Błądzenie przypadkowe i lokalizacja

Zdzisław Burda

Jarosław Duda, Jean-Marc Luck, Bartłomiej Wacław

Seminarium Wydziałowe WFiIS AGH, 07/11/2014

Plan referatu

- Wprowadzenie
- Zwykłe błądzenie przypadkowe (GRW)
- Błądzenie przypadkowe o maksymalnej entropii (MERW)
- Na regularnej sieci: GRW=MERW
- Losowe defekty na sieci $\longrightarrow$ lokalizacja
- Podsumowanie i spekulacje

Związek dyfuzji z ruchami Browna

- A. Einstein (1905) i M. Smoluchowski (1906)

- K. Pearson (1905) RANDOM WALK
- Błądzenie przypadkowe / Błądzenie losowe

Związek dyfuzji z ruchami Browna

- A. Einstein (1905) i M. Smoluchowski (1906)

- K. Pearson (1905) RANDOM WALK
- Błądzenie przypadkowe / Błądzenie losowe

Związek dyfuzji z ruchami Browna

- A. Einstein (1905) i M. Smoluchowski (1906)

- K. Pearson (1905) RANDOM WALK
- Błądzenie przypadkowe / Błądzenie losowe

Lokalizacja

- P.W. Anderson (1958)

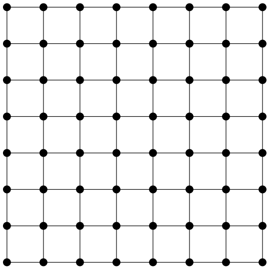
- ”Absence of Diffusion in Certain Random Lattice”.
- Efekt kwantowy

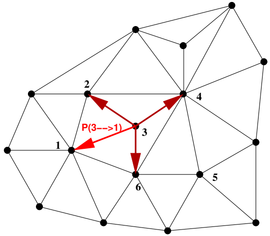
Lokalizacja

- P.W. Anderson (1958)

- "Absence of Diffusion in Certain Random Lattice".
- Efekt kwantowy

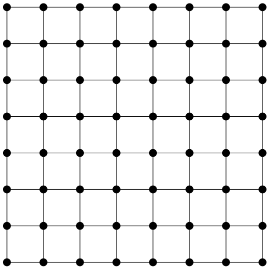
Błądzenie przypadkowe na grafach

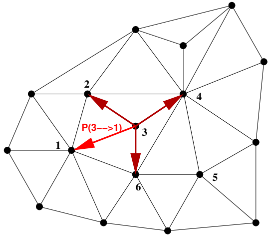




- Macierz sąsiedztwa: $A_{ij} = 1(0)$, ij są (nie są) sąsiadami
- Liczba koordynacyjna: $k_i = \sum_j A_{ij}$
- Prawdopodobieństwo przeskoku: $P(i \to j) = P_{ij}$
- Macierz stochastyczna: $0 \leq P_{ij} \leq A_{ij}; \quad \sum_j P_{ij} = 1$

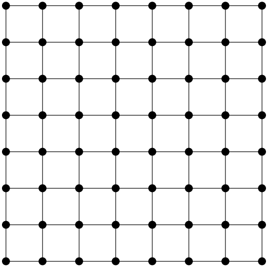
Błądzenie przypadkowe na grafach

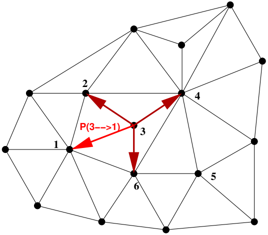




- Macierz sąsiedztwa: $A_{ij} = 1(0)$, ij są (nie są) sąsiadami
- Liczba koordynacyjna: $k_i = \sum_j A_{ij}$
- Prawdopodobieństwo przeskoku: $P(i \to j) = P_{ij}$
- Macierz stochastyczna: $0 \leq P_{ij} \leq A_{ij}; \quad \sum_j P_{ij} = 1$

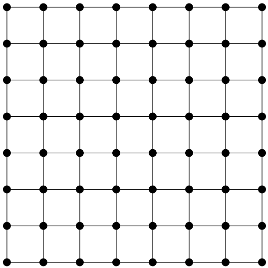
Błądzenie przypadkowe na grafach

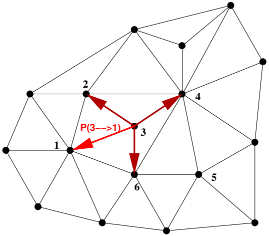




- Macierz sąsiedztwa: $A_{ij} = 1(0)$, ij są (nie są) sąsiadami
- Liczba koordynacyjna: $k_i = \sum_j A_{ij}$
- Prawdopodobieństwo przeskoku: $P(i \to j) = P_{ij}$
- Macierz stochastyczna: $0 \leq P_{ij} \leq A_{ij}$; $\quad \sum_j P_{ij} = 1$

Błądzenie przypadkowe na grafach





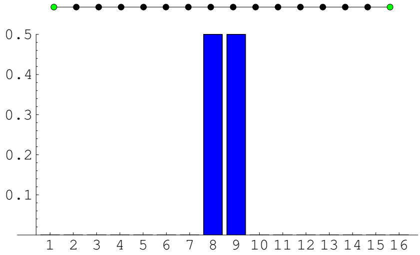
- Macierz sąsiedztwa: $A_{ij} = 1(0)$, ij są (nie są) sąsiadami
- Liczba koordynacyjna: $k_i = \sum_j A_{ij}$
- Prawdopodobieństwo przeskoku: $P(i \to j) = P_{ij}$
- Macierz stochastyczna: $0 \le P_{ij} \le A_{ij}; \quad \sum_j P_{ij} = 1$

Ewolucja rozkładu prawdopodobieństwa

- Równanie Master: $\pi_i(t+1) = \sum_j \pi_j(t) P_{ji}$
- Stan stacjonarny: $\pi_i^* = \sum_j \pi_j^* P_{ji}$
- Zwykłe błądzenie przypadkowe (GRW):

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{k_i} \longrightarrow \pi_i^* = \frac{k_i}{2L}$$

