament caracteritzat si la funció de densitat de probabilitat pel conjunt de variables aleatòries $\{\hat{x}(t_1), \hat{x}(t_2), \dots, \hat{x}(t_m)\}$ és coneguda, m és el nombre de passes temporals del procés. La funció densitat de probabilitat és tal que ens indica la probabilitat d'un succés a cada pas de temps, $f(x_1, \dots, x_m; t_1, \dots, t_m)$.

Es defineix procés *Markov* al procés que posseeix la propietat de que la probabilitat d'un esdeveniment futur no depèn de quina manera s'ha arribat a l'estat actual, sinó només d'aquest estat. Llavors, la funció de densitat de probabilitat d'un procés estocàstic markovià compleix que la probabilitat d'un estat futur x_m només depèn de l'actual x_{m-1} . Anem a caracteritzar aquesta propietat en llenguatge matemàtic. Tenint en compte el teorema de Bayes, la densitat de probabilitat del pas consecutiu, m , condicionada als estats visitats anteriorment, és:

$$f(x_m; t_m | x_1, \dots, x_{m-1}; t_1, \dots, t_{m-1}) \equiv \frac{f(x_1, \dots, x_m; t_1, \dots, t_m)}{f(x_1, \dots, x_{m-1}; t_1, \dots, t_{m-1})}, \quad (12)$$

on $t_1 < t_2 < \dots < t_m$. La densitat de probabilitat condicionada sols a l'estat actual, x_{m-1} , és:

$$f(x_m; t_m | x_{m-1}; t_{m-1}) \equiv \frac{f(x_{m-1}, x_m; t_{m-1}, t_m)}{f(x_{m-1}; t_{m-1})}. \quad (13)$$

Llavors, la propietat markoviana estableix que les funcions (12) i (13) han de ser iguals:

$$f(x_m; t_m | x_1, \dots, x_{m-1}; t_1, \dots, t_{m-1}) = f(x_m; t_m | x_{m-1}; t_{m-1}). \quad (14)$$

Finalment, podem escriure la funció densitat de probabilitat pel succés a temps final m com una successió de funcions de densitats de probabilitats condicionals de cada pas:

$$f(x_1, \dots, x_m; t_1, \dots, t_m) = f(x_m; t_m | x_{m-1}; t_{m-1}) \cdot f(x_{m-1}; t_{m-1} | x_{m-2}; t_{m-2}) \dots f(x_2; t_2 | x_1; t_1) \cdot f(x_1; t_1). \quad (15)$$

Un cas particular del procés Markov és quan totes les variables aleatòries a diferents temps del procés són independents entre sí. En aquest cas, la funció de probabilitat total l'escriuim com:

$$f(x_1, \dots, x_m; t_1, \dots, t_m) = f(x_1; t_1) f(x_2; t_2) \dots f(x_m; t_m) \quad (16)$$

3.1. Trajectòria estocàstica discreta (caminant aleatori)

Un exemple simple de procés estocàstic markovià és el caminant aleatori [1]. Aquest dibuixa trajectòries discretes en una seqüència temporal també discreta. El caminant aleatori, en una dimensió espacial, té dues opcions: des del punt on està pot anar a la dreta amb probabilitat p o a l'esquerra amb probabilitat $1 - p$. Amb un desplaçament espacial de 1, aquest procés en funció del temps es construeix com $\hat{x}(t + \Delta t) = \hat{x}(t) \pm 1$, on sumar significa anar a la dreta i restar, a l'esquerra. Les trajectòries resultants seran escalonades, totes partiran del mateix punt inicial però acabaran en punts molt diferents. Com és un procés markovià, la probabilitat d'obtenir un valor concret x_n al temps n només depèn de la posició x_{n-1} al temps $n - 1$, i no dels estats anteriors a aquell punt.

La posició en funció del temps $x(t)$, tenint en compte que el temps són les passes realitzades, es pot calcular com:

$$x(t) = x_0 + r - l, \quad (17)$$

on x_0 és la posició inicial a $t = 0$, r és el nombre de passes a la dreta i l és el nombre de passes a l'esquerra, situats sobre l'eix espacial. Les passes són de longitud 1.

Anem a generalitzar el problema suposant que les passes en l'eix x tenen longitud a i que les de la dimensió temporal són de longitud h . El nombre de passes negatives és igual al nombre de passes totals, n , menys les positives, r , de manera que descriurem la posició a un temps determinat com:

$$x(t = nh) = x_0 + a(r - l) = x_0 + a(r - (n - r)) = x_0 + (2r - n)a. \quad (18)$$

El caminant aleatori és equivalent a l'experiment de tirar una moneda n vegades, també sols obté dos resultats possibles. Si p és la probabilitat que surti cara en un llançament de la moneda, la probabilitat de que hagin sortit r cares i $n - r$ creus ve descrita per la distribució binomial:

$$P(r, n) = \binom{n}{r} p^r (1 - p)^{n-r}, \quad (19)$$

on $p = 1/2$. Fent l'analogia amb el caminant aleatori, la probabilitat d'estar a una certa posició $x(t)$ després d'un temps $t = nh$ és:

$$P(x, t) = \binom{n}{\frac{x - x_0 + an}{2a}} p^{\frac{x - x_0 + an}{2a}} (1 - p)^{\frac{(2-n)a - (x - x_0)}{2a}}. \quad (20)$$

Es pot calcular analíticament la mitjana i la variància que seguiran el conjunt de trajectòries resultants de l'experiment del caminant aleatori, suposant que $a = 1$:

$$\langle x(t) \rangle = 2\langle r \rangle - n + x_0 = (2p - 1)n + x_0, \quad (21)$$

$$\sigma^2[x(t)] = 4pn(1 - p). \quad (22)$$

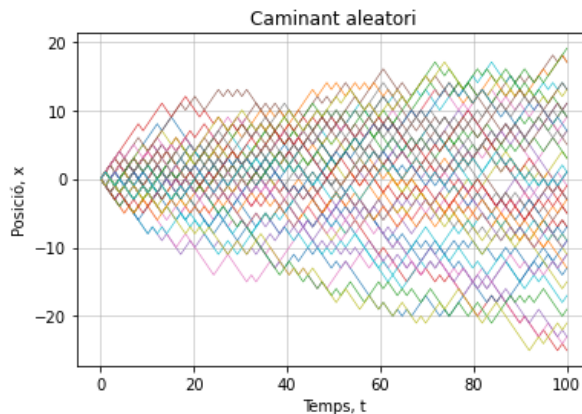


Figura 1: Exemple de 50 trajectòries del caminant aleatori. $x(t)$ segueix una distribució binomial amb $p = 0,5$. Els eixos estan equiespaiats 1.

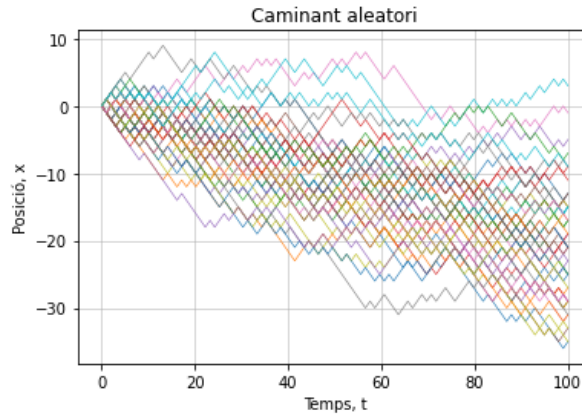


Figura 2: Exemple de 50 trajectòries del caminant aleatori. $x(t)$ segueix una distribució binomial amb $p = 0,4$. Els eixos estan equiespaiats 1.

Trajectòries representatives amb $p = 0,5$ i $p = 0,4$ es presenten a les figures 1 i 2, respectivament. Després d'un temps $t = 100$, la mitjana i desviació teòriques corresponents a la figura 1 són $\langle x(t) \rangle = 0$ i $\sigma[x(t)] = 10$, mentre que en el cas de la figura 2, són $\langle x(t) \rangle = -20$ i $\sigma[x(t)] = 9,8$. Observem aquestes característiques en les figures representades. A la figura 2 les trajectòries tendeixen a baixar cap a valors de x negatius, ja que és més probable que el caminant es mogui cap a l'esquerra ($1 - p = 0,6$) que cap a la dreta ($p = 0,4$). Quan les probabilitats d'anar cap a la dreta i a l'esquerra són iguals, el caminant no tindrà direcció preferida (figura 1).

3.2. Trajectòria estocàstica contínua (procés gaussià)

Un procés gaussià és un tipus particular de procés estocàstic on, a diferència del caminant aleatori, les variables estan distribuïdes de forma contínua. Aquest procés queda totalment caracteritzat si donam el valor mig i la funció de correlació de la posició.

Un exemple d'aquest tipus és el sistema de partícules brownianes que, com hem vist anteriorment, el seu moviment en una dimensió ve descrit per una funció de probabilitat gaussiana (5) de mitjana zero i variància $2Dt$.

Si apliquem el límit continu al procés del caminant aleatori de variables discretes s'obté, també, un procés estocàstic, però ara, governat per una distribució gaussiana de mitjana $(2p - 1)an$ i variància $4np(1 - p)a^2$ (Annex 8.1.2). Si imposem que el pas d'integració i l'interespaiat en l'eix x és 1, $a = h = 1$, i que la probabilitat d'anar a la dreta és igual que la d'anar a l'esquerra $p = 1/2$ obtenim una gaussiana de mitjana 0 i variància t .

4. Renou blanc i procés de Wiener

Estudiem amb més detall el renou blanc gaussià de l'equació de Langevin que descriu el moviment brownià. Per fer això, tornem a l'exemple del caminant aleatori que hem introduït anteriorment. Quan n és molt gran, $n \gg 1$, la distribució binomial (20) es pot aproximar per una distribució Gaussiana de mitjana $(2p - 1)a^t/h$ i variància $4tp(1 - p)a^2/h$ (Annex 8.1.2). Per simplificar posem que $x_0 = 0$, la probabilitat de que la posició després de n passes sigui menor o igual a $x = (r - l)a = (2r - n)a$ s'escriu:

$$P(x(t) \leq (2r - n)a) = \frac{1}{2} + \operatorname{erf}\left(\frac{2r - n}{\sqrt{n}}\right), \quad (23)$$

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-y^2} dy,$$

Si apliquem el límit continu ($n \rightarrow \infty, h \rightarrow 0, (2r - n) \rightarrow \infty, a \rightarrow 0$) al procés estocàstic del caminant aleatori obtenim l'anomenat *procés de Wiener*, $W(t)$. Notar que les variables $t = nh$, $x = (2r - n)a$, $2D = a^2/h$ prenen valors finits. A aquest límit amb $p = 1/2$ podem escriure la probabilitat com:

$$P(W(t) \leq x) = \frac{1}{2} + \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2Dt}}\right), \quad (24)$$

que correspon a la funció distribució de probabilitats d'una variable gaussiana de mitjana zero i variància $2Dt$. Com és sabut, la corresponent funció densitat de probabilitat és de la forma:

$$f(x; t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}, \quad (25)$$

que és equivalent a la solució de l'equació de difusió (3) en una dimensió espacial vista abans. Això és perquè la dinàmica dels processos de Wiener ve descrita per l'equació de Fokker-Plank simplificada:

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2}. \quad (26)$$

Aquesta forma simplificada corresponent al cas continu del caminant aleatori és equivalent a l'equació de difusió d'Einstein en una dimensió per partícules brownianes.

A la figura 3 podem observar un exemple de procés de Wiener creat a partir del caminant aleatori amb un temps final llarg en comparació amb el pas d'integració.

