



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Evolución dinámica de sistemas de muchos cuerpos: propiedades estocásticas y ergódicas

Jaume Masoliver i Garcia



Aquesta tesi doctoral està subjecta a la llicència **Reconeixement 4.0. Espanya de Creative Commons.**

Esta tesis doctoral está sujeta a la licencia **Reconocimiento 4.0. España de Creative Commons.**

This doctoral thesis is licensed under the **Creative Commons Attribution 4.0. Spain License.**

EVOLUCION DINAMICA
DE SISTEMAS
DE MUCHOS CUERPOS:
PROPIEDADES ESTOCASTICAS
Y ERGODICAS.

Tesis presentada en la
Facultad de Física de
la Universidad de Barcelona
por
JAUME MASOLIVER i GARCIA
para aspirar al grado de
Doctor en Ciencias Físicas.
Barcelona, Noviembre de 1982.

BIBLIOTECA DE LA UNIVERSITAT DE BARCELONA



0700561775



R. 41.472

AGRADECIMIENTOS

Al Prof. L.M. Garrido y al Dr. J. Marro por aceptar la dirección de esta tesis, incitarme al estudio de las técnicas utilizadas y por su continuo interés, estímulo y sugerencias sin las cuales no existiría este trabajo.

Al Prof. J. Fernández Ferrer, de la Universitat Politècnica de Barcelona, por su eficaz influencia en esta tesis y sus comentarios en nuestras frecuentes entrevistas.

A mis compañeros del Departamento de Física Teórica por su aliento y ayuda, y muy especialmente hacia el Dr. Llosa con quien he mantenido fructíferas y esclarecedoras discusiones.

A la Dirección de la empresa Centro de Cálculo de Sabadell (C.C.S.) por su desinteresada colaboración en la cesión de tiempo de C.P.U. de sus ordenadores.

A todos los miembros del Departamento técnico de C.C.S., especialmente a J. Brossa por su ayuda en el difícil arte del "software".

S U M A R I O

RESUMEN

PRIMERA PARTE

- I.1.- Introducción.
- I.2.- Formulaciones covariante e intrínseca de la ecuación de Fokker-Planck.
 - 2.1.- La formulación covariante.
 - 2.2.- La formulación intrínseca.
- I.3.- Caracterización de una clase de ecuaciones de Fokker-Planck exactamente resolubles.
 - 3.1.- Transformación de una EFP en otra con matriz de difusión \mathcal{D}^v .
 - 3.2.- Condiciones necesarias y suficientes para transformar cualquier EFP en otra con difusión constante.
 - 3.3.- Matriz del cambio de variables. Condiciones sobre el drift.
 - 3.4.- Algunos ejemplos.
- I.4.- Soluciones exactas a ecuaciones de Fokker-Planck no lineales.
 - 4.1.- Una clase de soluciones exactas a una EFP con difusión constante y drift no lineal.
 - 4.2.- Una segunda clase de soluciones exactas para una EFP no lineal.
 - 4.3.- Soluciones no lineales con simetría esférica.

- 4.4.- Condiciones intrínsecas sobre el drift.
- 4.5.- Casos especiales de drift no lineales cuya EFP es exactamente resoluble.
- 4.6.- Apéndice A .
- 4.7.- Apéndice B .

I.5.- Referencias de la primera parte.

SEGUNDA PARTE

- II.1.- Motivación de esta segunda parte.
- II.2.- Solución exacta del sistema unidimensional de varillas rígidas de igual masa y tamaño.
- II.3.- Dinámica molecular del sistema.
- II.4.- Relajación al equilibrio. Comportamiento ergódico del sistema.
- II.5.- Función de autocorrelación de la velocidad.
- II.6.- Función de distribución radial.
- II.7.- Referencias de la segunda parte.

CONCLUSIONES

RESUMEN

En esta Tesis se llega a resultados originales relacionados con las propiedades dinámicas de los sistemas de muchos cuerpos o grados de libertad. En particular se estudian propiedades estocásticas y ergódicas de modelos con evolución temporal que son relevantes en el estudio de ciertos problemas concretos de la Mecánica Estadística.

Atendiendo a los diferentes métodos de análisis utilizados y a las distintas propiedades investigadas, este trabajo ha sido separado en dos partes. La primera parte trata problemas relacionados con las soluciones exactas de la ecuación de Fokker-Planck. En esta parte se caracteriza toda una clase de ecuaciones de Fokker-Planck con difusión no constante y se determinan soluciones exactas de ecuaciones de Fokker-Planck con arrastre (drift) no-lineal. Este tipo de soluciones es de interés actual en el estudio de inestabilidades como las que pueden dar lugar a una transición de fase.

En la segunda parte se realiza un experimento numérico para detallar las propiedades cinéticas y ergódicas de un sistema unidimensional de varillas rígidas con masas y tamaños distintos. Se determinan las características de la relajación de este sistema, las funciones de correlación y distribución, las constantes de difusión, etc. ... para establecer sus diferencias esenciales con el sistema de masas y tamaños iguales. El sistema estudiado, que nunca ha podido ser resuelto analíticamente, es interesante como paso intermedio en el tratamiento de mezclas binarias en un espacio tridimensional y para elucidar ciertos problemas fundamentales de la Mecánica Estadística del No-Equilibrio.

PRIMERA PARTE

I.1. Introducción

El objetivo final de la Teoría de Muchos Cuerpos es el de poseer una conexión, y por tanto, una explicación completa, entre el comportamiento microscópico y el comportamiento macroscópico de cualquier sistema físico real.

La descripción del comportamiento macroscópico mediante ecuaciones microscópicas es un trabajo sumamente difícil, laborioso y en muchos casos prácticamente inviable. Es por ello que se buscan ecuaciones dinámicas fenomenológicas para las variables que describen el comportamiento macroscópico del sistema en estudio, las llamadas "variables macroscópicas", $q = (q^1, \dots, q^{\nu}, \dots, q^n)$.

En estas ecuaciones fenomenológicas se introducen las desviaciones, generalmente aleatorias, del comportamiento determinista. Las desviaciones aleatorias que reciben los nombres alternativos de "fluctuaciones", "ruido" o "términos estocásticos", se han de tener en cuenta debido básicamente al desconocimiento del conjunto de la dinámica microscópica del sistema o del proceso físico.

Las ecuaciones dinámicas en las que aparecen términos aleatorios, se denominan ecuaciones estocásticas y su forma más usual es la dada por las ecuaciones estocásticas de tipo Langevin (f) :

$$\dot{q}^{\nu}(t) = K^{\nu}(q(t)) + q_{\alpha}^{\nu}(q(t)) \cdot \xi^{\alpha}(t). \quad (1.1)$$

(f) En todo este trabajo sumamos sobre índices griegos repetidos, pero no sobre índices latinos repetidos, por ejemplo:

$$q_{\mu} q^{\mu} = \sum_{i=1}^n q_i^2$$

Las funciones $K(q)$ y $g(q)$ son funciones analíticas ordinarias de las variables macroscópicas del sistema. Las funciones $q_i(t)$ ($i = 1, 2, \dots, m$) son funciones fluctuantes o aleatorias del tiempo. Estas funciones sólo se pueden describir mediante sus propiedades estadísticas.

El primer término del segundo miembro de la ec. (1.1) es un término determinista y da cuenta de la "fuerza" aplicada al sistema, mientras que en el segundo término aparecen las fluctuaciones como factores multiplicativos de componentes $g_i(q(t))$.

Observemos que tanto $\dot{q}_i(t)$ como $q_i(t)$ en la ec. (1.1) no están bien definidas, pues las funciones $q_i(t)$ no son funciones analíticas ordinarias sino funciones estocásticas. Para resolver esta dificultad se supone que las $q_i(t)$ (que son continuas en t pero no diferenciables) se pueden aproximar por una sucesión de funciones continuas y diferenciables $q_i(t)$, con lo cual se pueden tratar las derivadas $\dot{q}_i(t)$ como la sucesión de $q_i(t)$ en el sentido de una función generalizada. Así las $q_i(t)$ obedecen las reglas formales del cálculo 1.

Desde un punto de vista teórico la ecuación de Langevin (1.1) se puede deducir de la dinámica microscópica del sistema. En efecto, en un sistema cerrado la dinámica microscópica está determinada por un Hamiltoniano, de forma que el conocimiento de todos los grados de libertad en un instante de tiempo es suficiente para determinar la evolución temporal del sistema. Así, en principio, la ecuación de Langevin (1.1) se puede deducir de la ecuación de Liouville aplicando un proceso de "coarse graining". En esta descripción, las variables macroscópicas $q_i(t)$ son las magnitudes que se conservan y las fluctuaciones son las manifestaciones de los grados de libertad suprimidos en el procedimiento de

"coarse graining". Tal separación de variables es posible siempre que haya distintas escalas de tiempo en la evolución del sistema. La escala temporal corta es la de las interacciones microscópicas. La escala temporal larga es el tiempo sobre el cual evolucionan las magnitudes que se conservan (energía, impulso,..). Esta es la descripción física del origen de las fluctuaciones internas de un sistema físico.

En un sistema abierto hay que introducir en el Hamiltoniano la interacción un campo externo, que puede ser fluctuante (fluctuaciones externas).

Resumiendo, las variables $q^{\nu}(t)$ en la ec. (1.1) son las que tienen una evolución lenta (en comparación con los tiempos de las interacciones microscópicas). En un sistema cerrado el efecto de las variables microscópicas se manifiesta en las funciones $\xi^{\alpha}(t)$. En un sistema abierto las funciones aleatorias $\xi^{\alpha}(t)$ incluyen también a un posible campo exterior fluctuante.

Aunque muy sugestiva, esta deducción microscópica de la evolución macroscópica del sistema es inviable aún en los casos más sencillos. Siendo prácticamente imposible, para un sistema con muchos grados de libertad, empezar de la ecuación de Liouville y usando un procedimiento de "coarse graining" obtener una ecuación del tipo (1.1), donde las propiedades estadísticas de las $\xi^{\alpha}(t)$ se siguen de la deducción. Ello justifica el que se postulen ecuaciones fenomenológicas adecuadas al sistema o proceso físico en estudio.

Desde el punto de vista de la Mecánica Estadística, la ecuación de Langevin (1.1) representa un modelo matemático para la evolución de un sistema que es miembro de un conjunto de sistemas equivalentes desde el punto de vista dinámico. A partir de un estado inicial, la evolución temporal de cada sistema

del conjunto está caracterizada por una realización de la fuerza estocástica $\xi(t)$. Luego las propiedades del conjunto en función del tiempo, están incluidas en $P(q, t/q_0)$, que es la densidad de probabilidad condicional de encontrar al sistema, en el instante t , dentro del intervalo $(q(t), q(t) + dq(t))$, sabiendo que el sistema comenzó en $q(0) = q_0$.

Es por ello que una descripción de la dinámica del sistema paralela a la dada por la ecuación de Langevin (y en muchos casos más ventajosa) consiste en encontrar una ecuación, llamada ecuación maestra, para la evolución temporal de la densidad de probabilidad $P(q, t/q_0)$.

Para los procesos aleatorios, continuos y Markovianos esta ecuación maestra es la ecuación de Fokker-Planck (EFP) que la escribimos de la forma:

$$\dot{P}(q, t) = \left\{ -\partial_v f^v(q) + \frac{1}{2} \partial_{q^\mu}^2 D^{\mu\nu}(q) \right\} \cdot P(q, t), \quad (1.2)$$

siendo $\partial_v = \partial / \partial q^v$; $\partial_{q^\mu}^2 = \partial^2 / \partial q^\mu \partial q^\mu$; $f^v(q)$ es el drift y $D^{\mu\nu}(q)$ es la matriz de difusión.

Para deducir la EFP (1.2) a partir de la ecuación de Langevin (1.1), es necesario realizar las tres hipótesis siguientes sobre los promedios y las correlaciones de las fuerzas estocásticas $\xi^a(t)$:

- (i) El promedio de las fluctuaciones $\xi^a(t)$ sobre el conjunto de sistemas macroscópicos idénticos es cero:

$$\langle \xi^a(t) \rangle = 0;$$

esto es, que en promedio, las fluctuaciones se anulan unas con otras.

(ii) Las fluctuaciones están delta-correlacionadas:

$$\langle \xi^\alpha(t+\tau) \cdot \xi^\beta(t) \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(\tau)$$

esta hipótesis denominada de "ruido blanco" significa que no existe correlación entre fluctuaciones correspondientes a instantes de tiempo diferentes.

(iii) Las fluctuaciones están distribuidas según la ley de Gauss. Ello significa que todos los momentos de orden superior de las $\xi^\alpha(t)$ se pueden

expresar en función de los momentos de orden dos. En este caso la ecuación de evolución de la densidad del espacio fásico $P(q,t)$, se reduce a una ecuación diferencial de segundo orden, i.e., a la ecuación de Fokker-Planck.

Aplicando estas hipótesis se deduce la EFP (1.2) a partir de la ecuación de Langevin (1.1), resultando que [1]:

$$f^\nu(q) = K^\nu(q) + \frac{1}{2} \partial_\mu g_\alpha^\nu(q) \cdot g_\beta^\mu(q) - \delta^{\alpha\beta} \quad (1.3)$$

y

$$D^{\nu\mu}(q) = g_\alpha^\nu(q) \cdot g_\beta^\mu(q) \cdot \delta^{\alpha\beta} \quad (1.4)$$

Matemáticamente la EFP (1.2) está mucho más fundamentada que la ecuación de Langevin (1.1). También físicamente la EFP es mejor punto de partida para el estudio macroscópico del sistema, ya que no contiene las fuerzas estocásticas que son un remanente de las variables microscópicas y pertenecen a un espacio fásico totalmente distinto al de las variables macroscópicas.

Evidentemente obtener una expresión analítica explícita para la densidad de probabilidad $P(q, t/q_0)$ es de gran utilidad de cara a conocer la evolución temporal del sistema en estudio. Sin embargo, la mayor parte de las veces, o bien sólo se conocen expresiones aproximadas de $P(q, t/q_0)$, o bien nos hemos conformado en el conocimiento parcial de la evolución del sistema que dan las ecuaciones de transporte de los momentos de $P(1, t/q_0)$.

Hasta la fecha tan solo se ha podido resolver exactamente la EFP para los procesos de Ornstein-Uhlenbeck, esto es, cuando la matriz de difusión es constante y el drift es lineal:

$$f^{\nu}(q) = a_{\mu}^{\nu} q^{\mu} + b^{\nu}, \quad (1.5)$$

en este caso la solución de la ecuación de Fokker-Planck (1.2) para la densidad de probabilidad $P(1, t/q_0)$ con la condición inicial usual:

$$P(q, 0/q_0) = \delta^n(q - q_0)$$

es ([2], [3]):

$$P(q, t/q_0) = (\pi^n \det \sigma_{\mu\nu}(t))^{-1/2} \times \exp \left\{ -\sigma_{\mu\nu}^{-1}(t) (q^{\mu} - q^{\mu}(t)) (q^{\nu} - q^{\nu}(t)) \right\}, \quad (1.6)$$

con

$$q^{\mu}(t) \equiv \gamma_{\rho}^{\mu}(t) \cdot [q_0^{\rho} + a_{\tau}^{\rho} b^{\tau}] - a_{\rho}^{-1 \mu} b^{\rho},$$

donde $\gamma_{\rho}^{\mu}(t)$ está definida por:

$$\dot{\gamma}_p^\mu(t) = a_\alpha^\mu \gamma_p^\alpha(t)$$

$$\gamma_p^\mu(0) = \delta_p^\mu$$

y

$$\sigma_{\mu\nu}(t) = [\gamma_{\mu}^p(0) \gamma_{\nu}^z(0) - \gamma_{\mu}^p(t) \gamma_{\nu}^z(t)] \Omega_{pz}$$

$$a_\mu^\alpha \Omega_\alpha^\nu + \Omega_\mu^\alpha a_\alpha^\nu = -2 \delta_\mu^\nu$$

El objetivo principal de la primera parte de este trabajo consiste en encontrar más soluciones exactas de la ecuación de Fokker-Planck y en su aplicación física.

Desde un punto de vista matemático, una de las primeras dificultades con que nos encontramos al intentar resolver una ecuación parabólica, como es la EPF (1.2), es que la matriz de difusión, $D^{\mu\nu}(q)$, no sea constante. Por ello nos preguntamos: ¿En qué condiciones existe un cambio de variables, $q = q(q')$, que transforme la matriz de difusión en una matriz constante? y, si es así, ¿cuál es este cambio? Bajo estas preguntas matemáticas subyacen cuestiones físicas de importancia: ¿Existe un sistema completo de variables macroscópicas para el cual la evolución temporal del sistema se realiza con difusión constante? ¿Cómo tiene que ser la estructura física del sistema para que esto sea así?

La respuesta a estas preguntas la buscamos dentro del marco de las formulaciones covariante e intrínseca de la ecuación de Fokker-Planck ([4], [5], [6]) que desarrollaremos en la siguiente sección. En la Secc. 3 se dan las condiciones necesarias y suficientes para que una EPF cualquiera se pueda transformar en una EPF con difusión constante, caracterizándose toda una clase de EPF exactamente resolubles [7].

Sin embargo una EFP que se haya transformado en otra con difusión constante tendrá solución exacta -del tipo (1.6)- tan solo cuando el drift transformado sea lineal. Sabido es que actualmente uno de los problemas de interés para la Teoría de Muchos Cuerpos y para la Mecánica Estadística es el relacionado con las no-linealidades de los procesos físicos (inestabilidades, cambios de fase, etc....). Es por ello que en la Secc. 4 damos soluciones exactas de la EFP para dos clases de drift no lineales.

I.2. Formulaciones covariante e intrínseca de la ecuación de Fokker-Planck.

2.1. Formulación covariante

Una ecuación es covariante bajo las transformaciones de coordenadas si la forma de la ecuación no varía por las transformaciones. Como el principio de la covariancia afirma que todas las leyes de la Física se pueden poner de forma covariante, tendrá sentido escribir la ecuación de Fokker-Planck en forma covariante.

Aunque algunos aspectos de la covariancia de la ecuación de Fokker-Planck fueron estudiados en 1933 por A. Kolmogoroff [8], ha sido mucho más reciente la obtención, por R. Graham [4] y L. Garrido [5], de una ecuación de Fokker-Planck covariante bajo las transformaciones generales de coordenadas. La formulación dada por R. Graham abarca también a la ecuación de Langevin (1.2). Ambas formulaciones se basan en la elección de la matriz de difusión $D^{\mu\nu}(q)$ como tensor métrico de la variedad M formada por los estados físicos del sistema y estudian la covariancia de la EFP mediante los métodos de la Geometría Diferencial de Riemann [9].

Sin embargo, en la formulación dada por L. Garrido, se imponen menos condiciones sobre las derivadas covariantes de la matriz de difusión. Este hecho lleva a ver que es más económico basar la covariancia en el cálculo diferencial exterior que en la geometría riemanniana, lo cual desemboca en una formulación mucho más potente de la EFP: la formulación intrínseca [6], que desarrollaremos en el segundo apartado de esta Sección. Pasemos pues a estudiar la covariancia de la ecuación de Fokker-Planck.

Bajo una transformación general de coordenadas $q' = q'(q)$, tenemos:

$$dq'^{\nu} = \frac{\partial q'^{\nu}}{\partial q^{\mu}} dq^{\mu} \quad (2.1)$$

En estas coordenadas, la ecuación de Fokker-Planck (1.2) es:

$$\dot{P}(q', t) = \left\{ -\partial'_{\nu} f'^{\nu}(q') + \frac{1}{2} \partial'^2_{\nu\mu} D'^{\nu\mu}(q') \right\} \cdot P(q', t) \quad (2.2)$$

siendo $\partial'_{\nu} \equiv \partial / \partial q'^{\nu}$ y $\partial'^2_{\nu\mu} \equiv \partial^2 / \partial q'^{\nu} \partial q'^{\mu}$. De las ecuaciones (1.3)

y (1.4) tenemos:

$$f'^{\nu} = K'^{\nu} + \frac{1}{2} \partial'_{\mu} g'^{\nu}_{\alpha} \cdot g'^{\mu}_{\beta} \delta^{\alpha\beta} \quad (2.3)$$

$$D'^{\nu\mu} = g'^{\nu}_{\alpha} g'^{\mu}_{\beta} \delta^{\alpha\beta}$$

con

$$K'^{\nu} = \frac{\partial q'^{\nu}}{\partial q^{\mu}} K^{\mu} \quad ; \quad g'^{\nu}_{\alpha} = \frac{\partial q'^{\nu}}{\partial q^{\mu}} g^{\mu}_{\alpha} \quad (2.4)$$

Vemos que K^{ν} se transforma como un vector contravariante, mientras que la matriz g^{ν}_{α} no se transforma como un tensor [9]. Sustituyendo las expresiones (2.4) en las ecuaciones (2.3) y volviendo a tener en cuenta las ecs. (1.3) y (1.4) obtenemos la conexión entre f'^{ν} y $D'^{\nu\mu}$ con f^{ν} y $D^{\nu\mu}$:

$$f'^{\nu} = \frac{\partial q'^{\nu}}{\partial q^{\lambda}} f^{\lambda} + \frac{1}{2} D^{\mu\lambda} \frac{\partial^2 q'^{\nu}}{\partial q^{\mu} \partial q^{\lambda}} \quad (2.5)$$

$$D'^{\nu\mu} = \frac{\partial q'^{\nu}}{\partial q^{\lambda}} \cdot \frac{\partial q'^{\mu}}{\partial q^{\alpha}} D^{\lambda\alpha}$$

Así, bajo una transformación general de coordenadas, el drift f^{ν} no se transforma como un vector contravariante, mientras que la matriz de difusión sí se transforma como un tensor.

De cara a relacionar P' con P , observemos que $Pdq = P'dq'$ es una probabilidad y, por lo tanto, un número invariante y sin dimensiones que se transforma como un escalar. Por otra parte, los elementos de volumen dq y dq' están conectados por:

$$dq' = \left\| \frac{\partial q'}{\partial q} \right\| dq,$$

siendo $\left\| \frac{\partial q'}{\partial q} \right\|$ el Jacobiano de la transformación (2.1) y como:

$$\left\| \frac{\partial q'}{\partial q} \right\| = \frac{1}{\sqrt{D}}$$

con $D \equiv \det(D^{\mu\nu})$ ([4], [5], [9]), entonces la magnitud:

$$S(q,t) \equiv P(q,t) \sqrt{D} \quad (2.6)$$

es una densidad de probabilidad que se transforma como un escalar.

Como ya hemos indicado el drift $f^{\nu}(q)$ no se transforma como un vector contravariante; sin embargo, teniendo en cuenta que [4]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} D^{\mu\lambda} \frac{\partial^2 q^{\nu}}{\partial q^{\mu} \partial q^{\lambda}} &= \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{D} \frac{\partial}{\partial q^{\mu}} \frac{D^{\mu\lambda}}{\sqrt{D}} - \frac{\partial q^{\nu}}{\partial q^{\lambda}} \left(\frac{1}{2} \sqrt{D} \frac{\partial}{\partial q^{\mu}} \frac{D^{\lambda\mu}}{\sqrt{D}} \right), \end{aligned}$$

el drift transformado (2.5) queda:

$$f'^{\nu} = \frac{\partial q'^{\nu}}{\partial q^{\lambda}} \left[f^{\lambda} - \frac{1}{2} \sqrt{D} \frac{\partial}{\partial q^{\mu}} \frac{D^{\lambda\mu}}{\sqrt{D}} \right] + \frac{1}{2} \sqrt{D'} \frac{\partial}{\partial q'^{\mu}} \frac{D'^{\nu\mu}}{\sqrt{D'}} \quad (2.7)$$

o sea:

$$f'^{\nu} - \frac{1}{2} \sqrt{D'} \frac{\partial}{\partial q'^{\mu}} \frac{D'^{\nu\mu}}{\sqrt{D'}} = \frac{\partial q'^{\nu}}{\partial q^{\lambda}} \left[f^{\lambda} - \frac{1}{2} \sqrt{D} \frac{\partial}{\partial q^{\mu}} \frac{D^{\lambda\mu}}{\sqrt{D}} \right]$$

y vemos claramente que la magnitud:

$$h^{\nu} = f^{\nu} - \frac{1}{2} \sqrt{D} \frac{\partial}{\partial q^{\mu}} \left(\frac{D^{\nu\mu}}{\sqrt{D}} \right) \quad (2.8)$$

se transforma como un vector contravariante: el drift contravariante. Sustituyendo f^{ν} de la ec. (2.8) y $P(q,t)$ de la ec. (2.6) en la EFP (1,2), esta ecuación queda:

$$\begin{aligned} \dot{S} &= -\sqrt{D} \cdot \partial_{\nu} \left\{ \frac{1}{\sqrt{D}} \left(h^{\nu} S - \frac{1}{2} D^{\mu\nu} \nabla_{\mu} S \right) \right\} = \\ &= - \left\{ -\frac{1}{2} \partial_{\nu} (\ln D) \cdot \left(h^{\nu} S - \frac{1}{2} D^{\mu\nu} \nabla_{\mu} S \right) + \partial_{\nu} \left(h^{\nu} S - \frac{1}{2} D^{\mu\nu} \nabla_{\mu} S \right) \right\} \quad (2.9) \end{aligned}$$

Siendo $\bar{\nabla}_{\mu}$ la derivada covariante respecto de q^{μ} . Como S es un escalar, su derivada covariante coincide con la derivada ordinaria: $\bar{\nabla}_{\mu} S = \partial_{\mu} S$ [9].

Para obtener la forma covariante de la EFP, es necesario especificar las derivadas covariantes de la matriz de difusión $D^{\mu\nu}$ y del tensor covariante simétrico, $D_{\mu\nu} = D_{\nu\mu}$, definido por:

$$D^{\lambda\mu} D_{\mu\nu} = D_{\nu\mu} D^{\mu\lambda} = \delta_{\nu}^{\lambda} \quad (2.10)$$

estas derivadas son ([5], [9]) :

$$\begin{aligned}\nabla_{\lambda} D_{\mu\nu} &= \partial_{\lambda} D_{\mu\nu} - \Gamma_{\mu\lambda}^{\rho} D_{\rho\nu} - \Gamma_{\nu\lambda}^{\rho} D_{\mu\rho} \\ \nabla_{\nu} D_{\mu\lambda} &= \partial_{\nu} D_{\mu\lambda} - \Gamma_{\mu\nu}^{\rho} D_{\rho\lambda} - \Gamma_{\lambda\nu}^{\rho} D_{\mu\rho} \\ \nabla_{\mu} D_{\lambda\nu} &= \partial_{\mu} D_{\lambda\nu} - \Gamma_{\lambda\mu}^{\rho} D_{\rho\nu} - \Gamma_{\nu\mu}^{\rho} D_{\lambda\rho}\end{aligned}\tag{2.11}$$

donde $\Gamma_{\mu\lambda}^{\rho}$ son los símbolos de Christoffel que determinan la conexión afín.

Sumando las dos primeras ecuaciones (2.11) y restando la tercer, tenemos:

$$\begin{aligned}\Gamma_{\lambda\nu}^{\rho} &= \frac{1}{2} D^{\rho\mu} (\partial_{\lambda} D_{\mu\nu} + \partial_{\nu} D_{\mu\lambda} - \partial_{\mu} D_{\lambda\nu}) \\ &\quad - \frac{1}{2} D^{\rho\mu} (\nabla_{\lambda} D_{\mu\nu} + \nabla_{\nu} D_{\mu\lambda} - \nabla_{\mu} D_{\lambda\nu}) \\ &\quad + \frac{1}{2} D^{\rho\mu} (D_{\nu\rho} (\Gamma_{\lambda\mu}^{\rho} - \Gamma_{\mu\lambda}^{\rho}) + D_{\lambda\rho} (\Gamma_{\nu\mu}^{\rho} - \Gamma_{\mu\nu}^{\rho})) \\ &\quad + \frac{1}{2} (\Gamma_{\lambda\nu}^{\rho} - \Gamma_{\nu\lambda}^{\rho}).\end{aligned}\tag{2.12}$$

Pero si $D_{\mu\nu}$ se toma como tensor métrico del espacio fásico, el primer sumando del segundo miembro de (2.12) es la conexión riemaniana $\overset{R}{\Gamma}_{\lambda\nu}^{\rho}$ del espacio [9] :

$$\overset{R}{\Gamma}_{\lambda\nu}^{\rho} = \frac{1}{2} D^{\rho\mu} (\partial_{\lambda} D_{\mu\nu} + \partial_{\nu} D_{\mu\lambda} - \partial_{\mu} D_{\lambda\nu}) = \overset{R}{\Gamma}_{\nu\lambda}^{\rho}\tag{2.13}$$

Por otra parte, el tensor de torsión es:

$$T_{\mu\nu}^{\rho} \equiv \Gamma_{\mu\nu}^{\rho} - \Gamma_{\nu\mu}^{\rho} = -T_{\nu\mu}^{\rho}\tag{2.14}$$

y si definimos:

$${}^{\rho}T_{\mu\nu} \equiv D_{\rho\lambda} T_{\mu\nu}^{\lambda} = -{}^{\rho}T_{\nu\mu}, \quad (2.15)$$

la ec. (2.12) se puede escribir:

$$\begin{aligned} \bar{\Gamma}_{\lambda\nu}^{\rho} &= \frac{R}{\lambda\nu} - \frac{1}{2} D^{\rho\mu} (\nabla_{\lambda} D_{\mu\nu} + \nabla_{\nu} D_{\mu\lambda} - \nabla_{\mu} D_{\lambda\nu}) + \\ &+ \frac{1}{2} D^{\rho\mu} (\nu T_{\lambda\mu} + \lambda T_{\nu\mu}) + \frac{1}{2} T_{\lambda\nu}^{\rho} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Teniendo en cuenta que $D^{\mu\rho}$ es un tensor simétrico y que las magnitudes

$\partial_{\rho} D_{\mu\nu} - D_{\mu} D_{\rho\nu}$ y $\nabla_{\rho} D_{\mu\nu} - \nabla_{\mu} D_{\rho\nu}$ son antisimétricas respecto de los índices μ, ρ , de (2.16) se sigue que la contracción $\bar{\Gamma}_{\rho\nu}^{\rho}$ es:

$$\bar{\Gamma}_{\rho\nu}^{\rho} = \frac{R}{\rho\nu} - \frac{1}{2} D^{\mu\rho} \nabla_{\nu} D_{\mu\rho} \quad (2.17)$$

siendo [9]:

$$\frac{R}{\rho\nu} = \frac{1}{2} D^{\mu\rho} \partial_{\nu} D_{\mu\rho} = \sqrt{g} \partial_{\nu} \left(\frac{1}{\sqrt{g}} \right) = -\frac{1}{2} \partial_{\nu} (\ln g) \quad (2.18)$$

En función de la contracción $\bar{\Gamma}_{\rho\nu}^{\rho}$ podemos escribir la divergencia covariante de cualquier vector contravariante; V^{ν} :

$$\nabla_{\nu} V^{\nu} = \partial_{\nu} V^{\nu} + \bar{\Gamma}_{\rho\nu}^{\rho} V^{\nu} \quad (2.19)$$

De las ecuaciones (2.17) y (2.19) vemos que el tensor de torsión, contenido en

la conexión afín, $\bar{\Gamma}_{\nu\lambda}^{\rho}$, no contribuye al valor de la divergencia de cualquier

vector. Así pues, identificando el vector V^{ν} con la expresión:

$$h^{\nu} S = -\frac{1}{2} D^{\mu\nu} \nabla_{\mu} S,$$

que aparece en la EFP (2.9) y teniendo en cuenta las ecuaciones (2.17) y (2.18), llegamos a la expresión covariante de la ecuación de Fckker-Planck:

$$\dot{S} = - \nabla_{\nu} \left(h^{\nu} S - \frac{1}{2} \mathcal{D}^{\mu\nu} \nabla_{\mu} S \right) - \frac{1}{2} \mathcal{D}^{\sigma\tau} \nabla_{\nu} D_{\sigma\tau} \left(h^{\nu} S - \frac{1}{2} \mathcal{D}^{\mu\nu} \nabla_{\mu} S \right). \quad (2.20)$$

De este desarrollo hay que remarcar tres aspectos importantes. En primer lugar se ha llegado a la ec. (2.20) sin ninguna restricción sobre la derivada covariante de la matriz de difusión. Esto significa un avance respecto del desarrollo dado por R. Graham [4] en el que se impone la condición extra:

$\nabla_{\nu} D_{\sigma\tau} = 0$, lo cual lleva a una ecuación de Fokker-Planck invariante. También el desarrollo efectuado aquí es válido aunque los elementos de la conexión afín, $\Gamma_{\lambda\gamma}^{\rho}$, no sean simétricos en sus índices inferiores (o sea cuando el tensor de torsión (2.14) no sea nulo).

En segundo lugar observemos que todo este desarrollo no es válido si la matriz de difusión es un tensor singular. En este caso es necesario trabajar con otro tensor métrico no singular que podría deducirse de la geometría del problema físico.

El último aspecto a remarcar es que para estudiar la covariancia de la ecuación de Fokker-Planck no es necesario conocer todas las componentes de la conexión afín, siendo suficiente conocer el valor de la contracción Γ_{ρ}^{ρ} , pudiendo dejar el resto de los componentes de la conexión totalmente indeterminados. Así para el estudio de la covariancia de la ecuación de Fokker-Planck la geometría diferencial riemanniana no es la técnica más económica.

Realmente para el estudio de la covariancia de la EFP ha sido suficiente

introducir tan solo la covariancia de los tensores antisimétricos; pero el estudio de los tensores antisimétricos y de sus derivadas está dentro del Cálculo Diferencial Exterior [10]. Luego parece más conveniente escribir la ecuación de Fokker-Planck usando los métodos y operadores del cálculo diferencial exterior. Al ser la mayoría de estos operadores independientes del sistema de coordenadas elegido, de todo ello resultará que tendremos una formulación más potente de la ecuación de Fokker-Planck: la formulación intrínseca [6].

2.2. La formulación intrínseca

Sea M la variedad formada por los estados del sistema físico en estudio. Consideremos las variaciones infinitesimales, dq^ν , de las variables macroscópicas de M . El conjunto de estas variaciones infinitesimales empezando desde un estado dado, $q = \{q^\nu; \nu = 1, 2, \dots, n\}$, es un espacio vectorial denominado espacio vectorial cotangente en q , y $\{dq^\nu, \nu = 1, 2, \dots, n\}$ es una base de dicho espacio. Espacio que se identifica con el símbolo $\bigwedge^1_q M$ está formado de todas las sumas:

$$a_{i_1 \dots i_r} dq^{i_1} \wedge dq^{i_2} \wedge \dots \wedge dq^{i_r}$$

que se denominan r -formas. $dq^{i_1} \wedge dq^{i_2}$ es el producto exterior [10] de los dos 1-formas dq^{i_1} y dq^{i_2} . Los coeficientes $a_{i_1 \dots i_r}$ son antisimétricos en sus índices.

Por $\bigwedge^r M$ ($r > 0$) entendemos el conjunto de todas las r -formas diferenciales -para cualquier valor de q - como una extensión de esta definición lla-

maremos $\wedge^0 M$ al conjunto de todas las funciones escalares y regulares definidas en M .

La variedad M se convierte en una variedad riemanniana al definir un producto escalar entre sus vectores y formas. En un sistema concreto de variables macroscópicas este producto escalar puede ser la matriz de difusión,

$D^{\mu\nu}(q)$, siempre que sea definida positiva y no singular (c.f. ec. (2.10)):

$$D^{\mu\nu}(q) = D_{\lambda\mu}(q) = D_{\lambda\mu}(q) \cdot D^{\lambda\sigma}(q) = \delta_{\lambda}^{\sigma}$$

En este caso el producto escalar $\langle \alpha, \beta \rangle$ de un par de 1-formas $\alpha \equiv \alpha_j(q) dq^j$

y $\beta \equiv \beta_j(q) dq^j$, es:

$$\langle \alpha, \beta \rangle = D^{\mu\nu}(q) \alpha_{\mu}(q) \beta_{\nu}(q) \quad (2.21)$$

este producto escalar en $\wedge^1 M$ determina un único producto escalar en $\wedge^r M$ por:

$$\langle \alpha_1 \wedge \dots \wedge \alpha_r ; \beta_1 \wedge \dots \wedge \beta_r \rangle \equiv \det(\langle \alpha_i, \beta_j \rangle) \quad (2.22)$$

con $\alpha_i, \beta_j \in \wedge^1 M$. Mediante la propiedad de la linealidad, el producto escalar (2.22) se extiende al espacio total.

El producto escalar (2.22) permite definir un elemento de volumen $\sigma \in \wedge^h M$ con dos orientaciones, mediante la condición:

$$\langle \sigma, \bar{\sigma} \rangle = 1 \quad (2.23)$$

En un sistema concreto de variables macroscópicas, el elemento de volumen es:

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{D(q)}} dq^1 \wedge \dots \wedge dq^n, \quad (2.24)$$

donde $D(q) \equiv \det(D^{ij}(q))$.

El operador estrella de Hodge [10] es una aplicación lineal que a cada r -forma, $\alpha \in \Lambda^r M$, le hace corresponder una $(n-r)$ -forma, $*\alpha \in \Lambda^{n-r} M$ tal que para cualquier $\beta \in \Lambda^{n-r} M$, tenemos:

$$\alpha \wedge \beta = \langle *\alpha, \beta \rangle \sigma \quad (2.25)$$

El operador $*$ ha sido definido independientemente de las variables macroscópicas, es por lo tanto un operador intrínseco y tiene las siguientes propiedades:

(i) Si $\alpha \in \Lambda^r M$ entonces

$$**\alpha = (-1)^{r(n-r)} \alpha$$

(ii) Si $\alpha, \beta \in \Lambda^r M$ entonces:

$$\alpha \wedge (*\beta) = \beta \wedge (*\alpha) = \langle \alpha, \beta \rangle \sigma,$$

(iii) $*\sigma = 1$

El operador diferencial exterior, d , existe y es único si está axiomatizado por:

(i) Si $\alpha \in \Lambda^r M$, entonces $d\alpha \in \Lambda^{r+1}$

(ii) $d(\alpha + \beta) = d\alpha + d\beta$

(iii) $d(\alpha \wedge \beta) = d\alpha \wedge \beta + (-1)^r \alpha \wedge d\beta$

(iv) $d(d\alpha) = 0$, para cualquier forma α

(v) La diferencial exterior de cualquier función, $f(q) \in \Lambda^0 M$, coincide

con su diferencial ordinaria:

$$df(q) = \partial_\nu f(q) \cdot dq^\nu$$

Se demuestra que el operador d es un operador intrínseco [10]. Al aplicar los axiomas anteriores a una r -forma:

$$\alpha = \alpha_{\nu_1 \dots \nu_r} dq^{\nu_1} \wedge \dots \wedge dq^{\nu_r}$$

se obtiene:

$$d\alpha = \partial_\mu \alpha_{\nu_1 \dots \nu_r} \cdot dq^\mu \wedge dq^{\nu_1} \wedge \dots \wedge dq^{\nu_r} \quad (2.26)$$

El carácter intrínseco de los operadores $*$ y d es lo que permite construir una ecuación de Fokker-Planck intrínseca [6]. Con este fin partimos de la EFP (1.2):

$$\dot{P}(q,t) = \partial_\nu (P(q,t) f^\nu(q)) - \frac{1}{2} \partial_\mu^2 (D^{\nu\mu}(q) P(q,t)) \quad (2.27)$$

y definimos la $(n-1)$ -forma dependiente del tiempo:

$$\mathcal{H} \equiv \left[P(q,t) f^\nu(q) - \frac{1}{2} \partial_\mu (D^{\nu\mu}(q) \cdot P(q,t)) \right] (-1)^{(\nu)-1} dq^1 \wedge \dots \wedge \widehat{dq^\nu} \wedge \dots \wedge dq^n \quad (2.28)$$

donde se suma sobre índices repetidos, excepto cuando un índice está dentro de un paréntesis. Por $\widehat{dq^\nu}$ indicamos la ausencia de dq^ν en el lugar ν .

La densidad de probabilidad intrínseca S , un escalar bajo las transformaciones generales de las variables macroscópicas, viene dada por la ec.

(2.6):

$$S \equiv P(q,t) \sqrt{D(q)}, \quad S \in \Lambda^0 M. \quad (2.29)$$

Mediante el drift contravariante h^ν (dfr. ec. (2.8)), podemos definir el drift intrínseco, η , que es la 1-forma:

$$\eta \equiv h_\mu dq^\mu = \mathcal{D}_\mu s h^\nu dq^\mu, \quad \eta \in \Lambda^1 M \quad (2.30)$$

Substituyendo estas definiciones en la ec. (2.28), tenemos:

$$\mathcal{U} = \frac{\mathcal{D}^{\mu\nu}}{\sqrt{\mathcal{D}}} \left(s h_\mu - \frac{1}{2} \partial_\mu s \right) (-1)^{(\nu)-1} dq^1 \wedge \dots \wedge \widehat{dq^\nu} \wedge \dots \wedge dq^n,$$

pero cuando se usa la métrica $\mathcal{D}^{\mu\nu}$, de la definición (2.25) del operador estrella de Hodge, se deduce que:

$$*dq^\mu = \frac{(-1)^{(\mu)-1} \mathcal{D}^{\mu\nu}}{\sqrt{\mathcal{D}}} dq^1 \wedge \dots \wedge \widehat{dq^\nu} \wedge \dots \wedge dq^n, \quad (2.31)$$

luego:

$$\mathcal{U} = * \left(s h_\mu dq^\mu - \frac{1}{2} \partial_\mu s dq^\mu \right)$$

y de (2.30) tenemos:

$$\mathcal{U} = * \left(s \eta - \frac{1}{2} ds \right) \quad (2.32)$$

La diferencial exterior de la $(n-1)$ -forma \mathcal{U} , $d\mathcal{U} \in \Lambda^n M$, es:

$$\begin{aligned} d\mathcal{U} &= \partial_\nu \left[\rho f^\nu - \frac{1}{2} \partial_\mu (\mathcal{D}^{\mu\nu} \rho) \right] dq^1 \wedge \dots \wedge dq^n \\ &= d * \left(s \eta - \frac{1}{2} ds \right), \end{aligned} \quad (2.33)$$

que permite escribir la ecuación de Fokker-Planck como una ecuación de continuidad (cfr.ec. (2.24) *):

$$\dot{s} \sigma + d\psi = 0 \quad (2.34)$$

o bien como:

$$*\sigma = 1$$

llegamos a la siguiente expresión para la ecuación de Fokker-Planck:

$$\dot{s} + *d*(s\eta - \frac{1}{2} dS) = 0, \quad (2.35)$$

que es una ecuación intrínseca pues tanto la diferencial exterior, d , como el operador $*$ son completamente independientes del sistema de coordenadas elegido.

Terminamos esta Sección viendo cuál es el significado físico de la $(n-1)$ -forma η . Hemos asociado a cada r -forma α , una $(r+1)$ -forma $d\alpha$ que es la diferencial exterior de α . Esta definición se da de manera que sea válido el Teorema de Stokes [10]:

$$\int_{\partial \Sigma} \alpha = \int_{\Sigma} d\alpha \quad (2.36)$$

donde Σ es una variedad orientada de dimensión $r+1$ y $\partial \Sigma$ es su contorno.

Así pues, integrando las n -formas $\dot{s} \sigma$ y $d\psi$ en la ec. (2.34):

$$\int_M \dot{s} \sigma = - \int_M d\psi$$

y aplicando el teorema de Stokes, tenemos:

$$\int_M \dot{s} \sigma = - \int_{\partial M} \psi \quad (2.37)$$

ques es la ley de conservación de la probabilidad para la ecuación de Fokker-Planck. Por lo tanto la $(n-1)$ -forma \mathcal{U} es la corriente de probabilidad intrínseca .

I.3. Caracterización de una clase de ecuaciones de Fokker-Planck exactamente resolubles.

3.1. Transformación de una EFP en otra con matriz de difusión $\delta^{\mu\nu}$.

En este apartado vamos a ver la forma de transformar la ecuación de Fokker-Planck (1.2), correspondiente a un proceso de difusión generalizado, en una EFP con difusión constante del tipo $\delta^{\mu\nu}$. Para ello escribimos la ec. (1.2) en forma covariante (cfr. ec. (2.20)):

$$\begin{aligned} \dot{S}(q,t) = & - \nabla_{\mu} (h^{\mu} S - \frac{1}{2} D^{\mu\nu} \nabla_{\nu} S) - \\ & - \frac{1}{2} D^{\sigma\tau} \nabla_{\nu} D_{\sigma\tau} (h^{\nu} S - \frac{1}{2} D^{\mu\nu} \nabla_{\mu} S). \end{aligned} \quad (3.1)$$

Al ser covariante esta ecuación conservará su forma al realizar cualquier transformación de coordenadas. Sea $\{q'^{\nu}\}$ un conjunto de nuevas variables macroscópicas caracterizado por la transformación:

$$J^{\sigma}_{\rho} = \frac{\partial q'^{\sigma}}{\partial q^{\rho}} \quad ; \quad J^{\nu}_{\sigma} = \frac{\partial q^{\nu}}{\partial q'^{\sigma}} \quad (3.2)$$

que obviamente verifica:

$$\partial_{\sigma} J^{\nu}_{\rho} = \partial_{\rho} J^{\nu}_{\sigma} \quad (3.3)$$

Supongamos que las nuevas variables, q' , son tales que la matriz de difusión transformada $D'^{\mu\nu}$ es una matriz constante del tipo $\delta^{\mu\nu}$:

$$D'^{\mu\nu} = \delta^{\mu\nu} \quad (3.4)$$

en este caso la ec. (3.1) queda:

$$\dot{S}(q', t) = -\nabla'_{\mu} \left(h'^{\mu} S' - \frac{1}{2} \nabla'_{\mu} S' \right), \quad (3.5)$$

siendo (cfr. ecs. (2.6) y (2.8)):

$$S'(q', t) = P'(q', t) \equiv P(q(q'), t) \quad (3.6)$$

$$h'^{\mu}(q') = f'^{\mu}(q') \equiv f^{\mu}(q(q')) \quad (3.7)$$

Para la métrica $\delta^{\mu\nu}$ (métrica euclídea) los símbolos de Christoffel son nulos (cfr. ecs. (2.13) y (2.16)) y la derivada covariante coincide con la derivada ordinaria (cfr. ec. (2.19)) . Así tenemos la ecuación de Fokker-Planck transformada:

$$\dot{P}'(q', t) = \left\{ -\partial'_{\mu} f'^{\mu}(q') + \frac{1}{2} \partial'^2_{\mu\mu} \right\} P'(q', t) \quad (3.8)$$

que es una ecuación con difusión constante del tipo $\delta^{\mu\nu}$.

Como $f'^{\mu} = h'^{\mu} = J^{\mu}_{\nu} h^{\nu}$, el drift transformado viene dado por:

$$f'^{\mu} = J^{\mu}_{\nu} \left(f^{\nu} + \frac{1}{2} D^{\alpha\beta} \Gamma^{\nu}_{\alpha\beta} \right) \quad (3.9)$$

siendo $\Gamma^{\rho}_{\alpha\beta}$ los símbolos de Christoffel asociados a la conexión riemanniana de la métrica $D^{\mu\nu}$ (cfr. ec. (2.13)) .

La ecuación de Fokker-Planck transformada, ec. (3.8), es exactamente resoluble si representa a un proceso de Ornstein-Uhlenbeck, es decir, si el drift transformado f'^{μ} , es lineal:

$$f'^{\mu}(q') = a^{\mu}_{\nu} q'^{\nu} + b^{\mu},$$

en este caso la solución de (3.8) dada por las ecs. (1.6) (ver más adelante).