- Przykład:

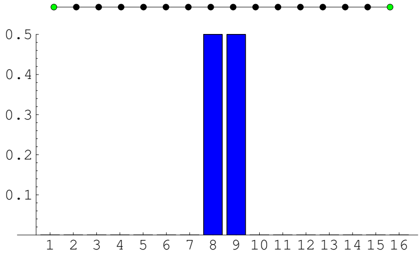


Ewolucja rozkładu prawdopodobieństwa

- Równanie Master: $\pi_i(t+1) = \sum_j \pi_j(t) P_{ji}$
- Stan stacjonarny: $\pi_i^* = \sum_j \pi_j^* P_{ji}$
- Zwykłe błądzenie przypadkowe (GRW):

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{k_i} \longrightarrow \pi_i^* = \frac{k_i}{2L}$$

- Przykład:

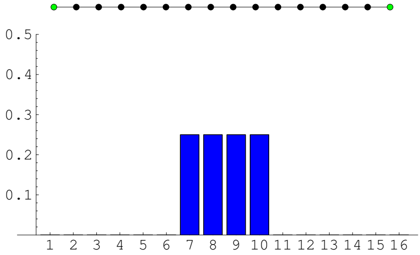


Ewolucja rozkładu prawdopodobieństwa

- Równanie Master: $\pi_i(t+1) = \sum_j \pi_j(t) P_{ji}$
- Stan stacjonarny: $\pi_i^* = \sum_j \pi_j^* P_{ji}$
- Zwykłe błądzenie przypadkowe (GRW):

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{k_i} \longrightarrow \pi_i^* = \frac{k_i}{2L}$$

- Przykład:

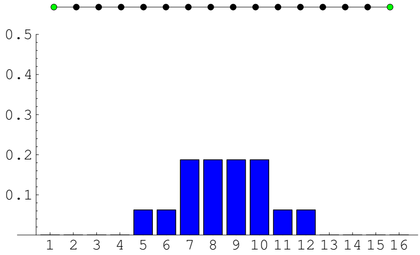


Ewolucja rozkładu prawdopodobieństwa

- Równanie Master: $\pi_i(t+1) = \sum_j \pi_j(t) P_{ji}$
- Stan stacjonarny: $\pi_i^* = \sum_j \pi_j^* P_{ji}$
- Zwykłe błądzenie przypadkowe (GRW):

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{k_i} \longrightarrow \pi_i^* = \frac{k_i}{2L}$$

- Przykład:

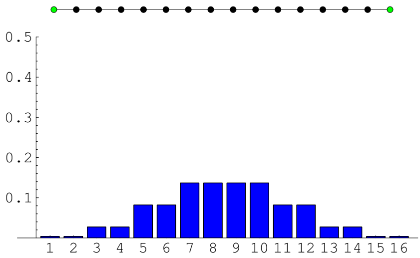


Ewolucja rozkładu prawdopodobieństwa

- Równanie Master: $\pi_i(t+1) = \sum_j \pi_j(t) P_{ji}$
- Stan stacjonarny: $\pi_i^* = \sum_j \pi_j^* P_{ji}$
- Zwykłe błądzenie przypadkowe (GRW):

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{k_i} \longrightarrow \pi_i^* = \frac{k_i}{2L}$$

- Przykład:

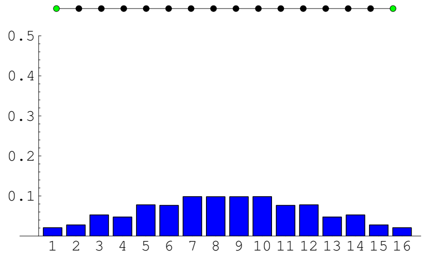


Ewolucja rozkładu prawdopodobieństwa

- Równanie Master: $\pi_i(t+1) = \sum_j \pi_j(t) P_{ji}$
- Stan stacjonarny: $\pi_i^* = \sum_j \pi_j^* P_{ji}$
- Zwykłe błądzenie przypadkowe (GRW):

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{k_i} \longrightarrow \pi_i^* = \frac{k_i}{2L}$$

- Przykład:

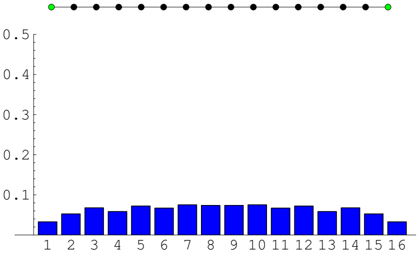


Ewolucja rozkładu prawdopodobieństwa

- Równanie Master: $\pi_i(t+1) = \sum_j \pi_j(t) P_{ji}$
- Stan stacjonarny: $\pi_i^* = \sum_j \pi_j^* P_{ji}$
- Zwykłe błądzenie przypadkowe (GRW):

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{k_i} \longrightarrow \pi_i^* = \frac{k_i}{2L}$$

- Przykład:

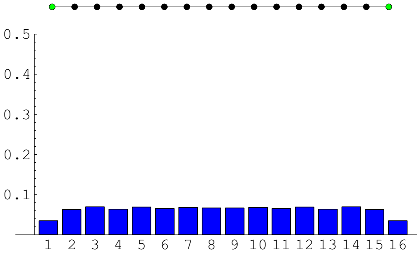


Ewolucja rozkładu prawdopodobieństwa

- Równanie Master: $\pi_i(t+1) = \sum_j \pi_j(t) P_{ji}$
- Stan stacjonarny: $\pi_i^* = \sum_j \pi_j^* P_{ji}$
- Zwykłe błądzenie przypadkowe (GRW):

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{k_i} \longrightarrow \pi_i^* = \frac{k_i}{2L}$$

- Przykład:

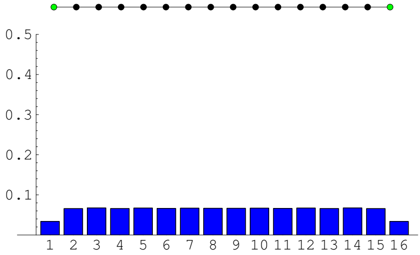


Ewolucja rozkładu prawdopodobieństwa

- Równanie Master: $\pi_i(t+1) = \sum_j \pi_j(t) P_{ji}$
- Stan stacjonarny: $\pi_i^* = \sum_j \pi_j^* P_{ji}$
- Zwykłe błądzenie przypadkowe (GRW):

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{k_i} \longrightarrow \pi_i^* = \frac{k_i}{2L}$$

- Przykład:

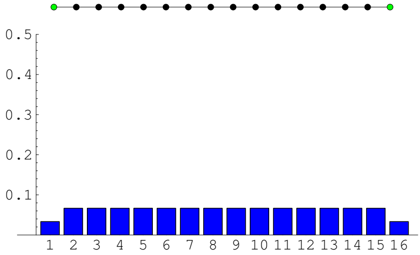


Ewolucja rozkładu prawdopodobieństwa

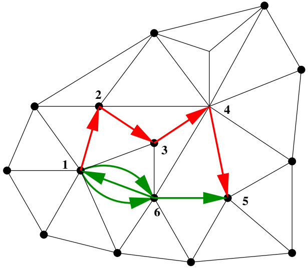
- Równanie Master: $\pi_i(t+1) = \sum_j \pi_j(t) P_{ji}$
- Stan stacjonarny: $\pi_i^* = \sum_j \pi_j^* P_{ji}$
- Zwykłe błądzenie przypadkowe (GRW):

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{k_i} \longrightarrow \pi_i^* = \frac{k_i}{2L}$$

- Przykład:



Trajektorie błądzenia przypadkowego $\gamma_{ab}^{(t)}$



- Prawdopodobieństwo: $P(\gamma_{i_0 i_t}^{(t)}) = P_{i_0 i_1} P_{i_1 i_2} \dots P_{i_{t-1} i_t}$
- GRW: $P(\gamma_{i_0 i_t}^{(t)}) = \frac{1}{k_{i_0}} \cdot \frac{1}{k_{i_1}} \cdot \ldots \cdot \frac{1}{k_{i_{t-1}}}$
- Przykład:
  $P(\gamma_{czerwona}) = \frac{1}{7} \cdot \frac{1}{5} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{8} = \frac{1}{1120}$;
  $P(\gamma_{zielona}) = \frac{1}{7} \cdot \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{7} \cdot \frac{1}{6} = \frac{1}{1764}$;
- MERW: $P(\gamma_{ab}^{(t)}) = F(t, a, b)$?

Entropia trajektorii

- $S_{ab,t} = -\sum_{\gamma \in \Gamma_{ab}^{(t)}} P(\gamma) \ln P(\gamma)$
- Produkcja entropii (Shannon, McMillan):

$$s \equiv \lim_{t \to \infty} \frac{S_{ab,t}}{t} = -\sum_i \pi_i^* \sum_j P_{ij} \ln P_{ij}$$

- $s_{\mathrm{GRW}} = \frac{\sum_i k_i \ln k_i}{2L}$
- Maksymalna entropia:

$$s_{\max} = \frac{\ln N_{ab,t}}{t} = \frac{\ln(A^t)_{ab}}{t} \sim \ln \lambda_{max}$$

- Nierówność:

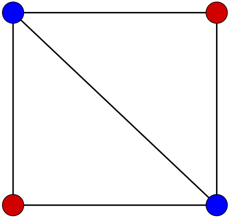
$$s_{\mathrm{GRW}} \leq s_{\max}$$

Największa wartość własna - tw. Frobeniusa-Perrona

- $k_{min} \leq \lambda_{max} \leq k_{max}$
- Nowa nierówność:

$$\exp(s_{GRW}) = \left(\prod_i k_i^{k_i}\right)^{\frac{1}{2L}} \leq \lambda_{max}$$

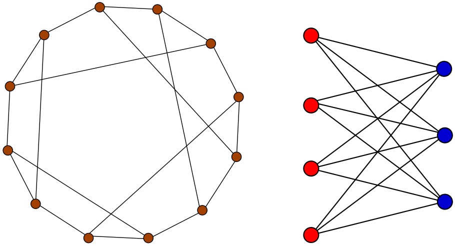
- Example:



$\exp(s_{GRW}) = 108^{1/5} \approx 2.55085$;
$\lambda_{max} = (1+\sqrt{17})/2 \approx 2.56155$;

Równość $s_{GRW} = s_{max}$

- $\exp(s_{GRW}) = \lambda_{max}$;
- Grafy k-regularne; $\lambda_{max} = k$;
- Dwudzielne grafy regularne: $\lambda_{max} = \sqrt{k_1 k_2}$;



MERW

- Wektor własny FP: $\sum_i \psi_i^2 = 1$

$$\sum_j A_{ij}\psi_j = \lambda_{max}\psi_i$$

- Prawdopodobieństwo przeskoku:

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{\lambda_{max}}\frac{\psi_j}{\psi_i}$$

- Prawdopodobieństwo trajektorii:

$$P(\gamma_{ab}^{(t)}) = \frac{1}{\lambda_{max}^t}\frac{\psi_b}{\psi_a}$$

- Stan stacjonarny: $\boxed{\pi_i^* = \psi_i^2}$
- Produkcja entropii: $s_{MERW} = s_{max} = \ln\lambda_{max}$

MERW

- Wektor własny FP: $\sum_i \psi_i^2 = 1$

$$\sum_j A_{ij}\psi_j = \lambda_{max}\psi_i$$

- Prawdopodobieństwo przeskoku:

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{\lambda_{max}}\frac{\psi_j}{\psi_i}$$

- Prawdopodobieństwo trajektorii:

$$P(\gamma_{ab}^{(t)}) = \frac{1}{\lambda_{max}^t}\frac{\psi_b}{\psi_a}$$

- Stan stacjonarny: $\boxed{\pi_i^* = \psi_i^2}$
- Produkcja entropii: $s_{MERW} = s_{max} = \ln \lambda_{max}$