El procés gaussià de Wiener adopta el caràcter markovià de la trajectòria del caminant aleatori, això implica que pot estar caracteritzat donant el valor mitjà i la correlació a dos temps:

$$\langle W(t) \rangle = 0, \quad (27)$$

$$\langle W(t_1)W(t_2) \rangle = 2D \min(t_1, t_2). \quad (28)$$

La primera derivada del procés de Wiener no està ben definida ja que és una successió de funcions escalons com en el caminant aleatori.

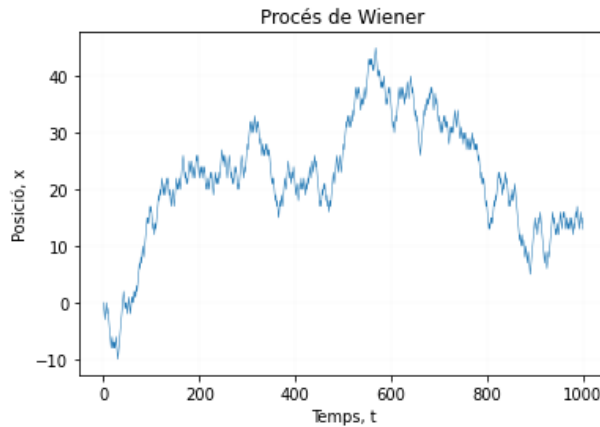


Figura 3: Exemple de procés de Wiener generat a partir del caminant aleatori amb un temps final $T = 1000$ i un pas d'integració $h = 1$.

El procés gaussià de Wiener adopta el caràcter markovià de la trajectòria del caminant aleatori, això implica que pot estar caracteritzat donant el valor mitjà i la correlació a dos temps:

$$\langle W(t) \rangle = 0, \quad (27)$$

$$\langle W(t_1)W(t_2) \rangle = 2D \min(t_1, t_2). \quad (28)$$

La primera derivada del procés de Wiener no està ben definida ja que és una successió de funcions escalons com en el caminant aleatori.

Definim *renou blanc*, $\xi(t)$, com la derivada del procés de Wiener, consegüentment, dependrà de com estigui construïda aquesta derivada. Primerament, exposarem un procés estocàstic nou, w_ϵ , a partir de la variable discreta del caminant aleatori:

$$w_\epsilon(t) = \frac{x(t + \epsilon) - x(t)}{\epsilon}. \quad (29)$$

Al límit continu, tendeix a ser un procés gaussià ja que és una seqüència de processos gaussians, llavors esdevé completament caracteritzat si donam la mitjana i les correlacions:

$$\langle w_\epsilon(t) \rangle = 0, \quad (30)$$

$$\langle w_\epsilon(t_1)w_\epsilon(t_2) \rangle = \begin{cases} 2D/\epsilon \left(1 - \frac{|t_1 - t_2|}{|\epsilon|}\right) & \text{si } -\epsilon \leq t_1 - t_2 \leq \epsilon \\ 0 & \text{si } |t_1 - t_2| > \epsilon \end{cases}. \quad (31)$$

Si apliquem el límit $\epsilon \rightarrow 0$, $w(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} w_\epsilon(t)$, el procés $w(t)$ esdevé la derivada del procés del caminant aleatori i la funció de correlació es converteix en una delta de Dirac:

$$\langle w_\epsilon(t_1)w_\epsilon(t_2) \rangle = 2D\delta(t_1 - t_2). \quad (32)$$

Després, podem escriure la derivada del procés de Wiener com $w(t) = \sqrt{2D}\xi(t)$ on $\xi(t)$ és un procés markovià definit per:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad (33)$$

$$\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = \delta(t_1 - t_2). \quad (34)$$

La variable aleatòria $\xi(t)$ es coneix com renou blanc i és la derivada del procés de Wiener si imposem $2D = 1$:

$$\xi(t) = \frac{dW(t)}{dt}. \quad (35)$$

El renou blanc es pot entendre com una sèrie de polsos instantanis que són independents entre sí, no tenen correlacions en el temps. El nom de renou blanc prové de que la densitat espectral de potència, que es calcula com la transformada de Fourier de la funció de correlació, és plana, pren el mateix valor per a totes les freqüències.

El renou de l'equació de Langevin (1) és renou blanc ja que comparteix aquestes característiques. En aquesta equació representa les pertorbacions actuant al sistema en direccions totalment aleatòries, no hi ha una direcció preferida, per això la mitjana de totes elles és zero, i no té correlacions en el temps.

5. Equacions estocàstiques

Quan afegim un terme aleatori a una equació diferencial determinista, esdevé una equació diferencial estocàstica, de manera que les solucions d'aquestes resulten trajectòries estocàstiques. Aquestes equacions poden dependre del terme aleatori de diferents maneres. Ens centrarem en el cas on els factors aleatoris estan dins la mateixa dinàmica del problema, com en l'equació de Langevin. Molts sistemes d'interès, com un oscil·lador harmònic en un fluid o renou tèrmic en una resistència elèctrica, són descrits per l'equació generalitzada de Langevin (36), on la força fluctuant no és una funció en el sentit habitual matemàtic i la seva derivada no està ben definida.

$$\frac{dx(t)}{dt} = q(x(t)) + g(x(t))\xi(t). \quad (36)$$

El terme afegit respecte l'equació diferencial determinista, $\xi(t)$, conté tota l'aleatorietat de l'equació. Aquest terme modifica la solució respecte a la que obtindríem en el sistema determinista. La variable dependent x d'aquesta equació esdevindrà aleatòria, degut a que ho és el renou, llavors, haurem de recórrer a una descripció probabilística del problema. La dinàmica d'aquesta equació vendrà regida per l'equació diferencial de Fokker-Plank (37) que predirà com canviarà la probabilitat en funció del temps. La seva solució ens donarà la funció de distribució de probabilitats pel sistema:

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [q(x)f(x, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left[g(x) \frac{\partial}{\partial x} [g(x)f(x, t)] \right]. \quad (37)$$

Hi ha casos en que la funció $g(x(t))$ és constant, així el renou es diu *additiu*. En l'equació de Langevin per partícules brownianes (1), el renou és additiu i $q(x) = 0$. En aquest cas, l'equació de Fokker-Plank esdevé l'equació de difusió d'Einstein per una sola partícula.

Si tenim coneixement d'algunes propietats estadístiques com la mitjana o les correlacions del procés estocàstic independent, $\xi(t)$, tenim una idea de com serà la família de trajectòries, $x(t)$, que obtindrem com a solucions. Amb aquestes propietats podem trobar les de la trajectòria completa i, així, realitzar un estudi estadístic sobre un sistema governat per equacions estocàstiques.

5.1. Mètodes numèrics per resoldre equacions diferencials estocàstiques

Són coneguts mètodes com el d'Euler o Rungge-Kutta per integrar numèricament equacions diferencials deterministes. Quan afegim un terme aleatori, $\xi(t)$, a aquestes equacions, aquests mètodes ja no serveixen, ja que estan preparats per a que la solució de l'equació sigui única. Aleshores, hem de recórrer a altres mètodes més sofisticats [1], [3].

Suposem una equació estocàstica simple com podria ésser l'equació de Langevin on el terme aleatori es defineix com renou blanc gaussià, depenent sols de la variable independent, t :

$$\dot{x}(t) = q(t) + g(t)\xi(t). \quad (38)$$

Hi haurà infinites solucions d'aquesta equació per unes úniques condicions inicials a $t = 0$. Cada possible solució s'anirà construint amb la família de valors aleatoris que esdevinguin per $\xi(t)$. El conjunt de totes les possibles solucions és un procés estocàstic. Cada vegada que resolguem aquesta equació extraurem una resposta diferent, no obstant, hi haurà trajectòries més probables que d'altres. Les propietats estadístiques de $x(t)$ dependran de les de $\xi(t)$, recordem $\langle \xi \rangle = 0$ i $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t')$.

L'objectiu serà resoldre equacions d'aquest tipus numèricament. Cada vegada que resolguem aquesta equació obtindrem conjunts diferents de solucions però amb la mateixa estadística. Aquest resultat ens abastirà per extreure informació descriptiva sobre la dinàmica aleatòria regida per aquesta equació.

Per obtenir una funció per $x(t)$ de l'equació anterior podem integrar a cada costat de la igualtat:

$$x(t) = x_0 + \int_0^t q(t')dt' + \int_0^t g(t')\xi(t')dt', \quad (39)$$

on x_0 és la constant d'integració. Podem escriure les integrals com:

$$x(t) = x_0 + Q(t) + W(t). \quad (40)$$

Com hem definit el renou com un procés gaussià, podem identificar $W(t)$ com un procés de Wiener, tal com hem establert anteriorment. Per resoldre equacions numèricament, necessitem que aquestes estiguin discretitzades:

$$x(t + \Delta t) = x_t + \int_t^{t+\Delta t} q(t')dt' + \int_t^{t+\Delta t} g(t')\xi(t')dt'. \quad (41)$$

Un altre cop substituïm les integrals per variables, al pas d'integració l'anomenarem h per simplificar notació. Suposarem que el renou és additiu, $g(t) = cte = g$:

$$q_h(t) \equiv \int_t^{t+h} q(t')dt', \quad (42)$$

$$w_h(t) \equiv g \int_t^{t+h} \xi(t')dt' = W(t+h) - W(t). \quad (43)$$

La contribució determinista, $q_h(t)$, es pot aproximar com $q_h(t) = hq(t)$ per valors de h molt petits, tal com succeeix en el cas continu. La funció $w_h(t)$ serà la diferència de processos de Wiener a dos temps diferents, per això segueix essent un procés gaussià i pot ser completament caracteritzada pels corresponents valors de la mitjana i correlació:

$$\langle w_h(t) \rangle = g \int_t^{t+h} \langle \xi(t') \rangle dt' = 0, \quad (44)$$

$$\begin{aligned} \langle w_h(t_1)w_h(t_2) \rangle &= g^2 \int_{t_2}^{t_2+h} \int_{t_1}^{t_1+h} \langle \xi(t'_1)\xi(t'_2) \rangle dt'_1 dt'_2 \\ &= g^2 \int_{t_2}^{t_2+h} \int_{t_1}^{t_1+h} \delta(t'_1 - t'_2) dt'_1 dt'_2. \end{aligned} \quad (45)$$

Per avaluar aquesta integral hem de fer ús de la propietat de la funció delta de Dirac:

$$\int_{x=a}^{x=b} \delta(x - x_0)f(x) dx = \begin{cases} f(x_0) & \text{si } a \leq x_0 \leq b \\ 0 & \text{si } x_0 < a \text{ o } x_0 > b \end{cases} \quad (46)$$

En el nostre cas $f(x) = 1$ i podem triar quina de les dues variables de la nostra integral serà dx , l'altre serà x_0 . Si integrem la delta de Dirac sobre la variable dt'_1 , apareix una restricció sobre la variable t'_2 pel fet de que l'integral no sigui nul·la: $t_1 < t'_2 < t_1 + h$.

Tenim $\int_{t_1}^{t_1+h} \delta(t'_1 - t'_2) dt'_1 = 1$, llavors, ens queda operar $\int_{t'_2=t_2}^{t'_2=t_1+h} dt'_2 = t_1 + h - t_2$.

Els límits d'integració són tals que donen lloc al solapament entre integrals i, així, obtenir un valor no nul per a les correlacions:

$$\langle w_h(t_i)w_h(t_j) \rangle = g^2 h \delta_{i,j}, \quad t_i = ih, \quad t_j = jh \quad i, j \text{ són nombres enters.} \quad (47)$$

En particular, si calculem la variància, és a dir, $t_1 = t_2 \equiv t$ obtenim: $\langle w_h(t)^2 \rangle = g^2 h$.