3.2. Condiciones necesarias y suficientes para transformar cualquier EFP en una EFP con difusión constante.

Evidentemente, para un proceso de difusión generalizado, caracterizado por una matriz $D^{\mu\nu}(q)$, no siempre existirá un cambio de variables, $q = q(q')$, tal que $D^{\mu\nu} = \delta^{\mu\nu}$. Vamos a demostrar que para que esto suceda es necesario y suficiente que se anulen los tensores de curvatura, $R_{\mu\nu\alpha\beta}$, y de torsión $T_{\nu\alpha}^{\mu}$, asociados a la matriz de difusión.

Supongamos que existe un conjunto de variables $q' = q'(q)$, tal que la matriz de difusión en estas coordenadas es:

$$D^{\mu\nu}(q') = \delta^{\mu\nu}$$

en este caso los símbolos de Christoffel asociados a ella, $\Gamma_{\mu\nu}^{\alpha}(q')$, son nulos. Como la relación entre símbolos de Christoffel para distintos sistemas de coordenadas viene dada por [9]:

$$\Gamma_{\mu\nu}^{\alpha}(q) = \Gamma_{\rho\sigma}^{\lambda}(q') \frac{\partial q^{\rho}}{\partial q^{\mu}} \frac{\partial q^{\sigma}}{\partial q^{\nu}} \frac{\partial q^{\alpha}}{\partial q^{\lambda}} + \frac{\partial^2 q^{\lambda}}{\partial q^{\mu} \partial q^{\nu}} \frac{\partial q^{\alpha}}{\partial q^{\lambda}} \quad (3.10)$$

tendremos que:

$$\frac{\partial q^{\lambda}}{\partial q^{\alpha}} \Gamma_{\mu\nu}^{\alpha}(q) = \frac{\partial^2 q^{\lambda}}{\partial q^{\mu} \partial q^{\nu}} \quad (3.11)$$

Sea J_{α}^{λ} la matriz del cambio de variables, la ec. (3.11) se puede escribir (cfr. ec. (3.2)):

$$J_{\alpha}^{\lambda} \Gamma_{\mu\nu}^{\alpha}(q) = \partial_{\mu} J_{\nu}^{\lambda} \quad (3.12)$$

Si existen unas variables $\{q^{\nu'}\}$ tales que $D^{\mu\nu'}(q') = \delta^{\mu\nu}$, o lo que es equivalente, que $\overline{\Gamma}_{\mu\nu}^{\alpha'}(q') = 0$, existirá una matriz de transformación solución de la ec. (3.12). Por ello debemos exigir que la ec. (3.12) sea integrable, esto es que cumple las condiciones de integrabilidad:

$$\partial_{\rho}^2 J_{\nu}^{\lambda} - \partial_{\rho}^2 J_{\nu}^{\lambda} = 0 \quad (3.13)$$

que son condiciones necesarias y suficientes para que el sistema (3.12) sea integrable.

Derivando la ec. (3.12) y sustituyendo en (3.13) llegamos a que la matriz

J_{α}^{λ} existe si:

$$J_{\alpha}^{\lambda} [\partial_{\rho} \overline{\Gamma}_{\mu\nu}^{\alpha}(q) - \partial_{\mu} \overline{\Gamma}_{\rho\nu}^{\alpha}(q)] + J_{\rho}^{\lambda} [\overline{\Gamma}_{\rho\alpha}^{\beta}(q) \cdot \overline{\Gamma}_{\mu\nu}^{\alpha}(q) - \overline{\Gamma}_{\mu\nu}^{\beta}(q) \cdot \overline{\Gamma}_{\rho\alpha}^{\alpha}(q)] = 0,$$

condición que se cumple si:

$$R_{\mu\nu\rho}^{\beta} \equiv \partial_{\rho} \overline{\Gamma}_{\mu\nu}^{\beta} - \partial_{\mu} \overline{\Gamma}_{\rho\nu}^{\beta} + \overline{\Gamma}_{\rho\alpha}^{\beta} \cdot \overline{\Gamma}_{\mu\nu}^{\alpha} - \overline{\Gamma}_{\mu\alpha}^{\beta} \cdot \overline{\Gamma}_{\rho\nu}^{\alpha} = 0 \quad (3.14)$$

siendo $R_{\mu\nu\rho}^{\beta}$ el tensor de curvatura de la variedad [9]. La condición (3.14) es equivalente a que se anule el tensor de curvatura covariante:

$$R_{\mu\nu\alpha\beta} \equiv \mathcal{D}_{\mu\nu} R_{\rho\alpha\beta}^{\sigma} = 0. \quad (3.15)$$

Luego si $R_{\mu\nu\alpha\beta} = 0$, existe una matriz J_{α}^{λ} , solución del sistema (3.12). Para que esta matriz corresponda a un cambio de variables continuo y diferenciable es necesario que :

$$\partial_\mu J_\alpha^\lambda = \partial_\alpha J_\mu^\lambda \tag{3.16}$$

o bien, mediante (3.12):

$$J_\beta^\lambda \left(\Gamma_{\mu\alpha}^\beta - \Gamma_{\alpha\mu}^\beta \right) = 0 \tag{3.17}$$

condición equivalente a que se anule el tensor de torsión de la variedad [9] :

$$T_{\mu\alpha}^\beta \equiv \Gamma_{\mu\alpha}^\beta - \Gamma_{\alpha\mu}^\beta = 0 . \tag{3.18}$$

Así pues las ecs. (3.15) y (3.18) nos dan las condiciones necesarias y suficientes para poder transformar la matriz de difusión $D^{\mu\nu}(q)$ en la matriz identidad $\delta^{\mu\nu}$.

Sin embargo en cualquier ecuación de Fokker-Planck, la difusión solo aparece a través de la contracción representada por la Laplaciana:

$$\Delta \equiv D^{\mu\nu}(q) \nabla_\mu \nabla_\nu \tag{3.19}$$

Teniendo esto en cuenta, vemos que para nuestros propósitos sería suficiente la existencia de un sistema de variables en el cual la Laplaciana fuera de la forma:

$$\Delta \equiv \delta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu \tag{3.20}$$

sin que necesariamente la métrica fuera constante. En otras palabras, "a priori" parece que un EFP con difusión constante no implica que la métrica sea constante, ya que podría ser que dos métricas distintas dieran lugar a una misma

Laplaciana. Así para realizar un cambio de variables que diera una Laplaciana del tipo (3.20) quizá no sería necesaria la anulación de todo el tensor de curvatura, siendo tan solo necesario que se anulasen algunas contracciones como, por ejemplo, el tensor de Ricci, R^{μ}_{ν} , o la curvatura escalar, R .

El siguiente teorema demuestra que esta primera impresión es falsa, siendo necesaria la anulación de todo el tensor de curvatura.

Teorema

"Si en algún sistema de coordenadas la Laplaciana que aparece en cualquier ecuación de Fokker-Planck se puede escribir de la forma dada por la ec. (3.20) entonces la métrica de la variedad, en estas coordenadas, es necesariamente una constante".

Demostración

Partimos de la ecuación de Fokker-Planck escrita en lenguaje intrínseco (cfr. ec. (2.35)) y que, sin pérdida de generalidad para nuestros propósitos, podemos suponer sin drift:

$$\dot{S} = \frac{1}{2} * d * d S'$$

el operador intrínseco $* d * d$ (ver Secc. 2) coincide con la Laplaciana y la ecuación anterior se puede escribir:

$$\dot{S} = \frac{1}{2} \Delta S' \quad (3.21)$$

Supongamos que en algún sistema de coordenadas $\{q^{\mu}\}$, la Laplaciana se puede escribir de la forma dada por la ec. (3.20):

$$\Delta = g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu,$$

y supongamos que, en las coordenadas $\{q^\mu\}$, el tensor métrico de la variedad viene dado por una matriz $D^{\mu\nu}(q)$. En este caso la Laplaciana también se puede escribir de la forma:

$$\Delta_D = D^{\mu\nu} \nabla_\mu \nabla_\nu.$$

Vamos a demostrar que si estos dos operadores de Laplace dan lugar a las mismas soluciones de la ecuación de Fokker-Planck (3.21), esto es, que:

$$\left(\Delta_D - \Delta_g \right) S' = 0 \quad (3.22)$$

para cualquier solución, S , de la EFP (3.21), entonces el tensor métrico, $D^{\mu\nu}(q)$, de la variedad es de la forma:

$$\left(\Delta_D - \Delta_g \right) S' = 0, \quad (3.23)$$

En efecto, desarrollemos (3.22) para dos tipos particulares de soluciones de la EFP (3.21):

a) Como fácilmente se comprueba $S = q^{(\nu)}$ es solución de la ec. (3.21), aplicándola a la ec. (3.22) tenemos:

$$\Delta_D q^{(\nu)} = 0, \quad (3.24)$$

o sea:

$$D^{\lambda\mu} \nabla_{D\lambda} \left(\nabla_{D\mu} q^{(\nu)} \right) = 0; \quad (3.25)$$

teniendo en cuenta que $q^{(\nu)}$ no es un vector sino una función y que $\delta_p^{(\nu)}$ es un vector pues es el gradiente de una función; desarrollando (3.25) obtenemos:

$$\begin{aligned} D^{\lambda\rho} \nabla_{D^\lambda} (\delta_p^{(\nu)}) &= D^{\lambda\rho} \left(\partial_\lambda \delta_p^{(\nu)} - \frac{(\rho)}{\lambda\rho} \delta_p^{(\nu)} \right) \\ &= - D^{\lambda\rho} \frac{(\rho)}{\lambda\rho} \delta_p^{(\nu)} = 0, \end{aligned} \quad (3.26)$$

siendo $\frac{(\rho)}{\lambda\rho}$ la conexión riemanniana de la métrica $D^{\mu\nu}(q)$. La condición (3.26) se puede escribir $[g]$:

$$\partial_\alpha (D^{\alpha\beta} \sqrt{D}) = 0 \quad (3.27)$$

con $D = \det(D^{\mu\nu})$.

b) La función:

$$S = a_{\mu\nu} q^\mu q^\nu \quad (3.28)$$

siendo $a_{\mu\nu}$ una matriz constante, simétrica y de traza nula, también es solución de la EFP (3.21). En efecto, por una parte tenemos que:

$$\dot{S} = \frac{d}{dt} (a_{\mu\nu} q^\mu q^\nu) = 0$$

y por la otra:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \Delta S' &= \frac{1}{2} \delta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu (a_{\rho\sigma} q^\rho q^\sigma) \\ &= \frac{1}{2} \delta^{\mu\nu} [a_{\nu\mu} + a_{\mu\nu}] \\ &= \delta^{\mu\nu} a_{\mu\nu} \\ &= a_{\mu\mu} = 0, \end{aligned}$$

pues $a_{\mu\nu}$ es simétrica y de traza nula. Sustituyendo la función dada por la ec. (3.28) en la condición (3.22) y desarrollando, obtenemos:

$$\begin{aligned} \Delta_D (a_{\mu\nu} q^\mu q^\nu) &= \\ &= a_{\mu\nu} (q^\mu \Delta_D q^\nu + q^\nu \Delta_D q^\mu + 2 \cdot \nabla_D q^\mu \cdot \nabla_D q^\nu) = 0 \end{aligned}$$

siendo ∇_D el operador gradiente en la métrica $D^{\mu\nu}$. Como:

$$\Delta_D q^\nu = \Delta_D q^\mu = 0$$

(cfr. ec. (3.24)), tenemos:

$$a_{\mu\nu} \nabla_D q^\mu \cdot \nabla_D q^\nu = 0,$$

o sea,

$$\begin{aligned} a_{\mu\nu} D^{\rho\sigma} \partial_\rho q^\mu \cdot \partial_\sigma q^\nu &= \\ &= a_{\mu\nu} D^{\rho\sigma} \delta_\rho^\mu \delta_\sigma^\nu \\ &= a_{\mu\nu} D^{\mu\nu} = 0. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Vamos a aplicar esta condición a dos tipos distintos de matriz constante, simétrica y de traza nula.

(i) Sea

$$a_{\mu\nu} = \delta_\mu^{(i)} \delta_\nu^{(j)} + \delta_\nu^{(i)} \delta_\mu^{(j)} \quad (i \neq j)$$

sustituyendo en (2.29) tenemos:

$$D^{ij} + D^{ji} = 0, \quad (i \neq j)$$

Como $D^{\mu\nu}$ es, por definición, una matriz simétrica, esta última igualdad

se verifica tan solo si:

$$D^{ij} = 0, \quad \text{para cualquier } i \neq j, \quad (3.30)$$

luego $D^{\mu\nu}(q)$ tiene que ser una matriz diagonal.

(ii) En segundo lugar sea $a_{\mu\nu}$ una matriz diagonal, constante y de traza nula:

$$a_{\mu\mu} \equiv \sum_{i=1}^n a_i = 0, \quad (3.31)$$

y como de (3.30) vemos que $D^{\mu\nu}$ también es una matriz diagonal, de la condición (3.29) deducimos:

$$\sum_{i=1}^n a_i D^i = 0, \quad (3.22)$$

con $D^i \equiv D^{ii}$.

Representemos por \vec{D} el vector de componentes $D^i \equiv D^{ii}$ y por \vec{a} el vector de componentes $a_i \equiv a_{ii}$. Sea $\vec{u} \equiv (1, 1, \dots, 1)$, entonces las ecs. (3.31) y (3.32) se pueden escribir de la forma:

$$\begin{aligned} \vec{a} \cdot \vec{u} &= 0 \\ \vec{a} \cdot \vec{D} &= 0 \end{aligned}$$

Estas ecuaciones indican que el vector \vec{a} es perpendicular a los vectores \vec{u} y \vec{D} simultáneamente, luego \vec{D} y \vec{u} deben de tener la misma dirección:

$$\vec{D} = D \cdot \vec{u}$$

o sea:

$$D^i = D^j \equiv D \quad (\text{para todo } i, j)$$

Así pues $D^{\mu\nu}$ es una matriz diagonal con todos los elementos iguales. Apli-

cando a este resultado la condición (3.27) obtenemos:

$$\partial_\alpha (D^{\nu\alpha} \sqrt{D}) = \partial_\alpha (D - D^{n/2}) = \partial_\alpha D^{1+n/2} = 0,$$

Luego:

$$D \equiv D^{ii} = \text{constante},$$

o sea

$$D^{\mu\nu} = D \cdot \delta^{\mu\nu}$$

c) Sea S una solución no estacionaria ($\dot{S} \neq 0$) de la EFP (3.21). De la ec. (3.22) deducimos:

$$\begin{aligned} \left(\Delta_D - \frac{\Delta}{S} \right) S' &= \left(D \delta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu - \delta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu \right) S' \\ &= (D-1) \frac{\Delta}{S} S' = 0 \end{aligned}$$

Como:

$$\frac{\Delta}{S} S' = z \dot{S}'$$

(cfr. ec. (3.21)), tenemos:

$$z (D-1) \dot{S}' = 0,$$

de donde:

$$D = 1,$$

ya que $\dot{S} \neq 0$. Así pues:

$$D^{\mu\nu} = \delta^{\mu\nu}$$

Lo que demuestra que la métrica de la variedad es de la forma dada por la ec. (3.23).

Luego si la Laplaciana que aparece en cualquier ecuación de Fokker-Planck es de la forma dada por la ec. (3.20), la métrica del sistema es constante, lo

que implica la anulación de todos los elementos del tensor de curvatura.

3.3. Matriz del cambio de variables. Condiciones sobre el drift.

Las condiciones dadas por las ecuaciones (3.15) y (3.18) aseguran la existencia de un cambio de variables caracterizado por una matriz J_{μ}^{λ} , tal que en las nuevas variables la matriz de difusión $D^{\mu\nu}(q')$ se convierte en $\delta^{\mu\nu}$. Si trabajamos con la conexión riemanniana de $D^{\mu\nu}$, los símbolos de Christoffel vienen dados por la ec. (2.13) y la condición (3.18) se satisface idénticamente.

La matriz de transformación J_{μ}^{λ} del cambio de variables debe ser solución de la ecuación (cfr. ec. (3.12)) :

$$\partial_{\mu} J_{\nu}^{\lambda} = \Gamma_{\mu\nu}^{\alpha} J_{\alpha}^{\lambda} \tag{3.33}$$

o bien:

$$\partial_{\mu} J_{\nu}^{\lambda} = \frac{1}{2} D^{\sigma\delta} (\partial_{\nu} D_{\sigma\mu} + \partial_{\mu} D_{\sigma\nu} - \partial_{\sigma} D_{\mu\nu}) J_{\alpha}^{\lambda} \tag{3.33'}$$

estas ecuaciones admiten una solución formal del tipo:

$$J_{\nu}^{\lambda}(q) = M_{\nu}^{\alpha}(q, q_0) J_{\alpha}^{\lambda}(q_0) \tag{3.34}$$

con:

$$M_{\nu}^{\alpha}(q, q_0) = \exp \left\{ \int_{q_0}^q \Gamma_{\mu\nu}^{\alpha}(x) dx^{\mu} \right\} \tag{3.35}$$

Esta solución formal está indeterminada pues no están dadas las "condiciones iniciales" que debe cumplir (3.33).

En las nuevas variables $\{q'^{\nu}\}$, la matriz de difusión se transforma

en una matriz constante, por lo tanto la solución general de (3.33) o (3.33') debe verificar que:

$$J_{\mu}^{-1\sigma} J_{\nu}^{-1\rho} D^{\mu\nu}(q) = A^{\sigma\rho} \quad (3.36)$$

o bien:

$$J_{\mu}^{\sigma} J_{\nu}^{\rho} A_{\sigma\rho} = D_{\mu\nu}(q) \quad (3.37)$$

siendo $A_{\sigma\rho}$ una matriz constante. Un caso especial de (3.36) o (3.37), que se puede considerar una solución particular de la ec. (3.33), es cuando $A_{\sigma\rho} = \delta_{\sigma\rho}$, en este caso la matriz de transformación verifica:

$$D_{\mu\nu}(q) = J_{\mu}^{\sigma} J_{\nu}^{\rho} \delta_{\sigma\rho}, \quad (3.38)$$

esta solución es la encontrada por M. San Miguel [11] para caracterizar a toda una clase de ecuaciones de Fokker-Planck exactamente resolubles.

Obsérvese que la solución (3.37) está indeterminada, pues la matriz $A_{\sigma\rho}$ está definida excepto transformaciones lineales regulares. Así (3.37) presenta el mismo grado de indeterminación que la solución general forma (3.34).

Una vez transformada una EFP cualquiera en una EFP con difusión constante del tipo $\delta^{\mu\nu}$, esta última será exactamente resoluble si el drift transformado $f^{\mu}(q')$ es lineal (proceso de Orstein-Uhlenbeck):

$$f^{\mu}(q') = a_{\nu}^{\mu} q'^{\nu} + b^{\mu}. \quad (3.39)$$

En este caso la EFP original tiene la solución exacta del tipo dado por (1.6) en las variables q' .

En las variables originales la ec. (3.39) implica que (cfr. ec. (3.9))

$$f^{\nu}(q) = J^{-1\nu}_{\mu} [a^{\mu}_{\sigma} q'^{\sigma}(q) + b^{\mu}] - \frac{1}{2} D^{\alpha\beta} \Gamma^{\nu}_{\alpha\beta}, \quad (3.40)$$

y vemos que para comprobar la linealidad del drift transformado hace falta integrar el cambio de variables [11]. La integración de un cambio de variables no es trivial, a parte de que puede resultar infructuosa si el drift transformado no es lineal. Así pues resultará muy interesante tener un método para comprobar "a priori" la linealidad del drift, sin tener que recurrir a la integración del cambio de variables.

La condición de linealidad del drift se puede escribir:

$$\partial'_{\gamma} \partial'_{\lambda} f'^{\mu}(q') = 0 \quad (3.41)$$

y como en las coordenadas q' la derivada covariante ∇'_{λ} coincide con la derivada ordinaria ∂'_{λ} (cfr. ec. (2.19)), la condición (3.41) se puede escribir de la forma:

$$\nabla'_{\gamma} \nabla'_{\lambda} h'^{\mu} = 0, \quad (3.42)$$

pues el drift $f'^{\mu}(q')$ es igual al drift covariante $h'^{\mu}(q')$ (cfr. ec. (3.7)). Al ser (3.42) una ecuación covariante, en las variables originales tendremos:

$$\nabla_{\gamma} \nabla_{\lambda} h^{\mu} = 0, \quad (3.43)$$

donde $h^{\mu} = h^{\mu}(q)$ viene dado por la ec. (2.8) y ∇_{λ} es la derivada covariante en las coordenadas originales.

La condición (3.43) nos asegura que en las variables q' , para las cuales $D^{\mu\nu}(q') = \delta^{\mu\nu}$, el drift es lineal. Obsérvese que tal condición no precisa la integración del cambio de variables, siendo suficiente el conocimiento de los símbolos de Christoffel, $\Gamma_{\nu\sigma}^{\mu}$, que se obtienen derivando la difusión $D^{\mu\nu}(q)$.

Resumiendo, desde un punto de vista matemático, una EFP cualquiera se puede someter a un "test" para ver si en algún sistema de coordenadas representa a un proceso de Ornstein-Uhlenbeck (que es exactamente resoluble). Este "test" consiste simplemente en comprobar que la matriz de difusión, $D^{\mu\nu}(q)$, verifica la condición:

$$R_{\mu\nu\alpha\beta} \equiv \frac{1}{2} \left(\partial_{\nu\alpha}^2 D_{\mu\beta} + \partial_{\mu\beta}^2 D_{\nu\alpha} - \partial_{\nu\beta}^2 D_{\mu\alpha} - \partial_{\mu\alpha}^2 D_{\nu\beta} \right) + D_{\sigma\rho} \left(\Gamma_{\nu\alpha}^{\sigma} \Gamma_{\mu\beta}^{\rho} - \Gamma_{\nu\beta}^{\sigma} \Gamma_{\mu\alpha}^{\rho} \right) = 0, \quad (3.44)$$

y el drift, $f^{\nu}(q)$, la condición (3.43):

$$\nabla_{\gamma} \nabla_{\lambda} \left[f^{\rho}(q) - \frac{1}{2} \sqrt{D(q)} \cdot \partial_{\mu} \left(\frac{D^{\rho\mu}(q)}{\sqrt{D(q)}} \right) \right] = 0 \quad (3.45)$$

En caso afirmativo se puede integrar el cambio de variables, que viene dado por una matriz del tipo (3.37) y la solución de la EFP es la transformada de (1.6).

Vemos pues que si la estructura física de un proceso de difusión generalizado es tal que su espacio físico es plano (curvatura nula), existe un sistema completo de variables macroscópicas para el cual la evolución del sistema se realiza con difusión constante. Con ello damos por contestadas algunas de las preguntas planteadas en la Introducción.

3.4. Algunos ejemplos

Terminaremos esta Sección dando ejemplos de aplicación del método desarrollado a algunos modelos físicos relevantes.

Un caso particular importante de proceso de difusión generalizado lo constituyen aquellos cuya matriz de difusión sea diagonal:

$$\mathcal{D}^{\mu\nu}(q) = \mathcal{D}_{(\mu)}^{-1} \delta^{\mu\nu}, \quad (3.46)$$

Sustituyendo (3.46) en la condición (3.44), vemos que los únicos elementos no nulos del tensor de curvatura son:

$$R_{\mu\nu\mu\rho} = \frac{1}{4} \left(\mathcal{D}_{(\mu)}^{-1} \cdot \partial_\nu \mathcal{D}_{(\mu)} - \partial_\rho \mathcal{D}_{(\mu)} + \mathcal{D}_{(\nu)}^{-1} \cdot \partial_\nu \mathcal{D}_{(\mu)} \cdot \partial_\rho \mathcal{D}_{(\nu)} + \right. \\ \left. + \mathcal{D}_{(\mu)}^{-1} \cdot \partial_\nu \mathcal{D}_{(\rho)} \cdot \partial_\rho \mathcal{D}_{(\mu)} - 2 \partial_{\rho\nu}^2 \mathcal{D}_{(\mu)} \right) \quad (\mu \neq \nu \neq \rho) \quad (3.47)$$

$$R_{\mu\nu\mu\nu} = \frac{1}{4} \left\{ \mathcal{D}_{(\mu)}^{-1} \left[(\partial_\nu \mathcal{D}_{(\mu)})^2 + \partial_\mu \mathcal{D}_{(\mu)} \cdot \partial_\mu \mathcal{D}_{(\nu)} \right] + \right. \\ \left. + \mathcal{D}_{(\nu)}^{-1} \left[(\partial_\mu \mathcal{D}_{(\nu)})^2 + \partial_\nu \mathcal{D}_{(\nu)} \cdot \partial_\nu \mathcal{D}_{(\mu)} \right] - \right. \\ \left. - \sum_{\sigma \neq \mu, \nu} \left[\mathcal{D}_{(\sigma)}^{-1} \partial_\sigma \mathcal{D}_{(\nu)} \cdot \partial_\sigma \mathcal{D}_{(\mu)} \right] \right. \\ \left. - 2 \left[\partial_{\mu\mu}^2 \mathcal{D}_{(\nu)} + \partial_{\nu\nu}^2 \mathcal{D}_{(\mu)} \right] \right\} \quad (\mu \neq \nu) \quad (3.48)$$

Así pues, la matriz de difusión $D^{\mu\nu}(q)$ de la ec. (3.46) se podrá transformar en una matriz del tipo $\delta^{\mu\nu}$, si la función $D_{(\mu)}(q)$ verifica simultáneamente las condiciones:

$$R_{\mu\nu\mu\rho} = 0 \quad (\mu \neq \nu \neq \rho) \quad (3.49)$$

$$R_{\mu\nu\mu\nu} = 0 \quad (\mu \neq \nu). \quad (3.50)$$

Como es fácil de comprobar una matriz de difusión de la forma:

$$D^{\mu\nu}(q) = \varphi_{(\mu)}^{-1}(q_{\mu}) \delta^{\mu\nu}, \quad (3.51)$$

con $\varphi_{(\mu)}(q_{\mu}) > 0$ y diferenciable, satisface simultáneamente las condiciones (3.49) y (3.50).

Sustituyendo (3.51) en la ec. (3.33'), tenemos que la matriz del cambio de variables, J_{ν}^{ρ} , es cualquier solución de las ecuaciones:

$$\left. \begin{aligned} \partial_{\mu} J_{\nu}^{\rho} &= 0 \quad (\mu \neq \nu) \\ \partial_{\nu} J_{\nu}^{\rho} &= \frac{1}{2} \partial_{\nu} \ln \varphi_{(\nu)} J_{\nu}^{\rho} \end{aligned} \right\} \quad (3.52)$$

La solución general de (3.52) es (cfr. ec. (3.37)):

$$J_{\nu}^{\lambda} = A_{\beta}^{\lambda} [\varphi_{(\beta)}(q_{\beta})]^{1/2} \delta_{\nu}^{\beta}, \quad (3.53)$$

siendo A_{β}^{λ} una matriz constante y regular; evidentemente y, como caso particular, A_{β}^{λ} puede ser igual a δ_{β}^{λ} :

$$J_{\nu}^{\lambda} = [\varphi_{(\mu)}(q_{\mu})]^{1/2} J_{\nu}^{\lambda} \quad (3.53')$$

Con la difusión (3.51) el drift covariante del proceso, en las variables originales, es:

$$h^{\nu} = f^{\nu} + \frac{1}{2} \varphi_{(\nu)}^{-2} \partial_{\nu} \varphi_{(\nu)} \quad (3.54)$$

y la condición (3.45) que debe cumplir el drift original $f^{\nu}(q)$ para que el drift transformado sea lineal es:

$$\nabla_{\delta} \nabla_{\lambda} [f^{\nu} + \frac{1}{2} \varphi_{(\nu)}^{-2} \partial_{\nu} \varphi_{(\nu)}] = 0 \quad (3.55)$$

A la clase de modelos representada por la ec. (3.51), pertenecen los modelos de Kubo y Gompertz. En efecto:

Sea la función $\varphi_{(\mu)}(q_{\mu})$ de la forma:

$$\varphi_{(\mu)}(q_{\mu}) = a_{(\mu)}^2 q_{(\mu)}^2 \quad (3.56)$$

entonces, si el drift transformado es constante, lo que implica:

$$\nabla_{\lambda} h^{\nu} = 0,$$

nos aparecen n modelos de Kubo unidimensionales ([11], [12], [13]).

Análogamente, si en lugar de (3.56) tenemos:

$$\varphi_{(\mu)}(q_{\mu}) = a_{(\mu)}^2 q_{(\mu)}^2 \left| \log(b_{(\mu)} / q_{(\mu)}) \right|^2, \quad (3.57)$$

cuando el drift transformado sea constante aparecerán n modelos de Gompertz unidimensionales ([11], [12], [13]).

Otro caso particular de proceso de difusión generalizado es aquél en el cual la matriz de difusión es conformemente plana:

$$D^{\mu\nu}(q) = D^{-1}(q) \delta^{\mu\nu}, \quad (3.58)$$

con $D(q) > 0$ y diferenciable. Sustituyendo (3.58) en las condiciones (3.49) y (3.50) vemos que existirá un cambio de variables tal que $D^{\mu\nu} = \delta^{\mu\nu}$ si la función $D(q)$ verifica simultáneamente las ecuaciones:

$$3D^{-1}\partial_\nu D \cdot \partial_\mu D - 2\partial_{\mu\nu}^2 D = 0 \quad (\mu \neq \nu) \quad (3.59)$$

$$D^{-1} \left[(\partial_\mu D)^2 + (\partial_\nu D)^2 - \frac{1}{2} \sum_{\sigma \neq \mu, \nu} (\partial_\sigma D)^2 \right] - (\partial_{\mu\mu}^2 D + \partial_{\nu\nu}^2 D) = 0 \quad (\mu \neq \nu) \quad (3.60)$$

Una solución a estas ecuaciones viene dada por la función:

$$D(q) = a \exp [b(q_\mu + q_\nu) + c] \quad (3.61)$$

con $a > 0$, b y c constantes. La matriz de cambio de variables es:

$$J \frac{\rho}{r} = a^{1/2} \cdot \exp \left\{ \frac{1}{2} [b(q_\mu + q_\nu) + c] \right\} A \frac{\rho}{\sigma} \quad (3.62)$$

(cfr. ec. (3.53)).

I.4. Soluciones exactas a ecuaciones de Fokker-Planck no lineales .

Como señalábamos en la introducción el objetivo principal de esta primera parte del trabajo, consiste en encontrar soluciones exactas a las ecuaciones de Fokker-Planck. En la Sec. 3 hemos demostrado que si una EFP se puede transformar, bajo ciertas condiciones, en otra EFP con difusión constante, la ecuación tiene solución exacta si el drift transformado es lineal, que es una condición bastante restrictiva. Es por ello que esta Sección la dedicaremos a encontrar soluciones exactas de ecuaciones de Fokker-Planck con difusión constante y drift no lineal [14]. Los drifts no lineales aparecen al estudiar todo tipo de problemas relacionados con las transiciones de fase, los estados estacionarios lejos del equilibrio, las inestabilidades de los sistemas, etc..., problemas que actualmente son objeto de intensos estudios en el campo de la Física y de otras ciencias [15].

4.1. Una clase de soluciones exactas a una ecuación de Fokker-Planck con difusión constante y drift no lineal.

Partimos de una EFP con difusión constante del tipo $\mathcal{J}^{\mu\nu}$:

$$\dot{P}(q,t) = -\partial_{\mu} [f^{\mu}(q) P(q,t)] + \frac{1}{2} \Delta P(q,t) , \quad (4.1)$$

donde $\partial_{\mu} = \partial / \partial q^{\mu}$, $\partial^{\mu} = \delta^{\mu\nu} \partial_{\nu}$ y $\Delta = \partial_{\mu} \partial^{\mu}$ es el operador de Laplace en la métrica $\delta^{\mu\nu}$.

Sea $\psi(q) \equiv \psi(q_1, \dots, q_n)$ el potencial del cual deriva el drift $f^{\mu}(q)$:

$$f^M(q) = -\partial^M \psi(q), \quad (4.2)$$

y sea $\psi(q)$ una función definida por:

$$\psi(q) \equiv \exp[-\Psi(q)], \quad (4.3)$$

con lo cual:

$$f^M(q) = \partial^M \psi(q) / \psi(q). \quad (4.4)$$

Evidentemente el cambio de función definido por (4.4) es válido excepto para el conjunto de valores de q tales que $\psi(q) = 0$.

Sustituyendo (4.4) en la ec. (4.1) tenemos:

$$\dot{P}(q,t) = -\partial_\mu \left[\partial^M \psi(q) \cdot \frac{P(q,t)}{\psi(q)} \right] + \frac{1}{2} \Delta P(q,t), \quad (4.5)$$

y definiendo la función:

$$Z(q,t) \equiv P(q,t) / \psi(q), \quad (4.6)$$

llegamos a la siguiente ecuación de Fokker-Planck:

$$\dot{Z}(q,t) \cdot \psi(q) = \frac{1}{2} \Delta Z(q,t) \psi(q) - \frac{1}{2} \Delta \psi(q) \cdot Z(q,t) \quad (4.7)$$

Supongamos que $\psi(q)$ es una función armónica definida positiva. En este caso $\psi(q) > 0$ y

$$\Delta \psi(q) = 0, \quad (4.8)$$

con lo cual la EFP (4.7) queda:

$$\dot{Z}(q,t) = \frac{1}{2} \Delta Z(q,t), \quad (4.9)$$

que tiene la misma forma que la ecuación homogénea de conducción del calor.

Imponiendo la condición inicial usual:

$$P(q, 0) = \delta^n (q_i - q_{0i}) \quad (4.10)$$

donde $q_{0i} = q_i(0)$, la solución de la ec. (4.9) es [16]:

$$Z(q, t | q_0) = c \frac{\exp \left[- \sum_{i=1}^n (q_i - q_{0i})^2 / 4t \right]}{(2\sqrt{\pi t})^n} \quad (4.11)$$

Fácilmente se comprueba que la expresión:

$$\Delta(q, q_0) \equiv \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\exp \left[- \sum_{i=1}^n (q_i - q_{0i})^2 / 4t \right]}{(2\sqrt{\pi t})^n}, \quad (4.12)$$

coincide con la distribución delta de Dirac, $\delta^n (q_i - q_{0i})$. En efecto,

$\Delta(q, q_0)$ verifica las condiciones:

$$(i) \quad \Delta(q, q_0) = 0, \quad \text{para todo } q \neq q_0$$

$$(ii) \quad \int_M \Delta(q, q_0) dq = \lim_{t \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\prod_{i=1}^n} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp \left[-(q_i - q_{0i})^2 / 4t \right]}{2\sqrt{\pi t}} dq_i \right\} = 1;$$

las cuales permiten identificar $\Delta(q, q_0)$ con la distribución delta de Dirac [16]. Teniendo esto en cuenta, la condición de normalización para la densidad de probabilidad:

$$\int_M P(q, t | q_0) = 1, \quad (4.13)$$

nos da directamente el valor de la constante C que aparece en la ec. (4.11):

$$C = 1/\psi(q_0), \quad (4.14)$$

con lo cual la solución normalizada de la ecuación de Fokker-Planck (4.1) es:

$$P(q,t|q_0) = \frac{\psi(q)}{\psi(q_0)} \frac{\exp[-\sum_{i=1}^n (q_i - q_{0i})^2/4t]}{(2\sqrt{\pi t})^n} \quad (4.15)$$

Como ya hemos indicado $\psi(q)$ es cualquier función armónica definida positiva. Un ejemplo de tal función viene dado por:

$$\psi(q) = \left(\sum_{i=1}^n q_i^2 \right)^{1-n/2}, \quad (n \neq 2), \quad (4.16)$$

siendo n la dimensión de la variedad M . El drift asociado a esta función es:

$$f^\mu(q) = (2-n) \frac{q^\mu}{\left(\sum_{i=1}^n q_i^2 \right)} \quad (\mu = 1, 2, \dots, n) \quad (4.17)$$

y presenta una singularidad en el origen.

Otra condición que debemos imponer a la función $\psi(q)$, para que la solución dada por la ec. (4.15) tenga sentido físico, es que las condiciones iniciales, q_0 , no coincidan con los ceros de la función $\psi(q)$, esto es que:

$$\psi(q_0) \neq 0. \quad (4.18)$$

4.2. Una segunda clase de soluciones exactas para una ecuación de Fokker-Planck no lineal.

Vamos a encontrar otra clase de soluciones exactas de la EFP (4.1) con difusión constante y drift no lineal. Para ello comenzamos con las definiciones dadas por las ecs. (4.2) y (4.3) del potencial del drift $\psi(q)$ y de la función

$$\begin{aligned} \psi(q) : \quad f^\mu(q) &= -\partial^\mu \psi(q) \\ \varphi(q) &= \alpha \rho [-\psi(q)] , \end{aligned}$$

de estas dos ecuaciones se deduce que, en función del drift, la Laplaciana de

$\psi(q)$ es:

$$\Delta \psi(q) = [\partial_\mu f^\mu(q) + f_\mu(q) \cdot f^\mu(q)] \psi(q) . \quad (4.19)$$

Supongamos que la función $\varphi(q)$ es solución de la ecuación:

$$\Delta \varphi(q) = (a^2 q_\mu q^\mu + b) \varphi(q) , \quad (4.20)$$

que es equivalente a la ecuación:

$$\partial_\mu f^\mu(q) + f_\mu(q) \cdot f^\mu(q) = a^2 q_\mu q^\mu + b , \quad (4.21)$$

con a y b constantes arbitrarias.

En el Apéndice A de esta Sección se demuestra que la solución general de la ec. (4.20) se puede escribir de la forma:

$$\varphi(q) = \sum_{\ell_i} c_{\ell_1 \dots \ell_n} \cdot \prod_{i=1}^n \psi_i^{\ell_i}(q_i), \quad (4.22)$$

donde $c_{\ell_1 \dots \ell_n}$ son constantes que dependen de los parámetros ℓ_i (cfr. (4.25) y (4.26)) y :

$$\psi_i^{\ell_i}(q_i) = e^{-(a|z)q_i^2} \cdot \phi_i^{\ell_i}(q_i) \quad (\phi_i^{\ell_i}(q_i) \neq 0) \quad (4.23)$$

con

$$\phi_i^{\ell_i}(q_i) = \left| \alpha_i F(\ell_i | \frac{1}{2} | a q_i^2) + \beta_i q_i F(\ell_i + \frac{1}{2} | \frac{3}{2} | a q_i^2) \right|, \quad (4.24)$$

siendo α_i, β_i constantes arbitrarias y :

$$\ell_i = \frac{1}{4} (1 + b_i | a) ; \quad \left(\sum_{i=1}^n b_i \equiv b \right). \quad (4.25)$$

$F(l_i | \frac{1}{2} | a q_i^2)$ es la función hipergeométrica confluyente [17]. Los parámetros l_i verifican la condición:

$$\sum_{i=1}^n \ell_i = \frac{1}{4} (n + b | a). \quad (4.26)$$

La suma sobre l_i que aparece en (4.22) se extiende sobre todos los valores de los l_i que verifiquen (4.26). Evidentemente las constantes α_i, β_i y $c_{\ell_1 \dots \ell_n}$ vienen determinadas por las condiciones de contorno que deba cumplir el drift del proceso (cfr. ec. (4.52)).

Recordando que:

$$\sum_{i=1}^n q_i^2 = q_{\mu} q^{\mu}$$

tenemos la solución de la ec. (4.20) para $\varphi(q)$:



$$\psi(q) = \exp[-(a/2) q_{\mu} q^{\mu}] \phi(q). \quad (4.27)$$

con

$$\phi(q) = \sum_{e_i} c_{e_1 \dots e_n} \prod_{i=1}^n \phi_i^{e_i}(q_i) \quad (\phi_i^{e_i}(q_i) \neq 0) \quad (4.28)$$

y el drift correspondiente es

$$f^{\mu}(q) = -a q^{\mu} + \frac{\partial^{\mu} \phi(q)}{\phi(q)}. \quad (4.29)$$

Sustituyendo (4.20) en la forma de la ecuación de Fokker-Planck dada por (4.7), se obtiene:

$$\dot{Z}(q, t) = \frac{1}{2} \Delta Z(q, t) - \frac{1}{2} (a^2 q_{\mu} q^{\mu} + b) Z(q, t). \quad (4.30)$$

Siguiendo el proceso de separación de variables descrito en el Apéndice B, llegamos a que la solución de (4.30) compatible con la condición inicial usual (cfr. ec. (4.10)):

$$P(q, 0) = \delta^n(q_i - q_{0i}) \quad (4.31)$$

es:

$$Z(q, t | q_0) = C \cdot (\sinh at)^{-n/2} \cdot \exp \left\{ -(b/2)t - (a/2) (1 - e^{-2at})^{-1} \right. \\ \left. \times \sum_{i=1}^n \left[(q_i - q_{0i} e^{-at})^2 + (q_i e^{-at} - q_{0i})^2 \right] \right\}, \quad (4.32)$$

y como (cfr. ec. (4.6)):

$$P(q, t | q_0) = Z(q, t | q_0) \cdot \varphi(q), \quad (4.33)$$

teniendo en cuenta (4.27) obtenemos finalmente que:

$$P(q, t | q_0) = C \cdot \phi(q) \cdot (\sinh \alpha t)^{-n/2} \cdot \exp \left\{ -(b/2)t - (a/2) \sum_{i=1}^n q_i^2 - \right. \\ \left. - (a/2) (1 - e^{-2\alpha t})^{-1} \cdot \sum_{i=1}^n \left[(q_i - q_{0i} e^{-\alpha t})^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + (q_i e^{-\alpha t} - q_{0i})^2 \right] \right\}. \quad (4.34)$$

Introduciendo la constante:

$$C' \equiv C (a/2\pi)^{n/2} \cdot \exp \left[-(a/2) \cdot \sum_{i=1}^n q_{0i}^2 \right], \quad (4.35)$$

la ec. (4.34) se puede escribir en forma más compacta:

$$P'(q, t | q_0) = C' \left(\frac{a}{2\pi} \right)^{n/2} \cdot \phi(q) \\ \times \frac{\exp \left\{ -(b/2)t - a \sum_{i=1}^n (q_i - q_{0i} e^{-\alpha t})^2 / (1 - e^{-2\alpha t}) \right\}}{(\sinh \alpha t)^{n/2}}. \quad (4.36)$$

Para hallar el valor de la constante C' , imponemos la condición de normalización para la densidad de probabilidad (cfr. ec. (4.13):

$$\int_M P(q, t | q_0) dq = 1$$

y teniendo en cuenta que la expresión

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left(\frac{a}{2\pi} \right)^{n/2} \frac{\exp \left\{ -(b/2)t - a \sum_{i=1}^n (q_i - q_{0i} e^{-\alpha t})^2 / (1 - e^{-2\alpha t}) \right\}}{(\sinh \alpha t)^{n/2}}$$

se puede identificar con la distribución de Dirac: $\delta^n(q_i - q_{i-1})$ (cfr. (4.12) y siguientes), encontramos que:

$$c' = 1 / \phi(q_0) \quad (4.37)$$

Así pues, si el drift $f^M(q)$ de la EFP (4.1) satisface la condición (4.21) —o bien es de la forma dada por (4.29)— la solución normalizada de la ec. (4.1), con la condición inicial (4.10), es:

$$P(q, t / q_0) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{n/2} \frac{\phi(q)}{\phi(q_0)} \times \frac{\exp\left\{-\frac{(b/2)t}{\sinh at} - a \sum_{i=1}^n \frac{(q_i - q_{0i} e^{-at})^2}{(1 - e^{-2at})}\right\}}{(\sinh at)^{n/2}} \quad (4.38)$$

Veamos el comportamiento en el infinito de la densidad de probabilidad $P(q, t / q_0)$. Para ello sustituimos las ecs. (4.24) y (4.28) en (4.38), quedando:

$$P(q, t / q_0) = \frac{(a/2\pi)^{n/2}}{\phi(q_0)} \frac{e^{-(b/2)t}}{(\sinh at)^{n/2}} \times \left\{ \sum_{\ell_i} c_{\ell_1 \dots \ell_n} \prod_{i=1}^n \left[\exp\left\{-\eta(t) (q_i - \gamma_i(t))^2\right\} \times \alpha_i F(\ell_i | \frac{1}{2} | a q_i^2) + \beta_i q_i F(\ell_i + \frac{1}{2} | \frac{3}{2} | a q_i^2) \right] \right\} \quad (4.39)$$

siendo:

$$\eta(t) \equiv \frac{a}{1 - e^{-2at}},$$

$$\gamma_i(t) \equiv q_i e^{-at}.$$

Teniendo en cuenta que [17]:

$$F(\alpha|\beta|z) \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} \frac{\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha)} z^{\alpha-\beta} e^{-z}, \quad (4.40)$$

fácilmente se deduce de (4.39) que:

$$\lim_{q \rightarrow \infty} P(q, t | q_0) = 0, \quad (4.41)$$

para cualquier instante de tiempo y para cualquier valor permitido de los parámetros l_i . Así la densidad de probabilidad (4.38) tiene buen comportamiento en el infinito.

Terminaremos este Apartado considerando el caso $a = 0$. En tal situación la ec. (4.20) se reduce a:

$$\Delta \varphi(q) = b \varphi(q) \quad (4.42)$$

o bien:

$$[\partial_\mu \partial^\mu - b] \varphi(q) = 0. \quad (4.42')$$

Para resolver esta ecuación realizamos un proceso de separación de variables análogo al descrito en el Apéndice A. Así descomponemos la función $\varphi(q) \equiv \varphi(q_1, \dots, q_n) > 0$ en un producto de n funciones $\varphi_i(q_i) > 0$:

$$\varphi(q) = \prod_{i=1}^n \varphi_i(q_i) \quad (4.43)$$

y sustituyendo esta descomposición en la ec. (4.42'), tenemos el sistema de ecuaciones independientes:

$$\partial_i^2 \varphi_i(q_i) - b_i \varphi_i(q_i) = 0 \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (4.44)$$

con

$$\sum_{i=1}^n b_i \equiv b \quad (4.45)$$

Cada una de las ecuaciones del sistema (4.44) es una ecuación lineal y homogénea, cuya solución se puede escribir de la forma:

$$\varphi_i(q_i) = \left| \alpha_i \cosh(\sqrt{b_i} q_i) + \beta_i \sinh(\sqrt{b_i} q_i) \right| \quad (4.46)$$

esta solución en forma de valor absoluto es posible debido a que la ec.

(4.44) es invariante por el cambio de signo de la función $\varphi_i(q_i)$ (ver Apéndice A). Así pues la solución general de la ec. (4.42) es:

$$\varphi(z) = \sum_{b_i} c_{b_1, \dots, b_n} \cdot \prod_{i=1}^n \left| \alpha_i \cosh(\sqrt{b_i} q_i) + \beta_i \sinh(\sqrt{b_i} q_i) \right|, \quad (4.47)$$

siendo α_i, β_i constantes arbitrarias y los números b_i deben verificar la condición (4.45).

Teniendo en cuenta (4.42) la EFP (4.7) se puede escribir de la forma:

$$\dot{Z}(q, t) = \frac{1}{2} \Delta Z(q, t) - \frac{1}{2} b Z(q, t), \quad (4.48)$$

resolviendo esta ecuación de forma análoga a la descrita en el Apéndice B, tenemos que su solución compatible con la condición inicial usual (4.10), es:

$$Z(q, t) = C t^{-n/2} \exp \left\{ - (b/2)t - \sum_{i=1}^n (q_i - q_{0i})^2 / 2t \right\} \quad (4.49)$$

y la densidad de probabilidad normalizada es:

$$P(q, t | q_0) = \frac{\psi(q)}{\psi(q_0)} \frac{\exp \left\{ -(b/z) t - \sum_{i=1}^n (q_i - q_{0i})^2 / z t \right\}}{(z \pi t)^{n/2}} \quad (4.50)$$

con $\psi(q)$ dada por (4.47).