MERW

- Wektor własny FP: $\sum_i \psi_i^2 = 1$

$$\sum_j A_{ij}\psi_j = \lambda_{max}\psi_i$$

- Prawdopodobieństwo przeskoku:

$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{\lambda_{max}} \frac{\psi_j}{\psi_i}$$

- Prawdopodobieństwo trajektorii:

$$P(\gamma_{ab}^{(t)}) = \frac{1}{\lambda_{max}^t} \frac{\psi_b}{\psi_a}$$

- Stan stacjonarny: $\boxed{\pi_i^* = \psi_i^2}$
- Produkcja entropii: $s_{MERW} = s_{max} = \ln \lambda_{max}$

MERW

- Wektor własny FP: $\sum_i \psi_i^2 = 1$

$$\sum_j A_{ij}\psi_j = \lambda_{max}\psi_i$$

- Prawdopodobieństwo przeskoku:

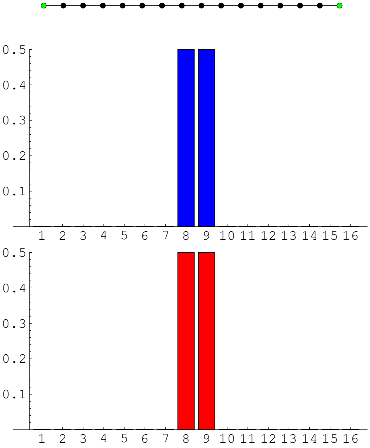
$$P_{ij} = \frac{A_{ij}}{\lambda_{max}}\frac{\psi_j}{\psi_i}$$

- Prawdopodobieństwo trajektorii:

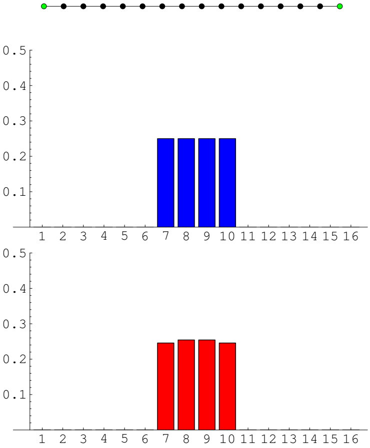
$$P(\gamma_{ab}^{(t)}) = \frac{1}{\lambda_{max}^t}\frac{\psi_b}{\psi_a}$$

- Stan stacjonarny: $\boxed{\pi_i^* = \psi_i^2}$
- Produkcja entropii: $s_{MERW} = s_{max} = \ln \lambda_{max}$