En definitiva, partíem de la següent correspondència per la variable $x(t)$:

$$x(t+h) = x_t + q_h(t) + w_h(t), \quad (48)$$

i hem deduït que $w_h(t)$ és una variable gaussiana de mitjana $\langle w_h(t) \rangle = 0$ i variància $\sigma^2[w_h] = g^2 h$. Ens interessa que la variable aleatòria no ens depengui del pas d'integració, així doncs, fem el canvi de variables $w_h(t_i) = g\sqrt{h}u_{t_i}$ on $\langle u_{t_i} \rangle = 0$ i $\langle u_{t_i}u_{t_j} \rangle = \delta_{t_i,t_j}$. El conjunt de valors de $\{u_{t_i}\}$ són nombres aleatoris gaussians independents entre ells. A l'apartat 9.2 de l'apèndix expliquem un mètode per a la generació d'aquests nombres aleatoris.

Finalment, la rutina numèrica que hem d'iterar per resoldre una equació diferencial estocàstica és:

$$x(t_i + h) = x_{t_i} + hq(t_i) + g\sqrt{h}u_{t_i}, \quad (49)$$

es considera com una generalització del mètode d'Euler, ja que si eliminem el terme aleatori resulta la discretització del mètode d'Euler per solucionar equacions diferencials deterministes. Com és habitual, per començar a iterar necessitem unes condicions inicials $x(t_0) = x_0$.

Apliquem aquesta teoria a un exemple d'equació diferencial estocàstica de tipus Langevin (38) en una dimensió amb $q(t) = 0$ i $g = \sqrt{2D}$:

$$\frac{dx(t)}{dt} = \sqrt{2D} \hat{\xi}(t). \quad (50)$$

La variable aleatòria és renou blanc amb les respectives propietats $\langle \hat{\xi}(t) \rangle = 0$ i $\langle \hat{\xi}(t)\hat{\xi}(t') \rangle = \delta(t - t')$. Aplicant la discretització anterior (49) a aquesta equació es té:

$$x_{t_i+h} = x_{t_i} + \sqrt{2Dh}u_{t_i}, \quad (51)$$

els valors de u_{t_i} seran nombres aleatoris extrets d'una distribució gaussiana de mitjana 0 i variància 1 (apèndix 9.2).

Les figures 4 i 5 representen una possible família de solucions per a l'equació (50), és a dir, possibles trajectòries realitzades per partícules brownianes en una dimensió espacial partint totes del punt $x_0 = 0$. Si apliquem l'equació de Fokker-Plank (37) a l'equació (50), obtenim la distribució de probabilitats pel conjunt de trajectòries del moviment brownià en una dimensió espacial descrit per l'equació (50):

$$f(x; t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}. \quad (52)$$

Com que hem suposat que totes les partícules parteixen del mateix punt inicial, hem demostrat en l'apartat 2, que per partícules brownianes en una dimensió es té $\langle x(t) \rangle = 0$ i $\langle x(t)^2 \rangle = 2Dt$. Recordem que $f(x; t)$ és equivalent a l'obtinguda al límit continu del caminant aleatori, és a dir, el procés de Wiener. Llavors, l'estructura de les trajectòries del moviment brownià s'assemblen a les del caminant aleatori. Aquesta distribució té en compte la dispersió de les trajectòries per un valor de t fixe amb el paràmetre D . Observem en la figura 5, quan $D = 20$, que les trajectòries estan més dispersades que en la figura 4, quan $D = 1$.

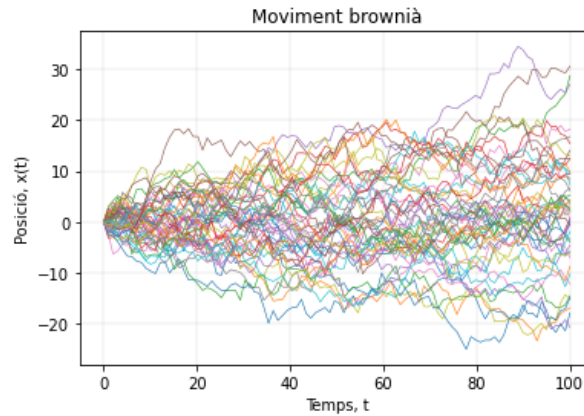


Figura 4: 50 trajectòries de moviment brownià en una dimensió espacial amb $D = 1$.

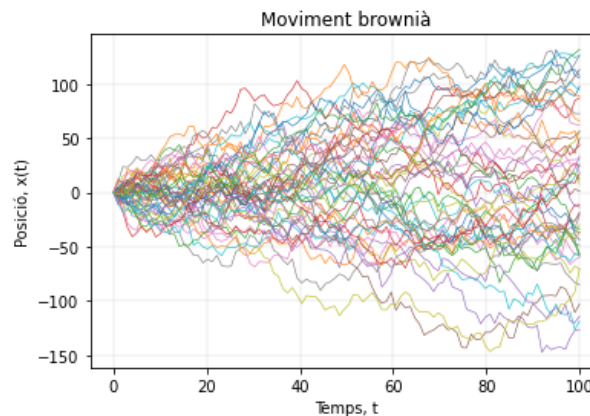


Figura 5: 50 trajectòries de moviment brownià en una dimensió espacial amb $D = 20$.

6. Esdeveniments rars i *backtracking*

La probabilitat de que en resoldre una equació diferencial estocàstica obtinguem un esdeveniment rar és molt baixa. Fent ús del mètode numèric de resolució d'equacions explicat anteriorment (49) hauríem d'esperar un temps molt llarg per a que ens apareixes una trajectòria rara. No obstant, és de gran interès conèixer aquests tipus d'esdeveniments, per això implementarem un mètode numèric alternatiu per poder generar trajectòries rares més eficientment i, així, quantificar la seva estadística. Més endavant, demostrarem que aquest mètode no altera les característiques i propietats estadístiques del sistema inicial.

Per exemple, en l'experiment de caminant aleatori amb igual probabilitat d'anar a la dreta que a l'esquerra i començant a $x_0 = 0$, s'espera que després d'un temps $t = 100$, la posició final no s'allunyi gaire d'aquest punt inicial. En aquest cas, una trajectòria rara és, per exemple, arribar a $x(t = 100) = 80$ o igual de poc probable és arribar, amb el mateix temps, a

$x = -80$. El temps es pot entendre com les passes realitzades, el que és el mateix, iteracions per construir una trajectòria. Per observar un esdeveniment rar d'aquest tipus hauríem d'executar moltes trajectòries del caminant aleatori. En definitiva, el cost computacional per representar una trajectòria rara amb el mètode directe de caminant aleatori és massa gran com per a que ens sigui funcional analitzar-les, hem de recórrer a altres mètodes.

L'equació diferencial (49) depèn del coeficient de difusió, aquest ens dona una idea de quant dispersades estaran les trajectòries a un temps fixat. Això implica que si una trajectòria, a un temps fixat, s'allunya molt del que estableix el coeficient de difusió, la considerarem poc probable. La probabilitat de succés (52) disminueix a mesura que es allunyem de l'establert pel coeficient de difusió.

El mètode *backtracking* [2][5], (mètode de retrocés) és una tècnica recent per modelar trajectòries rares en absència de temps computacionals realistes. La idea d'aquest mètode és anar enrere en el temps, elabora la trajectòria desitjada des del punt final a l'inicial, punt a punt. Aquest mètode treballa amb ponts estocàstics que permeten unir punts finals i inicials per construcció. El pont estocàstic està construït a mida, cada canvi d'estat ve definit per una distribució de probabilitats específica per aquell punt. Demostrarem que aplicant aquest mètode conservem l'estadística del procés, ja que assignem un pes estadístic convenient a cada trajectòria possible.

Cada vegada que generem una trajectòria amb aquest mètode, encara que els punts inicial i final es conservin, serà diferent a les altres generades, tal com passa quan resoldrem l'equació diferencial estocàstica o elaborem trajectòries amb el caminant aleatori. Llavors, el conjunt de trajectòries obtingudes amb aquest mètode no són interdependents.

Definim camí a la seqüència ordenada temporalment d'estats visitats a una mateixa trajectòria, $\mathbb{T} = (x_0, x_1, \dots, x_T)$ on T és el nombre total d'estats visitats d'aquell camí, o el que és el mateix, el nombre de passes totals realitzades. Un estat pot ser visitat múltiples vegades per un mateix camí. Per simulacions directes, és a dir, construint la trajectòria endavant en el temps, definim la probabilitat condicional d'estar a un estat x_{t+1} a un temps $t + 1$, sabent que aquell camí ha estat a la posició x_t a un temps anterior, t , com:

$$w_{x_t \rightarrow x_{t+1}}^t = P(x_{t+1} | x_t). \quad (53)$$

En l'exemple del caminant aleatori aquesta probabilitat serà p per anar a la dreta i $p - 1$ per anar a l'esquerra, considerant que la longitud de la passa és de una unitat:

$$w_{x \rightarrow x+1}^t = p \quad \text{i} \quad w_{x \rightarrow x-1}^t = 1 - p. \quad (54)$$

La probabilitat d'observar un camí particular \mathbb{T} en el procés de simulacions directes vendrà donada per:

$$\mathbb{P}(\mathbb{T}) = P_0(x) w_{x_0 \rightarrow x_1}^0 w_{x_1 \rightarrow x_2}^1 \dots w_{x_{T-1} \rightarrow x_T}^{T-1}, \quad (55)$$

on $P_0(x)$ és la distribució de probabilitat pel punt x_0 , podem triar lliurement $P_0(x) = \delta_{x, x_0}$, així tracem les trajectòries desitjades. El conjunt de probabilitats corresponents a cada un dels camins descriu totalment el procés. A partir d'aquesta descripció, podem trobar la probabilitat

marginal de que el sistema estigui a una certa posició x a un temps t , independentment del camí:

$$P(x, t) = \sum_{\mathbb{T}} \mathcal{P}(\mathbb{T}) \delta_{x, x_t}, \quad (56)$$

on δ_{x, x_t} és la delta de Kronecker. Com veiem no depèn del camí, només de la posició i el temps en que vulguem conèixer la probabilitat.

Seguidament aplicarem aquestes mateixes definicions al procés de retrocés. Això és, definim la probabilitat condicional de que el procés objectiu passi per un estat x_t a un temps t sabent que visità l'estat x_{t+1} a un temps $t + 1$:

$$\tilde{w}_{x_t \leftarrow x_{t+1}}^t = P(x_t | x_{t+1}). \quad (57)$$

Igualment com abans, la probabilitat d'observar un mateix camí \mathbb{T} al procés de retrocés associat és:

$$\tilde{\mathcal{P}}(\mathbb{T}) = \tilde{P}_T(x) \tilde{w}_{x_{T-1} \leftarrow x_T}^{T-1} \tilde{w}_{x_{T-2} \leftarrow x_{T-1}}^{T-2} \dots \tilde{w}_{x_0 \leftarrow x_1}^0, \quad (58)$$

on $\tilde{P}_T(x)$ és la distribució de probabilitat pel punt final. Aquesta distribució ha de tenir en compte que l'estat x_T sigui possible en les trajectòries directes, ha de complir $\tilde{P}_T(x) \neq 0$ sí i només sí $P(x, T) \neq 0$. Per exemple, en el caminant aleatori, dos estats consecutius no poden ser el mateix, ja que a cada pas següent sempre augmenta o disminueix el valor de la posició. O també, el nombre de passes totals donades pel caminant ha de permetre arribar a l'estat final, $|x_t - x_0| \leq T$, suposant que l'interespaiat temporal i espacial és 1.