Veamos, para finalizar, cuáles son las condiciones necesarias para que la solución (4.50) sea un caso particular de la solución más general (4.38) cuando $a = 0$. Teniendo en cuenta que [18]:

$$F(\alpha | \beta) z / \alpha \xrightarrow{\alpha \rightarrow \infty} \Gamma(\beta) z^{(1-\beta)/2} I_{\beta-1}(2\sqrt{z}) \quad (4.51)$$

siendo $I_{\beta-1}(2\sqrt{z})$ la función modificada de Bessel, y que :

$$I_{1/2}(z) = \sqrt{\frac{z}{\pi z}} \sinh z$$

$$I_{-1/2}(z) = \sqrt{\frac{z}{\pi z}} \cosh z,$$

y pasando al límite $\ell_i \rightarrow \infty$, que es equivalente al límite $a \rightarrow 0$ (cfr. ec. (4.25)), en la expresión (4.38), encontramos fácilmente que este límite coincide con (4.50) si:

$$C_{\ell_1, \dots, \ell_n} \xrightarrow{\ell_i \rightarrow \infty} C_{b_1, \dots, b_n} \quad (4.52)$$

Luego si a las constantes $C_{1_1, \dots, 1_n}$ se les impone esta condición límite, todo el proceso descrito en este Apartado es válido también cuando $a = 0$.

4.3. Soluciones no lineales con simetría esférica

Supongamos que el drift y su potencial poseen simetría esférica, esto es, que su dependencia espacial se verifica sólo a través de la combinación:

$$r \equiv \left(\sum_{i=1}^n q_i^2 \right)^{1/2}$$

En este caso la función $\psi(q)$ definida en (4.2) también tiene simetría esférica y su laplaciana se puede escribir de la forma:

$$\Delta \psi(r) = \frac{d^2 \psi(r)}{dr^2} + \frac{n-1}{r} \frac{d\psi(r)}{dr}, \quad (4.53)$$

siendo n la dimensión de la variedad M . Así la condición (4.20) de solubilidad de la EFP, es:

$$\frac{d^2 \psi(r)}{dr^2} + \frac{n-1}{r} \frac{d\psi(r)}{dr} - (a^2 r^2 + b) \psi(r) = 0. \quad (4.54)$$

El cambio de variable:

$$\rho = ar^2, \quad (4.55)$$

y la definición de la función:

$$\phi(r) = \psi(r) e^{(a/2)r^2} \quad (4.56)$$

transforman la ec. (4.54) en una ecuación hipergeométrica confluyente:

$$\rho \frac{d^2 \phi}{d\rho^2} + \left(\frac{n}{2} - \rho \right) \frac{d\phi}{d\rho} - \frac{1}{4} (n + b/a) \phi = 0 \quad (4.57)$$

cuya solución es:

$$\phi(\rho) = \alpha \cdot F\left(\frac{n}{4} + \frac{b}{4a} \mid \frac{n}{2} \mid \rho\right) \quad (4.58)$$

para cualquier valor de n y

$$\phi(\rho) = \alpha \cdot F\left(\frac{n}{4} + \frac{b}{4a} \mid \frac{n}{2} \mid \rho\right) + \beta' \rho^{1-n/2} F\left(1 + \frac{b}{4a} - \frac{n}{2} \mid 2 - \frac{n}{2} \mid \rho\right) \quad (4.59)$$

si $n = 1, 3, 5, 7, \dots$; α y β' son constantes arbitrarias.

Al ser (4.54) invariante bajo el cambio de signo de la función $\psi(r)$, su solución general viene dada por:

$$\psi(r) = e^{-(a/2)r^2} \phi(r) \quad , \quad (\phi(r) \neq 0), \quad (4.60)$$

con

$$\phi(r) = \left| \alpha F\left(\ell \mid \frac{n}{2} \mid ar^2\right) \right| \quad (4.61)$$

para cualquier valor de la dimensión n , y

$$\phi(r) = \left| \alpha F\left(\ell \mid \frac{n}{2} \mid ar^2\right) + \beta r^{2-n} F\left(\ell + 1 - \frac{n}{2} \mid 2 - \frac{n}{2} \mid ar^2\right) \right| \quad (4.62)$$

para $n = 1, 3, 5, 7, \dots$; α y β son constantes arbitrarias y

$$\ell = \frac{1}{4} (n + b/a) \quad (4.63)$$

En ambos casos el drift viene dado por :

$$\vec{f}(r) = \left[-ar + \frac{d\phi(r)/dr}{\phi(r)} \right] \cdot \frac{\vec{r}}{r} \quad (\phi(r) \neq 0) \quad (4.64)$$

y la solución normalizada de la EFP asociada viene dada por la ec. (4.38) con la función $\phi(q)$ dada por (4.61) ó (4.62) según sea la dimensión de la variedad.

Cuando $a = 0$, la aplicación del límite (4.51) nos lleva directamente a las expresiones:

$$\psi(r) = \left| \alpha \cdot r^{1-n/2} I_{\frac{n}{2}-1}(\sqrt{b}r) \right| \quad (4.65)$$

para cualquier valor de n , y

$$\psi(r) = r^{1-n/2} \left| \alpha \cdot I_{\frac{n}{2}-1}(\sqrt{b}r) + \beta I_{1-n/2}(\sqrt{b}r) \right| \quad (4.66)$$

para $n = 1, 3, 5, 7, \dots$; en este caso la densidad de probabilidad normalizada, $P(q, t/q_0)$, viene dada por la ec. (4.50) con $\psi(r)$ dada por (4.65) ó (4.66).

4.4. Condiciones intrínsecas sobre el drift

En la Secc. 2 se ha demostrado que cualquier ecuación de Fokker-Planck:

$$\dot{P}(q', t) = -\partial_{\mu} \left[f^{\mu}(q') \cdot P(q', t) \right] + \frac{1}{2} \partial_{\mu} \partial_{\nu} \left[D^{\mu\nu}(q') \cdot P(q', t) \right], \quad (4.67)$$

donde $q^{\mu}(t)$ ($\mu = 1, 2, \dots, n$) son las variables macroscópicas, $f^{\mu}(q')$ es el drift y $D^{\mu\nu}(q')$ es la matriz de difusión (que se toma como métrica de la variedad), admite una forma intrínseca, que es (cfr. ec. (2.25)):

$$\dot{S} + \text{div} \left(S \eta - \frac{1}{2} dS \right) = 0, \quad (4.68)$$

siendo $S \equiv P(q', t) / \sqrt{D(q')}$ ($D(q') = \det D^{\mu\nu}(q')$), d es la diferencial exterior, $\text{div} = * d *$ es el operador divergencia ($*$ es el operador estrella de Hodge, ec. (2.15)), y η es el drift intrínseco (dfr. ec. (2.20))

$$\begin{aligned} \eta &\equiv h_{\mu}(q') dq'^{\mu} = D_{\mu\nu}(q') h^{\nu}(q') dq'^{\mu} \equiv \\ &\equiv D_{\mu\nu}(q') \left(f^{\nu}(q') - \frac{1}{2} \sqrt{D(q')} \cdot \partial_{\mu} \frac{D^{\mu\rho}(q')}{\sqrt{D(q')}} \right) \end{aligned} \quad (4.69)$$

En la Secc. 3 hemos demostrado que si se anulan los tensores de curvatura y de torsión asociados a la matriz de difusión -métrica plana- entonces existe un sistema completo de variables macroscópicas $\{q^{\mu}\}_{\mu=1,2,\dots,n}$ en el cual la métrica es del tipo $\delta^{\mu\nu}$, es decir:

$$D^{\mu\nu}(q) = \delta^{\mu\nu}$$

y

$$S = P(q, t) \quad (4.70)$$

$$\eta = h_{\mu}(q) dq^{\mu} = f_{\mu}(q) dq^{\mu}. \quad (4.71)$$

En este caso la EFP (4.67) es exactamente resoluble si el drift transformado $f^{\mu}(q)$ es lineal:

$$f^{\mu}(q) = a_{\nu}^{\mu} q^{\nu} + b^{\mu}. \quad (4.72)$$

En los Apartados 4.1 y 4.2 de esta Sección hemos comprobado que si el drift transformado, $f^{\mu}(q)$, no es lineal pero verifica o bien la condición (4.8) (sobre la función $\psi(q)$), o bien, la condición (4.21), la ecuación de Fokker-Planck "plana" (4.67) tiene solución exacta.

Vamos a intentar escribir estas condiciones de resolución exacta de la EFP en lenguaje intrínseco.

Comenzamos con la condición de linealidad del drift. Si el drift es de la forma (4.72) se verifica que

$$\partial_\lambda \partial_\rho f^\mu(q) = 0 \quad (4.73)$$

en las variables q^μ la métrica es $\delta^{\mu\nu}$ (las variables q son las "coordenadas cartesianas" de la variedad) y en estas coordenadas la derivada covariante y la derivada ordinaria son iguales (ver Secc. 2), luego (4.73) se puede escribir:

$$\nabla_\lambda \nabla_\rho f^\mu(q) = 0 \quad (4.74)$$

esta ecuación nos lleva directamente a la condición intrínseca

$$\nabla \nabla \eta = 0. \quad (4.75)$$

Sin embargo nos parece que esta condición es demasiado potente y que no es la condición necesaria, siendo una condición suficiente de linealidad del drift.

Las otras condiciones de solubilidad de la EFP, sobre drifts no lineales, sí que tienen una formulación más precisa en lenguaje intrínseco. En efecto, la laplaciana de la función $\varphi(q)$ viene dada por (cfr. ec. (4.19)):

$$\frac{\Delta \varphi(q)}{\varphi(q)} = \partial_\mu f^\mu(q) + f_\mu(q) \cdot f^\mu(q); \quad (4.76)$$

en la métrica $\delta^{\mu\nu}$ la expresión $\partial_\mu f^\mu(q)$ es la divergencia del drift y $f_\mu(q) \cdot f^\mu(q)$ es el producto escalar del drift por sí mismo. Así podemos generalizar la ec. (4.76) en la forma:

$$\frac{\Delta\varphi(q)}{\varphi(q)} = \operatorname{div} f^{\mu}(q) + \langle f^{\mu}(q), f^{\mu}(q) \rangle \quad (4.77)$$

Como hemos visto en el Apartado 4.1 (ec. (4.8)) nos aparece una solución exacta de la EFP si:

$$\Delta\varphi(q) = 0$$

que nos lleva inmediatamente a la condición intrínseca

$$\operatorname{div}\eta + \langle \eta, \eta \rangle = 0 \quad (4.78)$$

Para escribir en forma intrínseca la condición de solubilidad dada por la ec. (4.21), debemos introducir algunas definiciones.

Sean q'_1 y q'_2 dos puntos de la variedad M y sea $\gamma: [0, 1] \rightarrow M$ la curva geodésica que los une, de forma que $\gamma(0) = q'_1$ y $\gamma(1) = q'_2$. Se denomina "función universo" a la aplicación:

$$W: M \times M \longrightarrow \mathbb{R}$$

definida por [19] :

$$W(q'_1, q'_2) \equiv \frac{1}{2} \int_0^1 \langle T_{\gamma}, T_{\gamma} \rangle dt \quad (4.79)$$

Siendo T_{γ} el campo de vectores tangentes a la geodésica γ . Evidentemente la función universo solo está bien definida para pares de puntos $q'_1, q'_2 \in M$ que están unidos mediante una y sólo una curva geodésica. La función universo es una magnitud intrínseca.

Para la variedad Euclídea \mathbb{R}^n , la función universo, $W: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ viene dada por:

$$W(\vec{a}, \vec{b}) = \frac{1}{2} \|\vec{a}, \vec{b}\|^2,$$

si tomamos el gradiente de W en las variables \vec{a} , tenemos:

$$-g \vec{\text{rad}}_{\vec{a}} W(\vec{a}, \vec{b}) = \vec{b} - \vec{a}$$

que no es más que la posición de \vec{b} relativa a \vec{a} .

En general, diferenciando la función $W(q'_1, q'_2)$ respecto de q'_1 obtenemos la 1-forma $d_{q'_1} W(q'_1, q'_2)$ que pertenece al dual del espacio tangente a la variedad en q'_1 , $M_{q'_1}^* [\delta]$. Análogamente al caso Euclídeo podemos definir la aplicación:

$$\begin{aligned} M &\longrightarrow M_{q'_1}^* \\ q' &\longrightarrow -d_{q'_1} W(q'_1, q') \end{aligned} \quad (4.80)$$

Tal aplicación recibe el nombre de "posición respecto de q'_1 ", ya que generaliza el concepto de posición relativa.

Volvamos a la condición de solubilidad dada por la ec. (4.21), condición que mediante la ec. (4.77) podemos escribir:

$$\text{div} f^M(q) + \langle f^M(q), f^M(q) \rangle = a^2 q_{,\mu} q^{\mu} + b. \quad (4.81)$$

Como las magnitudes q^{μ} son las "coordenadas cartesianas de la variedad M ", el término $q_{,\mu} q^{\mu}$ es el cuadrado de la distancia al punto que se toma como origen de coordenadas, esto ya es en sí un concepto intrínseco. Para poder escribirlo de forma intrínseca recurrimos a las definiciones (4.79) y (4.80) y en lugar de (4.81) escribimos:

$$\operatorname{div} \eta + \langle \eta, \eta \rangle = \alpha^2 \langle -d_0 W(0, q), -d_0 W(0, q) \rangle + b \quad (4.82)$$

condición intrínseca que junto con la condición intrínseca (4.78) da lugar a dos clases de soluciones no lineales y exactas de la ecuación de Fokker-Planck con difusión "plana" (4.67).

La condición (4.82) se puede escribir de una forma más sencilla y algo más operativa. Sea γ la geodésica que une el origen con el punto q de la variedad. La "distancia geodésica" entre estos dos puntos viene dada por

$$\rho(0, q) = \int_{\sigma^0}^q \sqrt{\dot{q}_\nu \dot{q}^\nu} dz, \quad (4.83)$$

donde z es un parámetro que no es el tiempo y $\dot{q}_\nu \equiv \frac{\partial q_\nu}{\partial z}$. Así en lugar de (4.82) podemos escribir la condición intrínseca:

$$\operatorname{div} \eta + \langle \eta, \eta \rangle = \alpha^2 \rho(0, q)^2 + b \quad (4.84)$$

que quizás es más sencilla que su equivalente (4.82).

4.5. Casos especiales de drifts no lineales cuya ecuación de Fokker-Planck es exactamente resoluble.

En el Apartado 4.2. hemos demostrado que una ecuación de Fokker-Planck con difusión del tipo $\delta^{\mu\nu}$:

$$\dot{P}(q, t) = -\partial_\mu [f^\mu(q) P(q, t)] + \frac{1}{2} \Delta P(q, t), \quad (4.85)$$

tiene solución exacta si el drift es de la forma:

$$f^M(q) = -a q^M + \frac{\partial^M \phi(q)}{\phi(q)}, \quad (4.86)$$

con

$$\phi(q) = \sum_{\ell_i} c_{\ell_1 \dots \ell_n} \cdot \prod_{i=1}^n \phi_i^{\ell_i}(q_i), \quad (\phi_i^{\ell_i}(q_i) \neq 0), \quad (4.87)$$

siendo:

$$\phi_i^{\ell_i}(q_i) = \left| \alpha_i F(\ell_i | \frac{1}{2} | a q_i^2) + \beta_i q_i F(\ell_i + \frac{1}{2} | \frac{3}{2} | a q_i^2) \right|, \quad (4.88)$$

los parámetros ℓ_i verifican la condición:

$$\sum_{i=1}^n \ell_i = \frac{1}{4} (n + b/a) \quad (4.89)$$

donde n es la dimensión de la variedad y a y b son parámetros conocidos.

El potencial del drift (4.86) es:

$$\psi(q) = cte + \frac{a}{2} \sum_{i=1}^n q_i^2 - \ln \phi(q). \quad (4.90)$$

Veamos algunos casos particulares de este potencial.

a) Sea $\beta_i = 0$, para todo $i = 1, 2, \dots, n$. En este caso la función $\phi(q)$

es:

$$\phi(q) = \sum_{\ell_i} c_{\ell_1 \dots \ell_n} \cdot \prod_{i=1}^n \left| F(\ell_i | \frac{1}{2} | a q_i^2) \right| \quad (4.91)$$

Supongamos que $\ell_i = -m_i$, ($m_i = 0, 1, 2, 3, \dots$), entonces tenemos [18]:

$$F(-m_i \mid \frac{1}{2} \mid a q_i^2) = (-1)^{m_i} \frac{m_i!}{(2m_i)!} H_{2m_i}(a^{1/2} q_i),$$

siendo $H_{2m_i}(a^{1/2} q_i)$ los polinomios de Hermite. Así una realización particular de (4.91) es:

$$\phi(q) = c \cdot \prod_{i=1}^n \left| H_{2m_i}(a^{1/2} q_i) \right|, \quad (4.92)$$

y el potencial (4.90) es de la forma:

$$\psi(q) = cte + \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{a}{2} q_i^2 - \ln \left| H_{2m_i}(a^{1/2} q_i) \right| \right\}. \quad (4.93)$$

Veamos algunas expresiones explícitas del potencial (4.93) para determinados valores de m_i .

(i) Sea $m_i = 1$, para cualquier valor de i . Como:

$$H_2(a^{1/2} q_i) = 4a q_i^2 - 2$$

el potencial (4.93) queda:

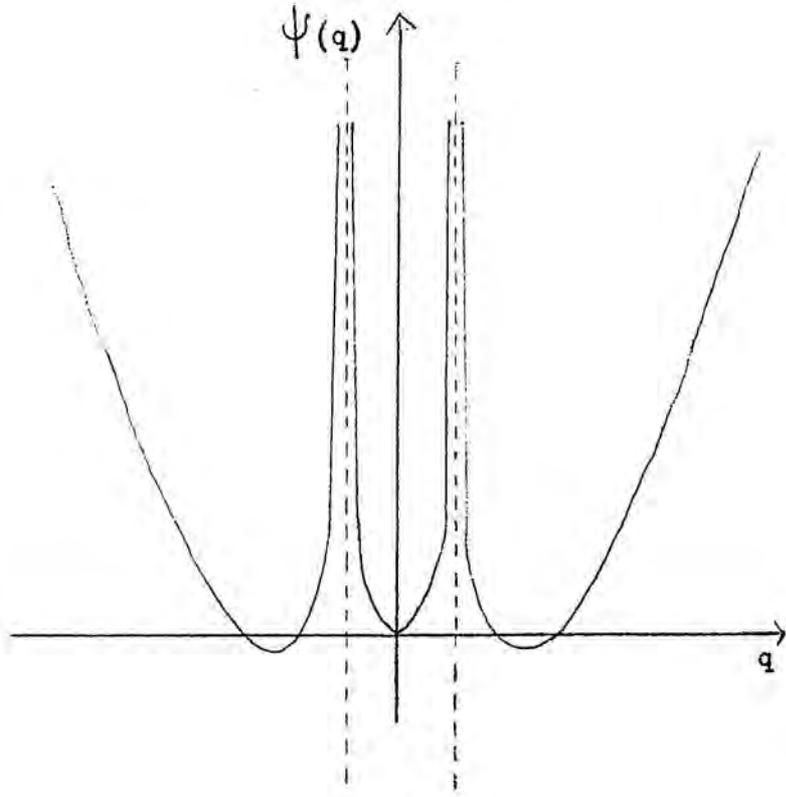
$$\psi(q) = cte + \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{a}{2} q_i^2 - \ln \left| 2a q_i^2 - 1 \right| \right\} \quad (4.94)$$

Para el caso unidimensional, el potencial (4.94) sólo tiene un máximo situado en $q = 0$ si el parámetro a es negativo ($a < 0$) y tiene tres mínimos situados en:

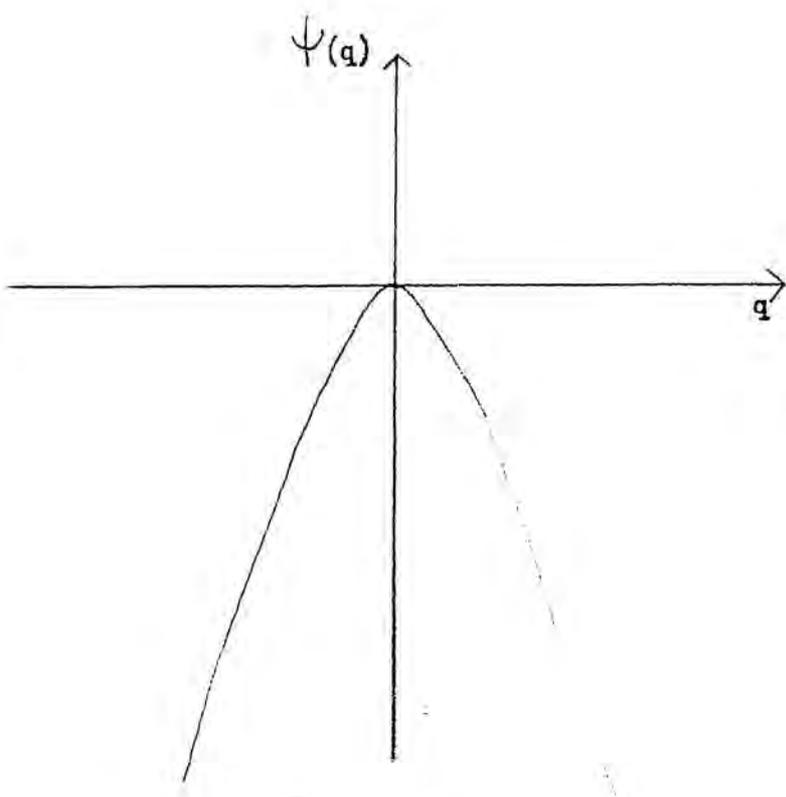
$$q = 0 \quad ; \quad q = \pm \sqrt{1/2a}$$

si el parámetro a es positivo ($a > 0$), (ver Fig. 4.1).

(ii) Sea $m_i = 2$, para todo i ; en este caso:



(a)



(b)

Fig. 4.1.- Gráfica del potencial unidimensional dado por la ec. (4.94). (a) Cuando el parámetro a es positivo. (b) Cuando a es negativo.

$$H_4(a^{1/2}q_i) = 16a^2q_i^4 - 48aq_i^2 + 12;$$

y el potencial (4.93) queda:

$$\psi(q) = \text{cte} + \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{a}{2} q_i^2 - \ln |4a^2q_i^4 - 12aq_i^2 + 3| \right\}. \quad (4.95)$$

En el caso unidimensional y para $a < 0$ este potencial sólo tiene un máximo

en $q_i = 0$. Para $a > 0$ el potencial tiene cuatro mínimos en los puntos:

$$q = \pm 2.42 a^{-1/2} \quad ; \quad q = \pm 1.07 a^{-1/2}$$

(Ver Fig. 4.2).

b) Supongamos que las constantes η_i de (4.88) son todas nulas. Así la función $\phi(q)$ es:

$$\phi(q) = \sum_{e_i} c_{e_1, \dots, e_n} \cdot \prod_{i=1}^n \left| q_i F\left(l_i + \frac{1}{2} \mid \frac{3}{2} \mid a q_i^2\right) \right|. \quad (4.96)$$

Sea $l_i + \frac{1}{2} = -m_i$, siendo $m_i = 0, 1, 2, \dots$, entonces [18]:

$$F(-m_i \mid \frac{3}{2} \mid a q_i^2) = (-1)^{m_i} \frac{m_i!}{(2m_i+1)!} \frac{1}{2a^{1/2}q_i} H_{2m_i+1}(a^{1/2}q_i)$$

y una realización particular de (4.96) es:

$$\phi(q) = c \cdot \prod_{i=1}^n \left| a^{-1/2} H_{2m_i+1}(a^{1/2}q_i) \right|. \quad (4.97)$$

con lo cual el potencial (4.90) queda:

$$\psi(q) = \text{cte} + \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{a}{2} q_i^2 - \ln \left| a^{-1/2} H_{2m_i+1}(a^{1/2}q_i) \right| \right\}. \quad (4.98)$$

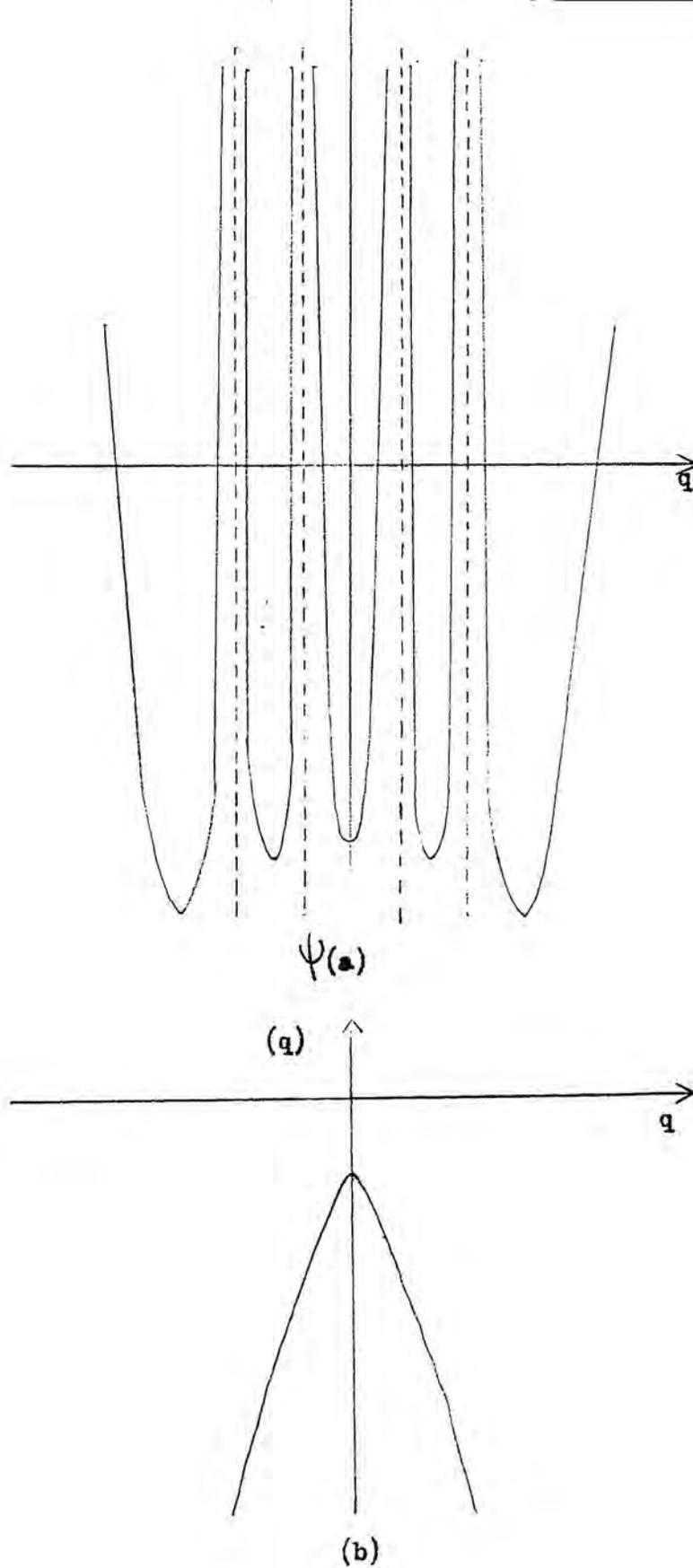


Fig. 4.2.- Gráfica del potencial unidimensional dado por la ec.(4.95) : (a) Cuando el parámetro a es positivo. (b) Cuando a es negativo.

Veamos dos casos particulares de este potencial:

(i) Sea $m_i = 0$, para todo i ; entonces como:

$$H_1(a^{1/2} q_i) = 2 a^{1/2} q_i$$

tenemos:

$$\psi(q) = cte + \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{a}{2} q_i^2 - \ln |q_i| \right\} \quad (4.99)$$

En el caso unidimensional, este potencial no tiene ningun extremos si $a < 0$.

Quando $a > 0$ el potencial tiene dos mínimos situados en:

$$q = \pm a^{-1/2}$$

(Fig. 4.3).

(ii) Sea $m_i = 1$, para todo i ; como:

$$H_3(a^{1/2} q_i) = 8 a^{3/2} q_i^3 - 4 a^{1/2} q_i,$$

se tiene

$$\psi(q) = cte + \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{a}{2} q_i^2 - \ln |2a q_i^3 - q_i| \right\} \quad (4.100)$$

En el caso unidimensional, este potencial tiene cuatro mínimos situados en:

$$q = \pm 1.83 a^{-1/2} \quad ; \quad q = \pm 0.39 a^{-1/2}$$

si a es positivo. Quando a es negativo este potencial no tiene ningún extremo. (Fig. 4.4).

c) Cuando el parámetro a , que aparece en (4.86), es nulo el drift es de la forma:

$$f^m(q) = \frac{\partial^m \psi(q)}{\psi(q)}, \quad (4.101)$$

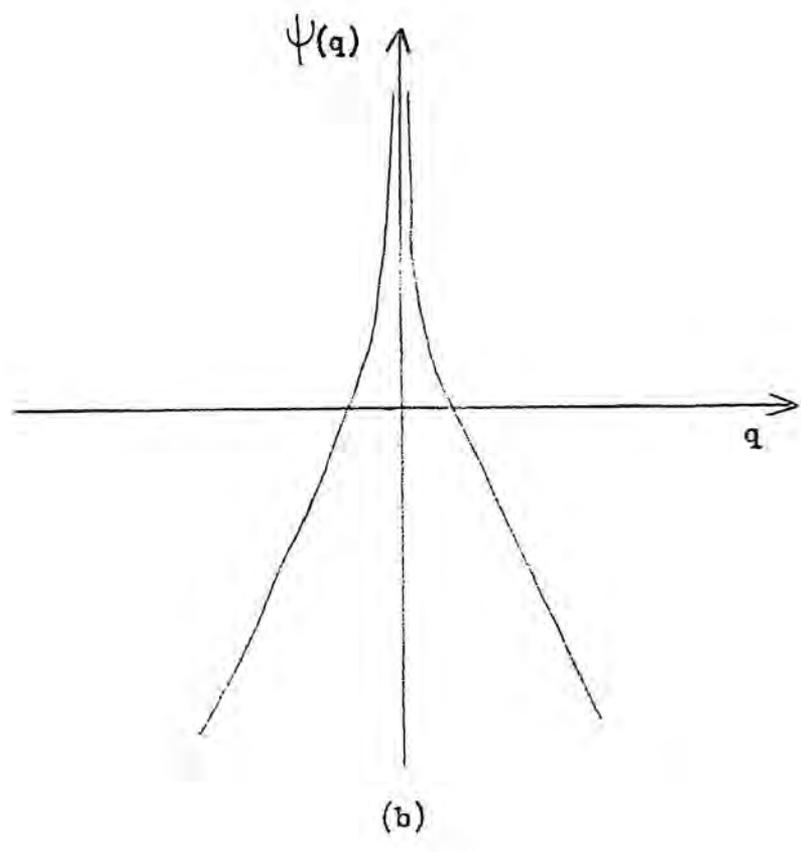
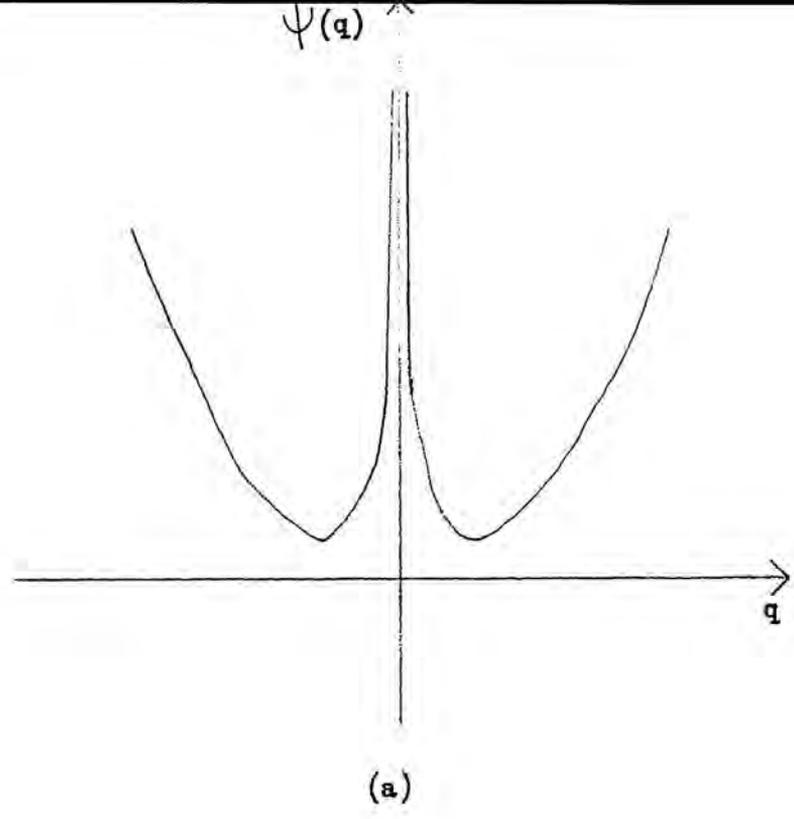
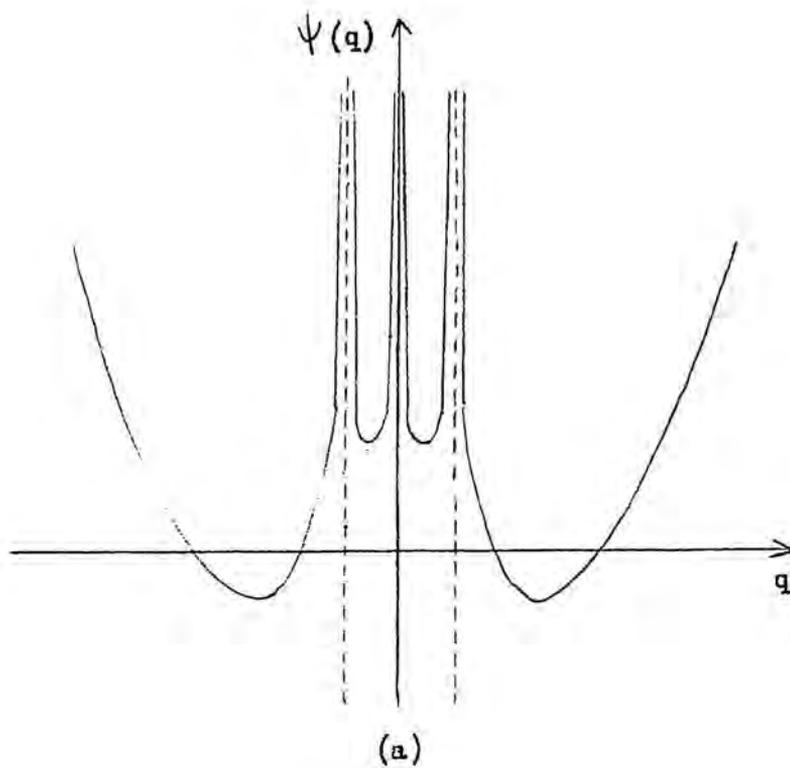
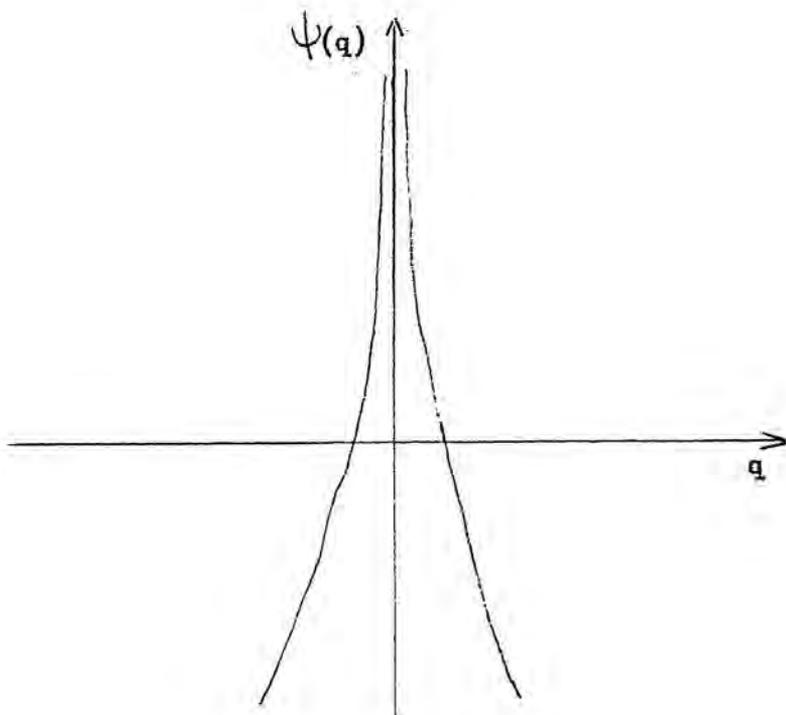


Fig. 4.3.- Gráfica del potencial unidimensional dado por la ec. (4.99) : (a) Cuando el parámetro a es positivo. (b) Cuando a es negativo.



(a)



(b)

Fig. 4.4.- Gráfica del potencial unidimensional dado por la ec. (4.100) : (a) Cuando el parámetro a es positivo. (b) Cuando a es negativo.

con :

$$\varphi(q) = \sum_{b_i} c_{b_1 \dots b_n} \cdot \prod_{i=1}^n \left| \alpha_i \cosh(\sqrt{b_i} q_i) + \beta_i \sinh(\sqrt{b_i} q_i) \right|, \quad (4.102)$$

(cfr. ec. 4.47). Los números b_i verifican que:

$$\sum_{i=1}^n b_i \equiv b$$

y el potencial del drift es:

$$\psi(q) = cte - \ln \varphi(q). \quad (4.103)$$

Supongamos que en la ec. (4.102) las constantes β_i sean todas nulas. Entonces una realización particular de $\varphi(q)$ es:

$$\varphi(q) = c \cdot \prod_{i=1}^n \left| \alpha_i \cosh \sqrt{b_i} q_i \right| \quad (4.104)$$

y el potencial es:

$$\psi(q) = cte - \sum_{i=1}^n \ln \left| \cosh \sqrt{b_i} q_i \right|. \quad (4.105)$$

Para el caso unidimensional este potencial es de la forma

$$\psi(q) = cte - \ln \left| \cosh \sqrt{b} q \right|, \quad (4.106)$$

si el parámetro b es positivo ($b > 0$) este potencial sólo tiene un máximo situado en el origen, $q = 0$. En cambio si b es negativo ($b < 0$), podemos escribir:

$$\sqrt{b} = i \sqrt{-b}$$

y como:

$$\cosh(ix) = \cos x,$$

el potencial (4.106) queda:

$$\psi(q) = \text{cte} - \ln \left| \cos \sqrt{-b} q \right| \quad (b < 0), \quad (4.106')$$

potencial periódico que tiene infinitos mínimos situados en:

$$q = \frac{k\pi}{\sqrt{-b}} \quad (k=0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

(ver Fig. 4.5).

d) En el Apartado 4.3 hemos visto que la ecuación de Fokker-Planck (4.85) también tiene solución exacta para un drift con simetría esférica de la forma:

$$\vec{f}(r) = \left[-ar + \frac{d\phi(r)/dr}{\phi(r)} \right] \frac{\vec{r}}{r} \quad (4.107)$$

siendo:

$$\phi(r) = \left| \alpha F\left(\ell \left| \frac{n}{2} \right| ar^2\right) \right| \quad (4.108)$$

para cualquier valor de la dimensión n , y

$$\phi(r) = \left| \alpha F\left(\ell \left| \frac{n}{2} \right| ar^2\right) + \beta r^{2-n} F\left(\ell + 1 - \frac{n}{2} \left| 2 - \frac{n}{2} \right| ar^2\right) \right| \quad (4.109)$$

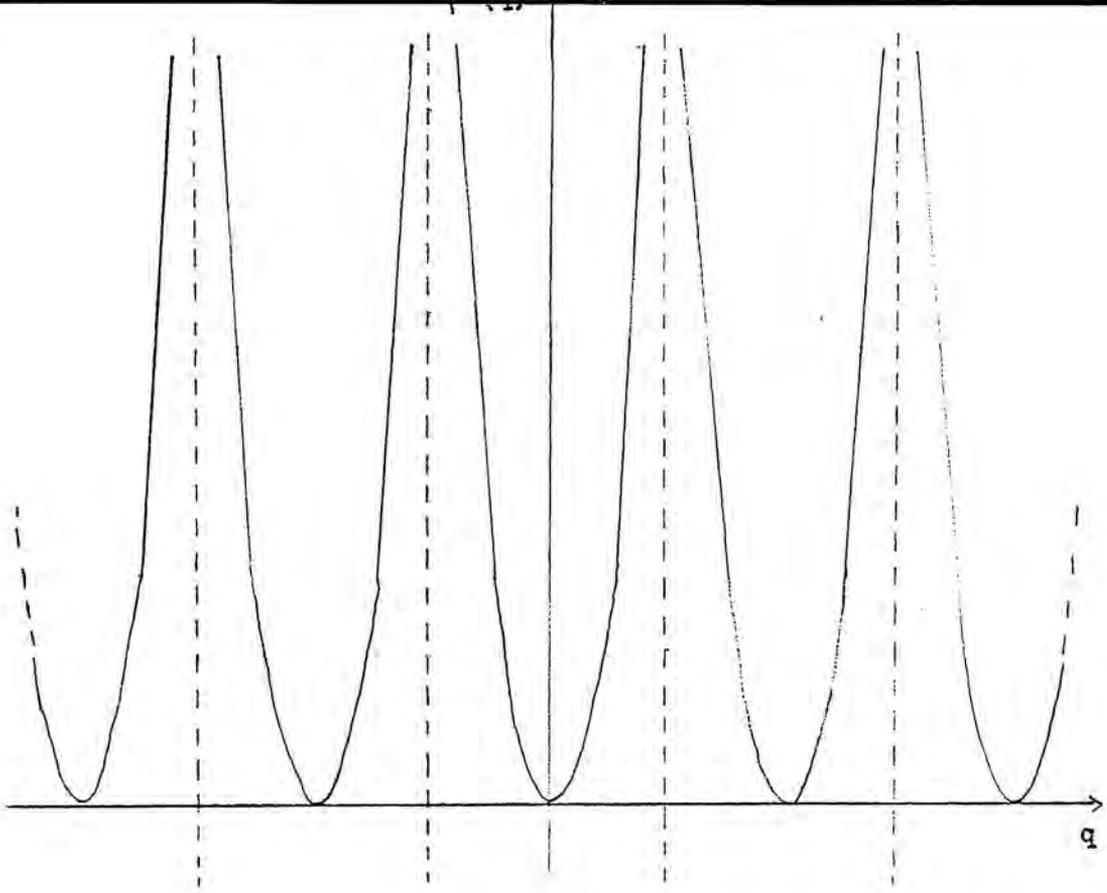
para $n = 1, 3, 5, 7, \dots$. α y β son constantes arbitrarias y $\ell = \frac{1}{4}(1+b/a)$.

En este caso el potencial es:

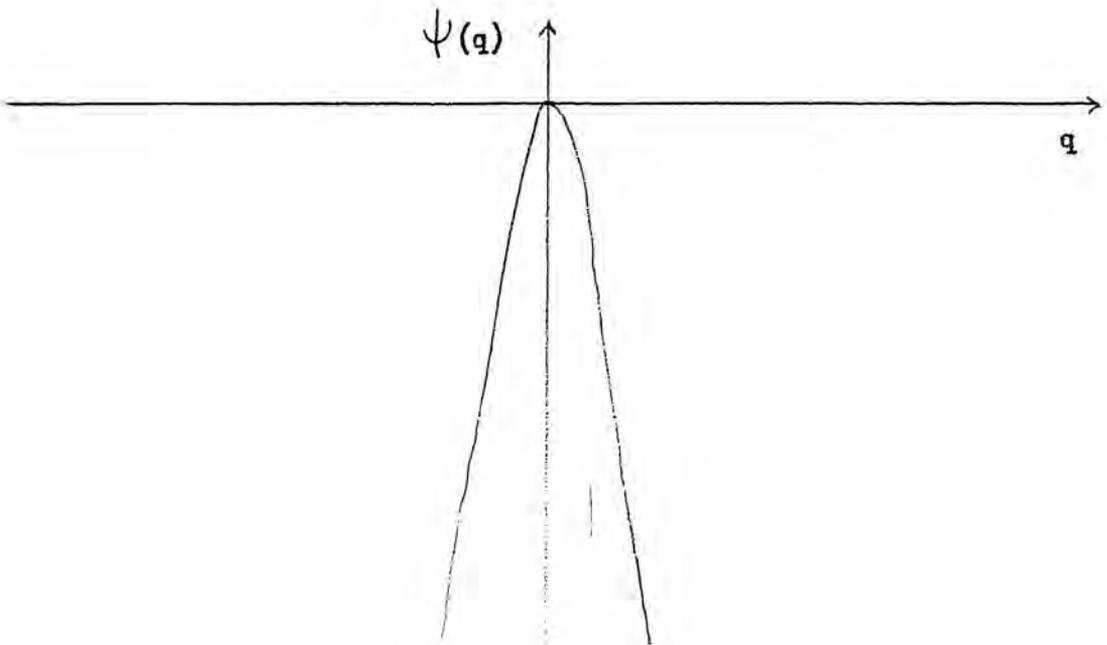
$$\psi(r) = \text{cte} + \frac{a}{2} r^2 - \ln \phi(r); \quad (4.110)$$

Veamos algunos casos particulares de este potencial.

(i) Para un sistema bidimensional ($n = 2$), tenemos de (4.108) y (4.110) que el potencial es:

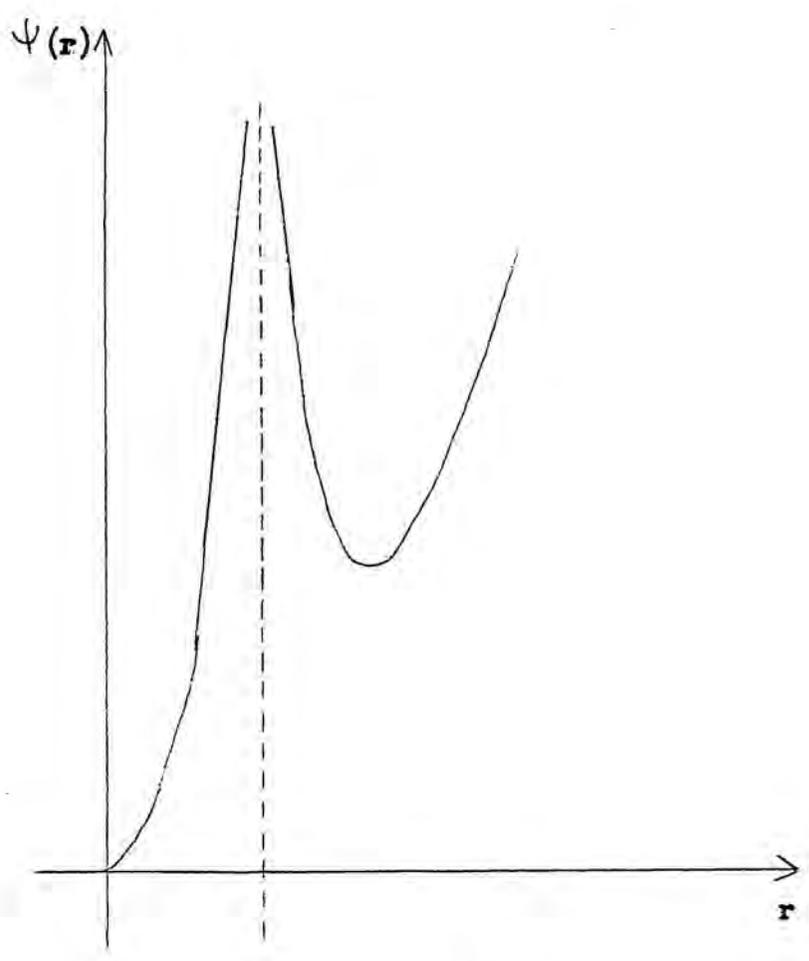


(a)

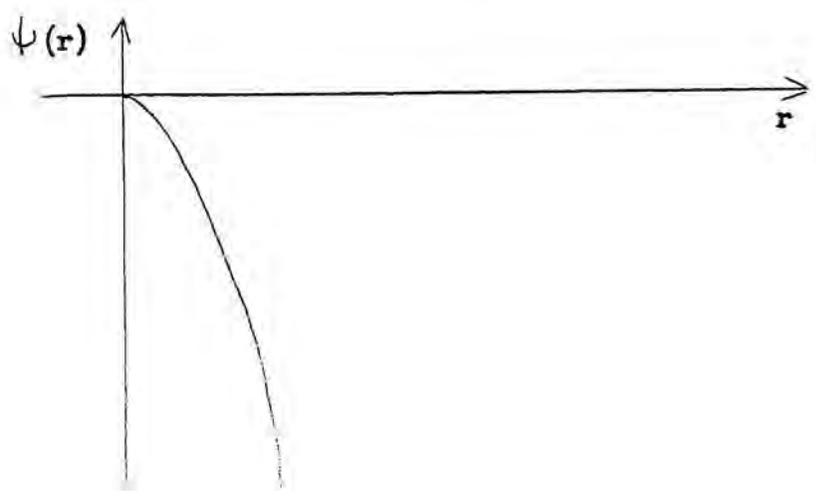


(b)

Fig. 4.5.- (a) Gráfica del potencial periódico unidimensional dado por la ec. (4.106').
 (b) Gráfica del potencial unidimensional dado por la ec. (4.106).