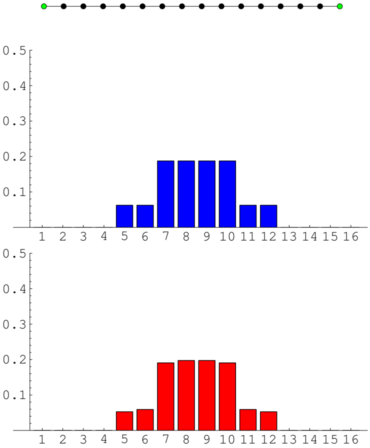
GRW vs. MERW na grafie liniowym



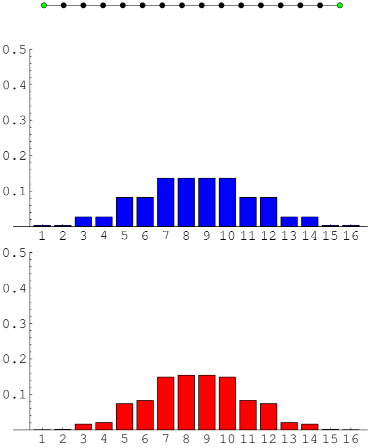
GRW vs. MERW na grafie liniowym



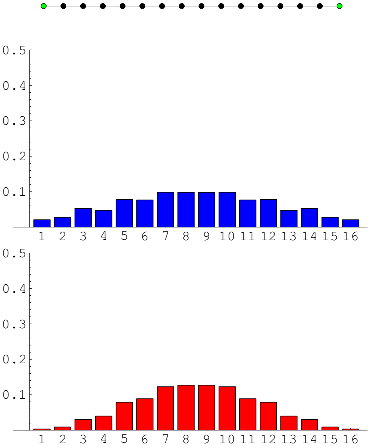
GRW vs. MERW na grafie liniowym



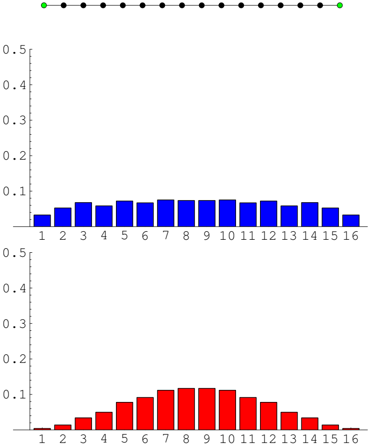
GRW vs. MERW na grafie liniowym



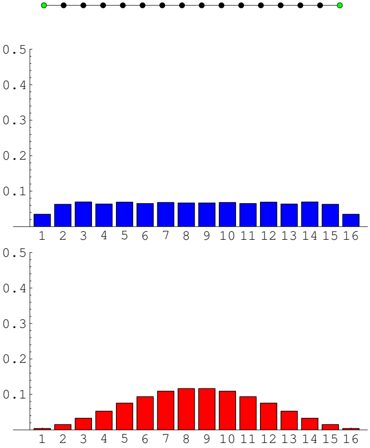
GRW vs. MERW na grafie liniowym



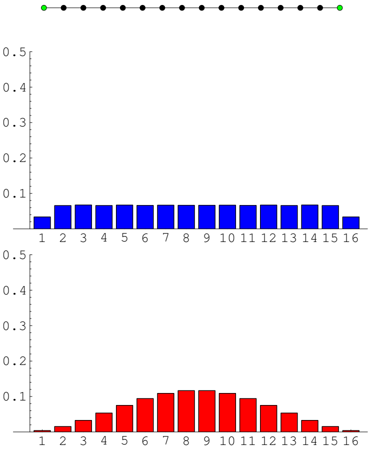
GRW vs. MERW na grafie liniowym



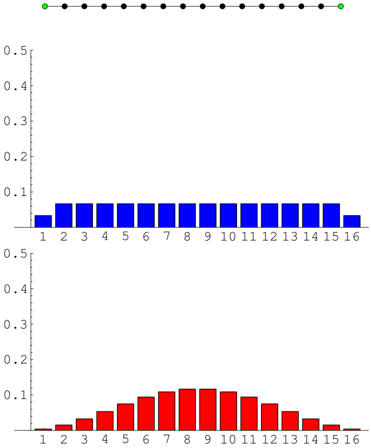
GRW vs. MERW na grafie liniowym



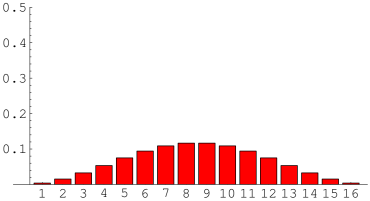
GRW vs. MERW na grafie liniowym



GRW vs. MERW na grafie liniowym

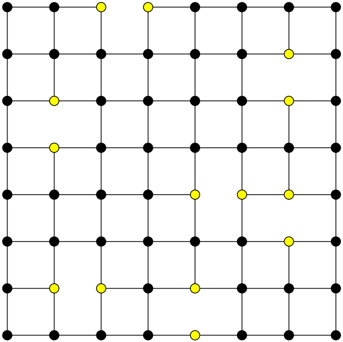


Odpychanie od defektów



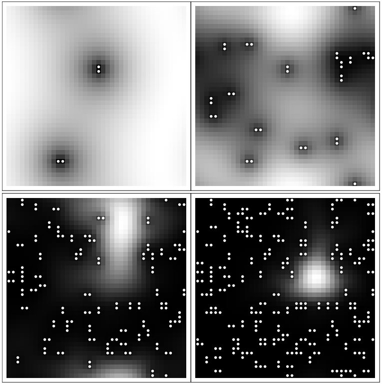
- $\pi_i^* = \frac{2}{L+1} \sin^2 \frac{i\pi}{L+1}; \quad i = 1, \ldots, L$
- Odpychanie od punktów końcowych (defektów)

Siatka z losowymi defektami



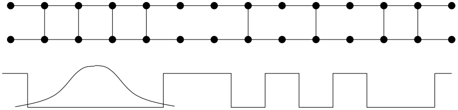
MERW na siatce z losowymi defektami

- 2-wymiarowa siatka + mała ilość defektów: *q* = ułamek usuniętych krawędzi;
- Przykład: 40×40; $q = 0.001, 0.01, 0.05, 0.1$:



Przykład 1-wymiarowy + argument Lifshitza

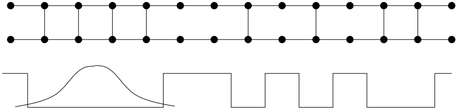
- graf drabinowy z losowo usuniętymi szczeblami:



- $\psi_{i+1} + \psi_{i-1} + r_i\psi_i = \lambda_{max}\psi_i, \quad r_i = 1$ z prawdop. p; 0 z $(1-p)$;
- $\psi_{i+1} + \psi_{i-1} - 2\psi_i + (r_i - 1)\psi_i = (\lambda_{max} - 3)\psi_i$
- Lifshitz, Nieuwenhuizen, Luck
- $-(\Delta\psi)_i + v_i\psi_i = E_0\psi_i; \quad v_i = 1 - r_i; \quad E_0 = 3 - \lambda_{max}$
- lokalizacja na najdłuższej sekwencji szczebli:
  $Lp^n(1-p)^2 \sim 1 \longrightarrow n \sim \ln L / |\ln p|$
- $\psi_i \sim \sin i\pi/(n+1); \quad E_0 \sim \pi^2/n^2$

Przykład 1-wymiarowy + argument Lifshitza

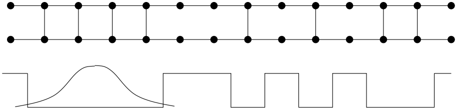
- graf drabinowy z losowo usuniętymi szczeblami:



- $\psi_{i+1} + \psi_{i-1} + r_i\psi_i = \lambda_{max}\psi_i, \quad r_i = 1$ z prawdop. p; 0 z $(1-p)$;
- $\psi_{i+1} + \psi_{i-1} - 2\psi_i + (r_i - 1)\psi_i = (\lambda_{max} - 3)\psi_i$
- Lifshitz, Nieuwenhuizen, Luck
- $-(\Delta\psi)_i + v_i\psi_i = E_0\psi_i; \quad v_i = 1 - r_i; \quad E_0 = 3 - \lambda_{max}$
- lokalizacja na najdłuższej sekwencji szczebli: $Lp^n(1-p)^2 \sim 1 \longrightarrow n \sim \ln L/|\ln p|$
- $\psi_i \sim \sin i\pi/(n+1); \quad E_0 \sim \pi^2/n^2$

Przykład 1-wymiarowy + argument Lifshitza

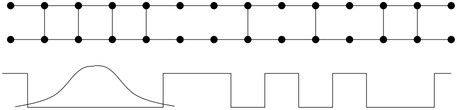
- graf drabinowy z losowo usuniętymi szczeblami:



- $\psi_{i+1} + \psi_{i-1} + r_i\psi_i = \lambda_{max}\psi_i, \quad r_i = 1$ z prawdop. p; 0 z $(1-p)$;
- $\psi_{i+1} + \psi_{i-1} - 2\psi_i + (r_i - 1)\psi_i = (\lambda_{max} - 3)\psi_i$
- Lifshitz, Nieuwenhuizen, Luck
- $-(\Delta\psi)_i + v_i\psi_i = E_0\psi_i; \quad v_i = 1 - r_i; \quad E_0 = 3 - \lambda_{max}$
- lokalizacja na najdłuższej sekwencji szczebli: $Lp^n(1-p)^2 \sim 1 \longrightarrow n \sim \ln L/|\ln p|$
- $\psi_i \sim \sin i\pi/(n+1); \quad E_0 \sim \pi^2/n^2$