Podem obtenir una relació entre les probabilitats de transició del procés de retrocés i les del procés objectiu, per virtut del teorema de Bayes (A 8):

$$\tilde{w}_{x_t \leftarrow x_{t+1}}^t = w_{x_t \rightarrow x_{t+1}}^t \frac{P(x, t)}{P(x_{t+1}, t + 1)}. \quad (59)$$

Fitxem-nos que la probabilitat de transició pertanyent al procés directe no depèn del temps, en canvi, les del procés de retrocés, en general, sí que hi dependran. Les probabilitats $P(x, t)$ i $P(x_{t+1}, t + 1)$ no depenen del punt final de la trajectòria, x_T , fet que millora l'eficiència del mètode. Aquestes prendran forma d'alguna distribució de probabilitats dependent del procés en qüestió.

Finalment, a partir de les expressions que hem plantejat, es dedueix la següent relació:

$$\mathcal{P}(\mathbb{T}) = \tilde{\mathcal{P}}(\mathbb{T}) \frac{P(x_T, T)}{\tilde{P}_T(x_T)}. \quad (60)$$

Aquesta ens ofereix les probabilitats de succés de cada camí en el mètode directe en funció de les del mètode de retrocés.

Ens falta definir com serà la densitat de probabilitat del punt final en el mètode de retrocés. Si triem $\tilde{P}_T(x) = P(x, T)$, considerant que l'estat final rarament succeirà directament, estem imposant que l'esdeveniment que acabi a aquest punt també serà poc probable en el mètode de retrocés, $\tilde{\mathcal{P}}(\mathbb{T}) = \mathcal{P}(\mathbb{T})$. Per evitar aquest problema, el que farem serà fixar el punt final per què s'ajusti a la trajectòria que volem dissenyar, $\tilde{P}_T(x) = \delta_{x, x_T}$. D'aquesta manera la probabilitat d'observar un camí en el mètode directe serà $\mathcal{P}(\mathbb{T}) = \tilde{\mathcal{P}}(\mathbb{T}) P(x, T)$.

Fins aquí no hem fet distinció en si estem treballant amb un sistema de variables discretes o contínues, anem a especificar la teoria per cada un d'aquests casos.

6.1. Backtracking en discret

En un sistema discret, el procés bota d'un estat a un altre segons les probabilitats de transició d'aquell pas. El que volem saber ara és quina forma tenen les probabilitats de cada pas en el mètode de retrocés. Per les trajectòries en temps discret, ens centrarem en l'exemple de caminant aleatori que hem estat comentant.

Anteriorment, hem argumentat que la probabilitat d'estar a un estat x a un temps t , en el cas del caminant aleatori, es calcula a partir de la distribució (20). Si substituïm aquesta expressió dins l'equació (59) i recordant que en aquest exemple $w_{x \rightarrow x+1}^t = p$ i $w_{x \rightarrow x-1}^t = 1 - p$, obtenim:

$$\tilde{w}_{x+1 \leftarrow x}^t = \frac{1 + t - x + x_0}{2(1 + t)}, \quad (61)$$

$$\tilde{w}_{x-1 \leftarrow x}^t = \frac{1 + t + x - x_0}{2(1 + t)}. \quad (62)$$

Aquestes equacions són les que ens serviran per construir les trajectòries de retrocés, des del punt final fins l'inicial. Comencem imposant un punt final, $x = x_T$, la distribució binomial amb $p = \tilde{w}_{x_T+1 \leftarrow x_T}^T$ ens traurà 1 o -1 aleatòriament, llavors el següent estat, x_{T-1} , vendrà donat per $x_{T-1} = x_T \pm 1$. S'ha de tenir en compte que el valor de x_T i de T han de tenir la mateixa paritat per poder arribar al valor de x_0 que pertoqui. Aquest mètode conté implícit el fet de que la probabilitat de transició per arribar a l'estat inicial, x_0 , ha de ser 0 o 1, per reproduir exactament la trajectòria objectiu, és a dir, $P(x \neq x_0, t = 0) = 0$ i $P(x = x_0, t = 0) = 1$. Aquestes equacions esdevenen independents de p , la probabilitat de transició es calcula en funció del punt actual i de a on s'hagi d'arribar, x_0 .

Si triem un valor de x_T poc probable, és a dir, un esdeveniment rar, el mètode directe necessitarà molt de temps de computació per obtenir el nombre de trajectòries desitjades. En canvi, el mètode de retrocés utilitzarà temps computacionals similars tant si és un esdeveniment rar com no. Per reproduir la figura 6 s'ha utilitzat el caminant aleatori amb $p = 0,5$, igualment com en la figura 1, però només hi ha representades les 100 primeres trajectòries acabades a $x_{T=100} = 20$. Aquest sistema es caracteritza per una desviació estàndard $\sigma = 10$, llavors les dibuixades no són les més típiques.

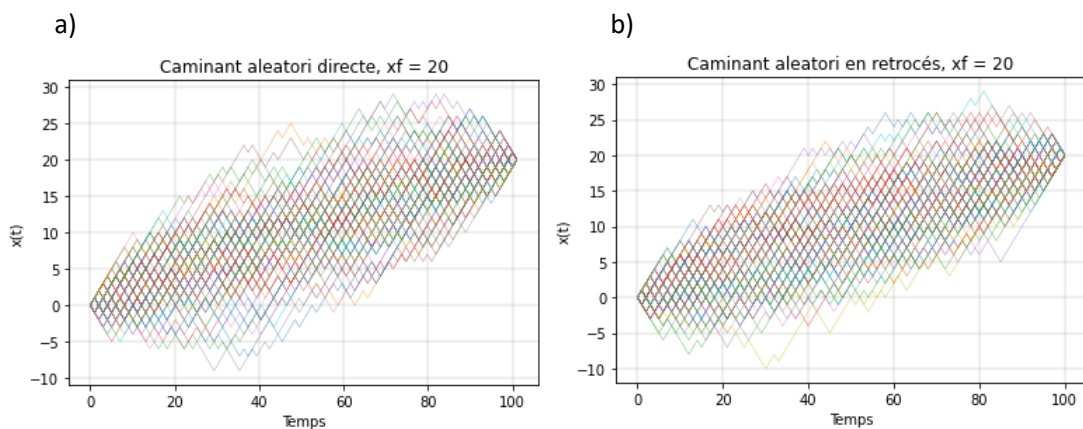


Figura 6: caminant aleatori amb temps i espai discret. a) Exemple de 100 trajectòries acabades a $x = 20$ construïdes amb el mètode directe. b) Exemple de 100 trajectòries acabades a $x = 20$ construïdes amb el mètode de retrocés.

Podem comprovar en la taula 1 que la mitjana (A 3) i les desviacions estàndard (A 5) a diferents temps dels dos gràfics de la figura 6 són similars, llavors, comparteixen propietats de dispersió de les trajectòries.

	$t = 20$		$t = 40$		$t = 60$		$t = 80$	
	$\langle x \rangle$	$\sigma[x]$	$\langle x \rangle$	$\sigma[x]$	$\langle x \rangle$	$\sigma[x]$	$\langle x \rangle$	$\sigma[x]$
Directe	4,50	3,820	8,02	5,280	12,90	5,164	16,52	4,295
Retrocés	3,82	4,129	8,26	5,135	12,06	4,754	15,76	4,188

Taula 1: Comparació de la mitjana i desviació estàndard a diferents temps entre les trajectòries resultants del caminant aleatori amb $p = 0,5$ amb el mètode directe i el de retrocés.

Com hem dit anteriorment, si el valor de p de la binomial és major a 1, les trajectòries tendeixen a anar cap amunt en la representació en funció del temps, i viceversa. Llavors, hem representat en la figura 7 la probabilitat d'obtenir trajectòries fixades a aquests punt inicial i final en funció d'aquest valor p :



Figura 7: Probabilitat binomial d'obtenir un camí que comença a $x = 0$ i acaba a $x = 20$ en un temps $T = 100$ amb el mètode directe.

El valor de p òptim amb què obtindrem la quantitat de trajectòries desitjades amb menys iteracions és 0,6. Si p és petit, el sistema tindrà tendència a baixar en l'eix espacial, llavors s'haurien de realitzar moltes iteracions per obtenir trajectòries acabades a aquest punt final. Per obtenir 100 trajectòries amb el mètode directe acabades a $x_f = 20$ amb $p = 0,4$ el programa ha hagut de realitzar $\sim 10^6$ operacions, en canvi, amb $p = 0,6$ n'ha realitzat $\sim 10^3$.

6.2. Backtracking en contínua

El mètode de retrocés canvia per sistemes amb temps continu. Recordem que per generar trajectòries estocàstiques contínues resollem equacions diferencials del tipus:

$$\frac{d\hat{x}(t)}{dt} = q(\hat{x}(t)) + g(\hat{x}(t))\hat{\xi}(t), \quad (63)$$

amb $\langle \hat{\xi} \rangle = 0$ i $\langle \hat{\xi}(t)\hat{\xi}(t') \rangle = \delta(t - t')$. Si discretitzem el temps ens queda l'esquema deduït anteriorment:

$$x(t_i + h) = x_{t_i} + hq(x_{t_i}, t_i) + \sqrt{h}g(x_{t_i}, t_i)u_{t_i}, \quad (64)$$

on u_{t_i} és un nombre aleatori independent extret d'una distribució gaussiana de mitjana 0 i variància 1.

Per l'exemple de partícules brownianes descrites per l'equació (50), recordem que la probabilitat en funció de qualsevol punt de l'espai segueix una distribució gaussiana de mitjana zero i variància $2Dt$, tal com estableix l'equació (52). Llavors, la densitat de probabilitat de transició és, també, una gaussiana $G(x; \mu, \sigma)$, on μ és la mitjana i σ^2 és la variància, tal que

$$w_{x_t \rightarrow x_{t+h}}^t = P(x_{t+h}|x_t) = G(x_{t+h}; x_t + hq(x_t, t), g(x_t, t)\sqrt{h}), \quad (65)$$

$$w_{x_t \rightarrow x_{t+h}}^t = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dh}} e^{-\frac{x^2}{4Dh}}. \quad (66)$$

Calculem la densitat de probabilitat de transició pel mètode de retrocés en funció de la del mètode directe, per aquest exemple, a partir de l'equació (59). Llavors, la probabilitat $\tilde{w}_{x_t \leftarrow x_{t+h}}^t$ vendrà donada per una gaussiana, ja que és funció de tres gaussianes multiplicades. Podem calcular la mitjana i la variància d'aquesta ja que totes són conegudes:

$$\tilde{w}_{x_t \leftarrow x_{t+h}}^t = P(x_t|x_{t+h}) = G\left(x_t; \frac{tx_{t+h}}{t+h}, \frac{2Dht}{t+h}\right) = \sqrt{\frac{t+h}{4\pi Dht}} e^{-\frac{(t+h)\left(x - \frac{tx_{t+h}}{t+h}\right)^2}{4Dht}}. \quad (67)$$

Llavors, partint de x_T , el punt x_{T-1} serà un nombre aleatori extret d'aquesta distribució de probabilitats. Fitxem-nos que aquesta distribució (67) canviarà per cada pas de temps. Quan arribem a $t = 0$ aquesta gaussiana tendirà a ser una delta de Dirac, δ_{x, x_0} , llavors, haurem arribat al punt inicial desitjat. Hem dibuixat trajectòries des de $x_{T=100} = 20$ fins $x_0 = 0$ amb aquest mètode en la figura 8 b.