(a)



(b)

Fig. 4.6.- Gráfica del potencial dado por la ec. (4.112) para un sistema bidimensional con simetría esférica. (a) Cuando a es positivo. (b) Cuando a es negativo.

$$\psi(r) = cte + \frac{a}{2} r^2 - \ln \left| F(l | 1 | ar^2) \right| \quad (4.111)$$

Supongamos que $l = -m$, con $m = 1, 2, 3, \dots$, en este caso:

$$F(-m | 1 | ar^2) = L_m(ar^2)$$

siendo $L_m(ar^2)$ los polinomios de Laguerre [18]. En particular, para $m = 1$

tenemos:

$$L_1(ar^2) = 1 - ar^2$$

y el potencial es:

$$\psi(r) = cte + \frac{a}{2} r^2 - \ln |1 - ar^2| ; \quad (4.112)$$

Cuando $a > 0$ este potencial tiene dos mínimos situados en:

$$r = 0 \quad \text{y} \quad r = \sqrt{3/a}$$

cuando $a < 0$ el potencial sólo tiene un máximo en $r = 0$ (Fig. 4.6).

(ii) Para un sistema tridimensional ($n = 3$), y si $\beta = 0$, de (4.109) deducimos que

$$\phi(r) = \left| \alpha F(l | \frac{3}{2} | ar^2) \right|$$

y el potencial es:

$$\psi(r) = cte + \frac{a}{2} r^2 - \ln \left| F(l | \frac{3}{2} | ar^2) \right|$$

Si $l = -m$, con $m = 1, 2, 3, \dots$, entonces:

$$\psi(r) = cte + \frac{a}{2} r^2 - \ln \left| \frac{1}{a^{1/2} r} \cdot H_{2m+1}(a^{1/2} r) \right| , \quad (4.113)$$

en particular, para $m = 1$, tenemos:

con lo cual:

$$\psi(r) = cte + \frac{a}{2} r^2 - \ln |2ar^2 - 1|, \quad (4.114)$$

potencial del mismo tipo que el dado por la ec. (4.94).

4.6. Apéndice A

Vamos a demostrar que la solución de la ecuación diferencial (4.20), para la función $\psi(q)$, viene dada por las expresiones (4.12), (4.23) y (4.24). Para ello escribimos la ec. (4.20) de la forma:

$$[\partial_\mu \partial^\mu - (a^2 q_\mu q^\mu + b)] \psi(q) = 0 \quad (\text{A.1})$$

y descomponemos la función $\psi(q) \equiv \psi(q_1, \dots, q_n) > 0$ en el producto de n funciones, $\psi_i(q_i) > 0$, de la forma:

$$\psi(q) = \prod_{i=1}^n \psi_i(q_i) \quad (\text{A.2})$$

como $\partial_\mu \partial^\mu = \sum_{i=1}^n \partial_i^2$ y $q_\mu q^\mu = \sum_{i=1}^n q_i^2$, la sustitución de (A.2) en (A.1) nos da:

$$\sum_{i=1}^n \left[\partial_i^2 \psi_i(q_i) - (a^2 q_i^2 + b_i) \psi_i(q_i) \right] \psi_1(q_1) \cdots \widehat{\psi_i(q_i)} \cdots \psi_n(q_n) = 0 \quad (\text{A.3})$$

donde $\sum_{i=1}^n b_i \equiv b$ y $\widehat{\psi_i(q_i)}$ indica la ausencia de la función $\psi_i(q_i)$.

La solución de la ec. (A.3) viene dada por el sistema de ecuaciones independientes:

$$\partial_i^2 \psi_i(q_i) - (a^2 q_i^2 + b_i) \psi_i(q_i) = \lambda_i \psi_i(q_i) \quad (\text{A.4})$$

con la condición

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 0. \quad (\text{A.5})$$

Definiendo el número \tilde{b}_i :

$$\tilde{b}_i \equiv b_i + \lambda_i \quad (\text{A.6})$$

que satisface:

$$\sum_{i=1}^n \tilde{b}_i = b, \quad (\text{A.7})$$

el sistema (A.4) queda:

$$\partial_i^2 \varphi_i(q_i) - (a^2 q_i^2 + \tilde{b}_i) \varphi_i(q_i) = 0, \quad (i=1, 2, \dots, n). \quad (\text{A.8})$$

El cambio de variables:

$$z_i \equiv a q_i^2$$

y la definición de las nuevas funciones

$$\varphi_i \equiv \theta_i \exp \left[-\frac{a}{2} q_i^2 \right],$$

transforman el sistema (A.8) en:

$$z_i \tilde{\partial}_i^2 \theta_i + \left(\frac{1}{2} - z_i \right) \tilde{\partial}_i \theta_i - \left(\frac{1}{4} - \frac{\tilde{b}_i}{4a} \right) \theta_i = 0, \quad (i=1, 2, \dots, n), \quad (\text{A.9})$$

donde $\tilde{\partial}_i \equiv \partial / \partial z_i$ y $\tilde{\partial}_i^2 \equiv \partial^2 / \partial z_i^2$. Cada una de las ecuaciones del sistema (A.9) es una ecuación hipergeométrica confluyente, cuya solución general es [17]:

$$\theta_i(z_i) = \alpha_i F\left(\ell_i \mid \frac{1}{2} \mid z_i\right) + \beta_i z_i^{1/2} F\left(\ell_i + \frac{1}{2} \mid \frac{3}{2} \mid z_i\right), \quad (\text{A.10})$$

α_i y β_i son constantes arbitrarias; $F(a|c|z)$ es la función hipergeométrica confluyente y:

$$\ell_i \equiv \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\tilde{b}_i}{a} \right), \quad (\text{A.11})$$

$$\sum_{i=1}^n l_i = \frac{1}{4} \left(n + \frac{b}{a} \right). \quad (\text{A.12})$$

Deshaciendo los cambios de variables y de función, encontramos que la solución de (A.8) viene dada por el conjunto de funciones:

$$\psi_i^{l_i}(q_i) = e^{-(a/2)q_i^2} \left[\alpha_i F\left(l_i \mid \frac{1}{2} \mid a q_i^2\right) + \beta_i q_i F\left(l_i + \frac{1}{2} \mid \frac{3}{2} \mid a q_i^2\right) \right]. \quad (\text{A.13})$$

Como las ecuaciones del sistema (A.8) son invariantes por el cambio de signo de la función $\psi_i(q_i)$, tenemos que la función:

$$\psi_i^{l_i}(q_i) = e^{-(a/2)q_i^2} \phi_i^{l_i}(q_i), \quad (\text{A.14})$$

con

$$\phi_i^{l_i}(q_i) \equiv \left| \alpha_i F\left(l_i \mid \frac{1}{2} \mid a q_i^2\right) + \beta_i q_i F\left(l_i + \frac{1}{2} \mid \frac{3}{2} \mid a q_i^2\right) \right|, \quad (\text{A.15})$$

también es solución de (A.8) excepto para el conjunto de valores de q_i tales que:

$$\phi_i^{l_i}(q_i) = 0,$$

el cual es un conjunto de medida nula.

Otsérvese que la solución (A.14) está en consonancia con el cambio dado por la ec. (4.4):

$$f^k(q) = \frac{\partial^k \psi(q)}{\psi(q)},$$

y tiene la ventaja de que, aparte de ser una solución definida positiva, no incluye los puntos singulares del potencial del drift (cfr. ec. (4.2)).

Una demostración alternativa para comprobar que la solución con valor absoluto (A.14)-(A.15) también es solución del sistema (A.8) -excepto para un

conjunto de puntos de medida nula— consiste en aplicar la teoría de las distribuciones [16]. En efecto, hemos demostrado que la función:

$$\psi(q) = e^{-(a/2)q^2} \phi(q),$$

con:

$$\phi(q) = \alpha F(\ell | \frac{1}{2} | aq^2) + \beta q F(\ell + \frac{1}{2} | \frac{3}{2} | aq^2)$$

es solución de la ecuación (cfr. ec. (A.1)):

$$\frac{d^2 \psi(q)}{dq^2} - (a^2 q^2 + b) \psi(q) = 0,$$

lo cual implica que la función $\phi(q)$ verifica la ecuación:

$$\frac{d^2 \phi(q)}{dq^2} - 2aq \frac{d\phi(q)}{dq} - (a+b) \phi(q) = 0. \quad (A.17)$$

(Para simplificar, y sin pérdida de generalidad, consideramos solo el caso unidimensional).

Vamos a demostrar que la función:

$$\chi(q) \equiv |\phi(q)| \quad (A.17)$$

también es solución de (A.16), excepto para un conjunto de puntos de medida nula.

Para ello definimos la distribución:

$$\epsilon(\phi(q)) = \begin{cases} +1 & \text{si } \phi(q) > 0 \\ -1 & \text{si } \phi(q) < 0 \end{cases} \quad (A.18)$$

y veamos cuál es su derivada (en el sentido de las distribuciones). Para cual-

quier función $g(q)$ infinitamente derivable y de soporte acotado tendremos

(si $\phi(-\infty) < 0$) [16]:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\epsilon(\phi(q))}{dq}, g(q) \right\rangle &\equiv - \left\langle \epsilon(\phi(q)), \frac{dg(q)}{dq} \right\rangle = \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \epsilon(\phi(q)) dg(q) = 2 \sum_{i=1}^{\nu} (-1)^{i+1} g(a_i) \end{aligned}$$

siendo a_i ($i = 1, 2, \dots, \nu$) los ceros de la función $\phi(q)$. Luego, en el sentido de las distribuciones, tenemos que:

$$\frac{d\epsilon(\phi(q))}{dq} = 2 \sum_{i=1}^{\nu} (-1)^{i+1} \delta(q-a_i), \quad (\phi(a_i)=0) \quad (\text{A.19})$$

o bien, si $\phi(-\infty) > 0$, que:

$$\frac{d\epsilon(\phi(q))}{dq} = 2 \sum_{i=1}^{\nu} (-1)^i \delta(q-a_i), \quad (\phi(a_i)=0), \quad (\text{A.19}')$$

en ambos casos $\delta(q-a_i)$ es la distribución de Dirac.

Con la definición (A.18), la función (A.17) se puede escribir de la forma:

$$|\phi(q)| = \epsilon(\phi(q)) \cdot \phi(q) \quad (\text{A.20})$$

Mediante las expresiones (A.19) tenemos [16]:

$$\begin{aligned} \frac{d|\phi(q)|}{dq} &= \frac{d\epsilon(\phi(q))}{dq} \cdot \phi(q) + \epsilon(\phi(q)) \frac{d\phi(q)}{dq} \\ &= 2 \cdot \sum_{i=1}^{\nu} (-1)^{i+1} \phi(q) \delta(q-a_i) + \epsilon(\phi(q)) \frac{d\phi(q)}{dq} \\ &= 2 \cdot \sum_{i=1}^{\nu} (-1)^{i+1} \phi(a_i) + \epsilon(\phi(q)) \frac{d\phi(q)}{dq}, \end{aligned}$$

y como $\phi(a_i) = 0$, obtenemos que:

$$\frac{d|\phi(q)|}{dq} = \epsilon(\phi(q)) \frac{d\phi(q)}{dq} \quad (\text{A.21})$$

Análogamente:

$$\frac{d^2|\phi(q)|}{dq^2} = \epsilon(\phi(q)) \frac{d^2\phi(q)}{dq^2} + 2 \frac{d\phi(q)}{dq} \cdot \sum_{i=1}^p (-1)^{i+1} \delta(q-a_i)$$

y

$$\frac{d^2|\phi(q)|}{dq^2} = \epsilon(\phi(q)) \frac{d^2\phi(q)}{dq^2} \quad (\forall q \neq a_i) \quad (\text{A.22})$$

Sustituyendo las expresiones (A.22), (A.21) y (A.20) en la ec. (A.16), vemos que la función $|\phi(q)|$ es solución de (A.16), excepto para el conjunto de puntos q , tales que $\phi(q) = 0$ (que es un conjunto de medida nula).

Finalizamos este Apéndice observando que, debido a la libertad de elección de los parámetros l_i sólo restringida por la condición (A.12), la solución general de la ec. (A.1) viene dada por:

$$\psi(q) = \sum_{l_i} c_{l_1 \dots l_n} \cdot \prod_{i=1}^n \psi_i^{l_i}(q_i), \quad (\text{A.23})$$

donde la suma se extiende a todos los valores de los l_i permitidos por la condición (A.12).

4.7. Apendice B

Vamos a demostrar que una solución de la ecuación diferencial (4.30) para la función $Z(q, t) = Z(q_1, \dots, q_n; t)$ viene dada por la ec. (4.32). Escribimos la ec. (4.30) de la forma:

$$\left[\partial_t - \frac{1}{2} \partial_\mu^2 + \frac{1}{2} (a^2 q_\mu q_\mu + b) \right] Z(q_1, \dots, q_n; t) = 0, \quad (\text{B.1})$$

y descomponemos la función $Z(q_1, \dots, q_n; t)$ en un producto de n funciones de la forma:

$$Z(q_1, \dots, q_n; t) = \prod_{i=1}^n Z_i(q_i; t), \quad (\text{B.2})$$

con lo cual (B.1) se puede escribir como:

$$\sum_{i=1}^n \left[\partial_t Z_i(q_i; t) - \frac{1}{2} \partial_i^2 Z_i(q_i; t) + \frac{1}{2} (a^2 q_i^2 + b_i) Z_i(q_i; t) \right] \times \\ \times Z_1(q_1; t) \cdots \widehat{Z_i(q_i; t)} \cdots Z_n(q_n; t) = 0 \quad (\text{B.3})$$

con $b \equiv \sum_{i=1}^n b_i$ y $\widehat{Z_i}$ significa la ausencia de Z_i . La solución de la ec. (B.3) está determinada por el sistema de ecuaciones independientes:

$$\partial_t Z_i(q_i; t) - \frac{1}{2} \partial_i^2 Z_i(q_i; t) + \frac{1}{2} (a^2 q_i^2 + b_i) Z_i(q_i; t) = \\ = \delta_i Z_i(q_i; t) \quad (\text{B.4})$$

con la condición:

$$\sum_{i=1}^n \delta_i = 0, \quad (\text{B.5})$$

Introduciendo el número:

$$\tilde{b}_i \equiv b_i - \delta_i \quad (8.6)$$

que verifica:

$$\sum_{i=1}^n \tilde{b}_i = b, \quad (8.7)$$

el sistema (B.4) queda:

$$\partial_t Z_i(q_i, t) - \frac{1}{2} \partial_i^2 Z_i(q_i, t) + \frac{1}{2} (a^2 q_i^2 + \tilde{b}_i) Z_i(q_i, t) = 0. \quad (8.8)$$

Para resolver (B.8) hacemos una separación entre las variables espaciales y temporales análoga a la realizada por M.O. Höngler en la ref. [20] para el caso unidimensional. Así suponemos que:

$$Z_i(q_i, t) = N_i(t) \exp \left\{ -\alpha_i(t) (q_i - \beta_i(t))^2 \right\} \quad (8.9)$$

La sustitución de (B.9) en (B.8) y la identificación de las potencias de q_i iguales, conduce a tres ecuaciones, que con las condiciones iniciales:

$$Z_i(q_i, 0) = \delta(q_i - q_{0i}) \quad (8.10)$$

compatibles con la condición inicial global (4.31), conducen a las expresiones de $N_i(t)$, $\beta_i(t)$ y $\alpha_i(t)$. El resultado final es:

$$Z_i(q_i, t) = c_i [\sin h(\kappa t)]^{-1/2} \times \exp \left\{ -\tilde{b}_i t / 2 - (a/2) (1 - e^{-2\kappa t})^{-1} [(q_i - q_{0i} e^{-\kappa t})^2 + (q_i e^{-\kappa t} - q_{0i})^2] \right\} \quad (8.11)$$

La sustitución de (B.11) en (B.2) nos lleva directamente a la solución (4.32) buscada.

I.5. Referencias de la primera parte

- 1 R.L. Stratonovich: "Topics in the Theory of Random Noise", Vol. 1. New York, Gordon and Breach 1963.
- 2 M.C.Waug, G.E. Uhlenbeck: Rev. Mod. Phys. 17,2(1945).
- 3 H. Haken: Rev. Mod. Phys. 47,67(1975).
- 4 R. Graham: Z. Physik, B26,397(1977).
- 5 L. Garrido: Physica 10CA,140(1980).
- 6 L. Garrido, J. Llosa: "Intrinsic Path integral Solution to the Fokker-Planck equation", in "Functional Integration: Theory and Applications", J.P. Antoine y E. Tirapeguí Eds., New York, Plenum (1980).
- 7 L. Garrido, J. Masoliver: J. Math. Phys., 23(b),1155(1982).
- 8 A. Kolmogoroff: Math. Annalen, 108,766(1933).
- 9 L.D. Landau, E.M. Lifshitz: "Teoría Clásica de Campos", Barcelona, Reverté (1966).
N.J. Hicks: "Notes on differential geometry", Londo, Van Nostrand (1971).
S. Weinber: "Gravitaion and cosmology", New York, Wiley (1972).
- 10 M. Spivak: "Calculus on manifolds", New York, Benjamin (1965).
H. Flanders: "Differential forms", New York, Academic Press (1963).
- 11 M. San Miguel: Z. Physik, B33,307(1979).
- 12 W. Horsthemke, A. Bach: Z. Physik B22,189(1975).
- 13 H. Haken: Z. Physik, B24,321(1976).
- 14 J. Masoliver, L. Garrido: Z. Physik , B 47,243-249(1982).
- 15 H. Haken: "Synergetics: An Introduction", Berlin, Springer(1978).
- 16 L. Schwartz: "Métodos matemáticos para las Ciencias Física", Madrid, Selecciones Científicas (1969).
- 17 P.M. Morse, H. Feshbach: "Methods of Theoretical Physics", New York, McGraw-Hill (1953).
- 18 W. Magnus, F. Oberhettinger, R.P. Soni: "Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics", Berlin, Springer (1966).
- 19 J. L. Synge: "Relativity: The Teneral Theory", Amsterdam, North-Holland (1960).
- 20 M.O. Höngler: Université de Genève (UGVA-DPT 1979/12-228).

II.1. Motivación de esta parte del trabajo

El estudio de los sistemas físicos unidimensionales tiene gran importancia tanto desde el punto de vista teórico como práctico. Muchos problemas tridimensionales actualmente insolubles, tienen un tratamiento más sencillo cuando se tratan sobre modelos unidimensionales. Por otra parte existen algunos problemas físicos reales que, a todos los efectos prácticos, pueden considerarse unidimensionales. En todo caso, el estudio de un sistema unidimensional constituye a menudo un primer paso para la investigación de problemas más realistas que necesariamente tienen un tratamiento más complicado. Este es el caso, por ejemplo, de algunos problemas cinéticos y ergódicos cuyo tratamiento preciso en tres dimensiones involucra un aparato matemático extraordinario, frecuentemente por encima de los conocimientos actuales.

La búsqueda de soluciones analíticas exactas para la evolución temporal de modelos unidimensionales se remonta al trabajo de Jepsen [1] que halló una expresión exacta para la función de autocorrelación de la velocidad de un sistema lineal de N puntos materiales impenetrables de igual masa. Posteriormente Lebowitz, Percus y Sykes obtuvieron la evolución temporal de las funciones de autodistribución condicional [2] y de distribución condicional total [3] para un sistema lineal de N varillas rígidas con igual masa y tamaño. La relevancia de estas funciones de distribución reside en el hecho de que están relacionadas con las funciones de correlación de Van Hove [4] cuya transformada de Fourier-Laplace, es, en principio medible mediante experimentos de scattering de neutrones y rayos X. Este sistema lineal de N varillas rígidas iguales ha sido también simulado en un ordenador (como una buena alternativa a la realización de un experimento real) mediante dinámica mole-

cular, primero por Bishop y Berre [5] y después por Haus y Ravaché [6] encontrando ambos un buen acuerdo de sus resultados "experimentales" con los resultados exactos de Lebowitz, Percus y Sykes.

Otro sistema unidimensional resuelto exactamente por Aizenman, Lebowitz y Marro [7, 18] es el formado por una mezcla de varillas rígidas de igual masa pero de distinto tamaño; la presencia de tamaños variables cambia algunas de las características del sistema de varillas duras iguales, encontrando que la disipación de información es más compleja afectando al comportamiento ergódico del sistema.

También se han encontrado soluciones exactas a sistemas de variables no rígidas, esto es, con un potencial de penetración. En este sentido cabe destacar el trabajo de Sutherland [8].

Los trabajos de Aizenman, Lebowitz y Marro, por una parte, y de Sutherland, por otra parte, han mostrado la enorme dificultad matemática que puede aparecer al intentar estudiar mediante métodos analíticos exactos otros sistemas más complicados que aquellos. Sin embargo, existen otros sistemas unidimensionales de complejidad creciente que tienen gran interés tanto desde puntos de vista teóricos como prácticos. Un buen ejemplo de éstos es el sistema unidimensional mezcla de N varillas rígidas de distinta masa y tamaño (esto es, longitud). El interés por este sistema se entiende fácilmente teniendo en cuenta que se trata de un caso más realista que el tratado en las Refs. [7, 18] puesto que, generalmente, un distinto tamaño de las partículas irá acompañado también por una masa distinta. En consecuencia, dados los interesantes resultados del trabajo de Aizenmann, Lebowitz y Marro, en el que

se compara la evolución de varillas rígidas de distinta longitud (pero igual masa) se hace evidente el interés por comparar estos sistemas con el de varillas rígidas con masas y/o longitudes distintas.

Esta es precisamente la motivación del trabajo que presentamos en esta parte donde nos proponemos analizar las peculiaridades cinéticas y ergódicas de los sistemas de varillas rígidas con masas distintas. Puesto que la complejidad extra introducida no parece permitir por ahora un tratamiento analítico exacto, nosotros estudiamos este sistema mediante un procedimiento numérico basado en los métodos Monte Carlo y de dinámica molecular. Este procedimiento de análisis está más que justificado en este caso puesto que se dan las condiciones necesarias para ello: el sistema no puede tratarse exactamente, la aplicación de métodos numéricos es, en principio, relativamente sencilla, económica y eficiente, y proporcionará información muy valiosa que, finalmente, puede permitir el desarrollo de una teoría semifemenológica para sistemas algo más complicados que el que nosotros estudiamos aquí.

En particular, nos proponemos estudiar las características generales de la evolución temporal del modelo unidimensional de varillas rígidas con masas distintas, comparándolas con el caso de los sistemas más sencillos, concluir acerca de la forma de la relajación hacia el equilibrio, acerca de su comportamiento ergódico, y acerca de la forma de las funciones de correlación espacial y temporal y de los coeficientes de transporte.

Hemos organizado esta segunda parte de la forma siguiente: En la Sec. 2 se realiza una breve exposición del modelo exacto de Lebowitz, Percus y Sykes. En la Sec. 3 se explican los detalles técnicos de la simulación dinámica de

nuestro sistema. Las siguientes secciones dan cuenta de los resultados de esta simulación. En la Sec. 4 concluimos acerca de la evolución al equilibrio y de las propiedades ergódicas. En la Sec. 5 acerca de la función de autocorrelación de la velocidad. En la Sec. 6 acerca de la función de distribución radial. Por último, la Sec. 7 está dedicada a las conclusiones finales.

II.2. Solución exacta del sistema unidimensional de varillas rígidas de igual masa y tamaño.

Como ya hemos indicado en la Sec. 1, Lebowitz, Percus y Sykes encontraron la solución exacta para la evolución temporal de la autodistribución condicional [2] y de la distribución condicional total [3] del sistema lineal de N varillas rígidas iguales. Vamos a hacer un breve comentario de los resultados de este trabajo que han de ser luego comparados con nuestros resultados y, en particular, vamos a obtener predicciones numéricas y figuras a partir de las expresiones exactas de esos autores para luego compararlos con nuestros resultados.

La autodistribución condicional $f_c(q, v, t/v_0)$ es la función de distribución de una partícula test del sistema que en $t=0$ se encuentra en el origen con velocidad v_0 . La distribución condicional total $f(q, v, t/v_0)$ es igual a la densidad de partículas que en el instante t se encuentran en la posición q con velocidad v cuando una partícula, cualquiera, del sistema se encontraba en el origen con velocidad v_0 . También se define la función de distribución "distinta" por:

$$f_d(q, v, t/v_0) \equiv f(q, v, t/v_0) - f_c(q, v, t/v_0) \quad (2.1)$$

Estas funciones de distribución se pueden escribir como promedios [2]:

$$f_c(y_1, t/y_0) = \left\langle \sum_{i=1}^N \delta(x_i(t) - y_1) \cdot \delta(x_i - y_0) \right\rangle, \quad (2.2)$$

$$f_d(y_1, t/y_0) = \left\langle \sum_{i \neq j}^N \delta(x_i(t) - y_1) \cdot \delta(x_j - y_0) \right\rangle,$$

siendo: $x_i \equiv (q_i, v_i)$, $y_1 \equiv (q_1, v_1)$, $y_0 \equiv (q, v_0)$. Fácilmente se comprueba que para $t=0$:

$$\begin{aligned} f_s(q, v, 0 | v_0) &= \delta(v - v_0) \cdot \delta(q) \\ f_d(q, v, 0 | v_0) &= \rho g(q) \cdot h_0(v) \end{aligned} \quad (2.3)$$

con $g(q)$ la función de distribución de la posición y $h_0(v)$ la distribución de velocidades iniciales, ρ es la densidad del sistema [2]. Veamos cuál es la evolución temporal de estas funciones.

En la deducción de $f_s(q, v, t/v_0)$ que se hace en la ref. [2] se usa el hecho de que f_s depende de la densidad ρ y del tamaño a de las varillas sólo a través de la combinación $n = \rho / (1 - \rho a)$, esto es, la única longitud que aparece en el problema es la distancia efectiva entre las partículas:

$n^{-1} = \rho^{-1} - a$. Con ello la autodistribución f_s tiene la misma forma para a finito que para $a=0$ (puntos impenetrables). Teniendo en cuenta esta circunstancia se encuentra un simple algoritmo, ideado primero por Jepsen [1], para encontrar la autodistribución f_s . Este procedimiento se basa en sustituir en (2.2) las ecuaciones del movimiento:

$$\begin{aligned} q_i(t) &= q_i + v_i t, \\ v_i(t) &= v_i. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Después de algunas manipulaciones se tiene que para $a=0$ (cuando $a \neq 0$ solo hay que sustituir por $n = \rho / (1 - \rho a)$):

$$f_s(q, v, t | v_0) = A(v, t) \delta(v - v_0) \cdot \delta(q - vt) + \rho h_0(v) \frac{1}{2\pi}$$

$$\times \int F(t_p, \theta, q | t) \cdot \exp \left\{ i\theta [\epsilon(q - vt) - \epsilon(vt - q)] \right\} d\theta,$$

(2.5)

siendo $\epsilon(z)$ la función escalón:

$$\epsilon(z) = \begin{cases} 0 & z < 0 \\ 1 & z > 0 \end{cases}$$

y las otras magnitudes indicadas vienen dadas por

$$F(t_p, \theta, v) = \exp \left\{ -t_p [(1 - \cos \theta) \mu(v) - i v \sin \theta] \right\}$$

$$\mu(v) = \int |v - w| h_0(w) dw$$

$$A(v, t) = \frac{1}{2\pi} \int F(t_p, \theta, v) d\theta = e^{-t_p t(v)} I_0 \left(t_p [\mu^2(v) - v^2]^{1/2} \right),$$

donde I_0 es la función modificada de Bessel de primera clase y orden cero.

La magnitud $A(v, t)$ nos da la probabilidad de que una partícula que inicialmente tenga una velocidad v conserve esta velocidad en el instante t , bien porque no ha chocado, bien porque la última colisión le ha proporcionado de nuevo la velocidad v .

Integrando $f_s(q, v, t | v_0)$ sobre las posiciones q , obtenemos la función de autodistribución condicional de la velocidad:

$$h_s(v, t | v_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_s(q, v, t | v_0) dq. \quad (2.6)$$

La función de autocorrelación de la velocidad $\psi(t)$ está definida por:

$$\begin{aligned}\psi(t) &= \langle v(t) \cdot v \rangle \\ &= \int v h_s(v, t | v_0) h_0(v_0) v_0 dv dv_0\end{aligned}\quad (2.7)$$

realizando estas integraciones para una distribución maxwelliana de velocidades iniciales:

$$h_0(v) = (2\pi/\beta m)^{-1/2} e^{-\beta m v^2/2} \quad (2.8)$$

se encuentra que para tiempos pequeños la función de autocorrelación de la velocidad tiene un decrecimiento exponencial tipo Langevin:

$$\psi(t) = (\beta m)^{-1} \exp \left\{ -4t\rho / (\pi\beta m)^{1/2} \right\} \quad (2.9)$$

(Ver Fig. (2.1a)) y para tiempos grandes la función de autocorrelación es del tipo (Long tails effects):

$$\psi(t) \propto 1/t^3 \quad (2.10)$$

(Ver Fig. (2.1b)). El tiempo de transición entre ambas realizaciones es:

$$\tau \cong (\pi\beta m)^{1/2} / \rho \quad (2.11)$$

Lebowitz, Percus y Sykes también han comprobado que para una distribución de velocidades iniciales continua de la forma:

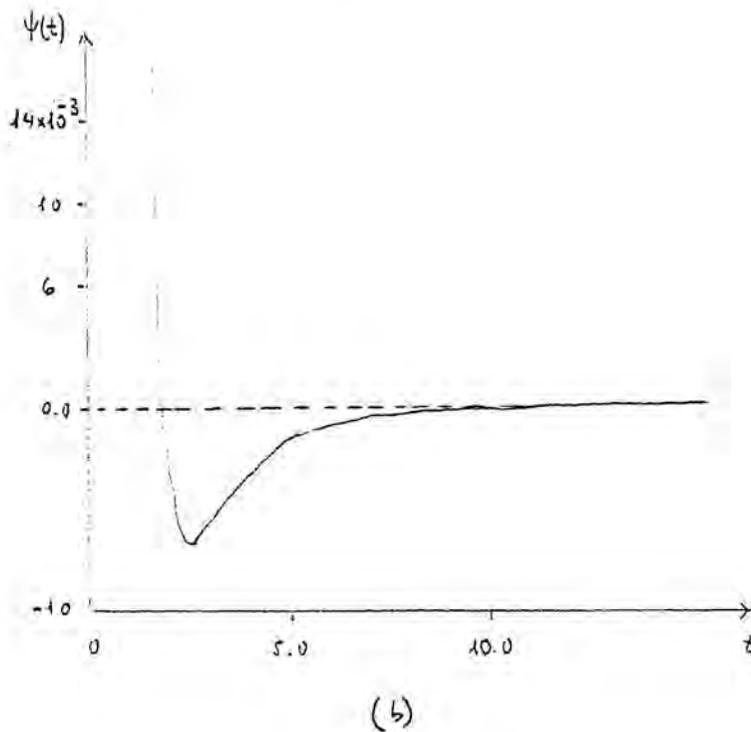
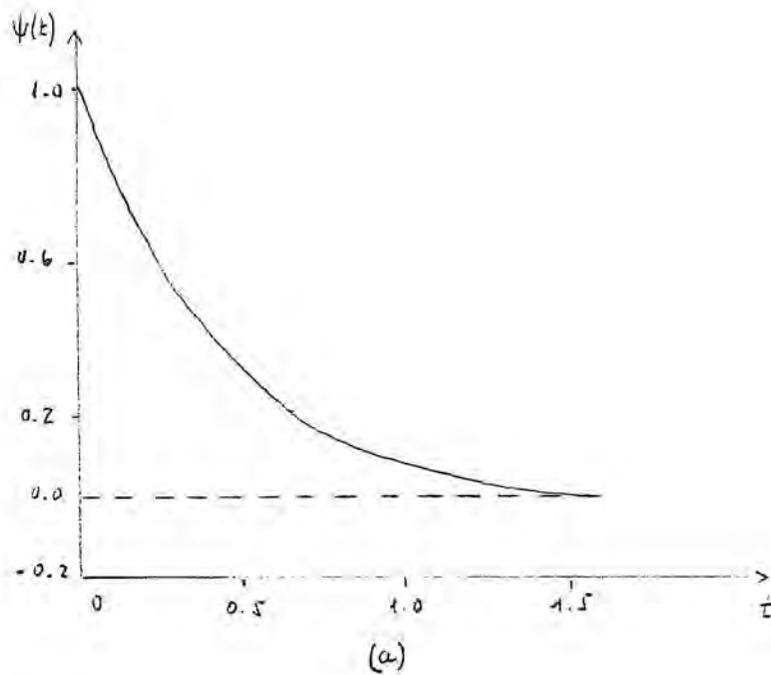


Fig. 2.1.- Para el sistema lineal de puntos duros con densidad y temperatura unidad. (a) Comportamiento para tiempos pequeños de la autocorrelación de la velocidad. (b) Comportamiento asintótico de la auto-distribución de la velocidad. (En ambos casos distribución inicial maxwelliana).

$$h_0(v) = \frac{1}{2} v^2 (v_0^2 + v^2)^{-3/2} \quad (2.12)$$

el comportamiento asintótico de $\psi(t)$ continúa siendo del tipo t^{-3} . Sin embargo para una distribución de velocidades iniciales discreta:

$$h_0(v) = \frac{1}{2} [\delta(v-v_0) + \delta(v+v_0)] , \quad (2.13)$$

en donde las partículas sólo pueden tener velocidades iniciales $\pm v_0$, la función $\psi(t)$ exacta es:

$$\psi(t) = v_0^2 e^{-2\rho v_0 t} \quad (2.14)$$

y su comportamiento asintótico es exponencial no presentando "long tail effects".

La función de autodistribución radial se define por la ecuación:

$$G_S(q,t) = \int dv dv_0 f_S(q,v,t/v_0) , \quad (2.15)$$

sustituyendo f_S por su expresión (2.5) se tiene después de algunas manipulaciones:

$$G_S(q,t) = \frac{1}{t} A(q|t,t) h_0(q|t) + \frac{\rho}{2\pi} \int d\theta F(t\rho, \theta, q|t) \langle \exp[i(\frac{\theta}{t}) \cdot \text{sgn}(\frac{q}{t} - v)] \rangle^2 . \quad (2.16)$$

Se comprueba [2] que tanto para $t \rightarrow 0$ como para $t \rightarrow \infty$ la autodistribución

$G_S(q,t)$ viene dada por las gaussianas:

$$f_s(q, t) = [2\pi\sigma^2(t)]^{-1/2} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{q^2}{\sigma^2(t)}\right] \quad (2.17)$$

con

$$\sigma^2(t) \rightarrow \begin{cases} \langle v^2 \rangle t^2 & t \rightarrow 0 \\ (1/\rho) \langle |v| \rangle t & t \rightarrow \infty \end{cases} \quad (2.18)$$

Una vez encontrados los resultados exactos de las funciones de autodistribución vamos a comentar los resultados encontrados en la ref. [3] para la evolución temporal de la función de distribución condicional total $f(q, v, t/v_0)$ de una partícula en el sistema unidimensional considerado.

Veamos primero el caso $a=0$ (puntos). En este caso la dinámica del sistema total es idéntica a la de un gas ideal donde no hay interacción entre las partículas. En efecto cuando $a=0$, la dinámica del sistema sólo se diferencia de la de un gas ideal en el hecho de que las colisiones intercambian la "numeración" de las partículas y, en consecuencia, esta distribución será igual a la de un gas ideal. Para un gas ideal $f_d(q, v, t/v_0)$ es independiente del tiempo y como $g(r) = (1-1/N) \rightarrow 1$ cuando $N \rightarrow \infty$, tenemos (ver ecs. (2.31)):

$$f_d(q, v, t | v_0) = \rho h_0(v),$$

mientras que

$$f_s(q, v, t | v_0) = \delta(q - vt) \cdot \delta(v - v_0),$$

así pues para $a=0$ la evolución temporal de la distribución total viene dada por:

$$f(q, v, t/v_0) = \rho h_0(v) + \delta(q-vt) \cdot \delta(v-v_0) \quad (2.19)$$

Para $a \neq 0$ la situación es algo más compleja pues ahora se ha de tener en cuenta que en un choque de partículas de diámetro a hay una discontinuidad, por el desplazamiento $\pm a$, en la localización de estas partículas. Esto hace que la evolución de $f(q, v, t/v_0)$ sea distinta a la de un gas ideal. Para analizar este sistema se hace una correspondencia biunívoca entre él y el sistema de puntos impenetrables. Si q_j es la posición de la varilla j y q'_j es la posición del "punto" j , esta correspondencia viene dada por:

$$q_j = q'_j + a \sum_{s=1}^N \epsilon(q'_j - q'_s) \quad (2.20)$$

donde

$$\epsilon(z) = \begin{cases} 1 & z > 0 \\ 1/2 & z = 0 \\ 0 & z < 0 \end{cases} \quad (2.21)$$

así las varillas están dentro de una caja de longitud L y los "puntos" en una caja de longitud $L - Na$.

La función de distribución condicional total se puede escribir de la forma [3]:

$$f(q, v, t | v_0) = \frac{1}{N h_0(v)} \sum_{i,j} \langle \delta(q_i(t) - q_j(v) - q) \delta(v - v_i(t)) \cdot \delta(v_0 - v_j(0)) \rangle \quad (2.22)$$

Para encontrar la evolución temporal de $f(q, v, t | v_0)$ es más sencillo trabajar con su transformada de Fourier de la posición:

$$f(k, v, t | v_0) = \int dq e^{ikq} f(q, v, t | v_0) \quad (2.23)$$

Sustituyendo en la ec. (2.23) la ec. (2.22) en la cual se han introducido las ecuaciones del movimiento de una partícula libre (ver ecs. (2.4)) y la correspondencia (2.20), se tiene finalmente la evolución temporal de $F(k, v, t | v_0)$:

$$f(k, v, t | v_0) = \delta(v - v_0) e^{ikt v} F(kt, ka, v) + h_0(v) \times \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{ikq} F(kt, ka, q | t) \exp \left\{ ika \left[\epsilon(q | t - v_0) - \epsilon(v - q | t) \right] \right\} \quad (2.24)$$

siendo

$$F(kt, ka, v) = \exp \left\{ -kt \left[\mu(v) (1 - \omega_0 ka) - i v \sin ka \right] \right\}$$

y

$$\mu(\omega) \equiv \langle |\omega - v| \rangle_v = \int dv h_0(v) |\omega - v|$$

La transformada temporal de Laplace de $f(k, v, t | v_0)$ viene dada por:

$$\mathcal{T}(k, s; v, v_0) = \delta(v - v_0) A(v, s) + h_0(v) \times \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A^2(\omega, s) e^{ika \left[\epsilon(\omega - v_0) - \epsilon(v_0 - \omega) \right]} \quad (2.25)$$

con

$$A(v, s) = [s - i\beta(k)v + \alpha(k)\mu(v)]^{-1}$$

y

$$\alpha(k) = n(1 - \omega_0 ka) \quad , \quad \beta(k) = k + h \sin ka$$

La función de distribución total de la posición $G(q, t)$ viene dada

por:

$$G(q, t) = \int dv \int dv_0 f(q, v, t/v_0) h_0(v) \quad , \quad (2.26)$$

su transformada espacial y temporal de Fourier nos da el factor de estructura,

también denominado "función de dispersión coherente" [4]:

$$S(k, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int dq \int dt e^{ikq - i\omega t} G(q, t) \quad . \quad (2.27)$$

La transformada de Fourier del espacio de la función de distribución radial

es:

$$\begin{aligned} X(k, t) &= \int dq e^{ikq} G(q, t) \\ &= \int dv \int dv_0 f(k, v, t/v_0) h_0(v) \quad , \end{aligned}$$

Sustituyendo $f(k, v, t/v_0)$ por su expresión dada por la ec. (2.24) se obtiene:

$$X(k, t) = -k^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dv h_0(v) e^{i\beta(k)v t - \alpha(k)\mu(v)t}}{[\alpha(k)\mu'(v) - i\beta(k)]^2} \quad (2.28)$$

Análogamente la transformada de Fourier del espacio y de Laplace del tiempo de la función de distribución radial:

$$\begin{aligned}\tilde{\chi}(k, s) &= \int_0^{\infty} dt e^{-st} \chi(k, t) \\ &= \int dv \int dv_0 \mathcal{I}(k, s; v, v_0) h_0(v),\end{aligned}$$

se puede escribir -sustituyendo \mathcal{I} por su expresión (2.25)- de la forma:

$$\tilde{\chi}(k, s) = \frac{k^2}{2\alpha(k)} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dv}{[s - i\beta(k)v + \alpha(k)\mu(v)]^2} \quad (2.29)$$

En función de $\chi(k, t)$ y de $\tilde{\chi}(k, s)$ el factor de estructura $S(k, \omega)$ viene dado por:

$$\begin{aligned}S(k, \omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} \chi(k, |t|) \\ &= \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \tilde{\chi}(k, i\omega)\end{aligned} \quad (2.30)$$

Para la distribución discreta de velocidades iniciales (2.13):

$$h_0(v) = \frac{1}{2} [\delta(v+v_0) + \delta(v-v_0)]$$

las funciones χ , $\tilde{\chi}$ y S toman la forma:

$$\chi(k, t) = \frac{k^2 e^{-\alpha(k)v_0 t}}{\alpha^2(k) + \beta^2(k)} \left\{ \cos \beta(k) v_0 t + \frac{\alpha(k)}{\beta(k)} \sin \beta(k) v_0 t \right\} \quad (2.31)$$

$$\tilde{\chi}(k, s) = \frac{k^2}{\alpha^2(k) + \beta^2(k)} \frac{s + 2\alpha(k)v_0}{[s + \alpha(k)v_0]^2 + \beta^2(k)v_0^2} \quad (2.32)$$

$$S(k, \omega) = \frac{2k^2 c^3 \alpha(k) \pi^{-1}}{\{\omega^2 + v_0^2 [\alpha^2(k) - \beta^2(k)]\}^2 + 4v_0^2 \alpha^2(k) \beta^2(k)} \quad (2.33)$$

Para una distribución maxwelliana de velocidades iniciales estas funciones no se pueden calcular analíticamente.

Fácilmente se comprueba de la ec. (2.31) que la función $\chi(k, t)$ sa-

tisface la ecuación de un oscilador armónico simple amortiguado:

$$\frac{\partial^2 \chi(k,t)}{\partial t^2} + \Omega^2(k) \chi(k,t) + R(k) \frac{\partial \chi(k,t)}{\partial t} = 0 \quad (2.34)$$

con

$$\Omega^2(k) = v_0^2 [\alpha^2(k) + \beta^2(k)] \quad (2.35)$$

$$R(k) = 2\eta v_0 (1 - \cos ka) \quad (2.36)$$

Este comportamiento de oscilador amortiguado se pone claramente de manifiesto en la representación gráfica de $\chi(k,t)$ dada en la Fig. (2.2a). En la Fig. (2.2b) se tiene la representación gráfica de la función $\tilde{\chi}(k,s)$ dada por la ec. (2.32). En la Fig. (2.3) tenemos la gráfica del factor de estructura $S(k,w)$ dado por la ec. (2.33). En estos gráficos los parámetros se han escogido de la forma:

$$\eta = a = v_0 = 1.$$

En el caso $a=0$ (puntos impenetrables) y para una distribución de velocidades iniciales discontinua (ec. (2.13)) las funciones $\chi(k,t)$, $\tilde{\chi}(k,s)$ y $S(k,w)$ toman los valores

$$\chi(k,t) = \cos k v_0 t \quad (2.37)$$

$$\tilde{\chi}(k,s) = \frac{s}{s^2 + k^2 v_0^2} \quad (2.38)$$

$$S(k,w) \equiv 0. \quad (2.39)$$

Obsérvese que en este caso no hay amortiguamiento en el comportamiento oscilatorio de $\chi(k,t)$ (el término $R(k)$ de amortiguamiento -ec. (2.35)- es nulo en este caso) y que el factor de estructura es idénticamente nulo (sustituir (2.38) en (2.30)). Las gráficas de estas funciones para el caso $v_0=1$

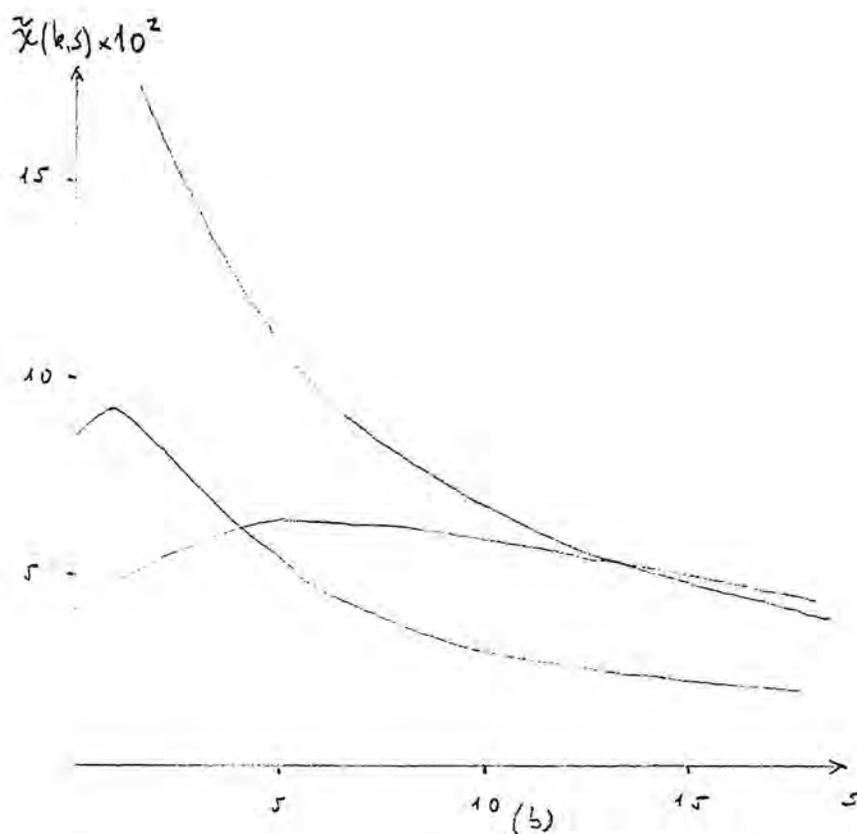
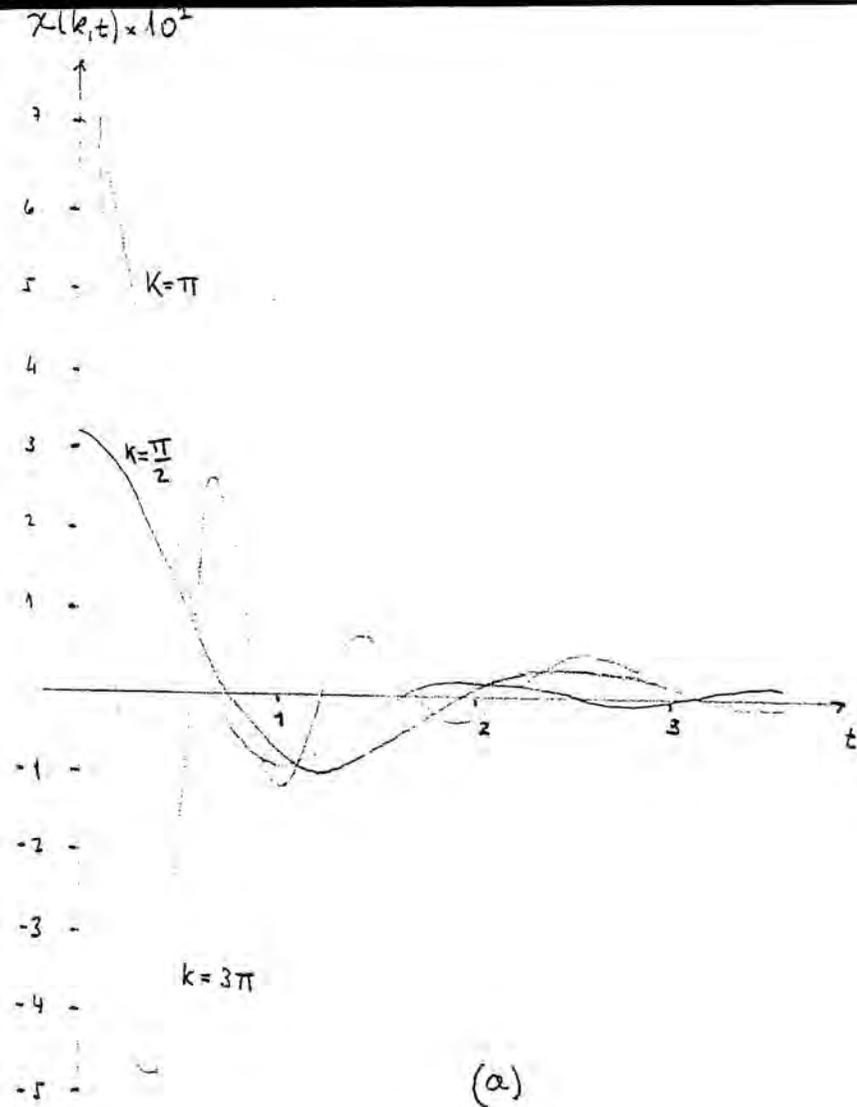


Fig. 2.2.- (a) Transformada de Fourier de la distribución de la posición. (b) Trasn. de Fourier-Laplace de la distribución de la posición.