Przykład 1-wymiarowy + argument Lifshitza

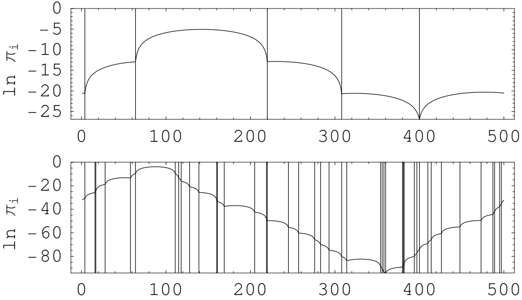
- graf drabinowy z losowo usuniętymi szczeblami:



- $\psi_{i+1} + \psi_{i-1} + r_i \psi_i = \lambda_{max} \psi_i, \quad r_i = 1$ z prawdop. p; 0 z $(1-p)$;
- $\psi_{i+1} + \psi_{i-1} - 2\psi_i + (r_i - 1)\psi_i = (\lambda_{max} - 3)\psi_i$
- Lifshitz, Nieuwenhuizen, Luck
- $-(\Delta\psi)_i + v_i \psi_i = E_0 \psi_i; \quad v_i = 1 - r_i; \quad E_0 = 3 - \lambda_{max}$
- lokalizacja na najdłuższej sekwencji szczebli: $Lp^n(1-p)^2 \sim 1 \longrightarrow n \sim \ln L / |\ln p|$
- $\psi_i \sim \sin i\pi/(n+1); \quad E_0 \sim \pi^2/n^2$

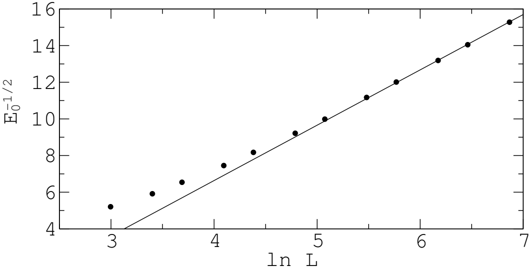
Przykład numeryczny

- $\pi_i^* = \psi_i^2$ for $L = 500$; $q = 1 - p = 0.01, 0.1$.



Test numeryczny

- $E_0 \approx (\pi |\ln p| / \ln L)^2$
- $L = 20, \ldots, 960;\ \ q = 1 - p = 0.1$



Sfery Lifshitza dla $D > 1$

- $-(\Delta\psi)_i + v_i\psi_i = E_0\psi_i$
- $-(\Delta\psi)_i = E_0\psi_i$ z warunkami Dirichleta w największym obszarze sferycznym bez defektów (SFERA LIFSHITZA);
- w 2-wymiarach promień sfery $R \approx (\ln L/(\pi|\ln p|))^{1/2}$

Podsumowanie

- GRW maksymalizuje lokalnie (zachłannie) entropię
- MERW maksymalizuje globalnie entropię trajektorii
- Podobna filozofia do zasady minimalnego działania
- GRW = MERW na sieci regularnej
- Lokalizacja MERW w przypadku losowych defektów
- Klasyczny przykład lokalizacji
- Lokalizacja związana jest ze stanami Lifshitza
- Ciekawa nierówność:

$$\left(\prod_i k_i^{k_i}\right)^{\frac{1}{2L}} \leq \lambda_{max}$$

Podsumowanie

- GRW maksymalizuje lokalnie (zachłannie) entropię
- MERW maksymalizuje globalnie entropię trajektorii
- Podobna filozofia do zasady minimalnego działania
- GRW = MERW na sieci regularnej
- Lokalizacja MERW w przypadku losowych defektów
- Klasyczny przykład lokalizacji
- Lokalizacja związana jest ze stanami Lifshitza
- Ciekawa nierówność:

$$\left(\prod_i k_i^{k_i}\right)^{\frac{1}{2L}} \leq \lambda_{max}$$

Podsumowanie

- GRW maksymalizuje lokalnie (zachłannie) entropię
- MERW maksymalizuje globalnie entropię trajektorii
- Podobna filozofia do zasady minimalnego działania
- GRW = MERW na sieci regularnej
- Lokalizacja MERW w przypadku losowych defektów
- Klasyczny przykład lokalizacji
- Lokalizacja związana jest ze stanami Lifshitza
- Ciekawa nierówność:

$$\left(\prod_i k_i^{k_i}\right)^{\frac{1}{2L}} \leq \lambda_{max}$$

Podsumowanie

- GRW maksymalizuje lokalnie (zachłannie) entropię
- MERW maksymalizuje globalnie entropię trajektorii
- Podobna filozofia do zasady minimalnego działania
- GRW = MERW na sieci regularnej
- Lokalizacja MERW w przypadku losowych defektów
- Klasyczny przykład lokalizacji
- Lokalizacja związana jest ze stanami Lifshitza
- Ciekawa nierówność:

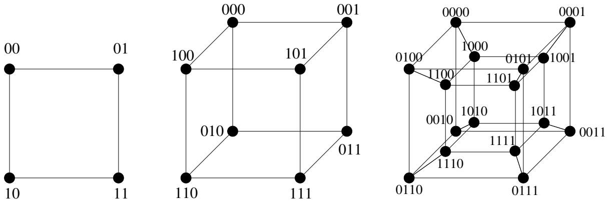
$$\left(\prod_i k_i^{k_i}\right)^{\frac{1}{2L}} \leq \lambda_{max}$$

Zastosowania i spekulacje

- Kwantowe amplitudy w zakrzywionej czasoprzestrzeni

$$K_{ab} = \sum_t \sum_{\gamma_{ab}^{(t)}} \mathrm{e}^{-S_{\mathrm{E}}}; \quad S_{\mathrm{E}} \sim t$$