Les trajectòries representades en la figura 8 a són diferents solucions de l'equació diferencial estocàstica presentada anteriorment (50) pel moviment brownià en una dimensió espacial. Fixant $x_{T=100} = 20$ i $D = 1$, hem dibuixat sols les 100 primeres solucions d'aquesta equació. A aquest sistema, el caracteritza una desviació estàndard $\sigma = \sqrt{2t}$, per això, a $t = 100$ esperem que les trajectòries estiguin separades $\sigma \sim 14,142$, per tant, el punt final elegit queda fora d'aquest rang, no és gaire probable.

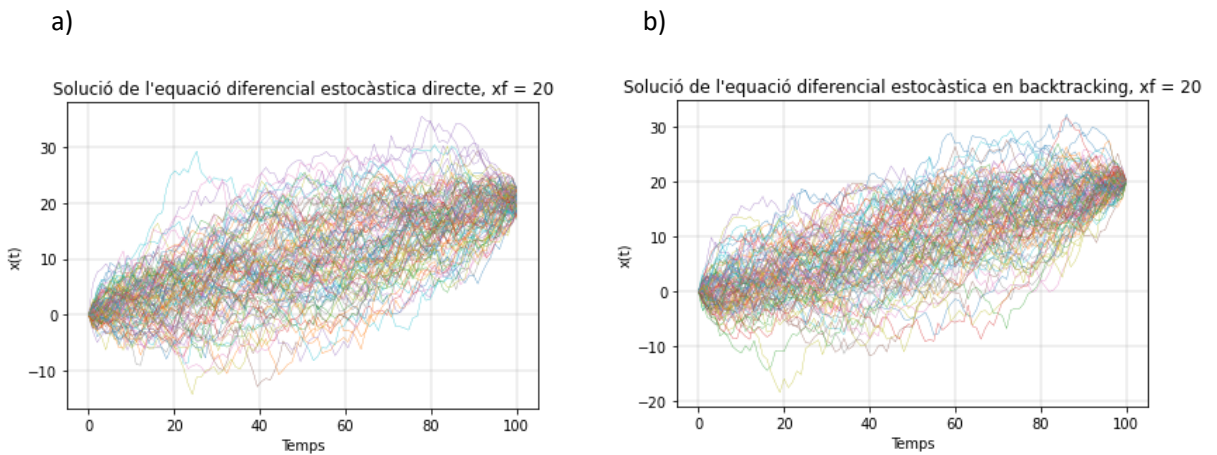


Figura 8: 100 solucions de l'equació diferencial estocàstica que descriu el moviment de partícules brownianes (50) amb $D = 1$. Totes les trajectòries comencen a $x = 0$ i acaben a $x = 20$. a) Construïdes amb el mètode directe. b) Construïdes amb el mètode de retrocés.

Podem comprovar a la taula 2 que la mitjana (A 3) i les desviacions estàndard (A 5) a diferents temps dels dos gràfics representats en la figura 8 són similars, per tant, tenen les mateixes propietats de dispersió de trajectòries.

	$t = 20$		$t = 40$		$t = 60$		$t = 80$	
	$\langle x \rangle$	$\sigma[x]$	$\langle x \rangle$	$\sigma[x]$	$\langle x \rangle$	$\sigma[x]$	$\langle x \rangle$	$\sigma[x]$
Directe	4,30	5,991	8,99	7,498	12,00	7,689	16,68	5,612
Retrocés	3,33	5,270	6,99	6,758	11,62	6,605	15,14	5,707

Taula 2: Comparació de la mitjana i desviació estàndard a diferents temps entre les trajectòries resultants del moviment brownià descrit per l'equació (50) amb el mètode directe i el de retrocés.

La desviació estàndard és major per temps propers a la mitat del temps final, ja que les trajectòries tenen més llibertat de moviment, no estan subjectes a les condicions de punt inicial o final.

Així com en el caminant aleatori hi havia un valor òptim de p per elaborar trajectòries amb el mètode directe acabades a un cert punt, en el cas continu hi ha un valor de D òptim. Per tant, per trajectòries que comencen a $x_0 = 0$ i acaben a $x_{100} = 20$, hem representat en la figura 9 la distribució de probabilitats (52) en funció del coeficient de difusió. Llavors, per reproduir trajectòries amb aquestes característiques de la manera més òptima utilitzant el mètode directe hem d'establir $D \approx 4$.

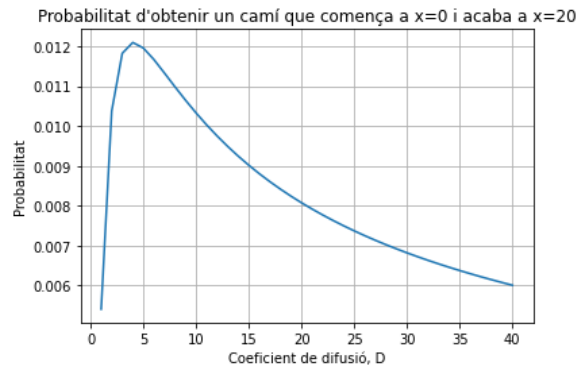


Figura 9: Probabilitat gaussiana d'obtenir un camí que comença a $x = 0$ i acaba a $x = 20$ en un temps $T = 100$ amb el mètode directe.

7. Comparació de distribucions de probabilitat

Un objectiu d'aquest treball és argumentar que les propietats estadístiques de les trajectòries resultants amb la implementació del mètode de retrocés són invariants respecte les obtingudes amb el mètode directe. Si confirmem que són les mateixes, llavors haurem presentat un bon mètode per modelar trajectòries estocàstiques rares.

Hem obtingut conjunts de trajectòries estocàstiques tant en temps discret com en continu fent ús dels mètodes esmentats. Els mètodes directes sols tenen en compte el punt inicial i la distribució de probabilitat per avançar. En canvi, els mètodes de retrocés tenen en compte el punt inicial i final per construir la trajectòria, a part de les respectives probabilitats a cada pas.

Per realitzar l'anàlisi, primer fixem un punt inicial i un punt final i dibuixem Q trajectòries des de x_0 fins x_T , tant amb el mètode directe com amb el mètode de retrocés. Seguidament, extraïem una distribució de probabilitats en funció de la variable aleatòria x , i una altre amb la variable t per cada un dels conjunts de trajectòries resultants.

Per la distribució de probabilitats en funció de la posició, fixem un temps t^* entre $[0, T]$ i prenem dades de quantes trajectòries passen per cada valor de x en aquest temps. Amb aquestes dades recollides dibuixem un histograma, que normalitzat, serà la distribució de probabilitats en funció de x pertanyent a t^* . A la figura 10, hem representat aquesta distribució pel conjunt de trajectòries resultants del caminant aleatori (figura 6) i la de la figura 11 pertany a les trajectòries brownianes (figura 8).

Hem calculat de manera analítica quina forma ha de tenir la distribució de probabilitats per una t^* fixada en funció de la posició:

$$P(x, t^* | x_0, x_T = x_f) = \frac{P(x, t^* | x_0, t = 0)P(x_f, T | x, t^*)}{P(x_T = x_f | x_0)}. \quad (68)$$

Aquesta expressió ens dona la probabilitat en funció de x per $t = t^*$ condicionada a que en el temps inicial ens trobem a x_0 i que en el temps final T ens trobem a x_f . Està construïda per parts, primer calclem la probabilitat d'arribar a x en un temps t^* començant de x_0 , llavors la de, partint d'aquest estat, arribar al punt x_f en un temps $T - t^*$. Multipliquem aquestes dues probabilitats i les dividim per la probabilitat d'arribar a x_f en un temps T començant de x_0 , així la distribució de probabilitats queda normalitzada.

Pel cas discret, cada una d'aquestes probabilitats es calcula amb la distribució binomial, $\text{binom}(M, n; p) = \binom{M}{n} p^n (1-p)^{M-n}$:

$$P(x, t^* | x_0, x_T = x_f) = \frac{\text{binom}\left(t^*, \frac{1}{2}(t^* + x - x_0); p\right) \text{binom}\left(T - t^*, \frac{1}{2}(T - t^* + x_f - x); p\right)}{\text{binom}\left(T, \frac{1}{2}(T + x_f - x_0); p\right)} \quad (69)$$

Aquesta probabilitat analítica està representada a la figura 10.

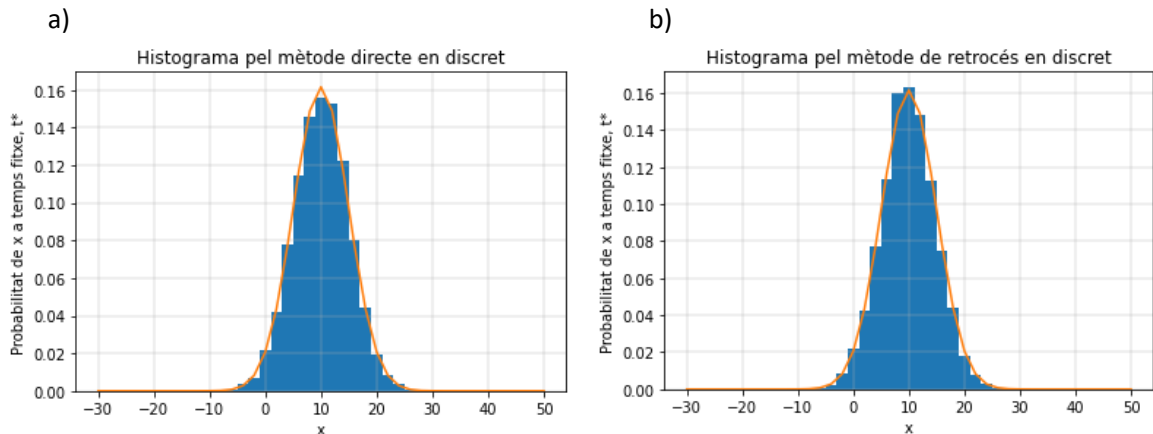


Figura 10: Densitat de probabilitat en funció de x per un temps fixe, t^* , corresponent a l'exemple de caminant aleatori. a) Trajectòries del mètode directe. b) Trajectòries del mètode de retrocés. La corba taronja és la solució analítica (69).

L'histograma en temps discret està dividit en caps de dos en dos, ja que, partint de x_0 parell, després d'un temps parell no és possible arribar a temps imparells llavors, mai obtindrem valors de posició imparells si fixem t^* parell, i viceversa, no obtindrem valors de posició imparells si t^* és imparell.

En l'exemple de trajectòries brownianes, pel cas continu, també podem calcular la distribució de probabilitats analítica corresponent als histogrames normalitzats en funció de la posició (figura 11). Aquesta es calcula a partir de probabilitats gaussianes, $G(x; \mu, \sigma)$, que caracteritzen cada estat en qüestió:

$$P(x, t^* | x_0, x_T = x_f) = \frac{G(x; x_0, \sqrt{2Dt^*})G(x_f; x, \sqrt{2D(T - t^*)})}{G(x_f; x_0, \sqrt{2DT}} \quad (70)$$

Posseeix la forma de la corba taronja de la figura 11.