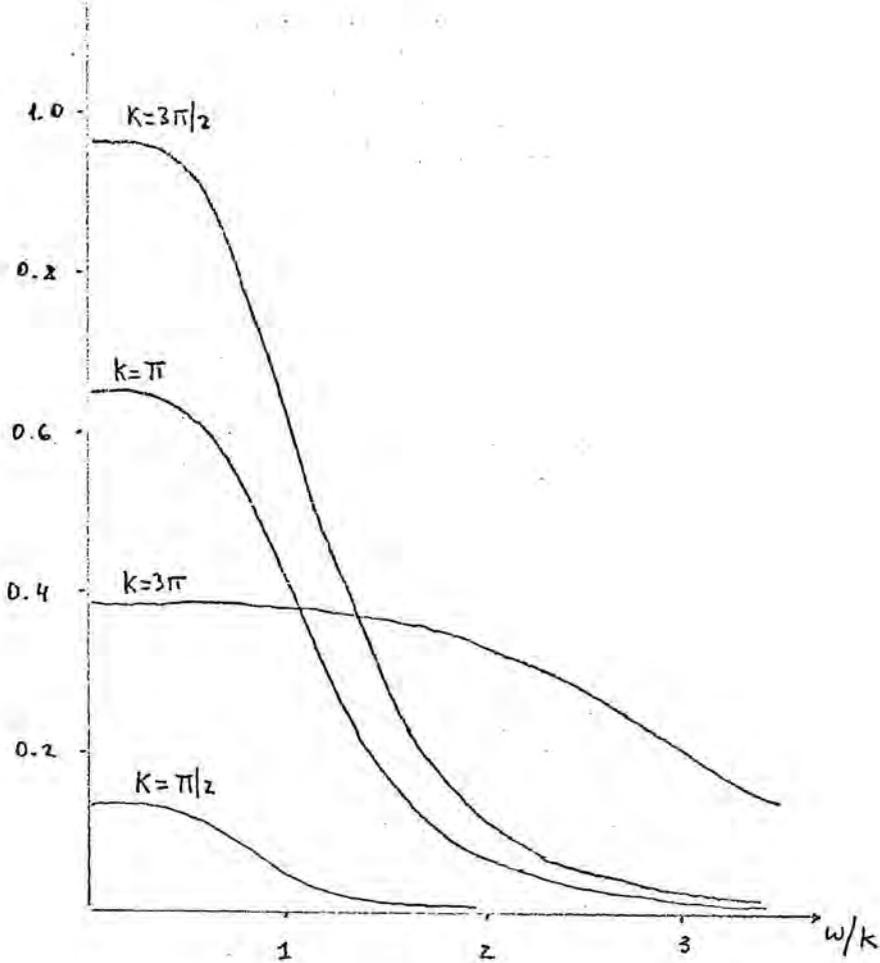


Fig. 2.3 .- El factor de estructura (part. de tamaño no nulo).

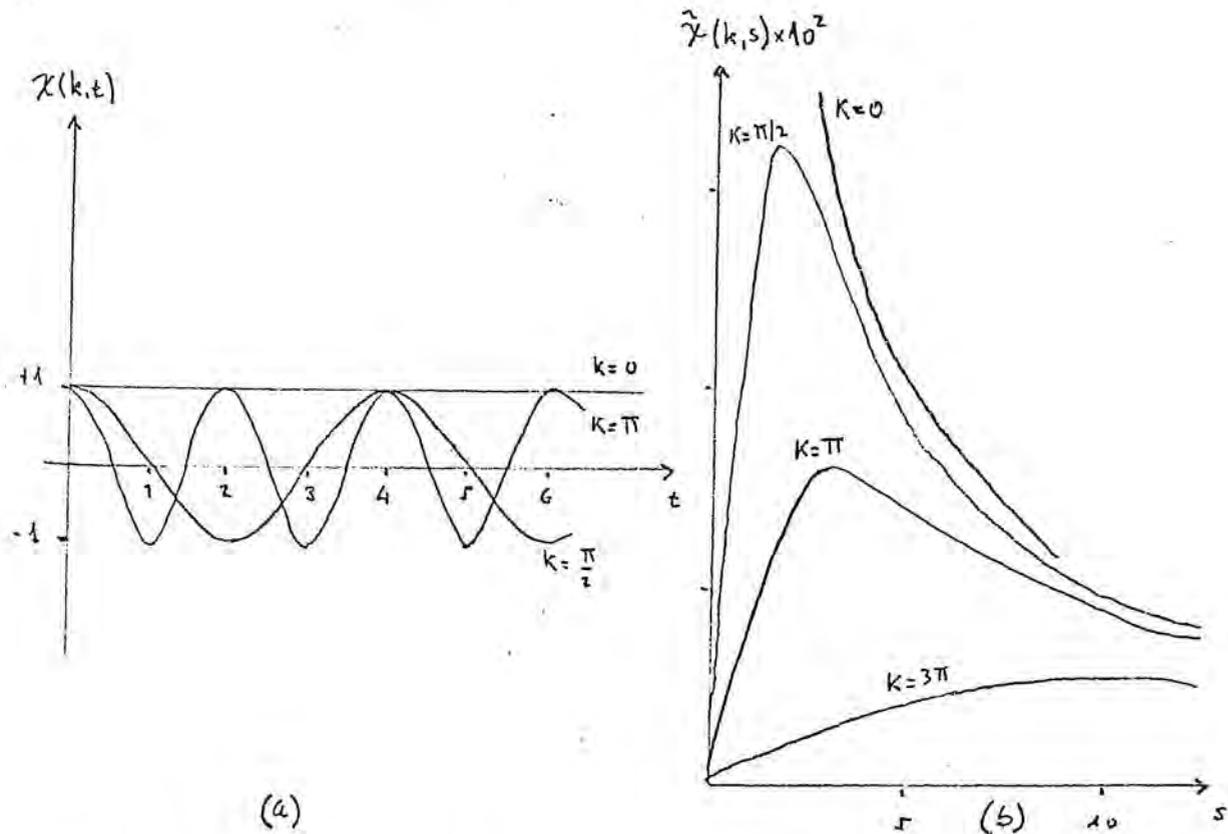


Fig. 2.4 .- (a) Trans. de Fourier. (b) Trans. de Fourier-Lapalce de la distribución de la posición para puntos impenetrables.

II.3. Dinámica Molecular del sistema

El sistema en estudio es unidimensional, con s componentes estando formado por N varillas rígidas de masas m_{σ} y diámetros a_{σ} ($\sigma = 1, 2, \dots, s$) distribuidas inicialmente al azar (i.e. homogéneamente) en una línea de longitud L que determina la densidad del sistema. N_{σ} es el número de varillas de cada componente; evidentemente

$$N = \sum_{\sigma=1}^s N_{\sigma} \quad (3.1)$$

Para seguir la evolución temporal del sistema, este se "comprime" para formar un sistema de puntos rígidos de distinta masa y tamaño nulo, distribuidos en una longitud reducida L_r que viene dada por:

$$L_r = L - \sum_{\sigma=1}^s N_{\sigma} a_{\sigma} \quad (3.2)$$

(ver Secc. 2, concretamente la ec. (2.20)). Posteriormente, sólo cuando sea necesario conocer el tamaño de cada varilla, se expandirá el sistema a la longitud y tamaños reales.

Las posiciones del sistema de puntos materiales se determinan inicialmente generando números aleatorios en el ordenador en el intervalo $[0, 1)$ que luego se multiplican por L_r . Inicialmente también se atribuyen números de orden a las partículas. Para evitar efectos de superficie se imponen condiciones de contorno periódicas; así, si una partícula sale por un extremo, aparece por el otro (lo que es equivalente a tener las partículas distribuidas en un anillo de circunferencia L_r). A las partículas se les da una distribución de velocidades iniciales $h_0(v)$ (ver más adelante).

Básicamente la evolución temporal del sistema se realiza siguiendo el esquema de Adler y Wainwright [9]. Al interaccionar con un potencial de núcleo rígido, las partículas se mueven con movimiento rectilíneo y uniforme excepto cuando chocan con otra partícula. Así la evolución del sistema puede dividirse en intervalos de tiempo distintos que corresponden a los intervalos entre dos colisiones sucesivas de cualesquiera dos partículas. En cada instante es necesario conocer cuándo tendrá lugar el próximo choque y el par de partículas que chocarán.

Sean $x_{ij} = x_i - x_j$ y $v_{ij} = v_i - v_j$ las posiciones y velocidades relativas de dos partículas del sistema. Para que estas partículas choquen es necesario que se aproximen, esto es que:

$$x_{ij} v_{ij} < 0 \quad (3.3)$$

Si x_{ij} y v_{ij} son las posiciones y velocidades relativas iniciales, la posición relativa un instante t posterior viene dada por

$$x'_{ij} = x_{ij} + v_{ij} t \quad (3.4)$$

cuando las partículas chocan es $x'_{ij} = 0$ y el tiempo de colisión viene dado por

$$t_{ij} = -x_{ij} / v_{ij} \quad (3.5)$$

Las velocidades de las partículas que chocan cambian según las ecuaciones:

$$v_i' = \frac{2(m_i v_i + m_j v_j)}{m_i + m_j} - v_i$$

$$v_j' = \frac{2(m_i v_i + m_j v_j)}{m_i + m_j} - v_j \quad (3.6)$$

que son consecuencia directa de la conservación del impulso y de la energía.

El tiempo de cálculo se disminuye considerablemente al tener en cuenta que, para el potencial considerado, sólo puede chocar una partícula con sus vecinas, lo que hace necesario ordenar las partículas, como ya se ha hecho desde un principio. En nuestro caso calcularemos los tiempos de choque de cada partícula i con la siguiente $i+1$, así en lugar de calcular la matriz simétrica t_{ij} sólo calculamos el vector $t_{i,i+1}$ t_i ($i=1,2,\dots,N$; $N+1 \equiv 1$). En este caso la condición necesaria (3.3) para que las partículas se aproximen es:

$$v_{i,i+1} > 0 \quad (3.7)$$

y el tiempo de colisión (3.5) viene dado por:

$$t_i = -\frac{x_{i,i+1}}{v_{i,i+1}} \quad (x_{i,i+1} \leq 0) \quad (3.8)$$

Si algún tiempo t_i sale negativo es que $x_{i,i+1} > 0$, o sea que

$x_{i+1} < x_i$, ello significa que choca la partícula situada al final del recinto con la situada en el principio (condiciones periódicas, ver Fig. 3.1)



Fig. 3.1

En este caso el tiempo de colisión es:

$$t_i^l = \frac{-x_{i,i+1} + L_r}{v_{i,i+1}} \quad (x_{i,i+1} > 0) \quad (3.9)$$

Una vez calculado el vector t_i ($i=1,2,\dots,N$), todas las partículas se mueven un tiempo t_m , que es el menor de todos los calculados, y se calculan las nuevas posiciones:

$$x_i^l = x_i + v_i t_m \quad (3.10)$$

Las partículas $(i,i+1)$ cuyo tiempo de colisión sea igual a t_m han chocado entonces y cambian sus velocidades de acuerdo con las ecs. (3.6). El nuevo vector de tiempos de colisión t'_i ($i=1,2,\dots,N$) se calcula restando t_m a todos los tiempos del vector, excepto a los tiempos de las partículas que han chocado que se vuelven a calcular según (3.8) ó (3.9). Se finaliza el proceso cuando el total del número de choques realizados excede a un número máximo de choques prefijado de antemano. Una vez terminado el proceso se calcula el tiempo libre medio t_0 del sistema que es igual al inverso de la frecuencia de colisión (la cual representa el número medio de choques que experimenta una partícula por unidad de tiempo).

En el esquema de Adler y Wainwright, a partir de las posiciones y velocidades del conjunto de las partículas del sistema, se calculan todos los tiempos de colisión ordenándolos desde el tiempo menor t_s al tiempo mayor t_1 (esto se denomina ciclo largo). Después de cada choque entre el par de partículas $(i, i+1)$ se vuelven a calcular los tiempos de colisión de los pares de partículas vecinas, $(i-1,i)$ y $(i+1, i+2)$. Si algunos de estos nuevos tiempos son mayores que el tiempo mayor t_1 , se excluyen de la lista de tiem-

pos. Este algoritmo, denominado ciclo corto, se itera hasta que se ha vaciado la lista de tiempos de colisión, comenzando un nuevo ciclo corto.

El procedimiento empleado difiere algo del esquema de Adler y Wainwright basado en ciclos largos y ciclos cortos, ya que con nuestro procedimiento realizamos un solo ciclo corto, pues al volver a introducir en el vector t_i los tiempos de las partículas que han chocado, este vector nunca se convierte en un vector vacío y no es necesario volver a generar un nuevo ciclo corto.

El grado de irreversibilidad introducido por el ordenador, debido a que opera con número reales, cuyas últimas cifras son truncadas, se controla constantemente calculando el impulso total y la energía cinética total. En todos los cálculos se ha verificado que las diferencias nunca sobrepasan un orden de magnitud de 10^{-11} para el impulso y de 10^{-8} para la energía cinética, lo cual es muy aceptable en términos relativos.

Las posiciones, velocidades, tiempos y partículas que chocan se almacenan en cintas magnéticas ("el demonio de Maxwell") para su posterior análisis.

La simulación dinámica se ha realizado para mezclas binarias equimoleculares ($s=2$ y $N_1 = N_2 = N/2$). El número total de partículas ha sido $N = 1000$. En todos los casos la relación de tamaños ha sido $a_2/a_1 = 2$ y se han realizado cinco simulaciones para las siguientes relaciones de masas:

$$m_2/m_1 = 1.05 ; \quad m_2/m_1 = 1.2 ; \quad m_2/m_1 = 2 ;$$

$$m_2/m_1 = 3 ; \quad m_2/m_1 = 4$$

Para comparar, también se ha realizado la simulación del sistema de 1000 varillas rígidas iguales:

$$a_2/a_1 = 1 \quad ; \quad u_2/u_1 = 1 .$$

La distribución de velocidades iniciales escogidas ha sido del tipo (2.13); más concretamente

$$h_0(v) = \begin{cases} 1/2 & \text{si } v = \pm V_0 \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (3.11)$$

Es decir, todas las velocidades iniciales tienen el mismo módulo, la mitad en un sentido y la otra mitad en el otro. En la siguiente tabla se resumen las principales características de las simuladas a que nos referimos en este trabajo.

m_2/m_1	a_2/a_1	d_2/d_1	L	ρ	n	nº choques	t_0
1	1	1	2000	0.50	1.0	160,000	2.00
1.05	2	0.525	2500	0.40	1.0	350,000	1.90
1.2	2	0.60	2500	0.40	1.0	160,000	1.76
2	2	1	2500	0.40	1.0	160,000	1.68
3	2	1.50	2500	0.40	1.0	350,000	1.56
4	2	2	2500	0.40	1.0	160,000	1.46

En la tabla $d_\sigma \equiv m_\sigma / a_\sigma$ es la densidad asociada con las varillas de la especie σ . $\rho \equiv N/L$ es el número de partículas por unidad de longitud y $n = N/L_T$ es la densidad total del sistema.

Las simulaciones fueron realizadas en las instalaciones centrales del Centro de Cálculo de Sabadell (C.C.S.) con un CYBER 173 de Control Data. El tiempo total de C.P.U. requerido para las simulaciones fué de 14.77 horas.

II.4. Relajación al equilibrio: comportamiento ergódico del sistema

Una vez simulada la evolución dinámica del sistema, podemos analizar algunos de los problemas planteados en la sección 1. La primera cuestión que se plantea se refiere al mismo hecho de si nuestro modelo es capaz de presentar una verdadera relajación hacia el equilibrio; es decir, si partiendo de cualquier distribución inicial de velocidades y de cualquier configuración, es capaz de alcanzar finalmente una distribución maxwelliana de velocidades y una distribución espacial homogénea. Esta duda, particularmente la de si se alcanza una distribución de Maxwell, está lejos de ser trivial. En efecto, un gas ideal de partículas (sin interacción alguna entre ellas) es bien sabido que nunca será capaz de mostrar tal relajación. Un sistema de varillas rígidas iguales difiere esencialmente de un gas ideal pero, aún así, no es capaz de mostrar una verdadera relajación: el módulo de las velocidades iniciales se conserva (salvo por lo que respecta a ligeras "inestabilidades" que, como los truncamientos de números reales en una simulación, parecen ser poco importantes, como antes constatábamos) de modo que una distribución arbitraria no conducirá en un tiempo "razonable" a la distribución de Maxwell. En este caso ocurre que si la distribución inicial de velocidades contiene, como (3.11), valores distintos distribuidos inhomogéneamente, éstos tenderán a distribuirse uniformemente con el tiempo; pero este hecho no es suficiente, por supuesto, para asegurar una verdadera relajación del sistema. Aizenman, Lebowitz y Merro [7, 18] han demostrado que la relajación es algo más complicada cuando las varillas, aun teniendo todas la misma masa, tienen longitudes diversas. Se plantea entonces el problema de determinar el tipo de relajación que presenta-

r  nuestro sistema de varillas con masas distintas, propiedad que no ha podido ser determinada hasta el momento "a priori", esto es, antes de realizar el "experimento" correspondiente.

La misma discusi n anterior sugiere c mo no es f cil plantear estas cuestiones en t rminos cuantitativos precisos. De hecho, es m s conveniente su discusi n en el contexto de la teor a erg dica. La conexi n m s general entre los dos puntos de vista establece que un sistema capaz de evolucionar hacia una distribuci n maxwelliana es tambi n un sistema con buen comportamiento erg dico en el sentido de que "sufrir " "con facilidad" el principio de equipartici n de la energ a. La teor a erg dica, sin embargo, proporciona una formulaci n matem ticamente rigurosa de estos temas y una clasificaci n precisa de los sistemas atendiendo a su comportamiento erg dico y, en definitiva, atendiendo a la complejidad de su evoluci n din mica.

Hist ricamente la ergodicidad surge de la denominada Hip tesis Erg dica formulada en 1871 por Boltzmann y precisada en 1879 por Maxwell [10]. La formulaci n dada por Boltzmann afirma que debido a la gran irregularidad del movimiento t rmico y a la multiplicidad de fuerzas que act an desde el exterior sobre un cuerpo determinado, sus  tomos en movimiento pasar n a trav s de todas las posiciones y velocidades compatibles con la ecuaci n de la energ a. Esta hip tesis permit a la igualdad entre los promedios espaciales y temporales de las variables din micas, igualdad fundamental para el desarrollo de la Mec nica Estad stica.

La formulaci n dada por Maxwell es m s precisa y afirma que para que un sistema verifique el principio de equipartici n de la energ a es necesario

que abandonado a sí mismo pase, más pronto o más tarde, a través de cualquier fase consistente con la conservación de la energía. En este sentido de Maxwell, si el sistema se relaja a una distribución maxwelliana de velocidades, y por lo tanto verifica el principio de equipartición de la energía habrá pasado por todas las fases consistentes con la conservación de la energía y por lo tanto tendrá buen comportamiento ergódico [11].

Hasta hace poco tiempo se tenía el convencimiento de que la ergodicidad sólo era patrimonio de los sistemas macroscópicos [12]. Sin embargo en 1962 Sinai demostró que un sistema bidimensional de N discos rígidos y un sistema tridimensional de N esferas rígidas, encerrados en un volumen de paredes reflejantes (Gas de Boltzmann-Gibbs) eran ergódicos y "mixing" (mezcla) para $N \geq 2$ [13]. Posteriormente Casati y Ford [14] comprobaron, mediante experimentos en ordenador, que el sistema unidimensional de dos puntos rígidos de distinta masa es ergódico y "mezcla" cuando la razón de las masas en la expresión

$$\cos \theta = [1 - (m_2/m_1)] / [1 + (m_2/m_1)] \quad (4.1)$$

es tal que θ es un múltiplo irracional de π . También se ha demostrado analíticamente que el sistema unidimensional de Varillas rígidas de masa iguales pero de distinto tamaño tiene buen comportamiento ergódico, concretamente es un sistema K [7]. Por otra parte se ha comprobado recientemente que el sistema tridimensional de cuadrados rígidos y paralelos no es ergódico, en el sentido de que una distribución arbitraria de velocidades iniciales no se relaja a una distribución maxwelliana [11].

Esta situación nos muestra claramente, en efecto, cómo no se pueden realizar afirmaciones a-priori sobre el carácter ergódico de nuestro sistema (ni de ningún sistema real) y que tampoco los experimentos pueden ser concluyentes sobre el tema, aunque si arrojar información importante (Lebowitz en 1971 ya observó que la ergodicidad del sistema de partículas rígidas de distinta masa no está completamente decidida ni aún en los casos más sencillos [15]):

La moderna teoría ergódica ha trascendido más allá de la cuestión de si un sistema es ergódico o no y, además, no sólo se ocupa de los sistemas hamiltonianos; de hecho, se ocupa de los llamados sistemas dinámicos abstractos. Tales sistemas vienen caracterizados por la terna (Γ, T_t, μ) donde Γ es un espacio real cuyos puntos representan los estados del sistema (el espacio fásico), T_t es un grupo uniparamétrico de automorfismos que actúa sobre Γ (la evolución temporal del sistema) y μ es una medida del espacio Γ invariante frente a T_t (el teorema de Liouville). Entre paréntesis se han citado las correspondencias con los sistemas clásicos hamiltonianos.

Dos sistemas dinámicos abstractos (Γ, T, μ) y (Γ', T', μ') se dicen isomorfos si existe una aplicación biyectiva φ de Γ sobre Γ' tal que:

$$\left. \begin{aligned} \mu'[\varphi(A)] &= \mu(A) \quad \text{para todo } A \subset \Gamma \\ T' &= \varphi T \varphi^{-1} \end{aligned} \right\} \quad (4.2)$$

El considerar sistemas isomorfos es importante pues si se prueba la ergodicidad de un sistema, tal propiedad la verifican todos los sistemas isomorfos con él.

Dada una función f definida en Γ su promedio espacial, si existe, viene definido por:

$$\langle f \rangle \equiv \int_{\Gamma} f(x) d\mu \quad , \quad x \in \Gamma , \quad (4.3)$$

(se supone que μ es finita y que $\int_{\Gamma} d\mu = 1$). El promedio temporal de f , si existe, viene definido por:

$$\bar{f}(x) \equiv \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{1}{z} \int_0^z f(\tau_t x) dt \quad , \quad x \in \Gamma, \quad t \in \mathbb{R}^+, \quad (4.4)$$

siempre que el grupo de automorfismo sea continuo. Si el grupo uniparamétrico es discreto se reemplaza en (4.4) la integral por un sumatorio [10].

Con estas definiciones es posible clasificar los sistemas dinámicos desde el punto de vista de su posible carácter ergódico. Esta clasificación es una jerarquía pues los sistemas de una determinada clase son sistemas de las clases inferiores. Mencionemos brevemente los elementos más importantes en esta jerarquía.

Un sistema dinámico es un sistema ergódico si para cualquier función μ -sumable los promedios espaciales y temporales son iguales, salvo, quizás, para los puntos de un conjunto de medida nula:

$$\langle f \rangle = \bar{f}(x) \quad \text{casi por doquier en } \Gamma ,$$

como puede verse para un sistema ergódico el promedio temporal \bar{f} no depende del punto inicial x .

Otra forma de definir un sistema ergódico es la siguiente: si f es

Una función μ -sumable e invariante bajo T_t , esto es, $f [T_t(x)] = f(x)$ para cualquier $x \in \Gamma$, entonces existe una constante c tal que:

$$f(x) = c \quad \text{casi por doquier en } \Gamma,$$

[17]. Para sistemas dinámicos hamiltonianos esta última definición significa que si el sistema es ergódico sobre una superficie de energía S_E cualquier constante integrable del movimiento es constante en S_E . Además, si la ergodicidad aparece en cada superficie de energía S_E , entonces no hay otras constantes del movimiento que las funciones de la energía E . En este caso está justificado el uso de la distribución microcanónica.

Uno de los sistemas ergódicos más sencillo es el del oscilador armónico simple, como uno se convence con facilidad [17].

Un sistema dinámico es "mezcla" fuerte cuando para cualquier par A, B de conjuntos medibles, se verifica que:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mu [T_t A \cap B] = \mu(A) \cdot \mu(B). \quad (4.5)$$

Fácilmente se demuestra que si un sistema es "mezcla" también es ergódico [16].

La propiedad de "mezcla" fuerte es mucho más restrictiva que la de ergodicidad, existiendo una propiedad intermedia en la jerarquía denominada "mezcla" débil: un sistema es "mezcla" débil si para todo par de conjuntos medibles A y B de Γ , se verifica:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} [\mu(T_t A \cap B) - \mu(A) \cdot \mu(B)] dt = 0. \quad (4.6)$$

La propiedad (4.6) indica que después de transcurrir el tiempo, se tiene "mezcla" excepto, quizás, en algunos instantes de tiempo aislados [10].

Para sistemas clásicos hamiltonianos la propiedad "mezcla" dada por (4.5) se puede enunciar de una forma más sencilla: un sistema clásico es "mezcla" si para cualquier par de funciones f y g de cuadrado sumable sobre una superficie de energía S_E , se verifica que:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \int_{S_E} f(x) g[\tau_t(x)] dx = \frac{\int_{S_E} f(x) dx \cdot \int_{S_E} g(x) dx}{\int_{S_E} dx} \quad (4.7)$$

con esta definición fácilmente se demuestra que los sistemas hamiltonianos que verifican la propiedad de "mezcla" evolucionan al equilibrio. En efecto, supongamos que el sistema empieza en $t = 0$ con una función de distribución ó función densidad $\rho_0(x)$ sobre S_E , la cual representa el estado inicial del sistema, lejano del equilibrio. Para instantes de tiempo posteriores, la función de distribución es $\rho_0[\tau_t(x)]$ (Teorema de Liouville) y el valor medio de cualquier variable dinámica f en el instante t es:

$$\int_{S_E} f(x) \cdot \rho_0[\tau_t(x)] dx \quad (4.8)$$

Si el sistema verifica la propiedad "mezcla" (4.7) entonces la integral (4.8) se aproxima al valor de f en el equilibrio que es $\int_{S_E} f(x) dx / \int_{S_E} dx$. Para ello basta sustituir $\rho_0(x)$ por $g(x)$ en la ecuación (4.7) [17].

Un sistema dinámico abstracto (Γ, τ_t, μ) es un sistema K (Kolmogorov) cuando existe una partición medible α de Γ , tal que [10]:

- a) $T_t \alpha \equiv \alpha_t \supset \alpha \quad \forall t \geq 0$
 b) $\bigcup_t T_t \alpha = \mathcal{E}$
 c) $\bigcap_t T_t \alpha = \mathcal{U}$

donde \mathcal{E} es la descomposición puntual de Γ (la más fina que existe) y

$\mathcal{U} = \{\Gamma\}$ es la partición más gruesa. El símbolo de la condición b) expresa que \mathcal{E} es la menor descomposición que contiene a todas las α_t , y el símbolo de la condición c) indica que \mathcal{U} es la mayor partición que está contenida en todas las α_t .

Todo sistema K es "mezcla" [16] y por lo tanto es ergódico; de hecho la demostración de Sinai [13] de que el gas de esferas duras es ergódico y "mezcla" consiste en demostrar que es un sistema K .

Un sistema dinámico abstracto (Γ, T_t, μ) es un sistema Bernouilli [16] si es isomorfo al sistema (M, ϕ, μ) donde: a) M es el producto cartesiano $M = Z_n^Z$, con $Z_n = \{0, 1, 2, \dots, n-1\}$; así los elementos de M son series bilaterales infinitas de elementos de Z_n :

$$m \in M; \quad m = \dots, a_{-1}, a_0, a_1, \dots$$

b) Partiendo de una medida normalizada μ en Z_n :

$$\mu(0) = p_0; \quad \mu(1) = p_1; \quad \dots; \quad \mu(n-1) = p_{n-1}; \quad \sum p_i = 1$$

se define, para los cilindros elementales A_i^j :

$$A_i^j \equiv \{m \in M / a_i = j\} \quad i \in Z, \quad j \in Z_n$$

la medida

$$\mu(A_i^j) \equiv p_j$$

c) El automorfismo ϕ es la traslación:

$$u = (\dots, a_i, \dots) \longrightarrow u^1 = (\dots, a_{i-1}, \dots) \quad \forall i,$$

ϕ es invertible y conserva la medida [16].

Para un sistema dinámico hamiltoniano que sea Bernouilli es posible definir una partición finita de la superficie S_E de energía constante,

R_0, R_1, \dots, R_n ($R_i \cap R_j = \phi \quad \forall i, j$; $\bigcup_{i=1}^n R_i = S_E$) de tal forma que las observaciones sobre las R_i , realizadas en instantes de tiempo distintos, no están en absoluto correlacionadas (como los números que aparecen en una ruleta) y si dos sistemas tienen distintos estados dinámicos en un mismo instante de tiempo, entonces las observaciones que se vayan haciendo sobre ellos no pueden dar resultados idénticos [17].

Un ejemplo usual de sistema Bernouilli es el constituido tomando como espacio Γ el cuadrado de lado unidad y como operación de evolución la "transformación del panadero" definida:

$$T(x, y) = \begin{cases} (2x, \frac{1}{2}y) & \text{si } 0 \leq x \leq 1/2 \\ (2x-1, \frac{1}{2}(y+1)) & \text{si } \frac{1}{2} < x \leq 1 \end{cases}$$

Otro ejemplo de sistema Bernouilli lo constituye, con algunas restricciones sobre la distribución de velocidades, el sistema unidimensional e infinito (en el sentido del límite termodinámico) de varillas rígidas iguales [18].

Se demuestra que todo sistema Bernouilli es un sistema K [16]. Esta jerarquía de propiedades ergódicas puede resumirse en el siguiente cuadro

[17] :

<u>PROPIEDAD</u>	<u>EJEMPLOS</u>
Sistema de Bernouilli - - - - -	- Transformación del panadero. - Gas unidimensional infinito de esferas duras sin interacción.
Sistema K - - - - -	- Sistema de esferas rígidas - Varillas rígidas de igual masa y distinto tamaño.
Sistema mezcla	
Sistema ergódico - - - - -	- Oscilador armónico simple.

Vamos a exponer ahora los resultados de la simulación de nuestro sistema en lo que concierne a este aspecto particular de su evolución dinámica.

En un principio la simulación se realizó para el sistema lineal binario de 1000 varillas rígidas, la mitad de ellas con masa y diámetro el doble que la otra mitad,

$$m_2 / m_1 = 2 \quad a_2 / a_1 = 2 \quad (4.9)$$

y se comunicó al sistema una distribución inicial de velocidades $f_0(v)$ fuertemente no-maxwelliana:

$$f_0(v) = \begin{cases} 1/2 & \text{si } v = \pm v_0 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (4.10)$$

nº. Partículas

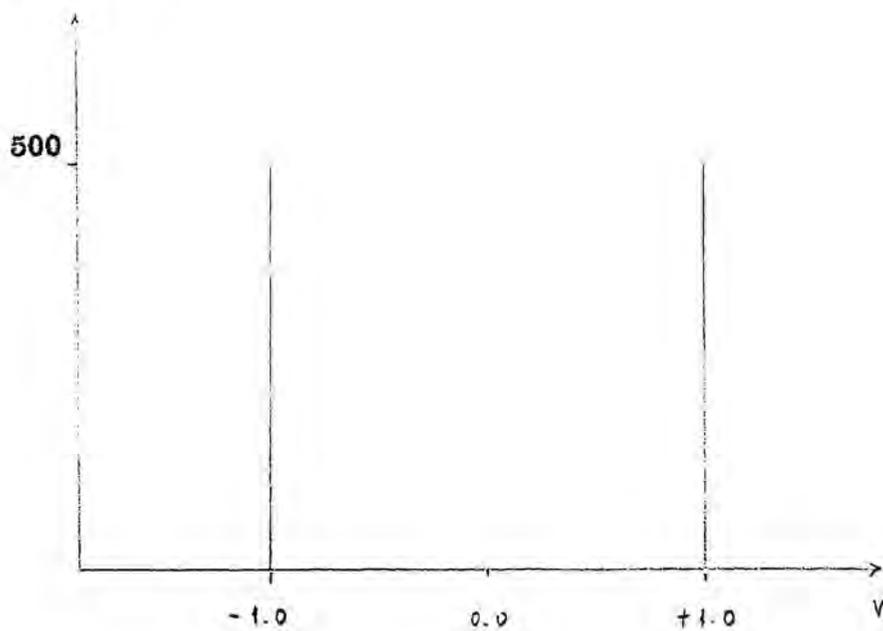


Fig. 4.1 .- Distribución de velocidades iniciales.

con $v_0 = 1$ (Ver Fig. 4.1.).

Como puede observarse en la Fig. 4.2 este sistema ha alcanzado prácticamente una distribución maxwelliana de velocidades cuando se han realizado 4000 colisiones en total (4 choques/partícula). La evolución se siguió en este caso hasta un total de 160.000 colisiones (160 choques/partícula). Evidentemente, una vez alcanzado el equilibrio, el sistema se mantiene en él. En la Fig. 4.2c tenemos la distribución de velocidades cuando el sistema ha realizado un total de 150.000 colisiones (150 choques/partícula). Tanto en la Fig. 4.2b como en la Fig. 4.2c, la curva continua es la gaussiana correspondiente a la media y desviación típica que presenta el sistema en este instante de tiempo:

$$f(v) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -(v - \bar{v})^2 / 2\sigma^2 \right\} \quad (4.11)$$

Podemos pues afirmar que el sistema mezcla con los parámetros (4.9) y la distribución inicial (4.10) se relaja rápidamente al equilibrio y tiene buen comportamiento ergódico.

En la Fig. 4.2a tenemos la distribución antes de alcanzarse el equilibrio, cuando el sistema sólo ha realizado 3000 colisiones (3 colisiones/partícula). Esta figura muestra cómo desde los primeros tiempos en la evolución existe una dispersión de velocidades considerable. Esto es debido, fundamentalmente, a que la diferencia de masa entre las partículas es grande y hay una fuerte transferencia de impulso y energía; en definitiva, se produce una rápida dispersión de información por el sistema. Intuitivamente, es lógico

nº. Part.



(a)

50 -

nº. Part.



(b)

50 -

nº. Part.



(c)

50 -

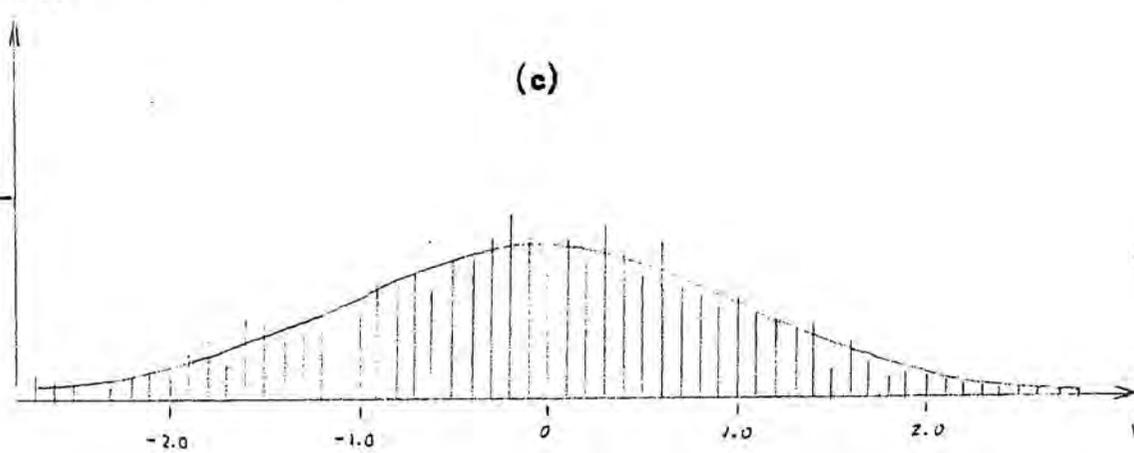
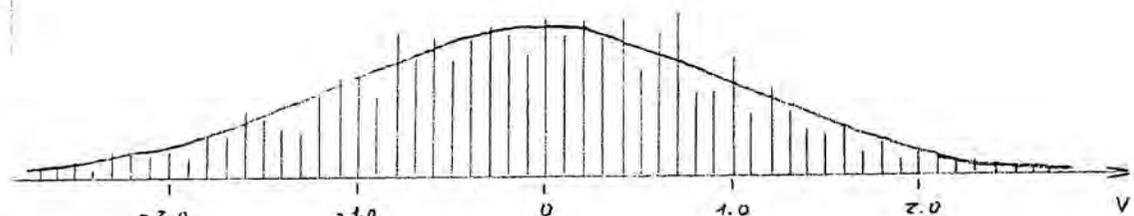
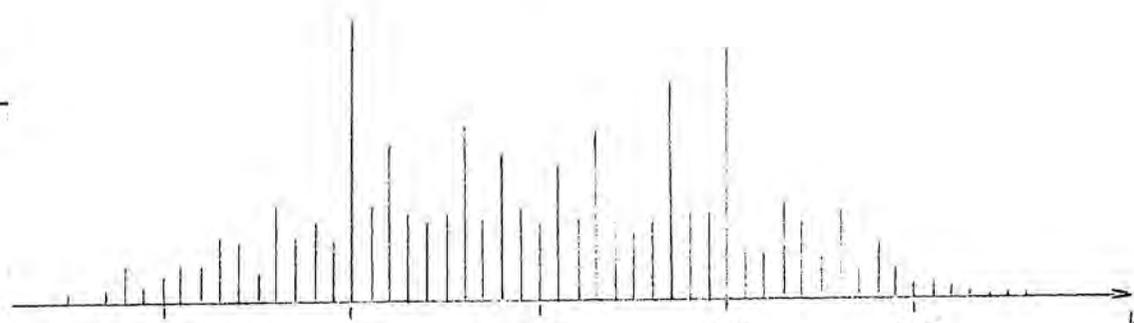


Fig. 4.2.- Distribución de velocidades, con $m_2/m_1 = 2$, cuando el sistema ha realizado: (a) 3000 col. (b) 10000 col. (c) 150000 col.

esperar que si la diferencia de masas es mayor que la (4.9) el relajamiento al equilibrio puede verse enmascarado por un aumento de las fluctuaciones. De hecho, la intuición trivial sólo ha sido confirmada parcialmente por los resultados experimentales. Así hemos simulado también otros sistemas binarios con

$$m_2 / m_1 = 4 \quad ; \quad a_2 / a_1 = 2 \quad (4.12)$$

y con

$$m_2 / m_1 = 1.2 \quad ; \quad a_2 / a_1 = 2 \quad (4.13)$$

En el primer caso se llega al equilibrio después de un tiempo similar al del caso (4.9), osea, después de unas 4.000 colisiones (4 choques/partícula). En consecuencia, la relajación en este caso no más rápida, como se pensó en un principio. Esto puede ser debido a que en el caso (4.12) existe una gran diferencia de masa entre las varillas y el relajamiento al equilibrio no es tan rápido como el esperado pues al tener inicialmente todas las varillas, grandes y pequeñas, la misma velocidad en módulo, el cambio de velocidad en una varilla de gran masa, producido por el choque de una varilla de masa mucho menor, será pequeño, teniendo que transcurrir un tiempo hasta que las varillas pequeñas tengan la suficiente energía para poder alterar apreciablemente la velocidad de las varillas grandes (ver Fig. 4.3b). Sin embargo sí que se observa una mayor dispersión en las velocidades (ver Fig. 4.3a) y mayores fluctuaciones (comparar las Figuras 4.3b y 4.3c con las Figuras 4.2b y 4.2c). Ambos efectos son imputables a la mayor transferen-

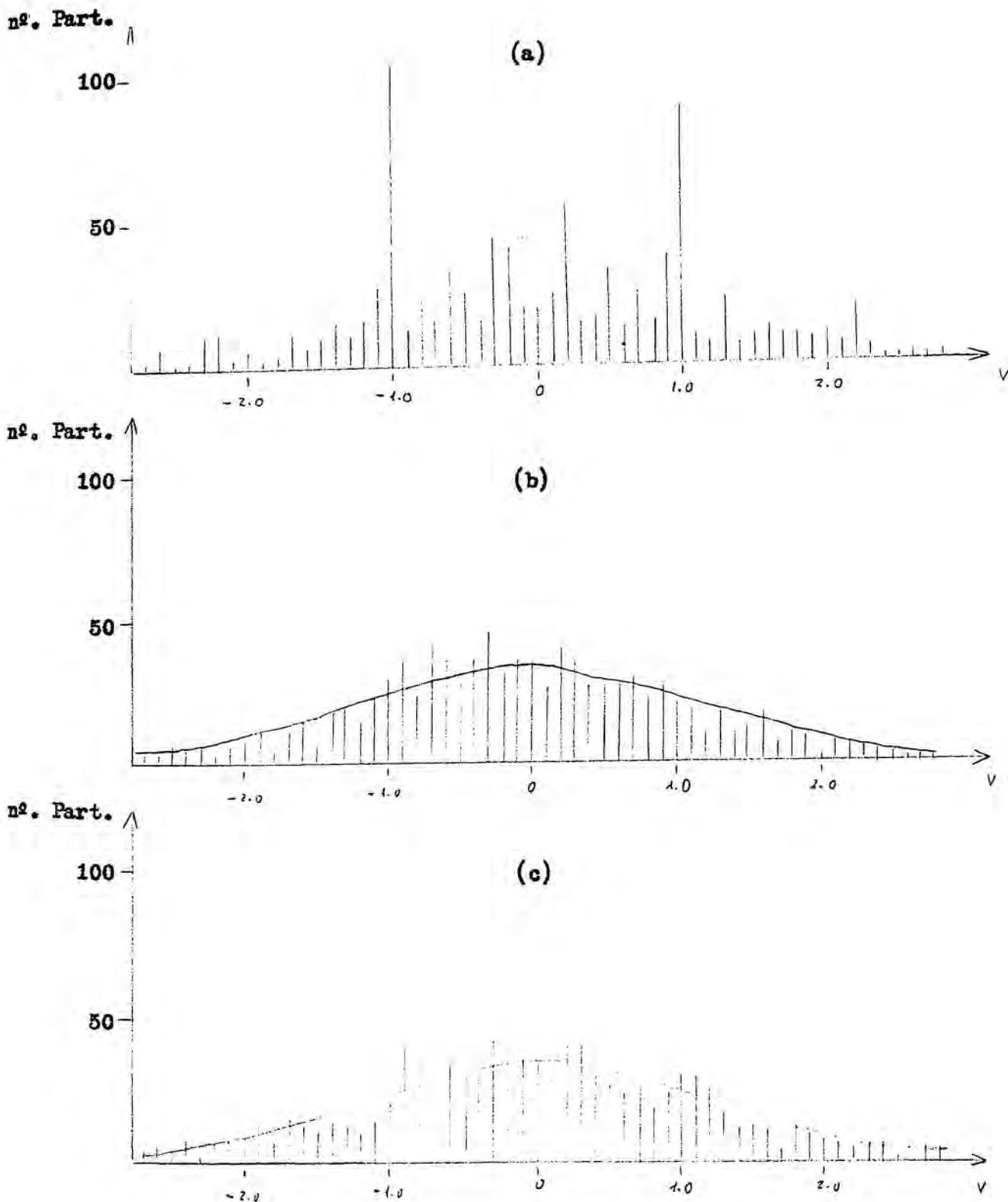


Fig. 4.3.- Distribución de velocidades, con $m_2/m_1 = 4$, cuando el sistema ha realizado: (a) 3000 col. (b) 10000 col. (c) 150000 col.

cia de momento y energía.

Para el sistema dado por los parámetros (4.13) la relajación al equilibrio es mucho más lenta, no alcanzándose éste hasta que el sistema ha realizado un total de unas 50.000 colisiones (50 colisiones/partícula) (Fig. 4.4c). Para este sistema hay una menor dispersión de las velocidades, encontrándose que durante bastante tiempo las velocidades se agrupan en torno a sus valores iniciales (ver Fig. 4.4a y Fig. 4.4b) y parece que la evolución temporal se hace mediante dos gaussianas centradas en los valores iniciales (ver Fig. 4.4a y Fig. 4.4b) y parece que la evolución temporal se hace mediante dos gaussianas centradas en los valores iniciales de la velocidad. Para poner más de manifiesto este hecho, se realizó la simulación de un sistema en el que la diferencia de masa fuese mucho menor:

$$m_2 / m_1 = 1.05 \quad ; \quad a_2 / a_1 = 2 \quad (4.14)$$

Este sistema que no llega a alcanzar el equilibrio ni aún después de 350.000 colisiones (350 choques/partícula) presenta claramente el efecto señalado anteriormente (ver Figuras 4.5a, 4.5b, 4.5c). Aunque, como puede intuirse de las Figuras, este sistema muestra evolución hacia el equilibrio, esta evolución se realiza muy lentamente, pudiendo afirmar que si la razón de masas tiende a uno ($m_2/m_1 \rightarrow 1$) el tiempo de relajación partiendo de una distribución de velocidades del tipo (4.10), se haría divergente.