- Bariery entropiczne i dynamika szkła spinowego;
- Model quasi-gatunków

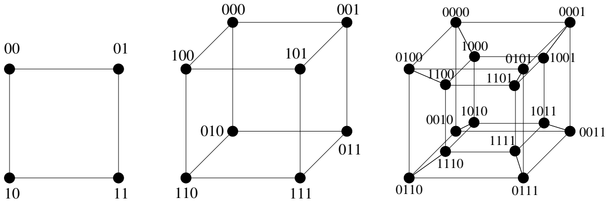


Zastosowania i spekulacje

- Kwantowe amplitudy w zakrzywionej czasoprzestrzeni

$$K_{ab} = \sum_t \sum_{\gamma_{ab}^{(t)}} \mathrm{e}^{-S_\mathrm{E}}; \quad S_\mathrm{E} \sim t$$

- Bariery entropiczne i dynamika szkła spinowego;
- Model quasi-gatunków

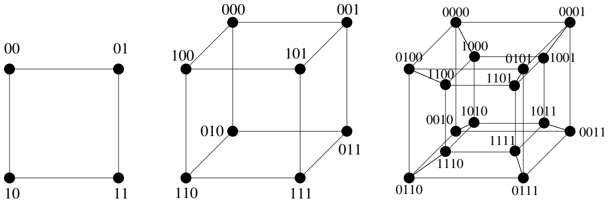


Zastosowania i spekulacje

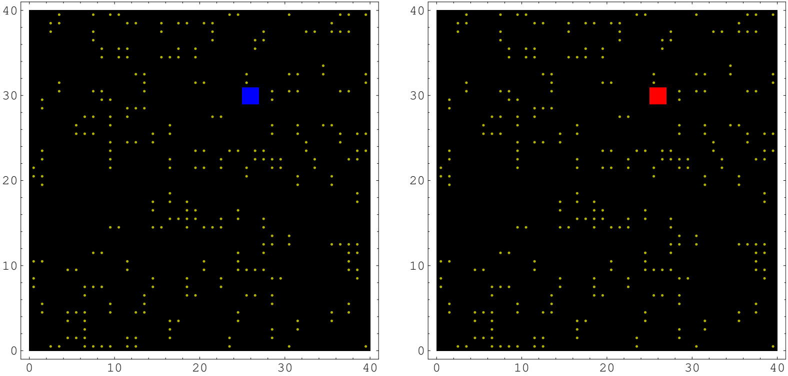
- Kwantowe amplitudy w zakrzywionej czasoprzestrzeni

$$K_{ab} = \sum_{t} \sum_{\gamma_{ab}^{(t)}} \mathrm{e}^{-S_{\mathrm{E}}}; \quad S_{\mathrm{E}} \sim t$$

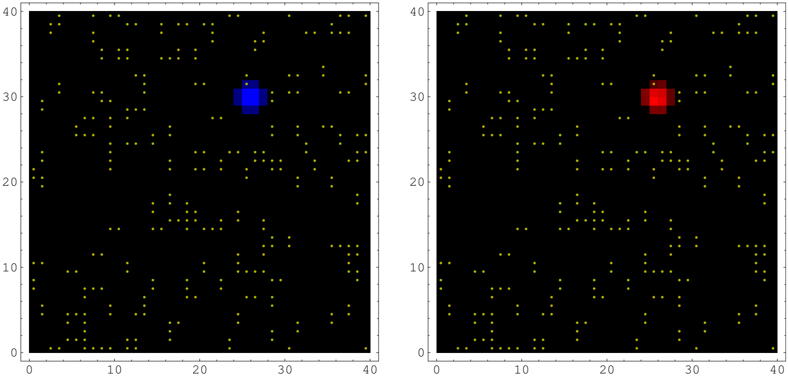
- Bariery entropiczne i dynamika szkła spinowego;
- Model quasi-gatunków