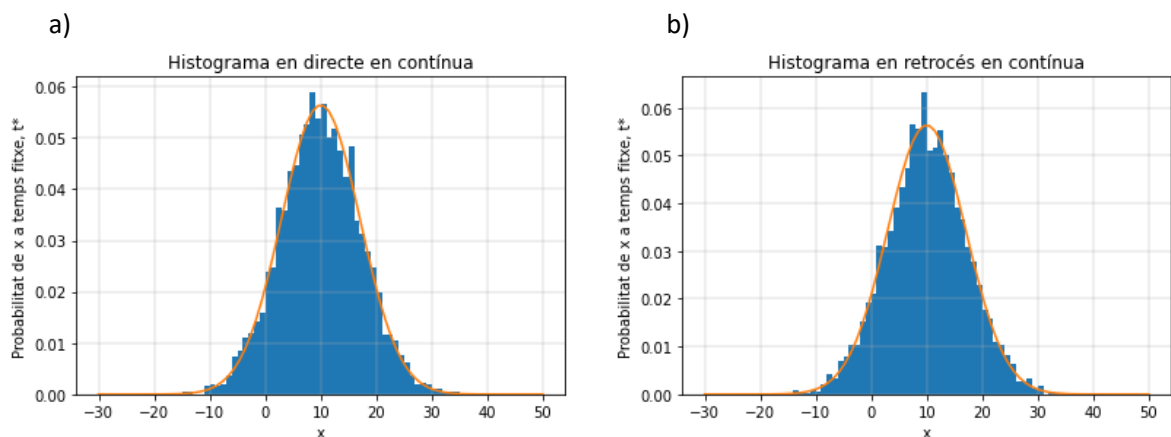


Figura 11: Densitat de probabilitat en funció de x per un temps fixe, t^* , corresponent a l'exemple de moviment brownià caracteritzat per l'equació (50). a) Trajectòries del mètode directe. b) Trajectòries del mètode de retrocés. La corba taronja és la solució analítica (70).

Per comparar les distribucions resultants per cada un dels mètodes hem utilitzat el test estadístic Kolmogorov-Smirnov (*Annex 8.3*). Hem calculat el valor de l'estadístic K-S i, amb aquest, el del *p-value* per saber si les distribucions corresponents al mètode directe i al de retrocés són suficientment iguals com per considerar que són iguals.

	Estadístic K-S	<i>p-value</i>
Discret	0.0513	0.9999999
Contínu	0.0506	0.9999709

Taula 3: Valors dels paràmetres comparatius del test Kolmogorov-Smirnov per les distribucions de probabilitat en funció de x pertanyents al mètode directe i al de retrocés, tant pel cas discret com continu.

Podem observar en la taula 3 que el valor del *p-value* als dos casos és molt alt, aproximadament 1. Això significa que, suposant que les dues distribucions són iguals, la probabilitat d'obtenir un resultat igual o més extrem que l'observat és molt alta. És a dir, que essent les dues distribucions la mateixa, si repetíssim l'experiment segurament obtindríem distàncies més grans que les que hem obtingut. Llavors, podem afirmar que la variable aleatòria x és distribuïda de la mateixa manera en les trajectòries dibuixades amb el mètode directe que amb el de retrocés. No ens és necessari fixar un nivell de significació degut a l'alt valor del *p-value*.

Extraurem, també, una distribució en funció del temps. El procediment és semblant, fixem una posició objectiu x^* i contem quantes trajectòries arriben a aquella posició per primera vegada a cada valor de temps dins l'interval. Anomenem aquesta distribució de probabilitats com probabilitat de primer pas per x^* . Hem calculat aquestes distribucions, tan per l'exemple de caminant aleatori com pel moviment brownià descrit per l'equació (50), en cada un dels dos mètodes, directe i de retrocés. En la figura 12 estan representats els temps de primer pas per les trajectòries resultants del caminant aleatori i en la figura 13 per les de moviment brownià.

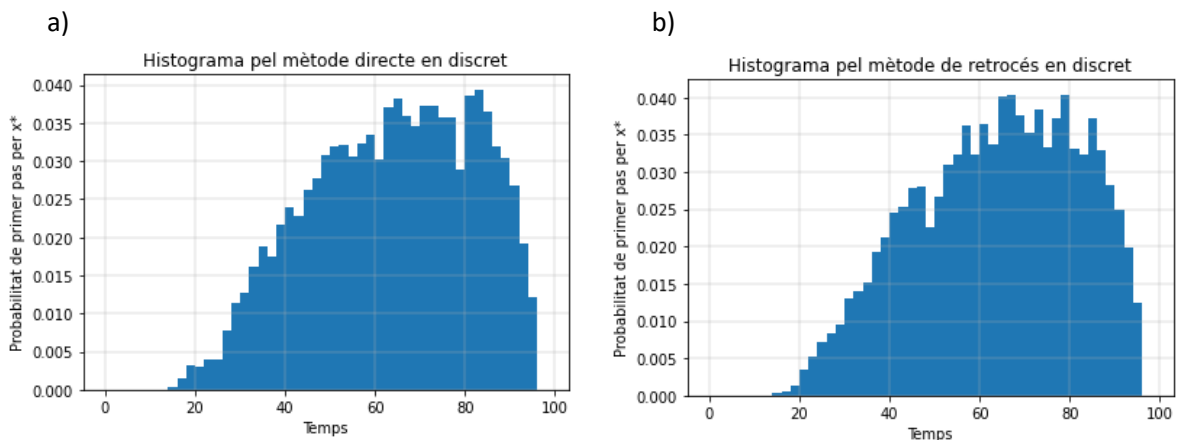


Figura 12: Densitat de probabilitat en funció del temps per una posició fixe, x^* , corresponent a l'exemple de caminant aleatori amb $p = 0,5$. a) Trajectòries del mètode directe. b) Trajectòries del mètode de retrocés.

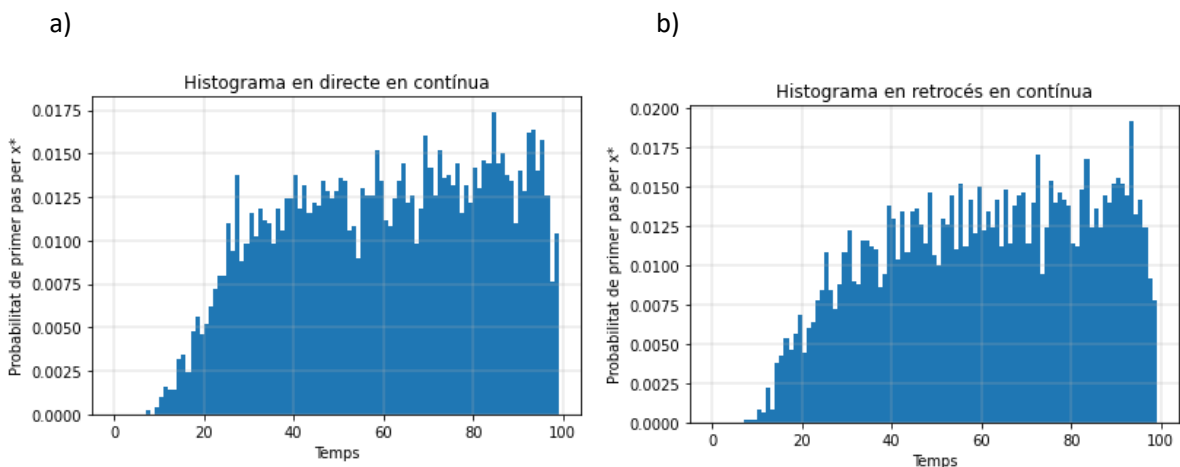


Figura 13: Densitat de probabilitat en funció del temps per una posició fixe, x^* , corresponent a l'exemple de moviment brownià caracteritzat per l'equació (50). a) Trajectòries del mètode directe. b) Trajectòries del mètode de retrocés.

Distintament del cas anterior, hem de tenir esment que no totes les posicions possibles cauen dins l'interval $[x_0, x_T]$. Si fixem x^* dins aquest interval totes les trajectòries passaran per aquest punt, però també és possible una x^* fora de l'interval i que alguna trajectòria passi, però no totes.

També hem comparat les distribucions de temps de primer pas per una x^* fixada de la mateixa manera com ho hem fet amb els histogrames anteriors. Hem obtingut els valors dels paràmetres del test estadístic Kolmogorov-Smirnov de la taula 4.

	Estadístic K-S	p-value
Discret	0.0816	0.9973451
Continu	0.0808	0.9052627

Taula 4: Valors dels paràmetres comparatius del test Kolmogorov-Smirnov per les distribucions de probabilitat en funció del temps pertanyents al mètode directe i al de retrocés, tant pel cas discret com continu.

En aquest cas hem obtingut valors de *p-value* lleugerament menors que abans, però tot i així, podem certament acceptar la hipòtesis nul·la que afirma que les dues variables aleatòries es distribueixen de la mateixa manera.

7.1. Probabilitat general de temps de primer pas

En aquesta secció deduirem l'estadística del procés directe a partir de l'estadística del procés de retrocés respecte [2]. Així com abans ens hem centrat en un sol punt final, ara dibuixarem Q trajectòries per varis punts finals, $\mathbb{T}_{x_T}^i$ amb $i = 1, \dots, Q$.

L'equació (60) descriu la probabilitat de succés de cada camí en el procés directe en funció de la del procés de retrocés. En aquesta expressió també apareix la probabilitat de que el sistema estigui a x_T en un temps T , $P(x_T, T)$, i la d'aquest mateix punt però en el procés de retrocés, $\tilde{P}_T(x_T)$. Les dues són conegudes, la primera ve donada per les distribucions binomial (20) i gaussiana (52) per processos discrets i continus, respectivament, i la segona és $\tilde{P}_T(x_T) = \delta_{x, x_T}$ tal com hem argumentat anteriorment. L'únic que ens queda a determinar és $\tilde{\mathbb{P}}(\mathbb{T})$. Com en el procés de retrocés el punt final i l'inicial estan fixats, totes les Q trajectòries són iguals de probables, llavors la probabilitat de cada camí en el procés de retrocés serà $1/Q$. Tot en conjunt, la probabilitat de cada camí és:

$$\mathbb{P}(\mathbb{T}) = \tilde{\mathbb{P}}(\mathbb{T}) \frac{P(x_T, T)}{\tilde{P}_T(x_T)} = \frac{P(x_T, T)}{Q}. \quad (71)$$

Un observable d'un camí en particular podria ser, per exemple, entre quins valor de x pren valors cada camí, a quina posició es troba a un cert temps fixe o en quant de temps arriba cada camí a una x fixe (temps de primer pas), etc. Podem estudiar el valor general d'algun observable, $\langle \Omega \rangle$, del sistema original sense tenir en compte un estat final concret:

$$\langle \Omega \rangle = \sum_{x_T} \left[\frac{P(x_T, T)}{Q_{x_T}} \sum_{i=1}^{Q_{x_T}} \Omega(\mathbb{T}_{x_T}^i) \right]. \quad (72)$$

Si suposem que per cada punt final dibuixem les mateixes trajectòries posem $Q_{x_T} = Q$.

Apliquem aquesta teoria en calcular el temps de primer de pas per una certa x^* , sense cenyir-se a cap estat final. Aquesta distribució de probabilitat ens dirà quina és la probabilitat de que la trajectòria arribi a x^* per primera vegada a cada temps t , $P^{1st}(x^*, t) = P(x(t) = x^* | x(t') \neq x^* \forall t' < t)$.

$$P^{1st}(x^*, t) = \sum_{x_T} P(x_T, T) \frac{N_{x_T}(x^*, t)}{Q}. \quad (73)$$

Utilitzant l'equació (73) hem calculat les distribucions de probabilitat de primer pas per $x^* = 15$ tant en el cas de trajectòries pertanyents al caminant aleatori amb $p = 0,5$ (figura 14) com en un sistema de partícules brownianes en una dimensió espacial descrites per l'equació

(50) (figura 15). En els dos casos, hem calculat la distribució de probabilitats corresponent tant al mètode *backtracking* com en el directe, així les podem comparar.