Como ya hemos indicado al principio de esta sección, el sistema lineal formado por dos puntos rígidos de distinta masa no es ergódico si la razón de masas es:

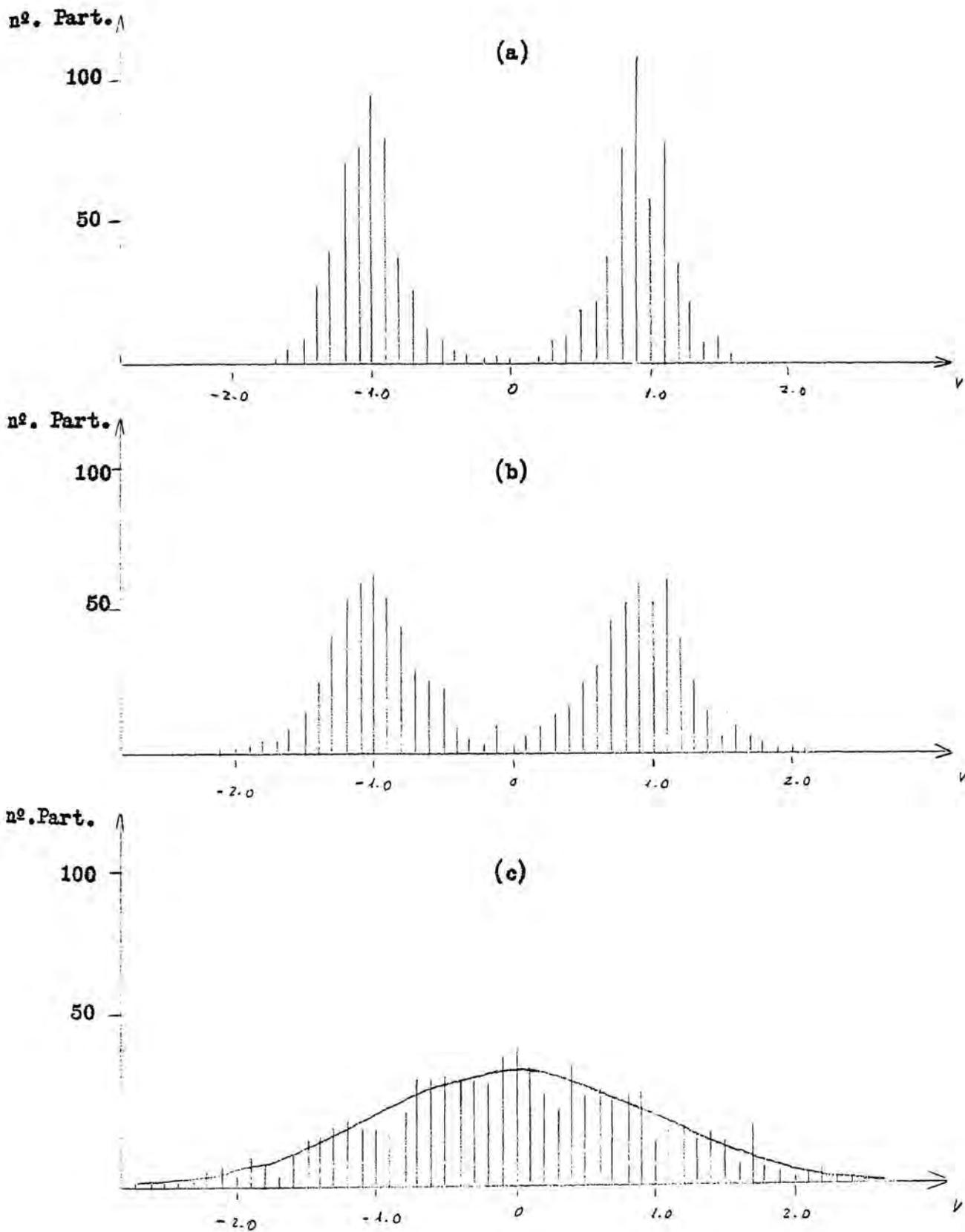


Fig. 4.4.— Distribución de velocidades, con $m_2/m_1 = 1.2$ cuando el sistema ha realizado: (a) 10000 col. (b) 20000 col. (c) 150000 col.

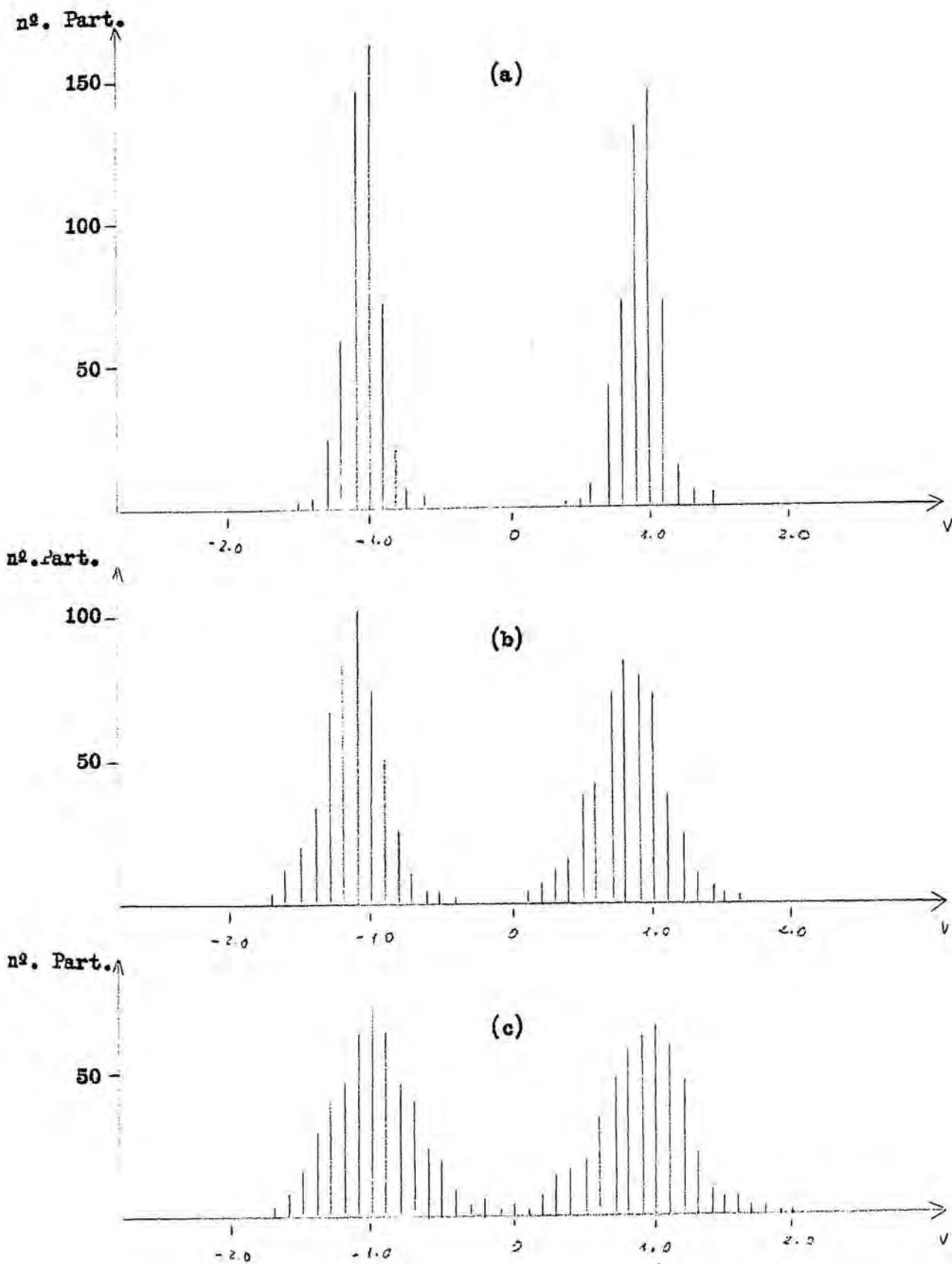


Fig. 4.5.- Distribución de velocidades con $m_2/m_1 = 1.05$ cuando el sistema ha realizado: (a) 100000 col. (b) 200000 col. (c) 300000 col.

$$\cos \theta = \frac{[1 - (m_2/m_1)]}{[1 + (m_2/m_1)]}$$

es un múltiplo racional de π [14]. Nos ha interesado analizar hasta qué punto esto podría seguir siendo cierto en nuestro sistema de muchos cuerpos. Con este fin simulamos un sistema de 1000 puntos rígidos con:

$$m_2 / m_1 = 3$$

que corresponde a $\theta = \frac{2}{3} \pi$, un múltiplo racional de π . Pues bien, este sistema de muchos cuerpos, contrariamente a lo que sucede para $N=2$, presenta un buen comportamiento ergódico, en el sentido de que se relaja con facilidad al equilibrio. En la Fig. 4.6 tenemos la distribución de velocidades cuando el sistema ha realizado un total de 150.000 colisiones (Fig. 4.6a) y un total de 200.000 colisiones (Fig. 4.6b). En ambos casos se observa una distribución maxwelliana de velocidades. La diferencia en el comportamiento del sistema cuando $N=2$ y cuando $N \gg 2$ se puede imputar al hecho de que al aumentar considerablemente el número de partículas también se aumenta la posibilidad de que el sistema sea ergódico (en el sentido dado por Boltzmann a la Hipótesis Ergódica (ver el principio de esta Sección).

Vemos pues que los sistemas estudiados tienen buen comportamiento ergódico y parece que cuando la diferencia de masa es pequeña y la distribución de velocidades iniciales es de la forma dada por la ecuación (4.10), la evolución temporal se realiza mediante dos gaussianas que centradas en los valores iniciales de la velocidad van evolucionando hacia una sola gaussiana centrada en el valor medio de las velocidades iniciales (Fig. 4.7). Como hemos comprobado la mayoría de los sistemas estudiados se relajan al equili-

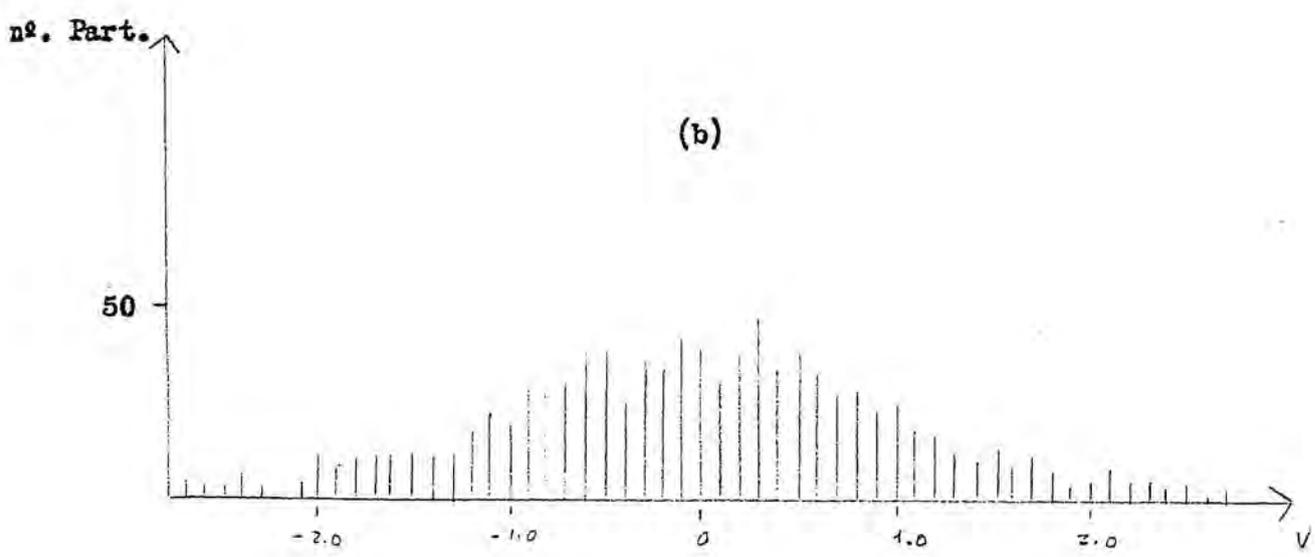
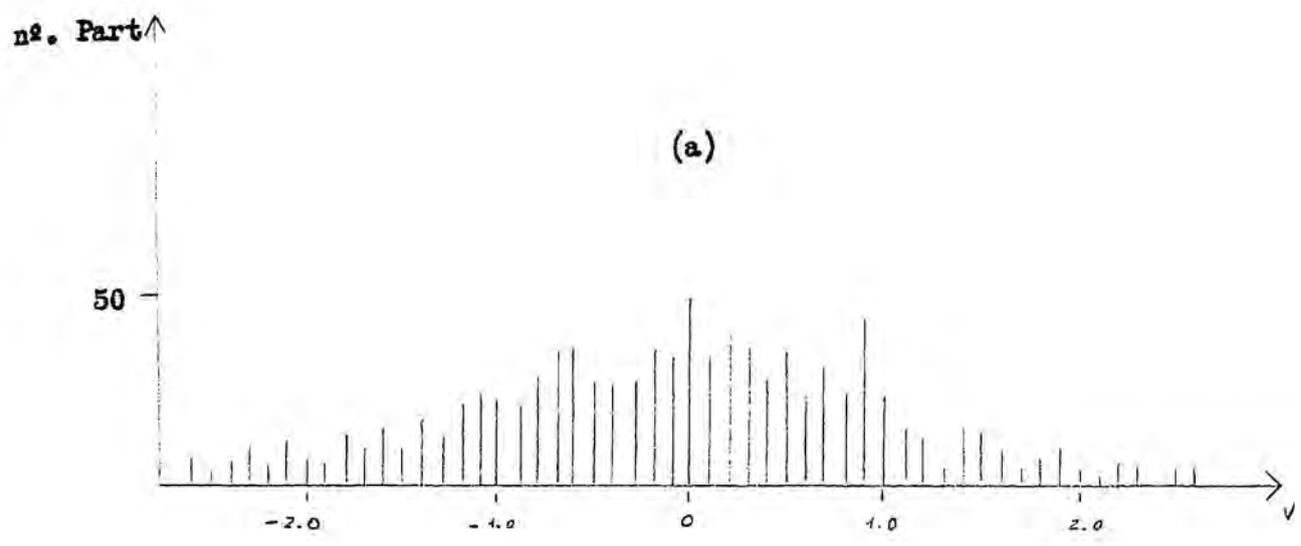


Fig. 4.6 .- Distribución de velocidades con $m_2/m_1 = 3$ cuando el sistema ha realizado: (a) 150000 col. (b) 200000 col.

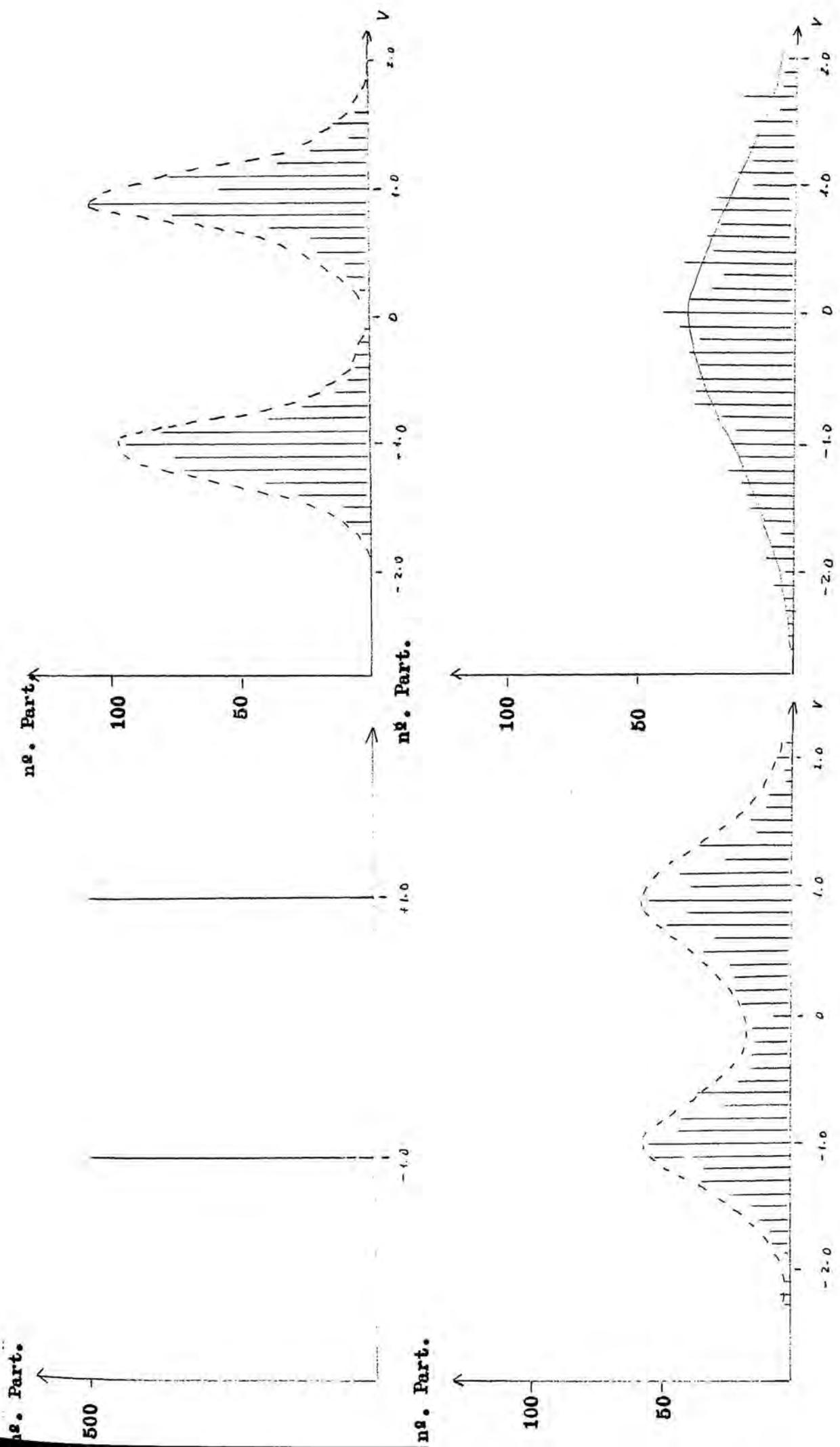


Fig.4.7.- Distintas fases de la evolución temporal de la fun. de distribución de la velocidad de un sistema binario unidimensional con $m_2/m_1 \approx 1$.

brío, pues al transcurrir el tiempo la distribución de velocidades tiene la forma de una curva gaussiana (distribución de Maxwell). Sin embargo aparecen fluctuaciones o desviaciones de la distribución experimental de velocidades respecto de la distribución maxwelliana ideal. Estas fluctuaciones se pueden medir con la magnitud:

$$\Delta \equiv \sqrt{\sum_{j=1}^m [f_{\max}(v_j) - f_{\exp}(v_j)]^2} \quad (4.15)$$

siendo $f_{\max}(v_j)$ la distribución maxwelliana ideal dada por la ec. (4.11) y $f_{\exp}(v_j)$ es la distribución de velocidades dada por el ordenador. El rango de velocidades escogido para calcular (4.15) ha sido desde $v_1 = -3.90$, hasta $v_m = +3.80$, con incrementos de 0,1, así pues $m = 78$.

En la Tabla 4.1 tenemos los valores de las fluctuaciones Δ para los sistemas que alcanzan el equilibrio. $\bar{\Delta}$ es la fluctuación media para cada valor de la velocidad: $\bar{\Delta} \equiv \Delta/m$. También aparecen los valores de la velocidad media y de la desviación típica de los sistemas estudiados. La velocidad media siempre sale negativa (aunque muy próxima a cero, que es el valor teórico) por el error sintomático introducido por el ordenador debido al truncamiento de los números reales. Claramente se observa que la desviación típica aumenta con la diferencia de masa, este hecho comprueba de forma cuantitativa la mayor dispersión de velocidades observada en las figuras.

En la Tabla 4.2 tenemos el promedio temporal, en el equilibrio, de las magnitudes anteriores. Hay que resaltar que el sistema con $m_2/m_1 = 3$ siempre presenta mayores fluctuaciones que los demás sistemas.

nº colisiones	m_2/m_1	vel. media	desv. típica	Δ	$\bar{\Delta} \times 10^3$
10^5	1.2	-0.05	1.00	0.35	4.49
	2	-0.04	1.07	0.27	3.46
	3	-0.04	1.14	0.32	4.10
	4	-0.05	1.23	0.30	3.85
1.2×10^5	1.2	-0.05	1.00	0.39	5.00
	2	-0.04	1.05	0.30	3.85
	3	-0.05	1.14	0.39	5.00
	4	-0.06	1.21	0.33	4.23
1.5×10^5	1.2	-0.05	1.00	0.30	3.85
	2	-0.05	1.05	0.26	3.33
	3	-0.06	1.15	0.37	4.74
	4	-0.06	1.20	0.32	4.00

Tabla 4.1. - Valores, en el equilibrio, de la velocidad media, la desviación típica, las fluctuaciones Δ y la fluctuación media $\bar{\Delta}$, por cada valor de la velocidad, de los sistemas estudiados.

m_2/m_1	$\langle \bar{v} \rangle$	$\langle \sigma \rangle$	$\langle \Delta \rangle$	$\langle \bar{\Delta} \rangle \times 10^3$
1.2	-0.05	1.00	0.35	4.45
2	-0.04	1.06	0.28	3.55
3	-0.05	1.14	0.36	4.61
4	-0.06	1.21	0.32	4.06

Tabla 4.2. - Promedio temporal, en el equilibrio, de la velocidad media, desviación típica, fluctuaciones y fluctuaciones por velocidad de los sistemas estudiados.

La función H de Boltzmann proporciona una forma cuantitativa de comprobar si un sistema físico evoluciona hacia el equilibrio. El teorema H afirma [20] que un sistema evoluciona al equilibrio si y sólo si la función:

$$H(t) = \int dV f(v; t) \ln f(v; t) \quad (4.16)$$

satisface la condición:

$$\frac{dH(t)}{dt} \leq 0. \quad (4.17)$$

Así pues un sistema evolucionará hacia el equilibrio, si la función $H(t)$ va decreciendo monótonamente con el tiempo hasta convertirse en una constante cuando el sistema se encuentra en el equilibrio.

Con los datos de la simulación y mediante integración numérica hemos calculado la función $H(t)$ dada por la ec. (4.16). En la Tabla 4.3 tenemos los valores de $H(t)$ para el sistema con $m_2/m_1 = 1.05$; en la Tabla 4.4 para el sistema con $m_2/m_1 = 1.02$ y en la Tabla 4.5 para los sistemas con $m_2/m_1 = 2$, $m_2/m_1 = 3$ y $m_2/m_1 = 4$.

t/t_0	10	20	30	40	50	60	70	80	90
$H(t)$	-0.15	-0.16	-0.18	-0.19	-0.20	-0.21	-0.22	-0.23	-0.24
t/t_0	100	110	120	130	140	150	200	250	300
$H(t)$	-0.24	-0.25	-0.25	-0.27	-0.27	-0.28	-0.30	-0.31	-0.33

Tabla 4.3. - Valores de la función $H(t)$ para el sistema con

$$m_2/m_1 = 1.05.$$

t/t_0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$H(t)$	-0.21	-0.23	-0.25	-0.26	-0.27	-0.27	-0.28	-0.29	-0.29
t/t_0	10	20	30	40	50	60	70	80	150
$H(t)$	-0.29	-0.33	-0.36	-0.37	-0.36	-0.37	-0.36	-0.37	-0.37

Tabla 4.4.- Valores de la función $H(t)$ para el sistema con $m_2/m_1 = 1.2$.

t/t_0	$H(t)$		
	$m_2/m_1=2$	$m_2/m_1=3$	$m_2/m_1=4$
1	-0.25	-0.23	-0.22
2	-0.33	-0.32	-0.31
3	-0.35	-0.35	-0.35
4	-0.37	-0.37	-0.37
5	-0.37	-0.37	-0.37
6	-0.37	-0.37	-0.37
8	-0.37	-0.37	-0.38
10	-0.37	-0.37	-0.37
150	-0.37	-0.37	-0.37

Tabla 4.5.- Valores de la función $H(t)$ para los sistemas con $m_2/m_1 = 2$; $m_2/m_1 = 3$ y $m_2/m_1 = 4$.

En estas tablas observamos que la función $H(t)$ disminuye con el tiempo en todos los sistemas estudiados; vemos también que, a partir de un cierto valor de t/t_0 , la función $H(t)$ es constante lo que indica que se ha alcanzado el estado de equilibrio (excepto para el sistema con $m_2/m_1 = 1.05$). Hay que resaltar que el valor de $H(t)$ en el equilibrio es prácticamente igual para todos los sistemas estudiados:

$$H_{\text{equil}} \cong -0.37 \quad . \quad (4.18)$$

Este hecho indica cómo el estado de equilibrio es independiente de la diferencia de masa y cómo la función $H(t)$ en el equilibrio es proporcional a la entropía del sistema:

$$\begin{aligned} S &= -k \int dV f_{\text{eq}}(v) \cdot \ln f_{\text{eq}}(v) \\ &= -k H_{\text{equil}} \end{aligned}$$

de modo que todos los sistemas considerados tienen la misma entropía.

En la Fig. 4.8 tenemos las gráficas de $H(t)$ para los sistemas estudiados. En todos los casos la variación temporal de $H(t)$, antes de alcanzar el estado de equilibrio, se ajusta bastante bien a una relación potencial decreciente de la forma:

$$H(t) = -a \left(t/t_0 \right)^b \quad , \quad (4.19)$$

los valores de los parámetros a y b y del coeficiente de determinación están dados en la Tabla 4.6.

Sustituyendo el valor común de $H(t)$ en el equilibrio dado por (4.8) en la ec. (4.19) podemos estimar, de forma aproximada, el tiempo que tardan en alcanzar el equilibrio (tiempo de relajación de $f(v,t)$) los sistemas estudiados. En la Tabla 4.7 tenemos los resultados de esta estimación. Todos estos tiempos de relajación, calculados a partir de (4.18) y (4.19) coinciden, con bastante aproximación, con los tiempos de relajación "experimentales" de la simulación. Observemos que el tiempo de relajación del sistema con $m_2/m_1 = 1.05$ ($t/t_0 = 457.56$) es superior al tiempo máximo de la simulación de este sistema ($t/t_0 = 300$), lo que explica el hecho de que su distribución de velocidades no se haya relajado a una gaussiana (ver Fig. 4.5)

	a	b	r
$m_2/m_1 = 1.05$	0.08	0.25	0.99
$m_2/m_1 = 1.2$	0.21	0.15	1.00
$m_2/m_1 = 2$	0.26	0.28	0.98
$m_2/m_1 = 3$	0.24	0.35	0.98
$m_2/m_1 = 4$	0.23	0.38	0.98

Tabla 4.6.- Valores de los parámetros a y b que aparecen en la ec. (4.19) y coeficiente de determinación r .

m_2/m_1	1.05	1.2	2	3	4
$(t/t_0)_{eq}$	457.56	43.64	3.53	3.44	3.49

Tabla 4.7.- Tiempos de relajación al equilibrio de la función de distribución $f(v,t)$ para los sistemas estudiados.

También parece que existe una relación entre el exponente b que aparece en la ecuación potencial (4.19) y el tiempo libre medio del sistema. En efecto, como puede comprobarse en la Tabla 4.8., parece que la solución $(t_0)^b$ es independiente de los sistemas estudiados ya que es aproximadamente constante:

$$t_0^b = \text{Cte.},$$

este hecho parece que implicaría una relación logarítmica entre el exponente b y el tiempo libre medio. (Notar, sin embargo, que falla apreciablemente para $m_2/m_1 = 1.2$).

m_2/m_1	t_0^b
1.05	1.17
1.2	1.09
2	1.16
3	1.17
4	1.15

Tabla 4.8.- Relación prácticamente constante entre el tiempo libre medio t_0 y el exponente b de la ley dada por la ec. (4.19).

Podemos concluir que, de forma tajante, todos los sistemas binarios evolucionan hacia el equilibrio y que por lo tanto tienen buen comportamiento ergódico.

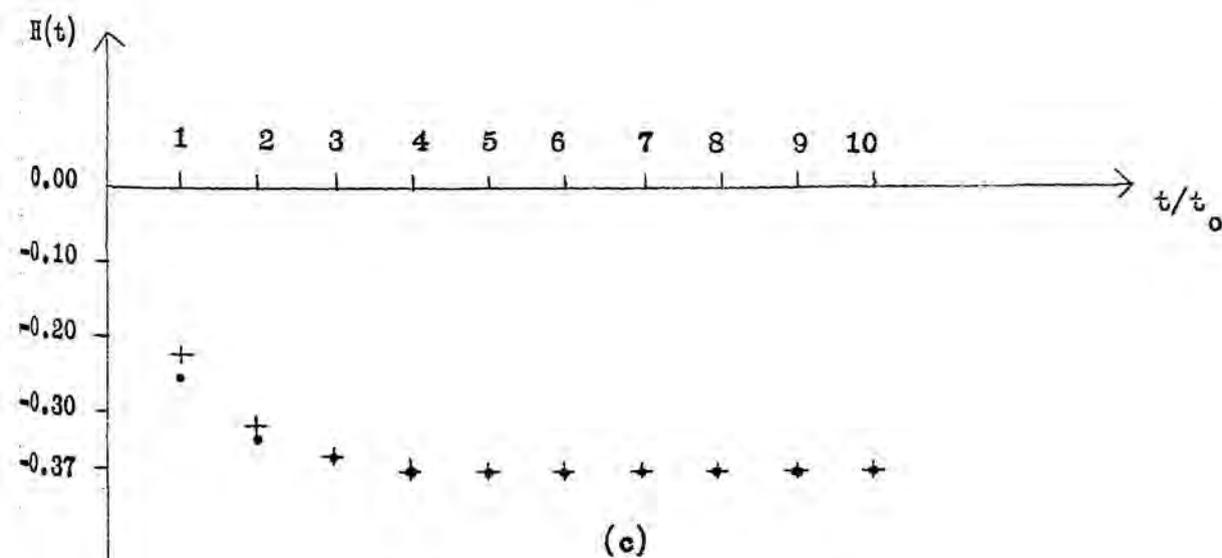
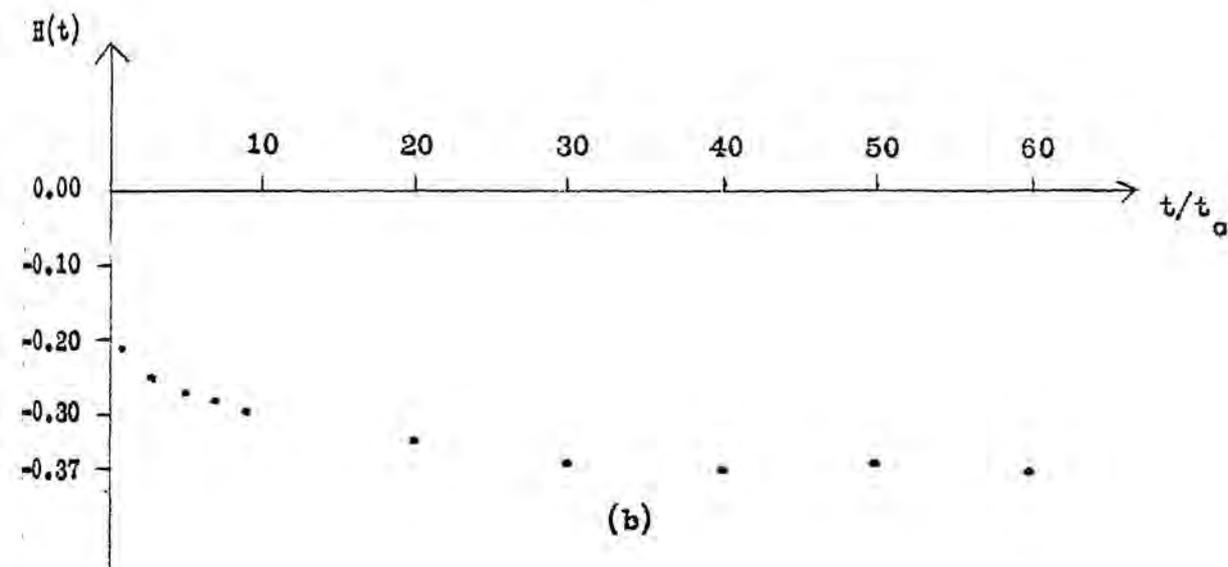
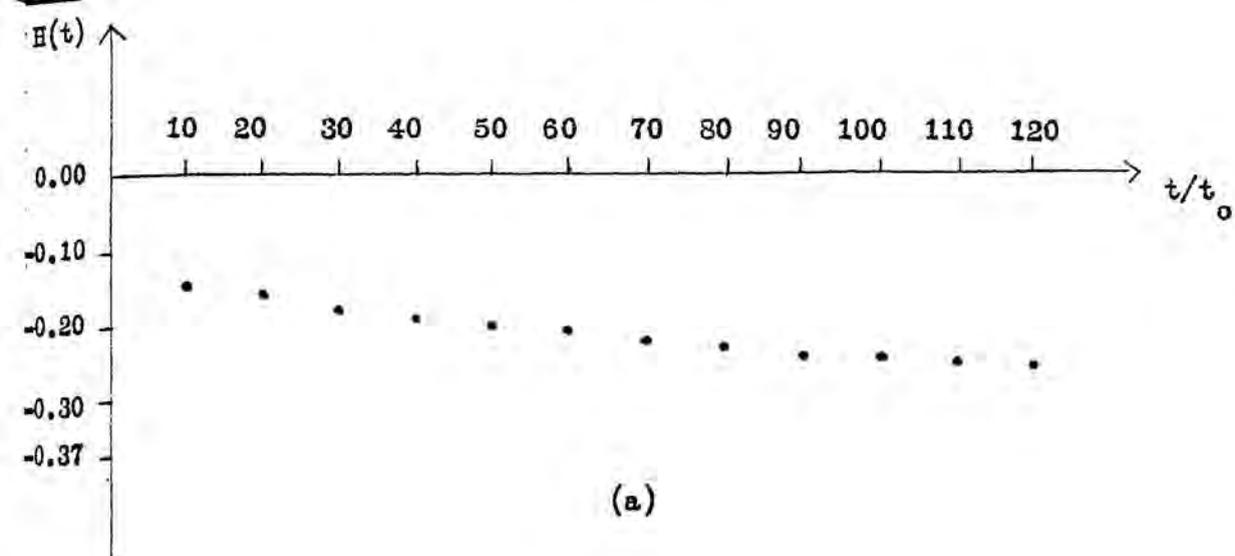


Fig. 4.8.- Gráfica de la función de Boltzmann $H(t)$ para los sistemas
 (a) $m_2/m_1 = 1.05$; (b) $m_2/m_1 = 1.2$; (c) la gráfica con \bullet
 corresponde a $m_2/m_1 = 2$ y la gráfica con $+$ a $m_2/m_1 = 4$.

II.5. Función de Autocorrelación de la velocidad

La función de autocorrelación de la velocidad $\psi(t)$ nos da la correlación existente entre la velocidad de una partícula en el instante $t=0$ y su velocidad en el instante t posterior:

$$\psi(t) = c \cdot \langle v(0) \cdot v(t) \rangle \quad (5.1)$$

El paréntesis $\langle \dots \rangle$ indica un promedio canónico o, equivalentemente, en el sistema y c es una constante de normalización que asegura $\psi(0) = 1$:

$$c = \langle v(0)^2 \rangle \quad (5.2)$$

con los datos de la simulación, calculamos la función de autocorrelación de la velocidad mediante el algoritmo tradicional:

$$\psi(t) = \frac{\sum_{i=1}^N v_i(0) \cdot v_i(t)}{\sum_{i=1}^N v_i(0)^2} \quad (5.3)$$

donde el promedio canónico se ha sustituido por el promedio sobre todas las partículas del sistema.

En primer lugar, el cálculo de $\psi(t)$ lo realizamos para el sistema de N varillas rígidas iguales. La razón de ello es que para tal sistema disponemos de resultados exactos con los cuales poder comparar los resultados experimentales de la simulación, asegurando así la bondad del procedimiento seguido por nosotros en la simulación. Como ya indicamos en la Secc. 1, la función de autocorrelación de la velocidad fue calculada exactamente por

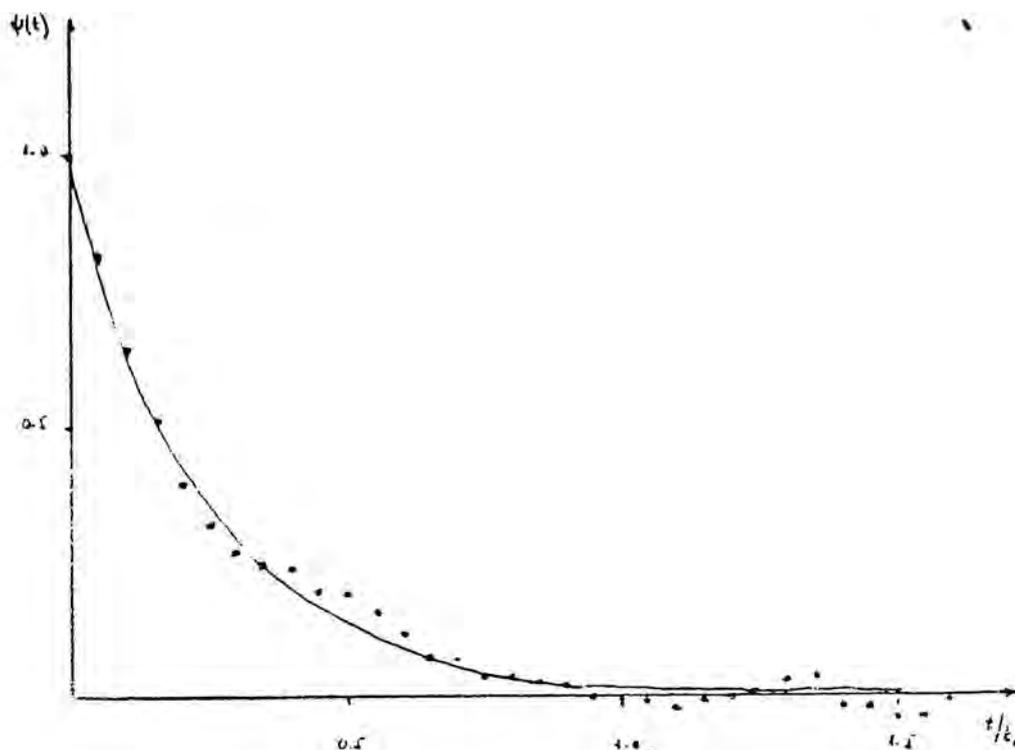


Fig. 5.1.— Función de autocorrelación de la velocidad para partículas de igual masa y tamaño. La curva continua corresponde a la función exacta.

Jepsen, para una distribución inicial maxwelliana [1]. Posteriormente, Lebowitz, Percus y Sykes calcularon exactamente $\psi(t)$ para distintos tipos de distribución inicial [2], entre ellas la que hemos dado a nuestro sistema:

$$f_0(v) = \frac{1}{2} [\delta(v+v_0) + \delta(v-v_0)] \quad (5.4)$$

El sistema lineal de varillas rígidas iguales, con esta distribución inicial, tiene la siguiente función de autocorrelación de la velocidad (ver ec. (2.14)):

$$\psi(t) = v_0^2 e^{-2n v_0 t} \quad (5.5)$$

en nuestro sistema de varillas iguales tenemos $v_0=1$, $n=1$, con lo cual (5.5) queda:

$$\psi(t) = e^{-2t} \quad (5.6)$$

con esta función hemos comparado nuestros resultados, tanto para el sistema de masas iguales como para los sistemas de masas distintas, pudiendo así observar las desviaciones originadas por la diferencia de masa.

La función de autocorrelación para el sistema de masas iguales aparece en la Fig. 5.1., en donde la curva continua es la autocorrelación exacta (ec. (5.6)). El incremento de tiempo escogido ha sido (en todos los casos):

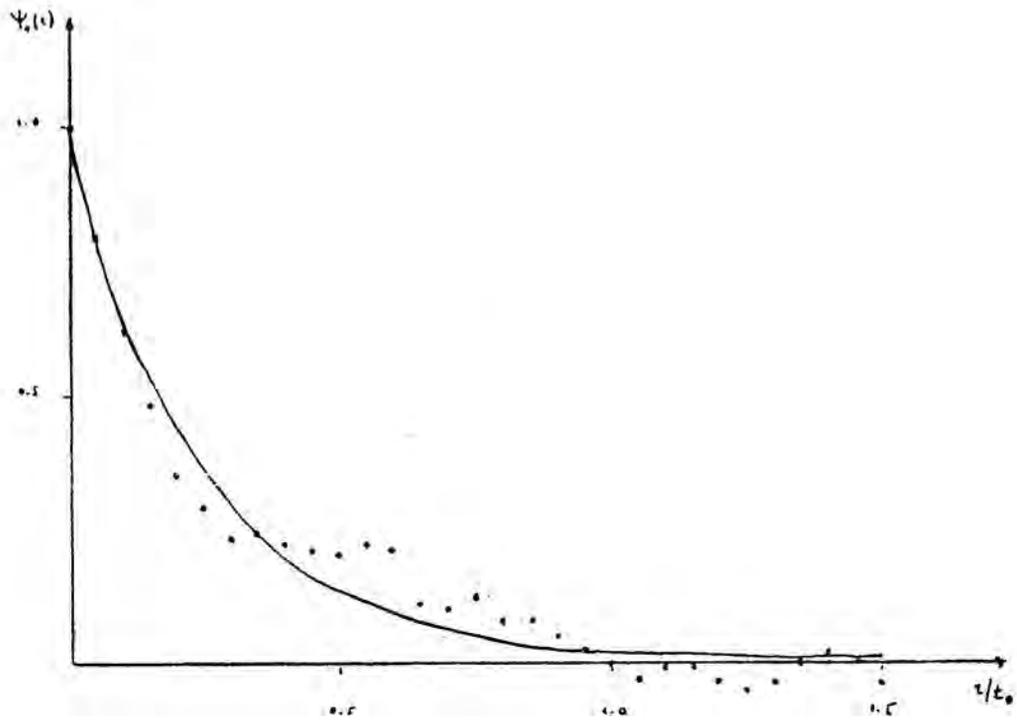
$$\Delta t = 0.05 t_0 \quad (5.7)$$

siendo t_0 el tiempo libre medio. Como puede observarse existe un buen

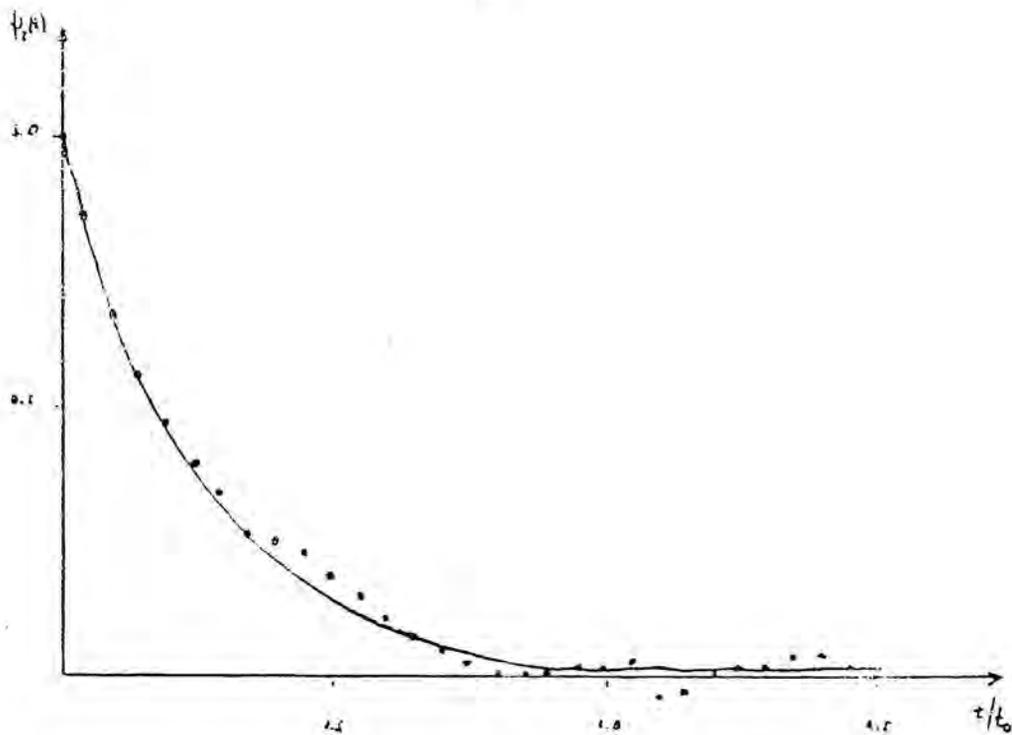
acuerdo entre los resultados teóricos exactos y los experimentales.

Para los sistemas binarios nos encontramos con dos autocorrelaciones, una, $\Psi_1(t)$, correspondiente a las partículas de menor masa m_1 , y otra, $\Psi_2(t)$, para las partículas de masa mayor m_2 . En las Figuras 5.2, 5.3, 5.4 y 5.5 hemos representado estas autocorrelaciones para las razones de masas: $m_2/m_1 = 1.05$, $m_2/m_1 = 1.2$, $m_2/m_1 = 2.0$ y $m_2/m_1 = 4.0$, respectivamente. En todos los casos la curva continua representa la correlación exacta (5.6) de masas iguales. De estos resultados obtenemos varias observaciones que pasamos a enumerar: (i) En todos los casos la autocorrelación de las partículas de menor masa decrece más rápidamente que la autocorrelación exacta de masa iguales (ver gráfica de $\Psi_1(t)$ en las Figs. 5.2, 5.3, 5.4 y 5.5), además este decrecimiento se hace más rápido con la diferencia de masa. Ello significa que cuanto mayor es la diferencia de masa las varillas de menor masa pierden más rápidamente la correlación de sus velocidades. (ii) La autocorrelación $\Psi_2(t)$ de las partículas de mayor masa es más regular que la autocorrelación de las partículas de masa menor $\Psi_1(t)$, ya que las fluctuaciones en las velocidades son mayores cuanto menor es la masa de las partículas. (iii) La autocorrelación $\Psi_2(t)$ de las partículas grandes decrece más lentamente que la autocorrelación exacta de masas iguales. Este decrecimiento se hace más lento al aumentar la diferencia de masa, así las varillas grandes pierden más lentamente su correlación.

Como veremos en (V), las observaciones (i) y (iii) tienen una explicación cuantitativa en el hecho de que al aumentar la diferencia de masa hay una variación en el tiempo de relajación del sistema.