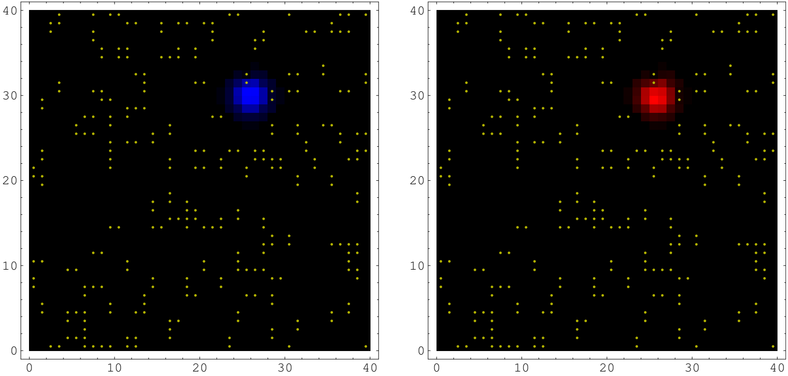
Dynamika MERW



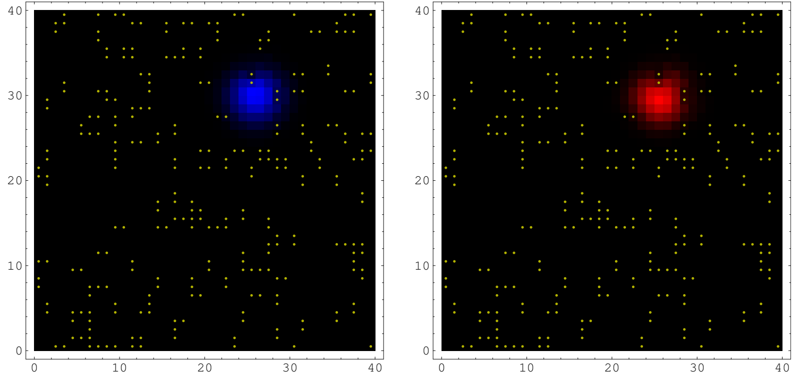
Dynamika MERW



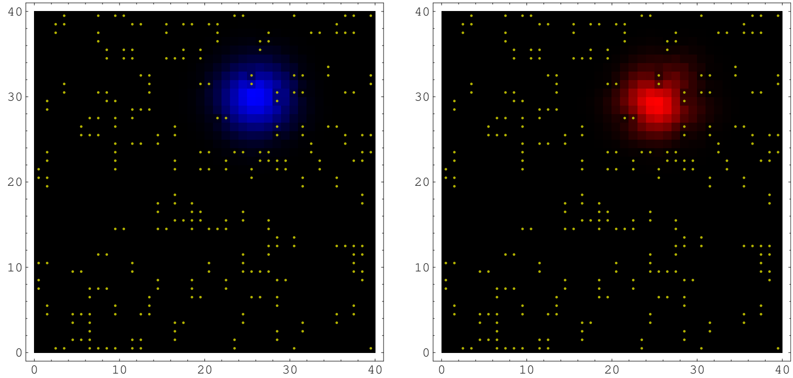
Dynamika MERW



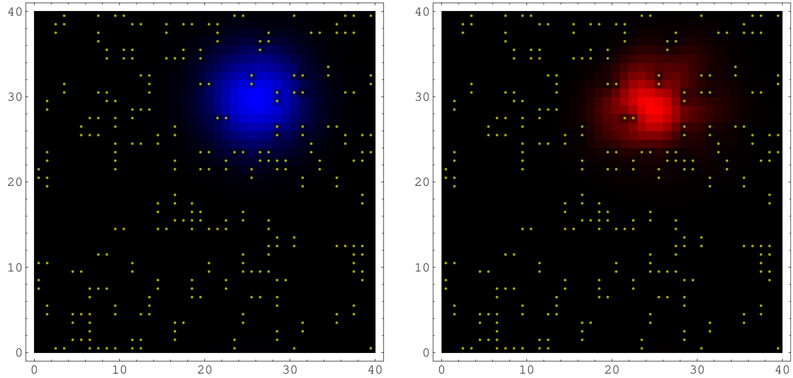
Dynamika MERW



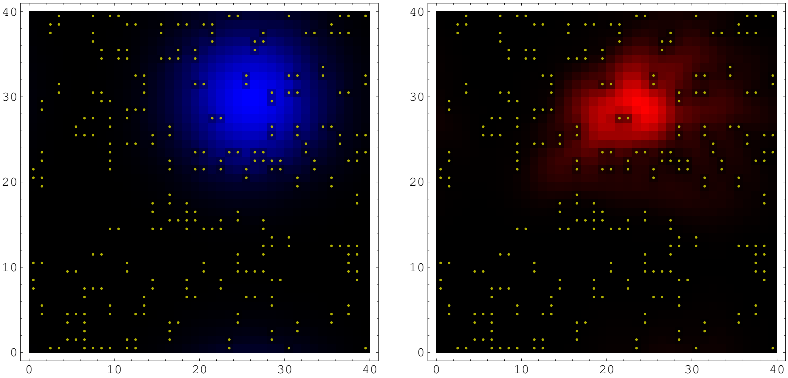
Dynamika MERW



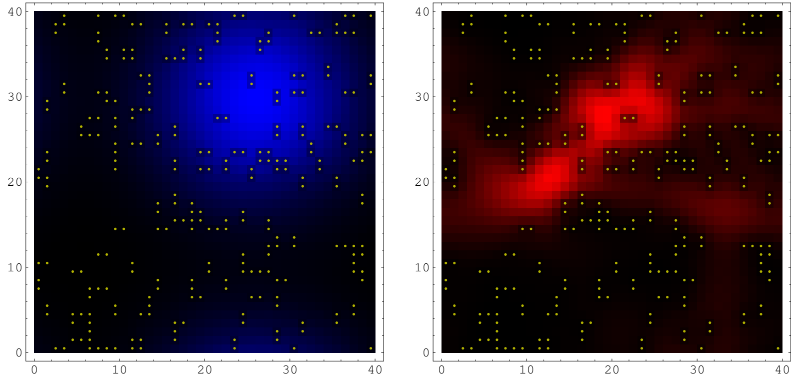
Dynamika MERW



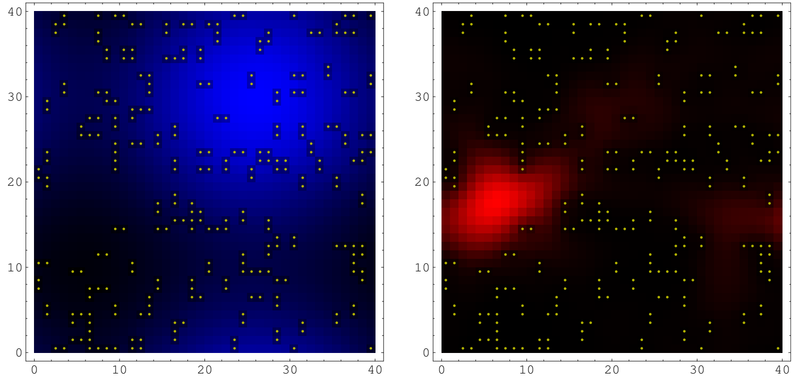
Dynamika MERW



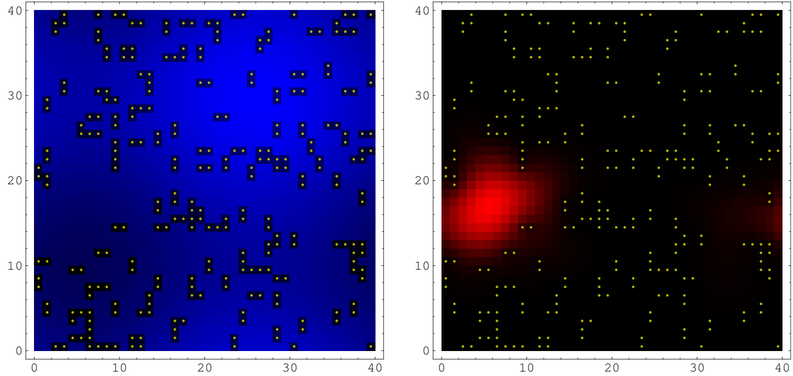
Dynamika MERW



Dynamika MERW



Dynamika MERW



Dynamika MERW