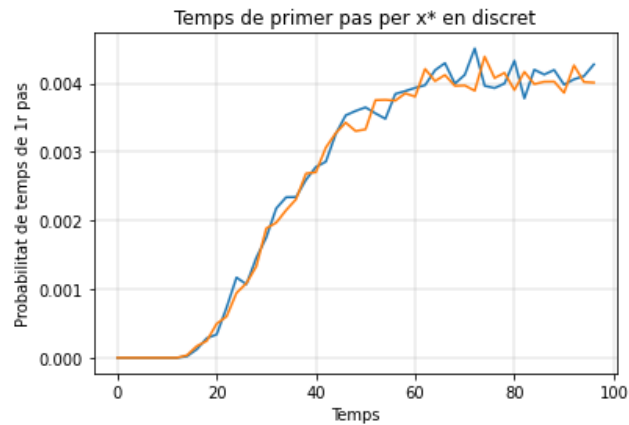


Figura 14: Densitat de probabilitat de temps de primer pas per $x^* = 15$ corresponent al cas del caminant aleatori. Blau: mètode directe. Taronja: mètode de retrocés.

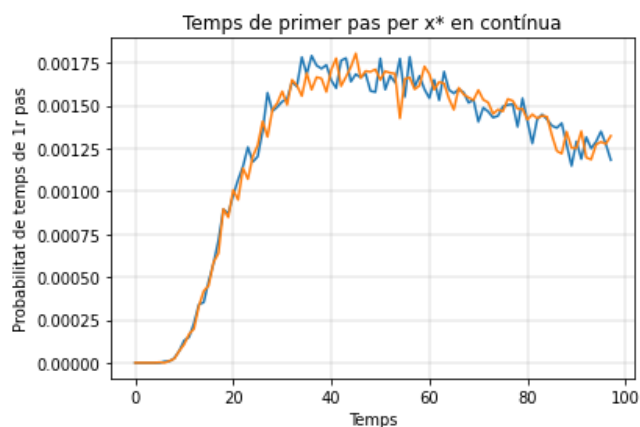


Figura 15: Densitat de probabilitat de temps de primer pas per $x^* = 15$ corresponent al cas de partícules brownianes en una dimensió descrites per l'equació (50). Blau: mètode directe. Taronja: mètode de retrocés.

A la taula 5 podem comprovar com els paràmetres del test estadístic Kolmogorov-Smirnov ens asseguren que, tant pel cas discret com continu, el mètode de retrocés preserva l'estadística del procés objectiu en la dimensió temporal. Aquest fet implica que, suposant que el temps segueix una distribució de probabilitats única entre els dos sistemes, la probabilitat d'observar trajectòries resultants iguals o més rares en experiments futurs que les obtingudes en aquest treball amb el mètode de retrocés, és molt alta. És a dir, si extraguéssim punts aleatoris amb les probabilitat de primer pas de les figures 14 i 15, segurament el resultat seria més rar que l'obtingut.

	Estadístic K-S	p-value
Discret	0.0816	0.9973451
Continu	0.0714	0.9653834

Taula 5: Valors dels paràmetres comparatius del test Kolmogorov-Smirnov per les distribucions de probabilitat general en funció del temps pertanyents al mètode directe i al de retrocés, tant pel cas discret com continu.

Si sumem totes les probabilitats de les distribucions de les figures 14 i 15, ens n'adonem que no sumen 1, llavors sembla que alguna cosa no va com tocaria. El que passa és que no reproduïm tot l'histograma, ja que l'histograma complet s'hauria de calcular per un temps molt llarg. És possible posar un punt objectiu, x^* , que quedi molt lluny del punt final d'algunes trajectòries calculades, fins i tot, pot ser que sigui impossible arribar-hi pel simple fet de que $|x_f| + 2|x^*| > T$. Per reproduir l'histograma complet correctament s'hauria de considerar un temps final molt llarg. Ara bé, no ens interessa conèixer la distribució per a temps molt llargs ja que les probabilitats de succés per aquets temps són molt baixes. Els histogrames representats estan tallats a un temps final $T = 100$, ja que fins ara hem utilitzat aquest valor com a temps final.

7.2. Probabilitat general en funció de la posició per un temps fixat

També hem calculat la distribució de probabilitats en funció de la variable x general per a tots els x_f . El procediment és semblant a l'anterior (equació (73)), sumem tots els histogrames particulars per cada x_f i ho multipliquem pel pes estadístic que li pertoca:

$$P_x(x, t^*) = \sum_{x_T} P(x_T, T) \frac{N_{x_T}(x, t^*)}{Q}. \quad (74)$$

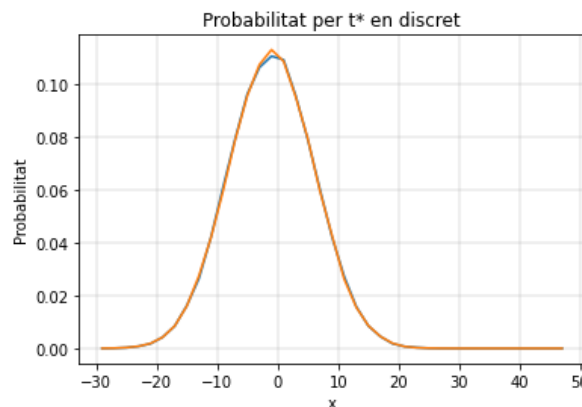


Figura 16: Distribució de probabilitat general en funció de x corresponent a $t^* = 50$ per trajectòries elaborades amb el caminant aleatori amb $p = 0,5$ en una dimensió espacial. Blau: mètode directe. Taronja: mètode de retrocés.

Utilitzant l'equació (74) hem calculat les distribucions de probabilitat per qualsevol x pertanyent a $t^* = 50$ tant en el cas de trajectòries construïdes amb al caminant aleatori (figura

16) com en un sistema de partícules brownianes en una dimensió espacial descrites per l'equació (50) (figura 17). En els dos casos, hem calculat la distribució de probabilitats corresponent tant al mètode *backtracking* com en el directe, així les podrem comparar.

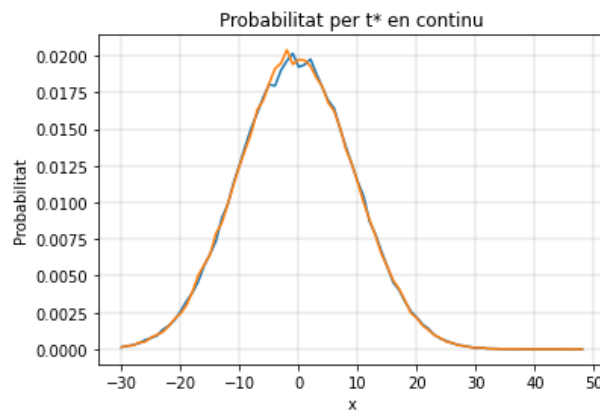


Figura 17: Distribució de probabilitat general en funció de x corresponent a $t^* = 50$ per trajectòries elaborades amb l'equació (50) que descriu el moviment brownià en una dimensió espacial. Blau: mètode directe. Taronja: mètode de retrocés.

Es pot apreciar que les distribucions de probabilitat de les figures 16 i 17 pels casos pertinents als diferents mètodes són gairebé la mateixa, de fet la corba blava (mètode directe) quasi no es veu. Aquest fet ens fa pensar que el valor del *p-value* per comparar les dues distribucions serà molt alt. En la taula 6 podem afirmar que, efectivament, aquest valor és molt aproximadament 1.

	Estadístic K-S	<i>p-value</i>
Discret	0.0513	0.99999999998
Continu	0.0380	0.99999999858

Taula 6: Valors dels paràmetres comparatius del test Kolmogorov-Smirnov per les distribucions de probabilitat general en funció de la posició pertanyents al mètode directe i al de retrocés, tant pel cas discret com continu.

Llavors, els resultats del test Kolmogorov-Smirnov ens asseguren que les distribucions en funció de x , tant per variables discretes com contínues, extretes a partir de les trajectòries resultants del mètode de retrocés són iguals a les pertinents al sistema objectiu.

8. Conclusions

En aquest treball hem conclòs que el mètode *backtracking* és un bon mètode per a la generació de trajectòries estocàstiques poc provables. Dins la gran multitud d'esdeveniments resultants de sistemes governats per l'aleatorietat, els de major interès són aquells que succeeixen poc freqüentment. Existeixen esdeveniments d'aquest tipus a diferents escales, des

de interruptors moleculars fins a terratrèmols. La simulació d'aquests esdeveniments requereix gran cost computacional si són reproduïts a partir de models matemàtics que resolen la dinàmica del sistema directament. És necessari recórrer a noves estratègies que puguin generar numèricament i més eficientment aquest tipus d'esdeveniments.

El mètode *backtracking* utilitza ponts estocàstics que van enrere en el temps, això és, es construeix la trajectòria desitjada partint del punt final i s'arriba al punt inicial. Els ponts estocàstics elaboren el camí a mida, a cada pas de temps, la densitat de probabilitat per anar de l'estat actual al pròxim és diferent. És a dir, el mètode de retrocés establirà com serà la densitat de probabilitat per anar de l'estat a temps t fins a l'estat a temps $t - h$, essent h el pas de temps.

S'ha implementat el mètode *backtracking* tant en sistemes de variables discretes com en contínues. Per reproduir el mètode en qüestió en variables discretes s'ha utilitzat l'exemple de caminant aleatori, on la probabilitat en funció del temps i la posició ve descrita per una distribució binomial. Aquesta distribució ve caracteritzada per una mitjana i una desviació típica, llavors, considerarem una trajectòria rara quan està allunyada d'aquelles prediccions. Per a la construcció d'aquest tipus de trajectòries enrere en el temps, a cada pas de temps, la distribució binomial serà diferent, dependrà de l'estat actual i de a on ha d'arribar. Si apliquem el límit continu a aquest exemple, $h \rightarrow 0$, la probabilitat que descriu el sistema esdevé en forma de distribució gaussiana de mitjana 0 i variància t , llavors s'obté un procés estocàstic continu.

El moviment d'un conjunt molt gran de partícules dins un fluid és aleatori, a aquest moviment se li atribueix el nom de *moviment brownià*. Les partícules brownianes venen descrites per l'equació de Langevin formada per una equació diferencial determinista més un terme aleatori anomenat *renou*. Les fluctuacions a la trajectòria browniana provocades pel terme aleatori tenen mitjana zero i no tenen correlacions a diferents temps, amb aquestes característiques esdevé *renou blanc*. El renou blanc es construeix aplicant el límit continu al caminant aleatori. Aquí hem suposat un exemple d'equació de Langevin on el terme determinista és anul·lat i el renou és additiu (equació 50). Llavors, la probabilitat en funció de la posició i del temps ve descrita per una distribució gaussiana de mitjana zero i variància $\sigma^2[\xi] = 2Dt$. Igualment com en el cas discret, la probabilitat de transició per passar d'un estat a un altre canvia a cada pas de temps, està condicionada a la posició actual i a on arribarà. Llavors, la probabilitat per canviar d'estat ve descrita per una distribució gaussiana tal que la seva mitjana i variància dependran de cada punt.

Una vegada explicat el funcionament del mètode *backtracking* hem comprovat que la realització de trajectòries amb aquest mètode preserva l'estadística del sistema. Obtingut el conjunt de trajectòries tant amb el mètode directe com amb el de retrocés, hem realitzat distribucions de probabilitat a partir dels resultats sobre cada un dels dos eixos. Un sistema estocàstic està completament caracteritzat donada la distribució de probabilitats en funció de l'espai i el temps. Llavors, els dos sistemes resultats del mètode directe i de retrocés seran

equivalents si les distribucions de probabilitats prediuen el mateix comportament. Finalment, hem realitzat comparatives fent ús del test Kolmogorov-Smirnov entre les distribucions de probabilitat pertinents als dos mètodes. Els resultats d'aquest test verifiquen que les variables es distribueixen de la mateixa manera tant en el mètode de retrocés com en el directe.