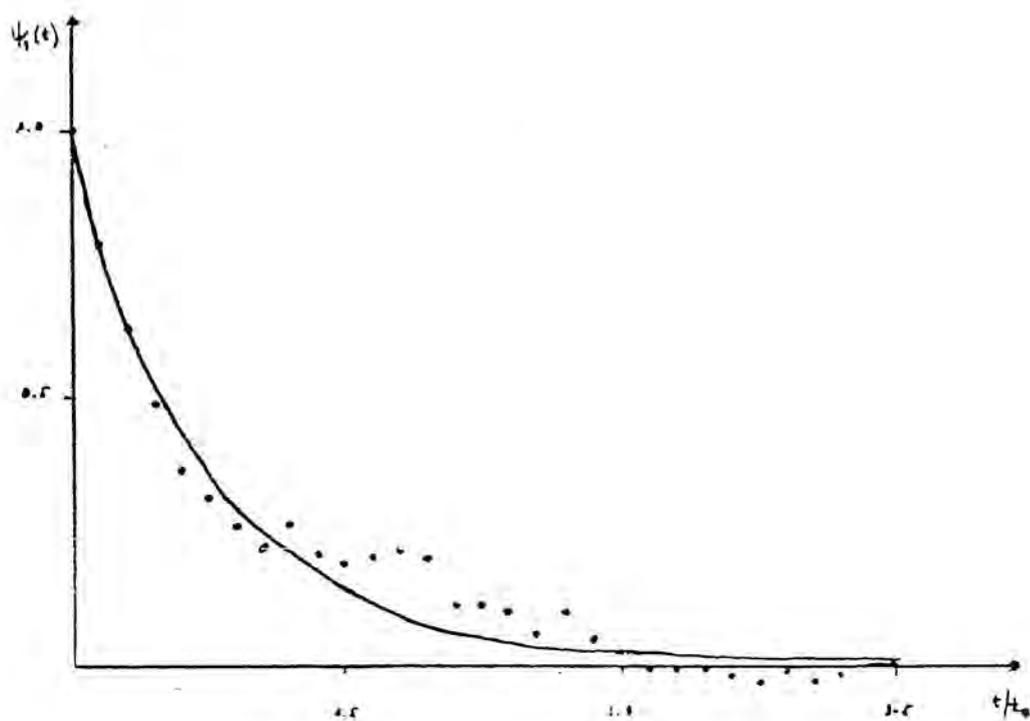


(a)

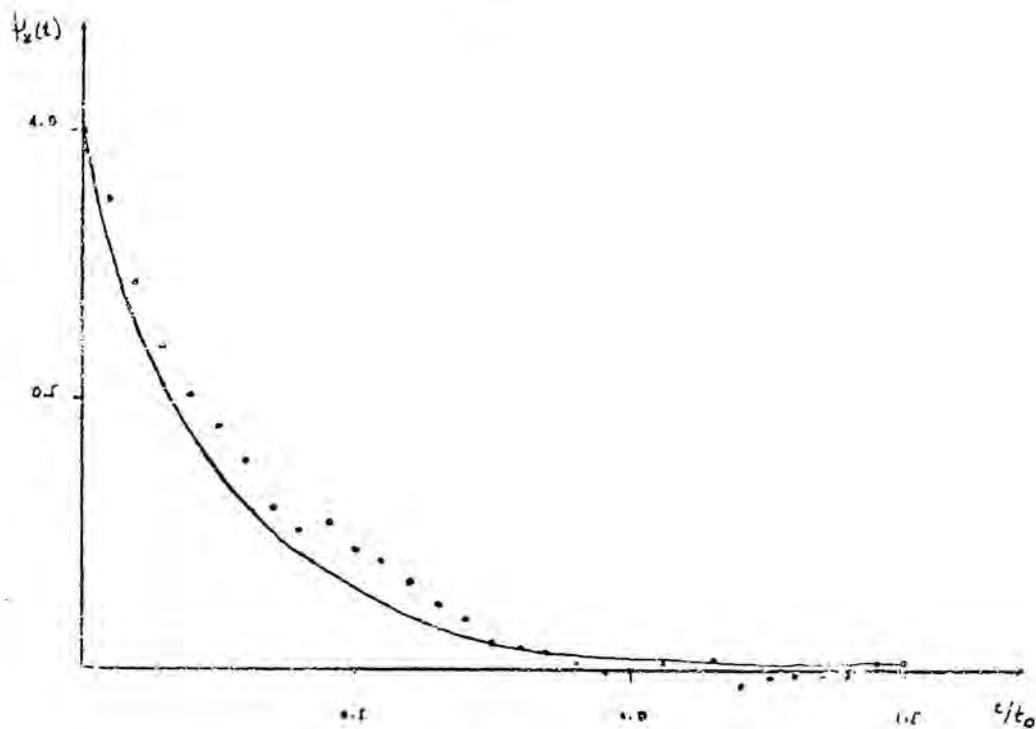


(b)

Fig. 5.2.- Función de autocorrelación velocidad, para $m_2/m_1 = 1.05$. (a) Partículas de masa menor. (b) Partículas de masa mayor. (La curva continua corresponde al caso exacto de masas iguales)

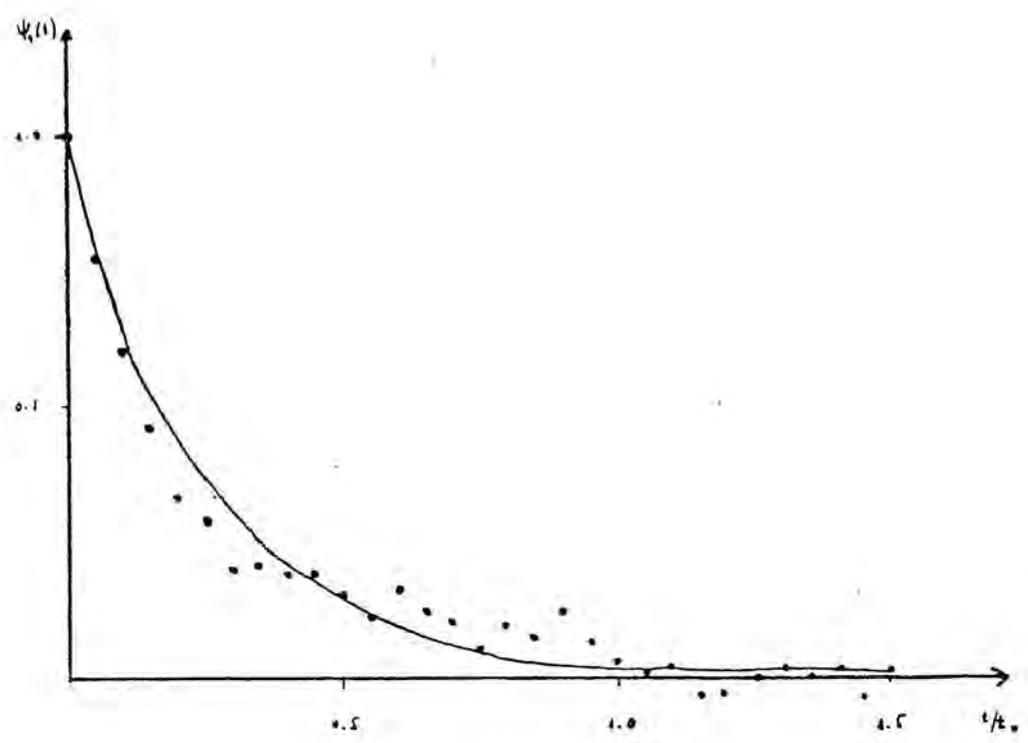


(a)

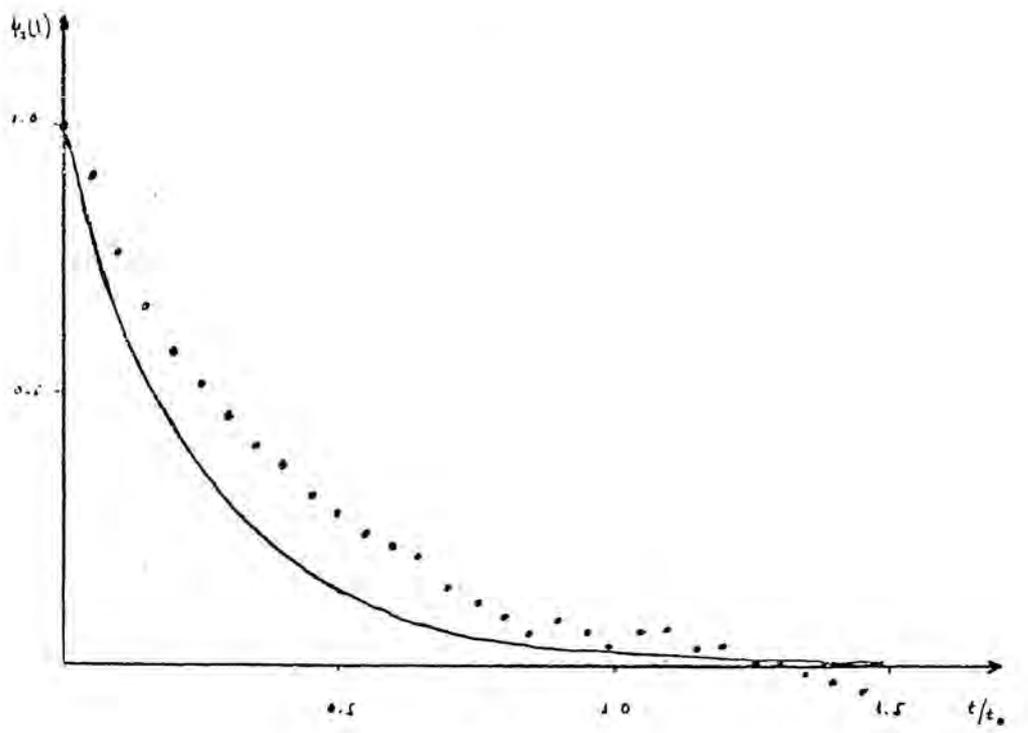


(b)

Fig. 5.3.— Función de autocorrelación velocidad para $m_2/m_1 = 1.2$. (a) Partículas de masa menor. (b) Partículas de masa mayor. (La curva continua corresponde al caso exacto de masas iguales)

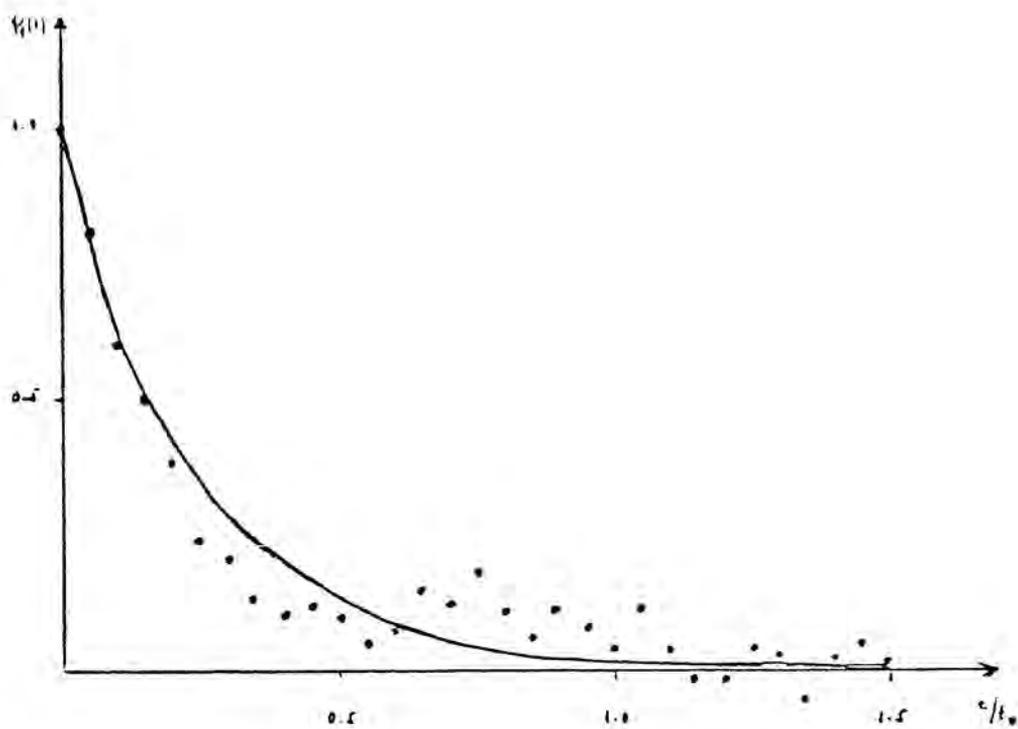


(a)

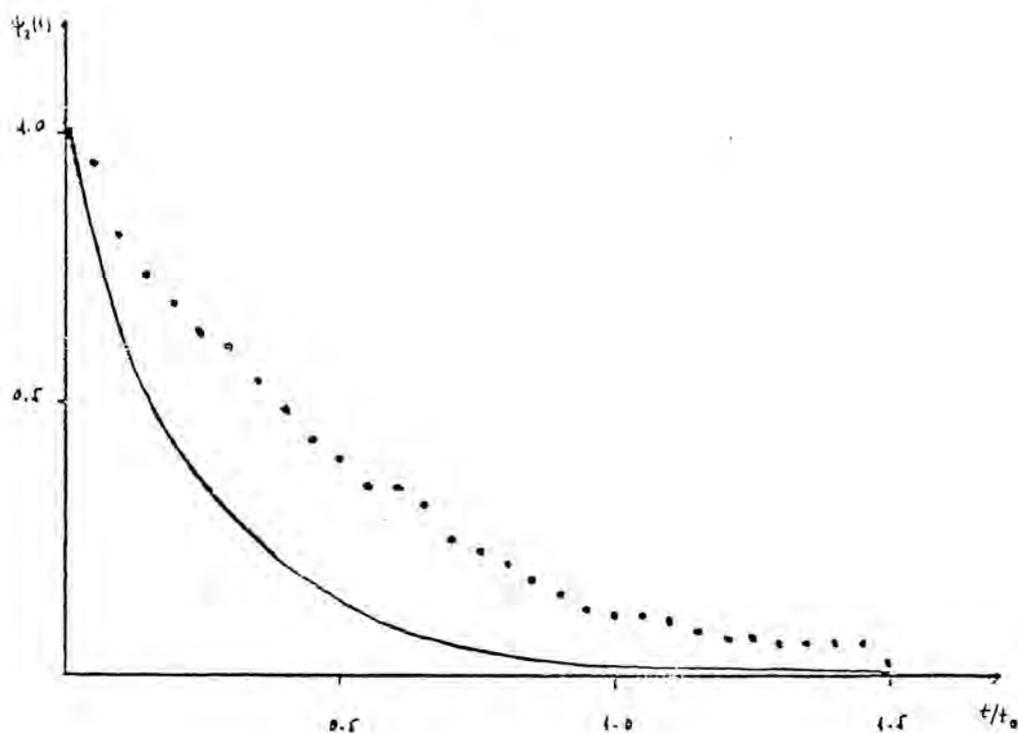


(b)

Fig. 5.4.- Función de autocorrelación de la velocidad para $m_2/m_1 = 2$. (a) Partículas de masa menor. (b) Partículas de masa mayor. (La curva continua corresponde al caso exacto de masas iguales)



(a)



(b)

Fig. 5.5.- Función autocorrelación velocidad para $m_2/m_1 = 4$. (a) Partículas de menor masa. (b) Partículas de mayor masa. (La curva continua corresponde al caso exacto de masas iguales)

(iv) La variación temporal, tanto de $\Psi_1(t)$ como de $\Psi_2(t)$, es exponencial, esto es:

$$\Psi_i(t) \sim e^{-\alpha_i t}, \quad (i=1,2), \quad (5.8)$$

si se cumple esta ecuación, entonces:

$$|\ln \Psi_i(t)| \sim t \quad (5.9)$$

o lo que es igual, la representación gráfica de $|\ln \Psi_i(t)|$ en función del tiempo debe ser, aproximadamente, una línea recta. En efecto así es; en la Fig. 5.6 hemos representado $|\ln \Psi_i(t)|$ frente al tiempo, para el caso $m_2/m_1 = 4$, como vemos la curva que mejor aproxima los datos experimentales es una recta (la recta de regresión). Esto queda confirmado al ser los coeficientes de correlación lineal $r_1 = r_2 = 0,996$ que claramente corresponden a una recta.

Vemos pues que, para todos los sistemas estudiados, la función de autocorrelación de la velocidad tiene el decrecimiento exponencial típico y esperado.

(v) Teniendo en cuenta que la variación temporal de $\Psi_{1,2}(t)$ es exponencial decreciente podemos calcular el tiempo de relajación a partir de los datos de la simulación. En efecto, sea τ el tiempo de relajación de la correlación de la velocidad, entonces (ver ec. (5.8)):

$$\Psi_i(t) \sim e^{-t/\tau_i} \quad (i=1,2) \quad (5.10)$$

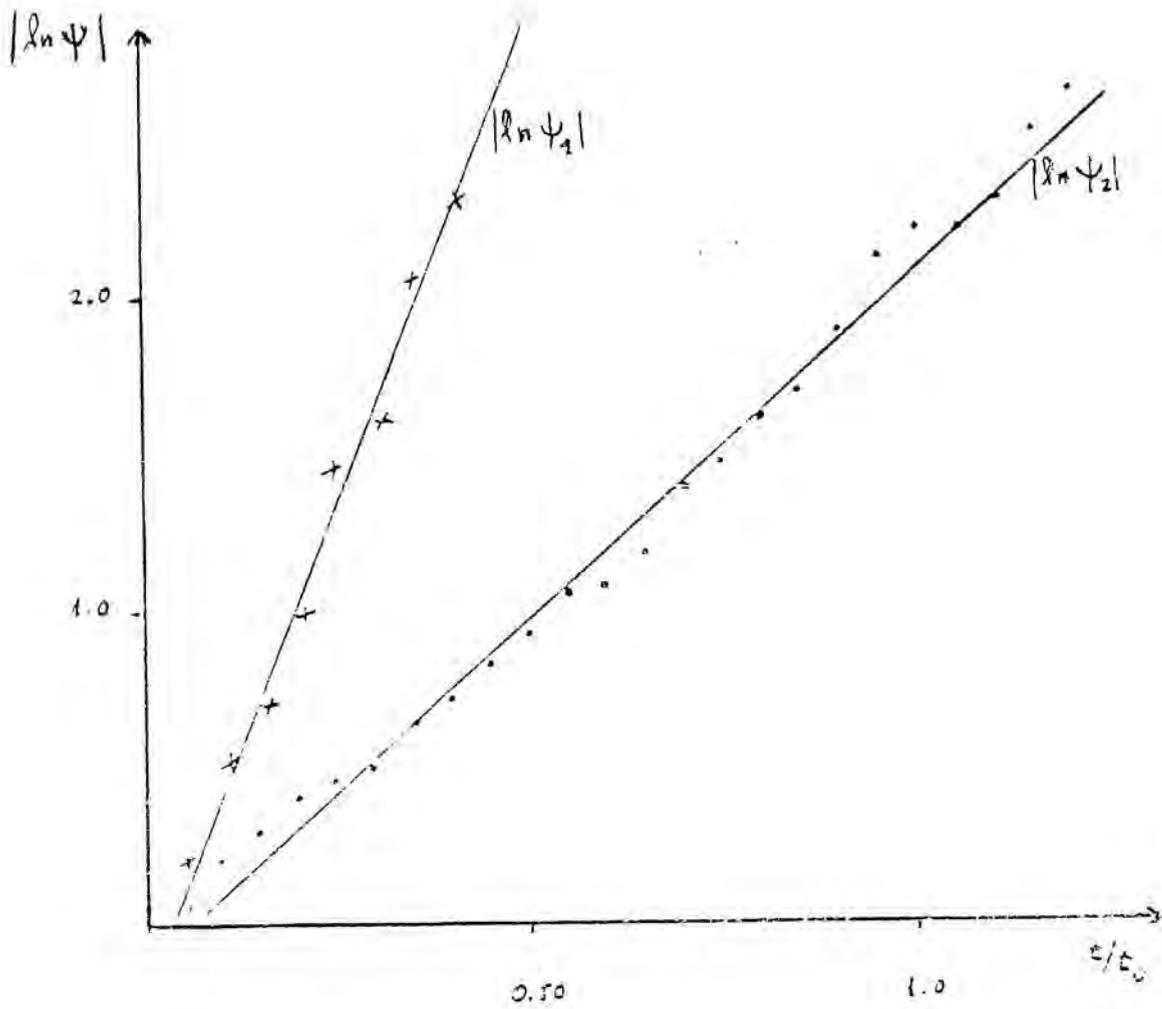


Fig. 5.8 .- Rectas de regresión para el logaritmo de la f. autocorrelación velocidad ($n_2/n_1=1$).

de donde:

$$\left| \ln \psi_i(t) \right| = \frac{1}{\tau_i} t + b_i, \quad (i=1,2), \quad (5.11)$$

vemos pues que la pendiente de la recta de regresión de $\left| \ln \psi_i(t) \right|$ es igual al inverso del tiempo de relajación del sistema. En la Tabla 5.1 tenemos los tiempos de relajación para los distintos sistemas estudiados. En la Tabla τ_1 es el tiempo de relajación de las partículas de masa menor m_1 y τ_2 es el tiempo de relajación de las partículas de mayor masa m_2 . Observamos que al aumentar la diferencia de masa, el tiempo de relajación de las partículas pequeñas, τ_1 , disminuye, mientras que el tiempo de relajación de las partículas grandes, τ_2 , aumenta. Esto confirma cuantitativamente las observaciones cualitativas (i) y (iii).

m_2/m_1	τ_1	τ_2
1	$0.25 t_0$	$0.25 t_0$
1.05	$0.30 t_0$	$0.21 t_0$
1.2	$0.29 t_0$	$0.26 t_0$
2	$0.25 t_0$	$0.33 t_0$
4	$0.17 t_0$	$0.51 t_0$

Tabla 5.1.- Tiempos de relajación de los sistemas simulados.

τ_1 de las partículas pequeñas; τ_2 de las partículas grandes. t_0 tiempo libre medio.

En las figuras 5.7 y 5.8 tenemos las rectas de regresión de los sistemas estudiados. En estas gráficas también se pone de manifiesto la varia-

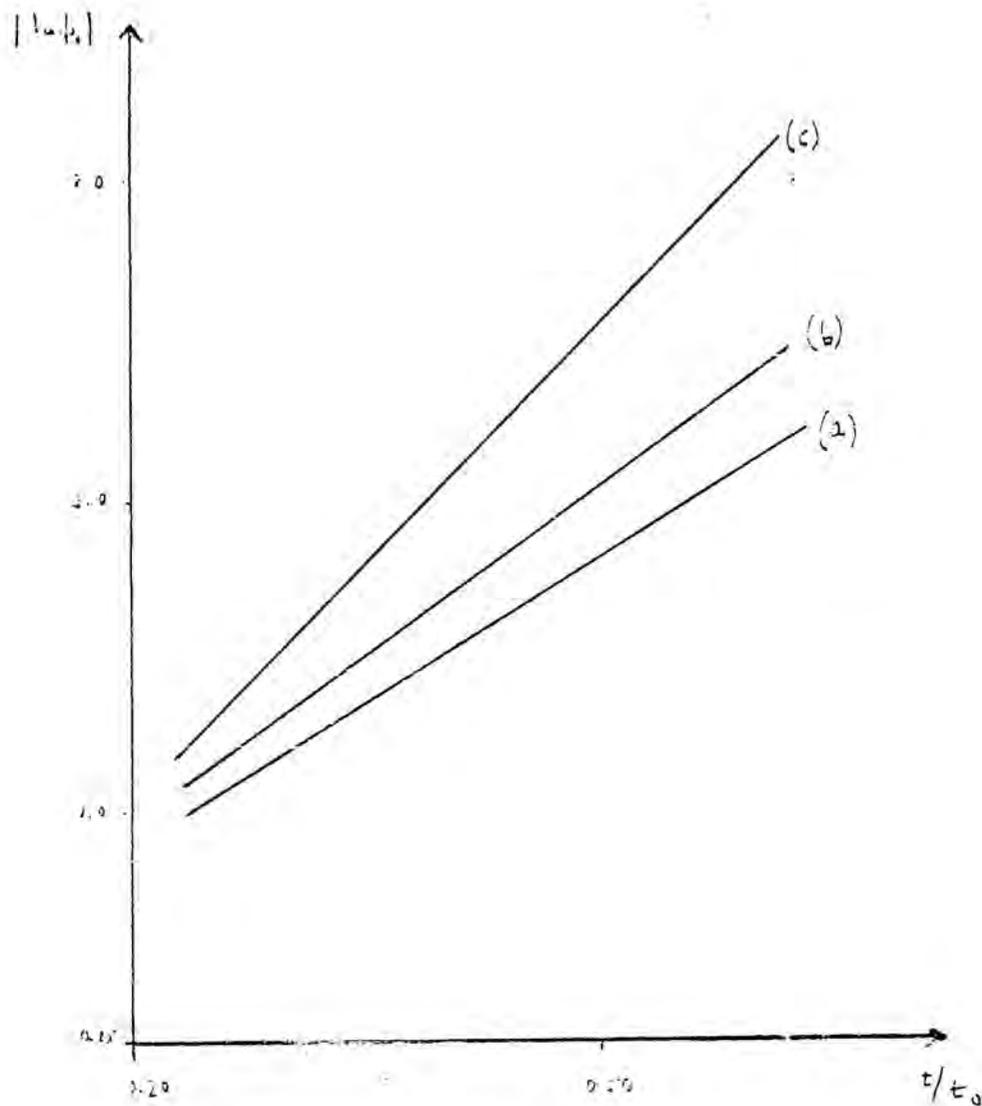


Fig. 5.7 .- Rectas de regresión del logaritmo de la función de autocorrelación de la velocidad para las partículas de masa menor. (a) $m_2/m_1 = 1.2$. (b) $m_2/m_1 = 2$. (c) $m_2/m_1 = 4$.

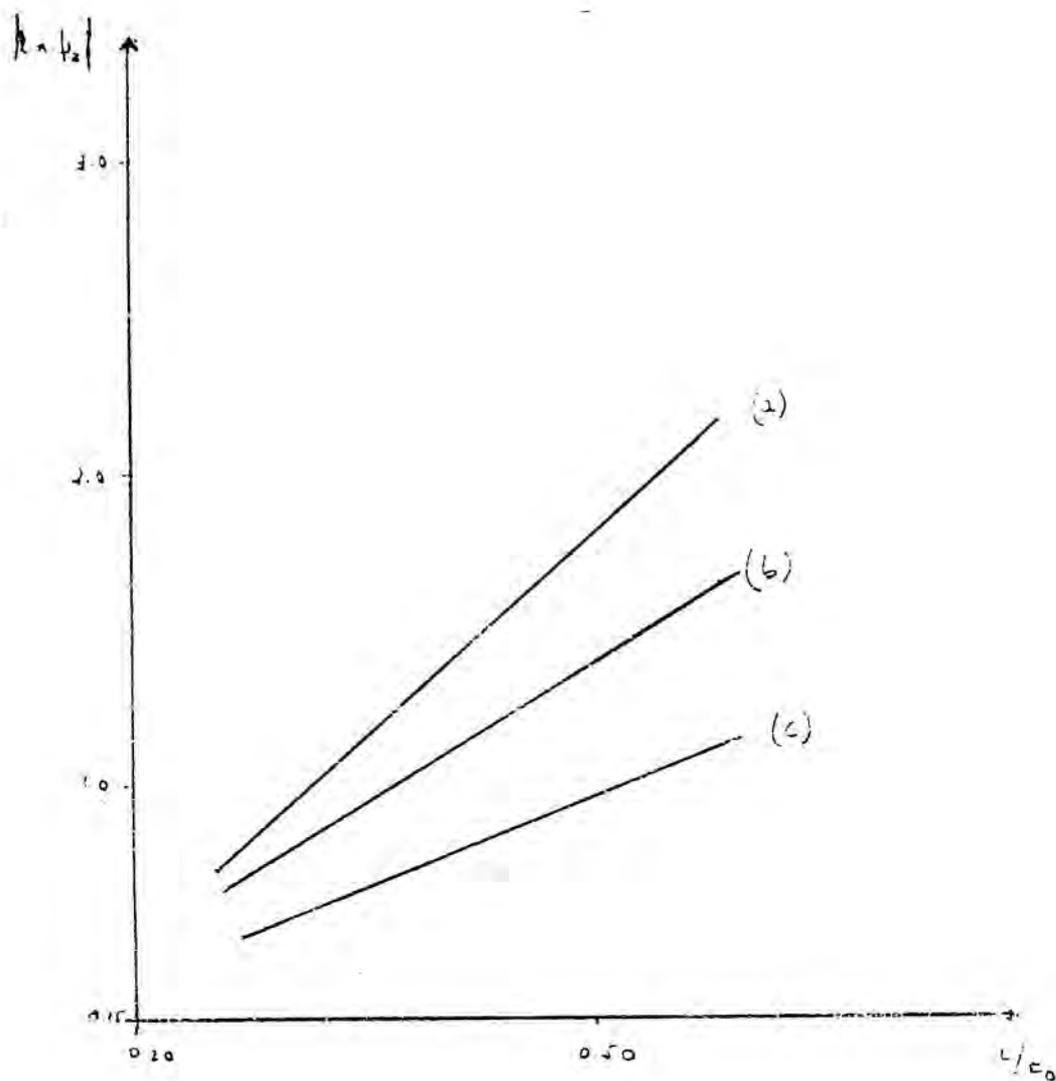


Fig. 5.8 .- Rectas de regresión para el logaritmo de la función de autocorrelación de la velocidad para las partículas de masa mayor. (a) $m_2/m_1 = 1.2$. (b) $m_2/m_1 = 2$. (c) $m_2/m_1 = 4$.

ción del tiempo de relajación.

Al intentar buscar, con los datos de que disponemos, la relación entre el tiempo de relajación τ_i y las masas de las varillas, encontramos que τ_i se ajusta bastante bien a una relación lineal con la masa reducida

$$\mu = m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2) :$$

$$\tau_i = a_i \mu + b_i, \quad (i=1,2), \quad (5.12)$$

para las partículas grandes esta relación es:

$$\tau_2 = 1.12 \mu - 0.17 \quad (r=0.99)$$

y para las partículas pequeñas:

$$\tau_1 = -1.06 \mu + 1.11 \quad (r=0.99),$$

r es el coeficiente de regresión lineal. Como puede observarse en la Fig. 5.9, las dos rectas se cortan para el valor:

$$\tau_1 = \tau_2 \cong 0.50,$$

que es precisamente el tiempo de relajación del sistema de varillas iguales.

Sin embargo la masa reducida para la cual $\tau_1 = \tau_2$ es $\mu = 0.59$ que es algo distinta a la que correspondería al sistema de varillas iguales: $\mu = 0.50$ (con $m_1 = 1$). Esta discrepancia puede ser debida a los pocos datos disponibles para encontrar una relación más exacta. Tampoco hay que descartar la aparición de discontinuidades cuando $m_1 = m_2$ [7], [18].

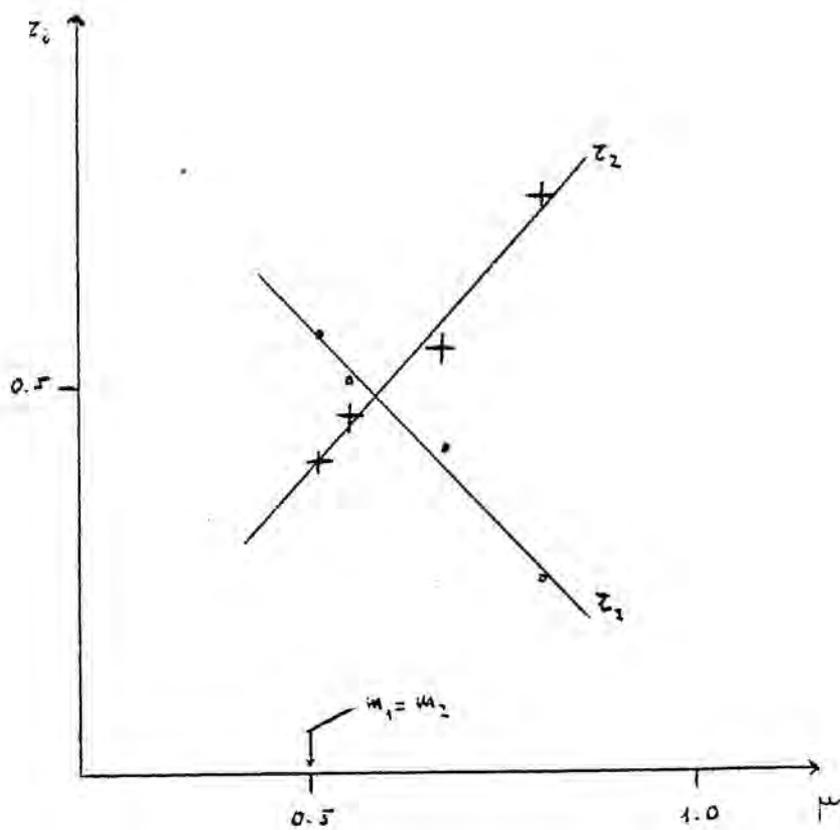


Fig. 5.9.— Tiempos de relajación, para la función de autocorrelación de la velocidad, en función de la masa reducida: $\mu = m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$.

(vi) A partir de los datos proporcionados por la simulación, también es posible calcular los coeficientes de difusión de los sistemas estudiados y ver cuál es su relación con la masa. En efecto, el coeficiente de difusión viene dado por [2] :

$$D_i = \int_0^{\infty} \psi_i(t) dt \quad (i=1,2) \quad (5.13)$$

En nuestro caso $\psi_i(t) \cong 0$ a partir de $t/t_0 \cong 1.5$ (ver Figs. 5.2, 5.3, 5.4 y 5.5), por lo tanto,

$$D_i \cong \int_0^{1.5t_0} \psi_i(t) dt \quad (i=1,2) \quad (5.14)$$

expresión calculada mediante integración numérica (regal de Simpson). En la Tabla 5.2 tenemos los resultados de este cálculo, siendo D_1 el coeficiente de difusión de las partículas pequeñas y D_2 el de las grandes.

m_2/m_1	D_1	D_2
1	0.49	0.49
1.05	0.47	0.50
1.2	0.46	0.51
2	0.39	0.59
4	0.31	0.70

Tabla 5.2.- Coeficientes de difusión de los sistemas simulados.

Sustituyendo la función de autocorrelación exacta dada por la ec. (5.6) (para el caso de masas iguales), obtenemos el coeficiente de difusión exacto para el sistema con $m_2/m_1 = 1$; este coeficiente es $D = 0.50$. Vemos que sólo hay una diferencia del 2% entre el coeficiente exacto y el coeficiente experimental (un dato mas que muestra la previsión numérica de la simulación). También observamos en la tabla que mientras D_1 disminuye con la diferencia de masa, D_2 aumenta con ella. Este resultado está de acuerdo con el hecho de que el tiempo de relajación de las variables pequeñas, τ_1 , disminuye al aumentar la diferencia de masa y el tiempo de relajación de las variables grandes, τ_2 , aumenta (ver observaciones (i), (iii) y (v)).

Al intentar buscar, con los datos disponibles, una relación entre D_i y la masa de las variables, encontramos que, al igual que el tiempo de relajación τ_i , el coeficiente de difusión D_i se ajusta bien a una relación lineal con la masa reducida $\mu = m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$:

$$D_i = \alpha_i \mu + \beta_i, \quad (i=1, 2), \quad (5.15)$$

para las variables pequeñas esta relación es:

$$D_1 = -0.58 \mu + 0.77, \quad (r=1.00),$$

y para las grandes:

$$D_2 = 0.69 \mu + 0.14, \quad (r=0.99),$$

es el coeficiente de regresión lineal. En este caso no tenemos la dificultad del tiempo de relajación ya que las dos rectas se cortan para una masa reducida:

$$\mu = 0.496$$

con el valor

$$D_1 = D_2 = 0.482$$

lo cual casi coincide con los valores para masas iguales (Fig. 5.10) .

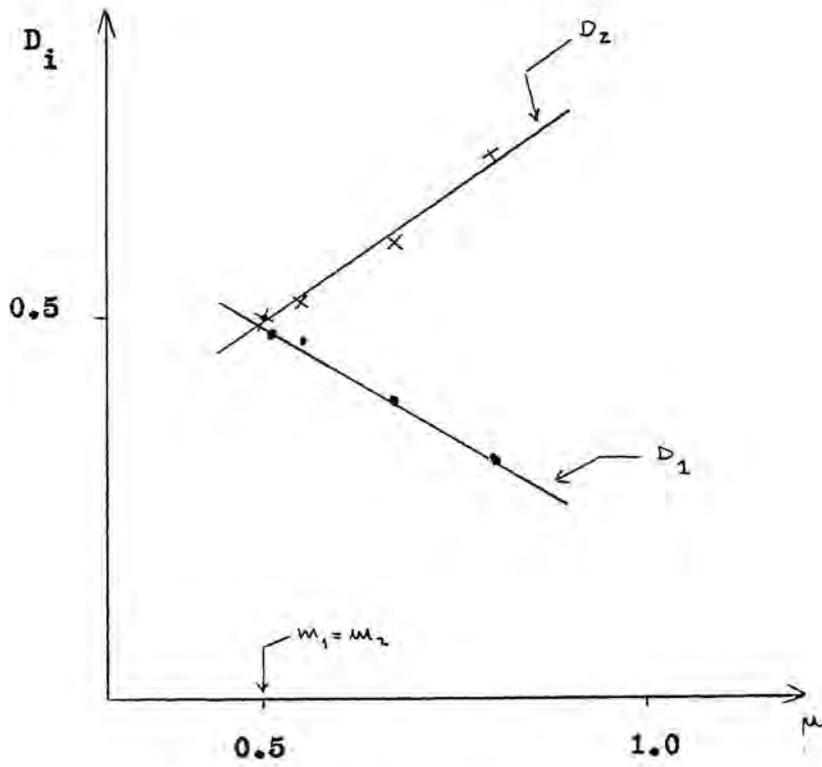


Fig. 5.10.- Coeficientes de difusión en función de la masa reducida.

II.6. La función de distribución radial

Otra función de gran importancia para conocer las propiedades de un sistema, en particular, su configuración espacial, es la función de distribución radial $g(r)$. Sea dn el número de partículas que hay en una celda de volumen dV situada a una distancia r de una partícula dada. Así el número de partículas por unidad de volumen que se encuentran a una distancia r de la partícula origen es:

$$\rho(r) = \frac{dn}{dV} \quad (6.1)$$

La función $\rho(r)$ está definida de forma local. La diferencia entre un fluido con una estructura espacial definida y un fluido sin estructura espacial definida se pone de manifiesto comparando la densidad local $\rho(r)$ con el número medio de partículas por unidad de volumen $\rho = N/V$. El cociente $\rho(r)/\rho$, entre la densidad media y la densidad local, se llama función de distribución radial:

$$g(r) = \frac{1}{\rho} \frac{dn}{dV} ; \quad (6.2)$$

si suponemos la existencia de simetría esférica, podemos escoger la celda tal que su volumen sea el de una corona esférica de anchura dr , así

$$dV = 4\pi r^2 dr \quad y$$

$$g(r) = \frac{1}{\rho} \frac{dn}{4\pi r^2 dr} \quad (6.2')$$

En un líquido la distribución espacial de sus moléculas presenta orden de corto alcance, mientras que en un gas diluido tal ordenación es inexistente [19]; consecuentemente, para un fluido tenemos la condición asintótica:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} g(r) = 1. \quad (6.3)$$

Por otra parte como las moléculas son impenetrables:

$$\lim_{r \rightarrow 0} g(r) = 0. \quad (6.4)$$

La desviación local de una distribución estadísticamente uniforme viene dada por $\rho(r) - \rho$. Definimos la función $h(r)$ mediante $\rho h(r) \equiv \rho(r) - \rho$, con lo cual:

$$h(r) = g(r) - 1 \quad (6.5)$$

Si $r \rightarrow \infty$ entonces $h(r) \rightarrow 0$. Así $h(r)$ refleja el rango del ordenamiento de un fluido. La desviación de $h(r)$ del valor cero es una medida de la correlación entre las partículas pues $g(r) = 1$ sólo si las partículas están lo suficientemente alejadas. Por ello la función $h(r)$ recibe el nombre de función de correlación radial. La forma típica de las funciones $g(r)$ y $h(r)$ para un fluido está dada en la Fig. 6.1.

La importancia de las funciones $g(r)$ y $h(r)$ reside en el hecho de que pueden medirse directamente mediante experimentos de difracción de neutrones [4], [19] o de rayos X [19].

En efecto, si $I_0(\vec{k})$ es la intensidad de la radiación incidente y

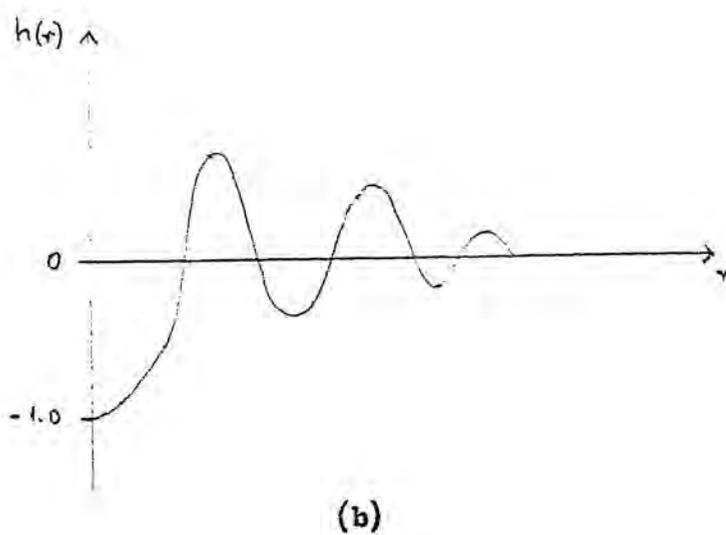
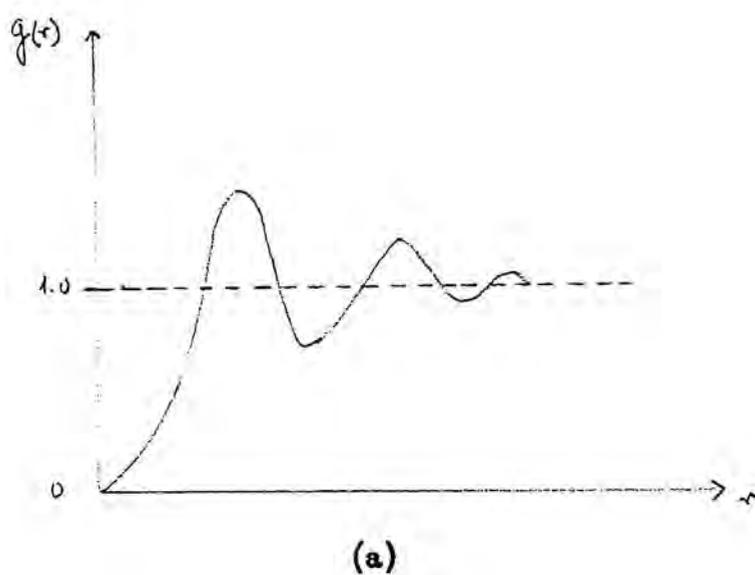


Fig. 6.1 .- Forma típica para un fluido de:
(a) La función de distribución radial.
(b) La función de correlación radial.

$i(\vec{k})$ es la parte relevante de la intensidad de la radiación difractada [12]; se llama factor de estructura a:

$$S_k \equiv i(\vec{k}) / I_0(\vec{k}). \quad (6.6)$$

A partir de S_k , la función de correlación radial se puede calcular por [12], [19]:

$$h(r) = \frac{1}{2\pi\rho} \int (S_k - 1) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{k}, \quad (6.7)$$

fórmula que nos da $h(r)$ a partir de los datos experimentales.

Veamos cómo calculamos esta función para nuestro sistema unidimensional, partiendo de los datos de la simulación dinámica.

En un sistema unidimensional el cálculo de la función radial se realiza contando el número de partículas que se encuentran en un intervalo Δx a una distancia $\pm x$ de una partícula dada (Fig. 6.2)

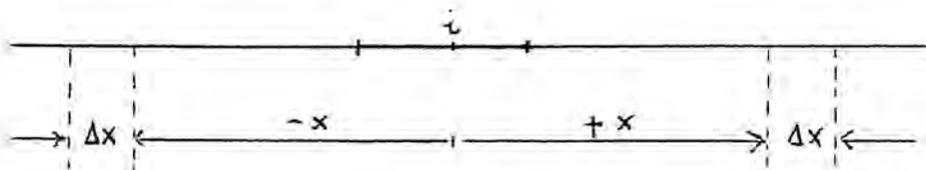


Fig. 6.2

y la definición (6.2) se puede escribir de la forma aproximada:

$$g_i(x) = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\Delta n_i(+x) + \Delta n_i(-x)}{2\Delta x}, \quad (6.8)$$

con $\rho = N/L$ el número medio de partículas por unidad de longitud,

$\Delta n_i(\pm x)$ es el número de partículas que se encuentran dentro del intervalo Δx a una distancia x de una partícula i de referencia.

Para obtener mejores resultados estadísticos y simular un promedio canónico, promediamos la ec. (6.8) para el conjunto de las N partículas:

$$g(x) = \frac{1}{2\rho N \Delta x} \left\{ \sum_{i=1}^N [\Delta n_i(+x) + \Delta n_i(-x)] \right\}. \quad (6.9)$$

El intervalo Δx escogido ha sido

$$\Delta x = 0.05 a_1$$

siendo a_1 el menor tamaño del sistema binario. Al ser Δx mucho menor que el tamaño de cualquier partícula del sistema, la contribución a

$\Delta n_i(\pm x)$ en (6.9) es:

$$\Delta n_i(\pm x) = \frac{\Delta l_i(\pm x)}{a(j)} \quad (6.10)$$

donde $\Delta l_i(\pm x)$ es el trozo de la varilla j de diámetro $a(j)$ que cae dentro del intervalo Δx (Fig. 6.3)

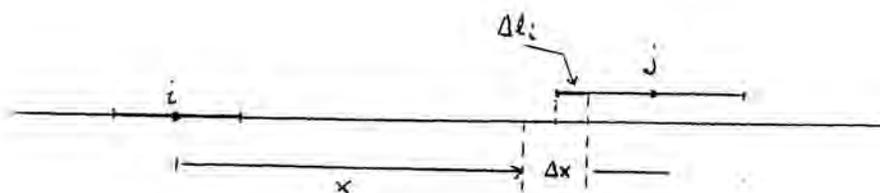


Fig. 6.3

En la Fig. 6.4 tenemos la gráfica de la función $g(x)$ para un sistema lineal de 1000 varillas duras iguales. En esta figura se observa claramente la gran probabilidad de encontrar una partícula a una distancia algo mayor que un diámetro de una partícula dada. Esta probabilidad va tendiendo a 1 conforme aumenta la distancia (comparar con la Fig. 6.1).

En la Fig. 6.5 (a) y (b) tenemos las gráficas de $g(x)$ para los sistemas con: (a) $m_2/m_1 = 1.05$ y (b) $m_2/m_1 = 1.2$. Vemos que existe una gran similitud entre estas funciones radiales, que corresponden a sistemas con pura diferencia de masas entre sus componentes. Aunque estas gráficas son bastante parecidas al caso de masas iguales (Fig. 6.4), la probabilidad de encontrar una partícula a una distancia aproximadamente igual al diámetro menor (de una partícula dada) es más pequeña. También en ambos casos $g(r)$ tiende a 1.

En la Fig. 6.6 tenemos las gráficas de la función radial para partículas con gran diferencia de masa: (a) $m_2/m_1 = 2$ y (b) $m_2/m_1 = 4$. En este caso se observa una disminución de la probabilidad de encontrar una partícula a una distancia del orden del menor diámetro a partir de una partícula dada.