9. Annex

9.1. Revisió de conceptes de probabilitat

Quan parlem de procés estocàstic significa que treballem amb almenys una variable aleatòria. La distribució de probabilitat, $f_{\hat{x}}(x)$, assigna una probabilitat per cada un d'aquets valors que pot prendre la variable aleatòria. Depenent de si aquesta variable, anomenada \hat{x} , és discreta o continua, definim la probabilitat d'ocurrència d'un esdeveniment qualsevol x_i : $P_i = P(\hat{x} = x_i)$ i $P(\hat{x} \in [a, b]) = \int_a^b f_{\hat{x}}(x) dx$, respectivament. La densitat de probabilitat s'ha d'ajustar dins l'interval $[0, 1]$ i ha de complir que la suma total de totes les probabilitats per tots els possibles valors de x ha de sumar 1 (condició de normalització).

Ens serà útil definir la funció de distribució acumulativa, $F_{\hat{x}}(x)$, d'una distribució de probabilitat:

$$F_{\hat{x}}(x) = \int_{-\infty}^x f_{\hat{x}}(x') dx'. \quad (\text{A } 1)$$

Aquesta funció ens indica la probabilitat de que una variable aleatòria prengui valors igual o menors que x : $P(\hat{x} \leq x) = F_{\hat{x}}(x)$. Sempre és creixent i tendeix a 1 pel màxim valor que pot prendre x .

9.1.1. Valors mitjans i variància

La mitjana, o valor esperat, d'una variable aleatòria $\hat{x}(\beta)$ que dona valors numèrics reals als resultats, β , de l'experiment en qüestió, es calcula com:

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x f_{\hat{x}}(x) dx. \quad (\text{A } 2)$$

En particular, si la variable aleatòria és discreta:

$$\langle \hat{x} \rangle = \sum_{\forall i} p_i x_i. \quad (\text{A } 3)$$

Seguidament, per calcular la variància, σ^2 , i desviació estàndard, σ :

$$\sigma^2[\hat{x}] = \langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2, \quad (\text{A } 4)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \langle \hat{x} \rangle)^2}{N}}, \quad (\text{A } 5)$$

on N és el nombre total de valors de x que tenquem.

9.1.2. Distribucions de probabilitats conegudes

Ens seran útils algunes distribucions de probabilitat importants:

- Binomial

Aquesta distribució sorgeix de repetir un experiment amb dos únics resultats possibles, amb probabilitats p i $(1 - p)$, M vegades. Contem quantes vegades apareix cada resultat sense tenir en compte l'ordre en que apareixen, aquest procés defineix una variable aleatòria \hat{N} . Aquesta variable és discreta ja que pren valors de 0 a M d'un en un. La variable \hat{N} segueix una distribució de valor mig $\mu[\hat{N}] = Mp$ i variància $\sigma^2[\hat{N}] = Mp(1 - p)$ de la forma:

$$P(M, \hat{N} = n, p) = \binom{M}{n} p^n (1 - p)^{M-n}. \quad (\text{A } 6)$$

- Gaussiana

La distribució de probabilitat Gaussiana, $G(x; \mu, \sigma)$, caracteritza les probabilitats d'una variable aleatòria contínua \hat{x} i ve definida per la mitjana μ i variància σ^2 . Si apliquem el límit $M \rightarrow \infty$ a la distribució binomial $P(M, n; p)$ obtenim la distribució Gaussiana $G(x; Mp, \sqrt{Mp(1 - p)})$. La forma que segueix aquesta densitat de probabilitat és:

$$G(x; \mu, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}. \quad (\text{A } 7)$$

9.1.3. Teorema de Bayes

El teorema de Bayes expressa la probabilitat condicional d'un esdeveniment aleatori A donat un esdeveniment B. Aquesta probabilitat ve donada en termes de la probabilitat condicional de B donat A i de les probabilitats marginals dels dos esdeveniments A i B:

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)}. \quad (\text{A } 8)$$

9.2. Nombres aleatoris

Per resoldre equacions estocàstiques és necessari obtenir nombres aleatoris numèricament. Aquests nombres aleatoris seran valors que pot prendre una variable aleatòria \hat{x} distribuïda segons la distribució de probabilitat (figura 18 a), $f_{\hat{x}}(x)$, adient segons el cas. Existeixen comandaments dins el llenguatge de programació que treuen nombres aleatoris directament, però anem a entendre com funcionen.

El mètode bàsic per generar aquests nombres fa ús del següent teorema: definim la funció de probabilitat acumulativa (figura 18 b), $F_{\hat{x}}(x)$, de la variable aleatòria \hat{x} , llavors fem el canvi de variables $\hat{u} = F_{\hat{x}}(x)$. La nova variable aleatòria \hat{u} està uniformement distribuïda dins l'interval $[0, 1]$.

Un cop tenim la funció acumulativa, \hat{u} , que pren valors entre 0 i 1 per definició, elegim un valor u aleatori dins aquest interval continu amb igual probabilitat. Assignem aquest valor a la funció acumulativa, $F_{\hat{x}}(x) = u$, si fem la inversa, $F_{\hat{x}}^{-1}(u) = x$, trobem el valor de x que li correspon. Per tant, tenim un valor per a la variable aleatòria \hat{x} obtingut amb la correcta densitat de probabilitat.

Posem a prova el mètode amb el cas per a la funció de probabilitat Gaussiana, $G(x; \mu, \sigma)$. La funció acumulativa que li correspon és:

$$F_{\hat{x}}(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{x-\mu}{\sigma\sqrt{2}}\right) \text{ on } \operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-y^2} dy. \quad (\text{A } 9)$$

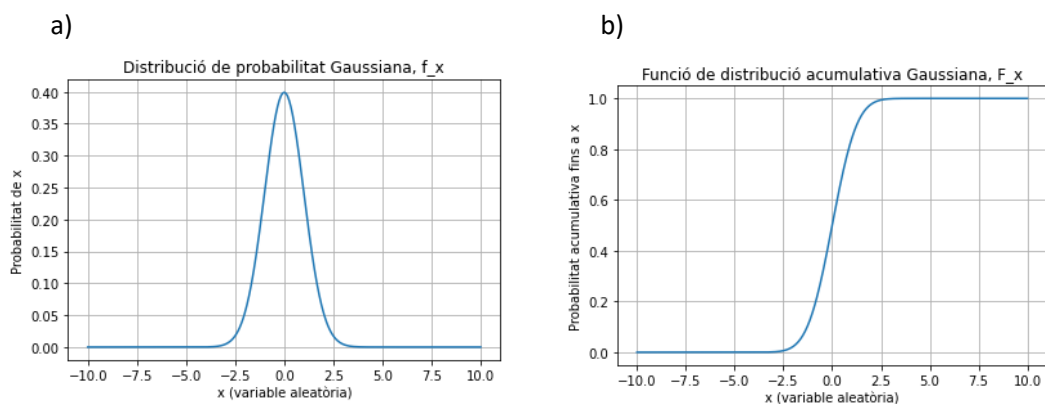


Figura 18: Distribució gaussiana de mitjana 0 i variància 1. a) Distribució de probabilitat. b) Distribució acumulativa de probabilitat.

Deduïm que pels valors de x on la funció acumulativa tingui més pendent seran els més provables, ja que el rang de probabilitat per un valor de x fixat serà més ampli com més pendent tingui la funció a aquell punt.

9.3. Comparació de distribucions

Una vegada que hem obtingut distribucions de probabilitat provinents dels experiments realitzats, procedim a analitzar-les. Pretenem que les distribucions de probabilitat obtingudes a partir de les trajectòries directes i de retrocés tinguin les mateixes propietats estadístiques. Hi ha múltiples estratègies per detectar si existeixen diferències entre distribucions. Els mètodes de comparació analitzen, entre diferents distribucions, un paràmetre estadístic com la mitja, la mitjana, la desviació típica (dispersió), etc. Llavors, s'ha de tenir en compte quin mètode és el que convé, ja que dues distribucions poden tenir la mateixa mitjana i ser ben diferents. L'estratègia convingent s'elegeix segons quin canvi en les distribucions ens interessa detectar.

El test *Kolmogorov-Smirnov* [6] utilitza com a paràmetre estadístic la distància màxima entre distribucions de probabilitat acumulades pertanyents a les dues mostres que volem comparar. Aquest test serveix tant per comprar un mostreig amb la distribució teòrica, com per detectar diferències entre dues distribucions experimentals. Aquesta estratègia ens proveeix

informació sobre diferències en la localització i en la forma de la distribució, és útil per determinar si existeixen evidències de que una mateixa variable es distribueix de diferent forma entre dos grups. Una avantatge d'aquets test és que és independent del tipus de distribució de la qual és extreta la mostra.

Aquesta distància màxima s'anomena *estadístic K-S*, un cop l'hem obtingut s'ha de determinar si aquesta distància és suficientment gran com per dir que les dues distribucions són diferents. Per això, calcularem la probabilitat anomenada *p-value* a partir de l'estadístic K-S. El valor de *p-value*, que oscil·larà entre 0 i 1, ens dirà la probabilitat d'haver obtingut els resultats de l'estudi, o altres més extrems referents a la hipòtesi nul·la, suposant com a certa la hipòtesis nul·la, H_0 .

$$p = P(\text{valor tant extrem o més} | H_0) \quad (\text{A } 10)$$

En el test Kolmogorov-Smirnov es pot definir aquest valor com la probabilitat d'observar distàncies iguals o majors tenint com a cert que les mostres són extrems de la mateixa distribució. La hipòtesis nul·la, per tant, és afirmar que les dues mostres es distribueixen segons la mateixa distribució, es poden considerar estadísticament iguals. Llavors, el *p-value* ens confirmarà si l'estadístic K-S obtingut a partir de les mostres de l'experiment és suficientment gran com per considerar que existeix una diferència real entre distribucions subjacents. En conclusió, normalment, valors petits per l'estadístic K-S, el que implica valors alts del *p-value*, permet acceptar la hipòtesis nul·la. Pel cas contrari, rebutgem la hipòtesis nul·la.

Sempre que acceptem o rebutgem una hipòtesis ho fem a partir d'un llindar de probabilitat, conegut com nivell de significació. Aquest és establert per l'investigador, depenent de l'estudi, desitjarà uns resultats més precisos o menys. Com més petit sigui el valor d'aquest llindar més segurs podem estar dels resultats, ja que si el *p-value* és menor a aquest, rebutjarem la hipòtesis nul·la.

10. Referències

- [1] *Raúl Toral and Pere Colet. Stochastic Numerical Methods: an Introduction for Students and Scientists. John Wiley & Sons, 2014.*
- [2] Javier Aguilar, Joseph W Baron, Tobias Galla and Raúl Toral. Sampling rare trajectories using Stochastic bridges. *Physical Review E*, 105(6):064138, 2022.
- [3] Notes del curs del professor Tobias Galla. Advanced Statistical Physics. PHYS40571. 2016
- [4] Instabilities and Nonequilibrium Structures VI, eds. E. Tirapegui, J. Martínez and R. Tiemann, Kluwer Academic Publishers 35-130 (2000).
- [5] <https://ifisc.uib-csic.es/es/publications/sampling-rare-trajectories-in-stochastic-systems/>
- [6] https://www.cienciadedatos.net/documentos/51_comparacion_distribuciones_kolmogorov%E2%80%93smirnov