En todos los casos la tendencia al valor 1 de $g(x)$, tarda en manifestarse, persistiendo un comportamiento oscilatorio con amortiguamiento débil. Esto es debido a la elevada densidad de los sistemas estudiados.

Estas gráficas son "instantáneas", en el sentido de que nos muestran la función de distribución radial en un instante dado de tiempo, sin que se haya hecho ningún tipo de promedio. Por ello con gráficas poco regulares pues

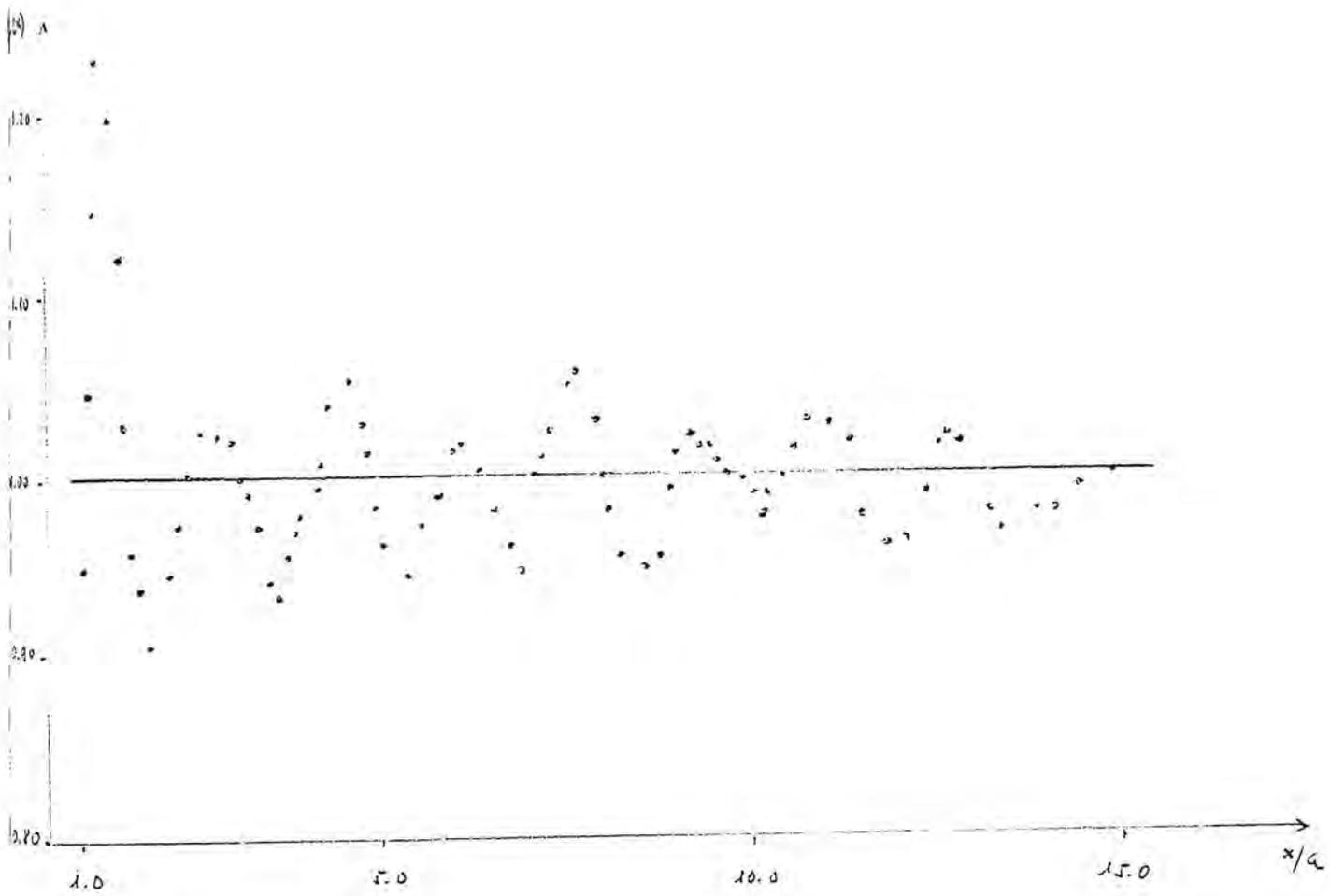


Fig. 6.4 .- Función de distribución radial para un sistema de varillas rígidas iguales.

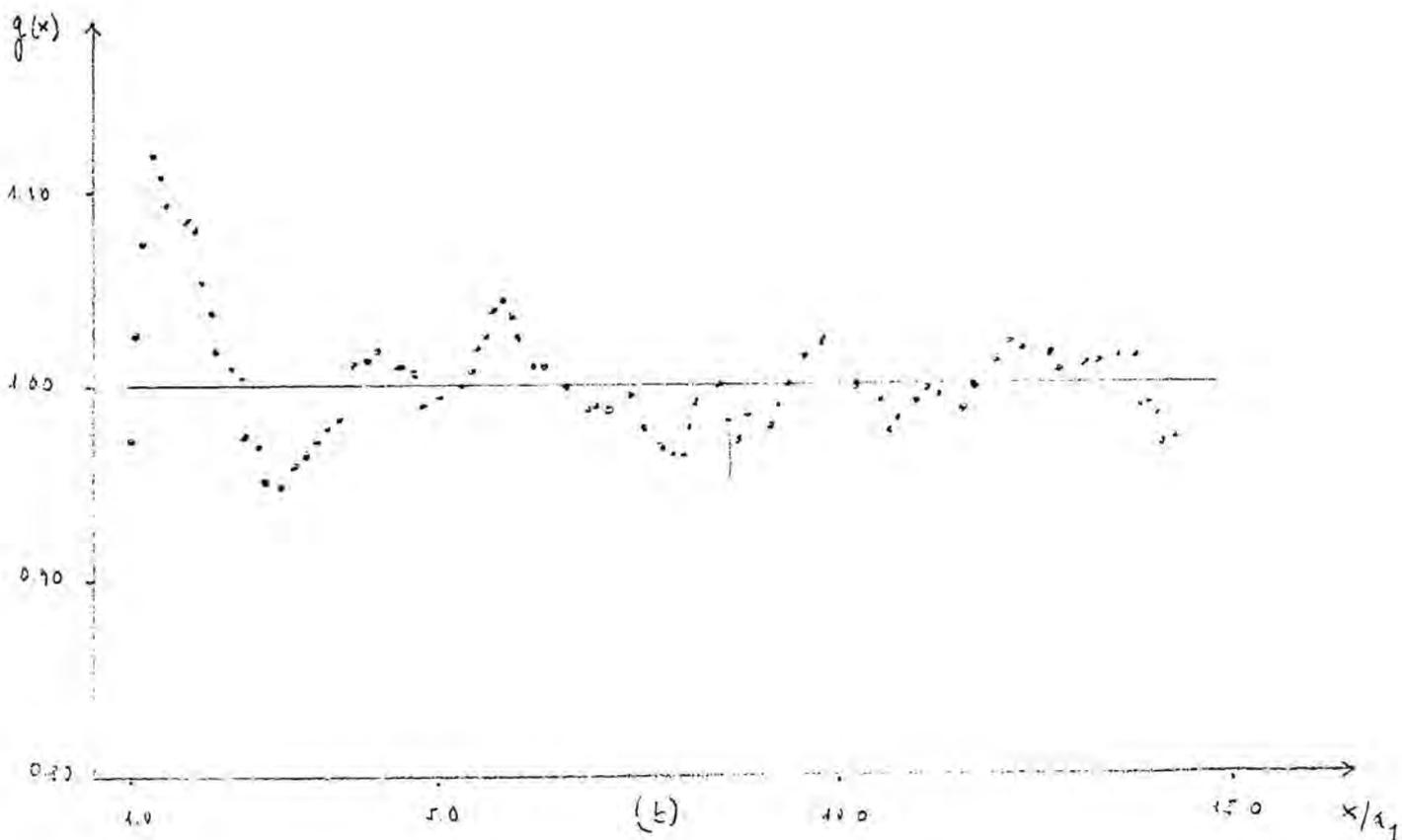
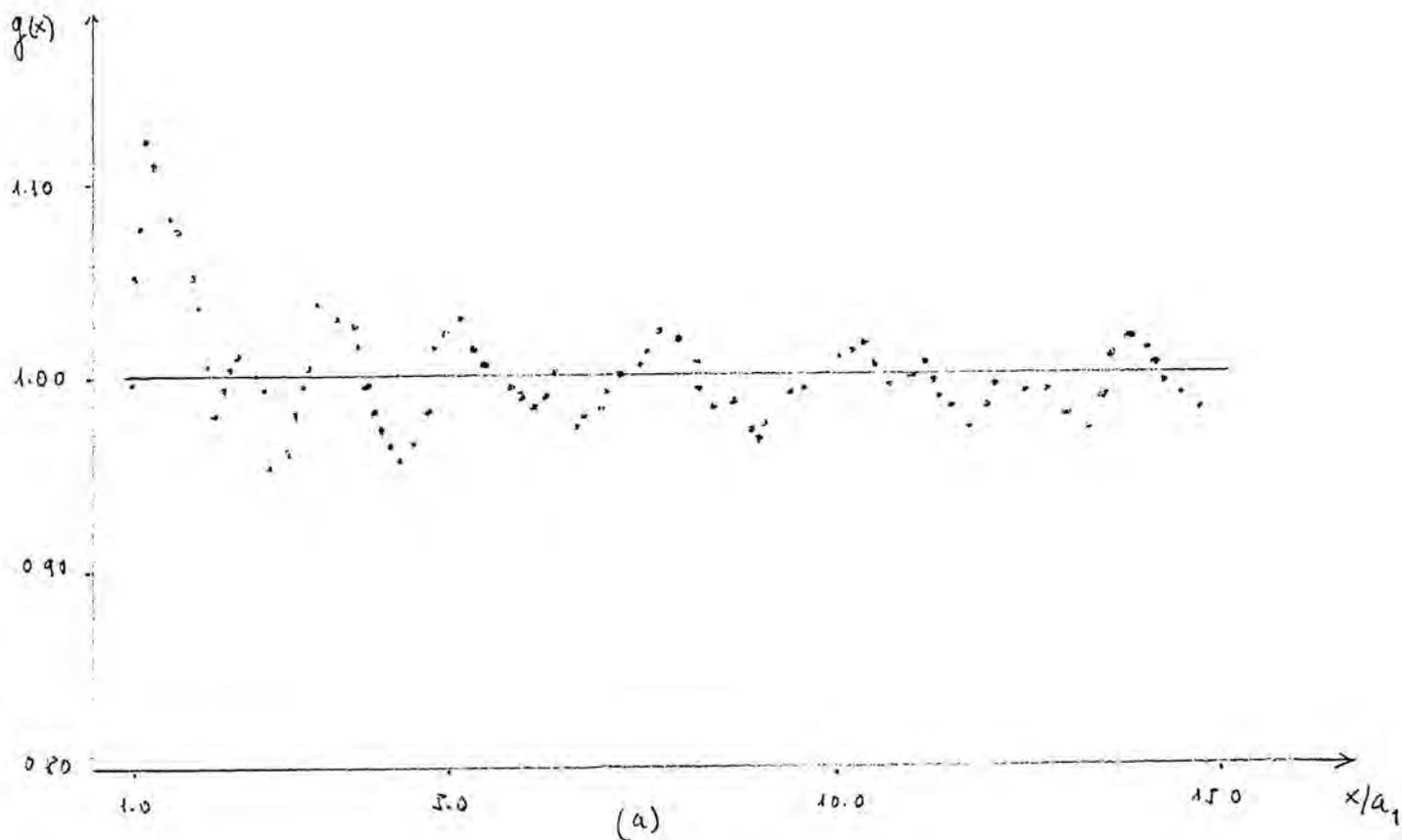


Fig. 6.5 .- Función de distribución radial para los sistemas con :
 (a) $m_2/m_1 = 1.05$; (b) $m_2/m_1 = 1.2$

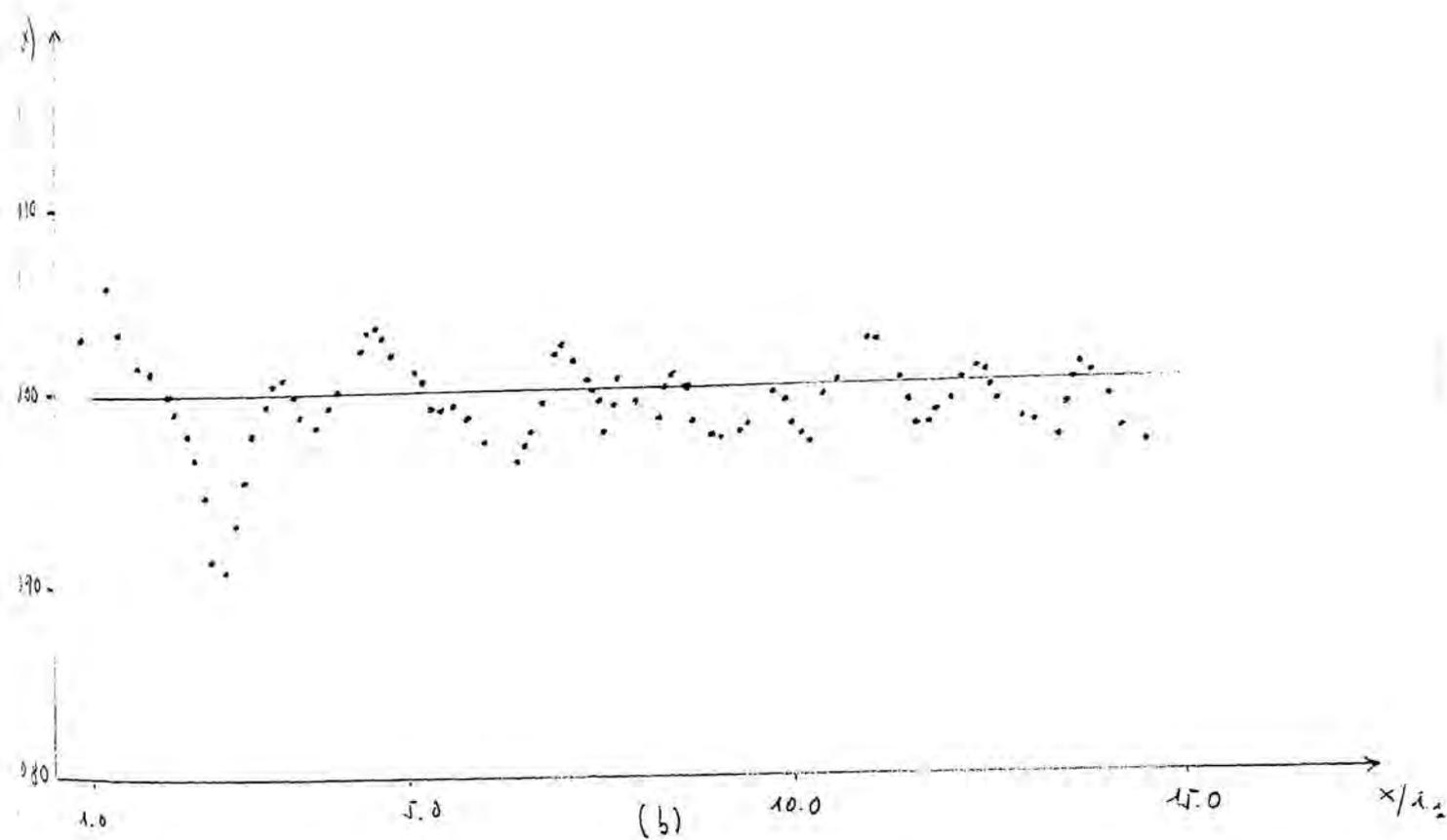
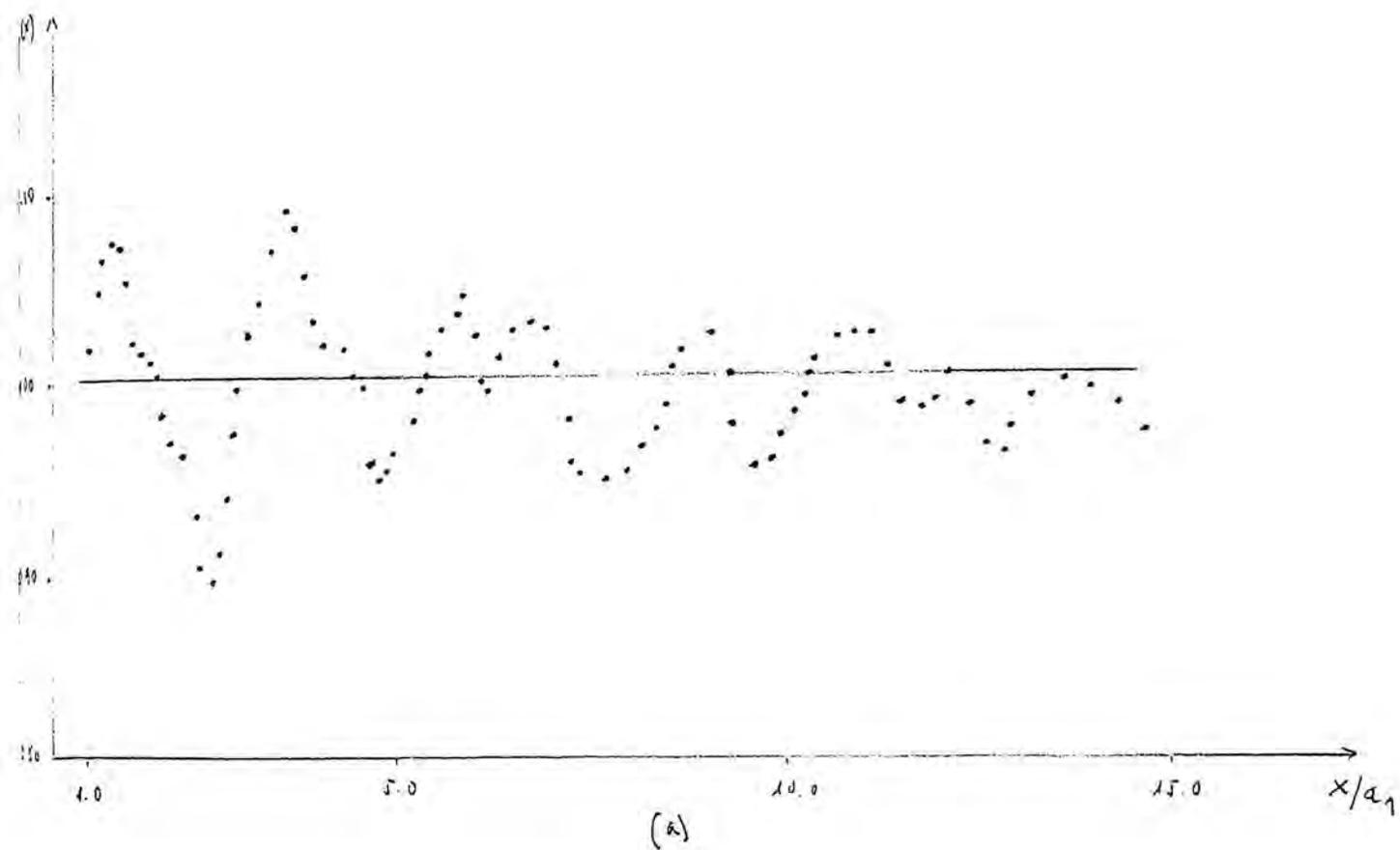


Fig. 6.6 .- Función de distribución radial, para los sistemas con :
 (a) $m_2/m_1 = 2$; (b) $m_2/m_1 = 4$

las fluctuaciones no están "matizadas". El momento escogido para hacer las gráficas ha sido cuando los sistemas han realizado un total de 100.000 colisiones. En este instante todos los sistemas están en el equilibrio, excepto el sistema para el cual $m_2/m_1 = 1.05$ (ver Secc. 4). Así la gráfica de $g(x)$ para este sistema (Fig. 6.5a) no es relevante pues está basada en la ec. (6.2) que da la definición de la función radial para sistemas que se encuentran en el equilibrio. Para los demás sistemas y debido a la Hipótesis Ergódica (Secc. 4), es posible realizar promedios temporales para dar gráficas más relevantes de la función radial pues se podrán suavizar las fluctuaciones. Esto también permite hacer cálculos cuantitativos más fiables.

En la Fig. 6.7 tenemos el promedio temporal en el equilibrio de la función radial $g(x)$ para los sistemas: (a) $m_2/m_1 = 2.2$; $m_2/m_1 = 2$; $m_2/m_1 = 4$. Se ha promediado sobre los valores de $g(x)$ en 15 instantes de tiempo distintos y no correlacionados, pues entre dos instantes de tiempo sucesivos el sistema ha realizado unas 10.000 colisiones en total. En estas gráficas promediadas se ven con mayor claridad las observaciones dadas anteriormente.

De los datos numéricos necesarios para la construcción de estas gráficas se pueden obtener algunas observaciones cuantitativas de interés. Una de ellas es la distancia promedio al origen a la que se encuentran los máximos de la función radial. Esto nos indicará la distancia promedio a la cual es más probable encontrar una partícula (a partir de una partícula dada que está en el origen). En efecto, la probabilidad de encontrar una partícula en una corona esférica de espesor dr a una distancia r de otra que se en-

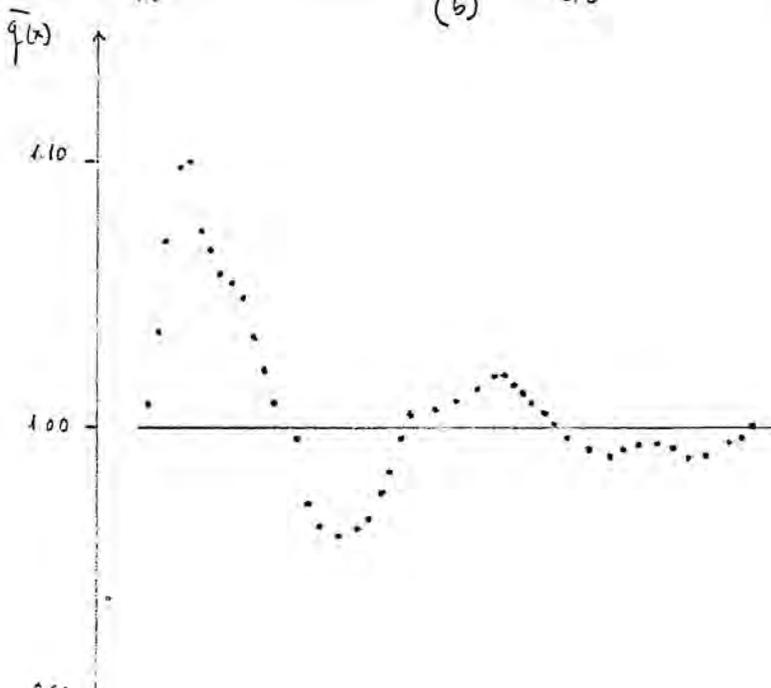
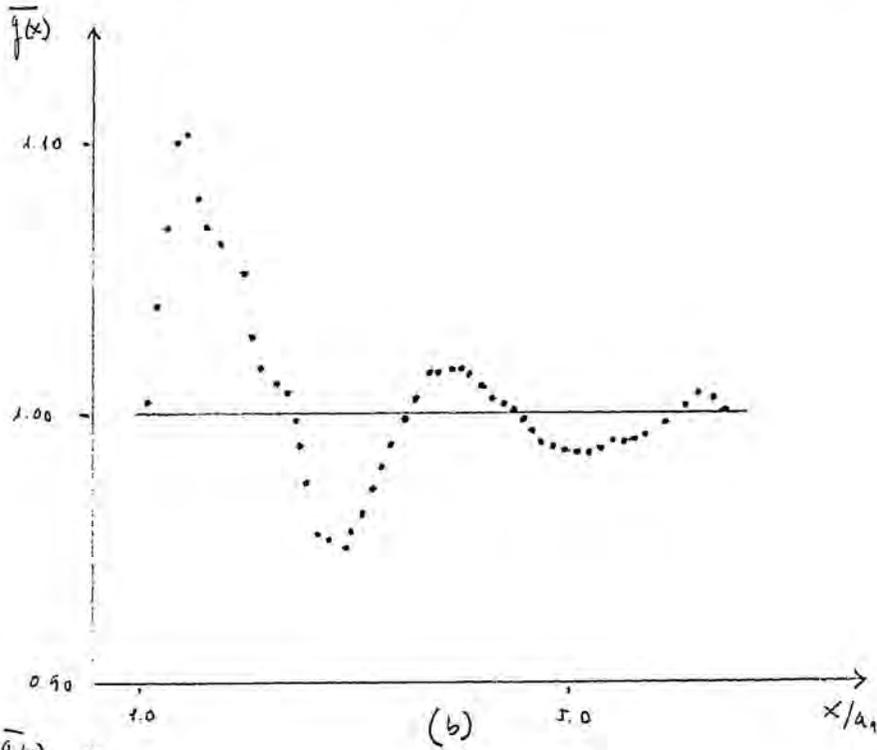
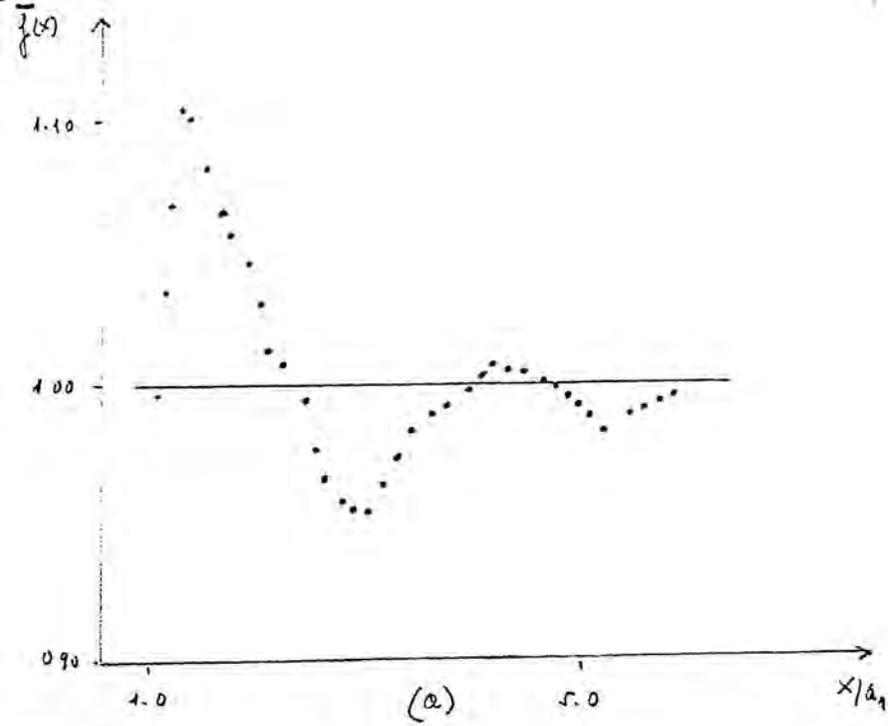


Fig. 6.7.—Gráficas de los promedios temporales de la fun. distribución radial en el equilibrio. (a) $m_2/m_1 = 1$;
 (b) $m_2/m_1 = 2$;
 (c) $m_2/m_1 = 4$.

cuentra en el origen, es:

$$4\pi\rho r^2 g(r) dr,$$

así pues los máximos de $g(r)$ indicarán los máximos de esta probabilidad.

Como el primer máximo de $g(r)$ es el máximo absoluto de esta función (ver Figs. 6.1, 6.6 y 6.7), la distancia más relevante de cara a encontrar una partícula será la distancia al primer máximo.

En la tabla 6.1, tenemos la distancia promedio a la que se encuentran el primer y segundo máximos de $g(x)$, para los sistemas de la Fig. 6.7.

Como puede observarse estas distancias son muy similares para los sistemas estudiados, pudiendo afirmar que a una distancia del orden de $1.5 a_1$

($a_1 =$ menor diámetro), desde una partícula dada, se tiene la máxima probabilidad de encontrar otra partícula.

m_2/m_1	Distancia al origen del primer máximo.	Distancia al origen del segundo máximo.
1.2	$1.4 a_1$	$4.2 a_1$
2	$1.5 a_1$	$4.0 a_1$
4	$1.5 a_1$	$4.4 a_1$

Tabla 6.1. - Distancia promedio al origen de la fun. de distribución radial en el equilibrio ($a_1 =$ menor diámetro).

Este valor de $1.5 a_1$ es significativo pues en los sistemas binarios estudiados el diámetro medio es precisamente $1.5 a_1$.

Como podemos observar en la Tabla 6.1., parece que la función de distribución radial es independiente de la razón de masas m_2/m_1 . Esta observación viene confirmada por la Fig. 6.8 en donde las gráficas de la función radial para distintos valores de m_2/m_1 son prácticamente iguales.

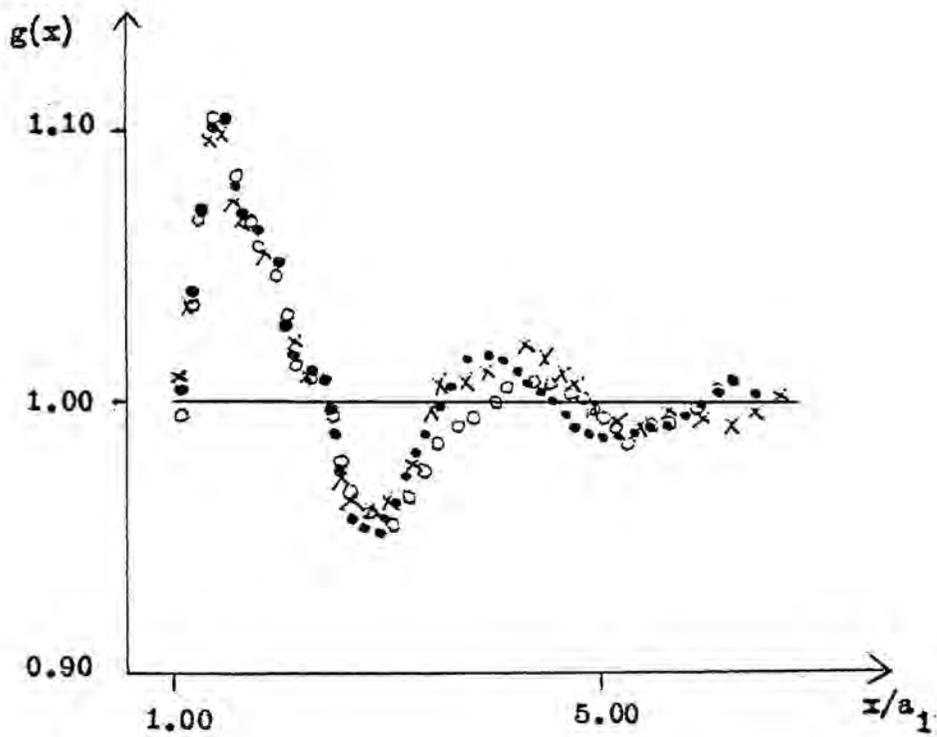


Fig 6.8.— Gráficas de los promedios temporales de la función de distribución radial en el equilibrio. $\circ = m_2/m_1 = 1.2$;
 $\bullet = m_2/m_1 = 2$; $\times = m_2/m_1 = 4$.

II.7. Referencias de la segunda parte

- 1 D.W. Jepsen, J. Math. Phys. 6,405(1965).
- 2 J.L. Lebowitz, J.K. Percus, Phys. Rev. 155,122(1967).
- 3 J.L. Lebowitz, J.K. Percus, J. Sykes, Phys. Rev. 171,224(1968).
- 4 L. Van Hove, Phys. Rev. 95,249(1954).
- 5 M. Bishop, B.J. Berne, J. Chem. Phys. 60,893(1974).
- 6 J.W. Haus, H.J. Raveché, J. Chem. Phys. 68,4969(1978).
- 7 M. Aizenman, J. Lebowitz, J. Marro, J. Stat. Phys. 18,179(1978).
- 8 B. Sutherland, Phys. Rev. 21,2134(1980).
- 9 B.J. Alder, T.E. Wainwright, J. Chem. Phys. 31,459(1959).
- 10 L. Navarro, J.M. Parra, Treballs Física 1(1981).
- 11 H.L. Frisch, J. Roth, B.D. Krawchuk, P. Sofinski, M. Bishop, Phys. Rev. 22,740(1980).
- 12 R. Balescu "Equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics", J. Wiley, N.Y. (1975).
- 13 Ya. G. Sinai, Russian Math. Surveys, 25(1970).
- 14 G. Casati, J. Ford, J. Comp. Phys. 20,97(1976).
- 15 J.L. Lebowitz, Hamiltonian flows and rigorous results in non-equilibrium statistical mechanics, in "Statistical Mechanics: Proceedings I.U.P.A.P. Conference, Chicago 1971" (S.A. Rice, K.F. Freed and J.L. Light, Eds.), University of Chicago Press, Chicago, 1972.
- 16 V.I. Arnold, A. Avez "Ergodic Problems of Classical Mechanics", Benjamin, N.Y. (1968).
- 17 J.L. Lebowitz, O. Penrose, Phys. Today (1973).
- 18 J. Marro, An. Fis., 76,5(1980).
- 19 G.H.A. Cole "The statistical Theory of Classical Simple Dense Fluids", Pergamon, Oxford (1967).
- 20 J. Biel, J. Marro, Rev. R. Acad. Ciencias, Madrid, 73,191(1979).

CONCLUSIONES

En esta parte resumimos las principales conclusiones de este trabajo:

1. Para un proceso de difusión generalizado, caracterizado por una matriz de difusión $D^{\mu\nu}(q)$ y por un drift $f^\mu(q)$, la correspondiente ecuación de Fokker-Planck admite un cambio de variables, que la transforma en una ecuación con difusión constante del tipo $\delta^{\mu\nu}$ si y solo si se anulan los tensores de curvatura, $R_{\mu\nu\alpha\beta}$, y de torsión, $T_{\nu\alpha}^\mu$, asociados a la matriz de difusión.

2. La matriz, $J_\lambda^\mu(q)$, del cambio de variables debe verificar la relación:

$$\partial_\mu J_\lambda^\mu = \Gamma_{\mu\nu}^\alpha J_\alpha^\lambda, \quad (1)$$

cuya solución formal es:

$$J_\nu^\lambda(q) = S_\nu^\alpha(q, q_0) J_\alpha^\lambda(q_0),$$

donde:

$$S_\nu^\alpha(q, q_0) \equiv \exp \left[\int_{q_0}^q \Gamma_{\mu\nu}^\alpha(x) dx^\mu \right]$$

Si la matriz de difusión, en las nuevas variables, es la matriz constante $A^{\sigma\rho}$, la solución general de (1) debe verificar que:

$$J_\mu^\sigma J_\nu^\rho A_{\sigma\rho} = D_{\mu\nu}(q) \quad (2)$$

3. La EFP transformada representa a un proceso de Ornstein-Uhlenbeck, que tiene solución exacta, si el drift transformado, $f'^{\mu}(q')$, es lineal. Para que esto suceda es suficiente que, en las variables originales, $\{q^{\mu}\}$, se verifique:

$$\nabla_{\sigma} \nabla_{\lambda} h^{\mu}(q) = 0, \quad (3)$$

siendo $h^{\mu}(q)$ el drift covariante y ∇_{α} la conexión riemanniana de la variedad.

4. Como caso particular de este formalismo, tenemos matrices de difusión de la forma:

$$D^{\mu\nu}(q) = \psi_{(\mu)}^{-1}(q_{\mu}) \delta^{\mu\nu} \quad (4)$$

con $\psi_{(\mu)}(q_{\mu}) > 0$ y diferenciable. En este caso el cambio de variables viene caracterizado por la matriz:

$$J_{\nu}^{\lambda} = A_{\beta}^{\lambda} [\psi_{(\beta)}(q_{\beta})]^{1/2} \delta_{\nu}^{\beta}$$

siendo A_{β}^{λ} una matriz regular y constante. En la matriz (4) están incluidos los modelos de Kubo y de Gompertz.

5. Si en algún sistema de coordenadas la Laplaciana que aparece en cualquier ecuación de Fokker-Planck:

$$\Delta \equiv D^{\mu\nu}(q) \nabla_{\mu} \nabla_{\nu}$$

se puede escribir de la forma:

$$\Delta = \delta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu$$

entonces la métrica de la variedad, en estas coordenadas, es necesariamente una constante.

6. Con el método presentado podemos comprobar, sin necesidad de integrar ningún cambio de variables, si cualquier EFP representa, en algún sistema de coordenadas, un proceso de Orstein-Uhlenbeck. Para ello basta comprobar si $D^{\mu\nu}(q)$ verifica las condiciones $R_{\mu\nu\alpha\beta} = 0$, $T_{\nu\alpha}^{\mu} = 0$ y si el drift $f^{\mu}(q)$ verifica la condición (3). En caso afirmativo podemos integrar, con seguridad de éxito, el cambio de variables caracterizado por una matriz J^{\wedge}_{\vee} del tipo (2) y la solución exacta de la EFP es la transformada de la solución de Orstein-Uhlenbeck.

7. Una EFP con difusión constante del tipo $\delta^{\mu\nu}$, también tiene solución exacta para drifts no lineales que verifiquen alguna de las condiciones:

$$\partial_\mu f^{\mu}(q) + f_\mu(q) \cdot f^{\mu}(q) = 0 \quad (5)$$

$$\partial_\mu f^{\mu}(q) + f_\mu(q) \cdot f^{\mu}(q) = a^2 q_\mu q^\mu + b \quad (6)$$

8. La clase drifts que verifican la ecuación (5) son de la forma:

$$f^{\mu}(q) = \frac{\partial^{\mu} \varphi(q)}{\varphi(q)},$$

siendo $\varphi(q)$ cualquier función armónica definida positiva.

En este caso la solución exacta y normalizada de la EFP, compatible con la condición inicial usual:

$$P(q, 0) = \delta^n(q_i - q_{0i}) \quad (7)$$

es:

$$P(q, t | q_0) = \frac{\varphi(q)}{\varphi(q_0)} \frac{\exp\left[-\sum_{i=1}^n (q_i - q_{0i})^2 / 4t\right]}{(z\sqrt{\pi t})^n}$$

9. Una de las clases de drifts que verifican la condición (6), tienen la forma:

$$f^n(q) = -aq^n + \frac{\partial^n \phi(q)}{\phi(q)},$$

siendo:

$$\phi(q) = \sum_{e_i} c_{e_1, \dots, e_n} \prod_{i=1}^n \phi_i^{e_i}(q_i), \quad (\phi_i^{e_i}(q_i) \neq 0), \quad (8)$$

con

$$\phi_i^{e_i}(q_i) = \left| \alpha_i F(e_i | \frac{1}{2} | a q_i^2) + \beta_i q_i F(e_i + \frac{1}{2} | \frac{3}{2} | a q_i^2) \right|.$$

La suma que aparece en (8) se extiende a todos los valores de los parámetros l_i que verifican la condición:

$$\sum_{i=1}^n l_i = \frac{1}{4} (n + b/a)$$

También verifican la condición (6) una clase de drifts con simetría esférica, de la forma:

$$\vec{f}(r) = \left[-ar + \frac{d\phi(r)/dr}{\phi(r)} \right] \frac{\vec{r}}{r}, \quad (\phi(r) \neq 0),$$

siendo:

$$\phi(r) = \left| \alpha F\left(\ell \left| \frac{n}{2} \right| ar^2\right) \right| \quad (9)$$

para cualquier valor de la dimensión n , y:

$$\phi(r) = \left| \alpha F\left(\ell \left| \frac{n}{2} \right| ar^2\right) + \beta r^{2-n} F\left(\ell+1-\frac{n}{2} \left| 2-\frac{n}{2} \right| ar^2\right) \right| \quad (10)$$

si $n = 1, 3, 5, 7, \dots$. En ambos casos:

$$\ell \equiv \frac{1}{4} (n + b/a).$$

En este caso la solución exacta y normalizada de la EFP, compatible con la condición inicial (7), es:

$$P(q, t | q_0) = \left(\frac{a}{2\pi} \right)^{n/2} \cdot \left[\frac{\phi(q)}{\phi(q_0)} \right] \\ \times \frac{\exp \left\{ -\left(\frac{b}{2} \right) t - a \sum_{i=1}^n (q_i - q_{0i} e^{-at})^2 / (1 - e^{-2at}) \right\}}{(\sinh at)^{n/2}},$$

con $\phi(q)$ dada por (8). En el caso de simetría esférica, vale esta misma solución con $\phi(r)$ dada por (9) ó (10).

10. La condición (5) de solubilidad de la ecuación de Fokker-Planck, se puede escribir intrínsecamente de la forma:

$$\text{div } \eta + \langle \eta, \eta \rangle = 0,$$

siendo η el drift intrínseco, definido en este caso por:

$$\eta = \int_{\mu}(\eta) d\eta^{\mu}.$$

La condición (6) tiene la forma intrínseca:

$$\operatorname{div} \eta + \langle \eta, \eta \rangle = a^2 \langle -d_0 W(0, q), -d_0 W(0, q) \rangle + b,$$

siendo $W(0, q)$ el valor de la función universo en el origen y en el punto q . El operador d es la diferencial exterior y el producto escalar:

$$\langle -d_0 W(0, q), -d_0 W(0, q) \rangle$$

es igual al cuadrado de la distancia del punto q al origen.

11. Como conclusión general de la primera parte de este trabajo, podemos pues afirmar que:

Hemos encontrado algunas clases de soluciones exactas para ecuaciones de Fokker-Planck cuya matriz de difusión $D^{\mu\nu}(q)$ tiene los tensores de curvatura y torsión nulos. En este caso la matriz de difusión es constante en algún sistema de coordenadas. La primera de estas clases de soluciones exactas corresponde a un drift lineal (ver conclusión nº 3). Las otras dos clases que hemos estudiado corresponden a drifts no lineales. Las condiciones que deben verificar los drifts de estas clases escritas en lenguaje intrínseco son:

$$\operatorname{div} \eta + \langle \eta, \eta \rangle = 0$$

y

$$\operatorname{div} \eta + \langle \eta, \eta \rangle = a^2 (\text{distancia al origen})^2 + b,$$

donde a y b son números reales cualesquiera.

Del estudio dinámico-molecular de sistemas unidimensionales con dos componentes, extraemos las siguientes conclusiones:

12. Todos los sistemas estudiados con $m_2 \neq m_1$ evolucionan hacia una distribución maxwelliana de velocidades, partiendo de una distribución inicial no-maxwelliana. Por lo tanto tienen buen comportamiento ergódico, al contrario que el caso $m_2 = m_1$.
13. La evolución hacia el equilibrio se hace tanto más lentamente cuanto menor es la diferencia de masas entre las partículas del sistema. Podemos afirmar que si $m_2/m_1 \rightarrow 1$, el tiempo de relajación tiende a infinito.
14. En un sistema aquí molecular con todas las velocidades iniciales iguales en módulo, al aumentar la razón de masa, m_2/m_1 , el tiempo de relajación disminuye. Sin embargo, a partir de un cierto valor de m_2/m_1 este tiempo no disminuye indefinidamente, ya que hay una menor transferencia de energía en el choque de una partícula de gran masa con una partícula de masa mucho menor, lo cual retarda el proceso de relajamiento.
15. Conforme aumenta la diferencia de masa entre las partículas del sistema, aumentan la dispersión de velocidades y las fluctuaciones.

16. Cuando la razón de masa está muy próxima a la unidad ($m_2/m_1 \gtrsim 1$), partiendo de una distribución inicial de la forma:

$$f_0(v) = \frac{1}{2} [\delta(v+v_0) + \delta(v-v_0)] \quad (11)$$

la evolución temporal se realiza mediante dos gaussianas, que centradas en los valores iniciales de las velocidades, van evolucionando hacia una sola gaussiana centrada en el valor medio de las velocidades iniciales.

17. Parece no existir el mismo comportamiento ergódico para sistemas binarios con $N = 2$, que con $N \gg 2$ ($N = 1000$). En concreto para el sistema binario con $m_2/m_1 = 3$ resulta que para $N = 2$ el sistema es periódico (no es ergódico) ([14], [16]) mientras que para $N = 1000$ el sistema tiene un buen comportamiento ergódico.
18. Todos los sistemas binarios estudiados verifican el Teorema H de Boltzmann, lo cual da una comprobación cuantitativa de que evoluciona al equilibrio.
19. El valor de la función $H(t)$ en el equilibrio es prácticamente igual para todos los sistemas estudiados; lo que está de acuerdo con la realidad, pues el valor de $H(t)$ en el equilibrio es proporcional a la entropía del sistema y la entropía no depende de la diferencia de masa.

20. En todos los sistemas binarios estudiados la variación temporal de $H(t)$, antes de alcanzar el equilibrio, se ajusta bastante bien a una relación potencial decreciente de la forma:

$$H(t) = -a \left(t/t_0 \right)^b \quad (12)$$

Además parece que la relación t_0^b es constante para todos los sistemas estudiados.

21. Los tiempos de relajación al equilibrio calculados a partir de la ec. (12) coinciden apreciablemente con los tiempos de relajación reales. Confirmando cuantitativamente la conclusión nº 13 en el sentido de que el tiempo de relajación aumenta apreciablemente con la diferencia de masa.

22. La función de autocorrelación de la velocidad de las partículas de masa menor, $\psi_1(t)$, decae más rápidamente que la función de autocorrelación exacta de masas iguales, $\psi_{\text{exac}}(t)$. Este decrecimiento se acentúa al aumentar la diferencia de masa.

23. La función de autocorrelación de la velocidad de las partículas de masa mayor $\psi_2(t)$, decae más lentamente que $\psi_{\text{exac}}(t)$.

24. En todos los sistemas binarios estudiados, la variación temporal de la función de autocorrelación de la velocidad es exponencial decreciente:

$$\psi_i(t) \sim e^{-\alpha_i t} \quad (i=1,2), \quad (13)$$

tanto para las partículas grandes como pequeñas.

25. En todos los sistemas estudiados la relación entre el tiempo de relajación τ_i de la función de autocorrelación de la velocidad y la masa reducida $\mu = m_1 \cdot m_2 / (m_1 + m_2)$ parece ser una relación lineal de la forma:

$$\tau_i = a_i \mu + b_i \quad , \quad (i=1,2), \quad (14)$$

con $a_1 > 0$, $b_1 < 0$ y $a_2 < 0$, $b_2 > 0$. La masa reducida para la cual $\tau_1 = \tau_2$ (masas iguales) es $\mu = 0.59$, algo distinta a la que correspondería al sistema de masas iguales: $\mu = 0.50$ (con $m_1 = 1$). Esta discrepancia puede ser debida a la aparición de discontinuidades cuando $m_1 = m_2$.

26. Con los datos disponibles parece que la relación entre el coeficiente de difusión D_i ($i = 1,2$) y la masa reducida, μ , también es lineal:

$$D_i = \alpha_i \mu + \beta_i \quad , \quad (i=1,2), \quad (15)$$

con $\alpha_1 < 0$, $\beta_1 > 0$ y $\alpha_2 > 0$, $\beta_2 < 0$. En este caso se tiene que

$D_1 = D_2$ (masas iguales) cuando $\mu = 0.496$, que prácticamente coincide con el valor de μ para masas iguales (0.5).

27. En todos los sistemas binarios estudiados la función de distribución radial $g(x)$ presenta el típico comportamiento "oscilatorio amortiguado".

28. También en todos los casos se observa la tendencia a los valores asintóticos:

$$\lim_{x \rightarrow 0} g(x) = 0 \quad ; \quad \lim_{x \rightarrow \infty} g(x) = 1$$

29. En los sistemas que están en el equilibrio, a una distancia del orden de un diámetro medio desde una partícula dada, se tiene la máxima probabilidad de encontrar otra partícula. En cualquier caso, $g(x)$ y, por tanto, el estado de equilibrio, es independiente de m_2/m_1 .