



UNIVERSITAT^{DE}
BARCELONA

Aplicaciones de la dinámica de Fokker-Planck

José María Sancho Herrero



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.**



APLICACIONES DE LA DINAMICA DE FOKKER-PLANCK

Tesis Doctoral presentada en la
Facultad de Física de la
Universidad de Barcelona por
José María Sancho Herrero.

Barcelona, Marzo, 1.980

LUIS GARRIDO ARILLA, Catedrático Numerario de Física Matemática de la Facultad de Física de la Universidad de Barcelona

CERTIFICO : Que la presente memoria "Aplicaciones de la Dinámica de Fokker-Planck" ha sido realizada bajo mi dirección en el Departamento de Física Teórica de la Universidad de Barcelona por Don José María Sancho Herrero y constituye su Tesis para optar al grado de Doctor en Física.

Y para que conste, en cumplimiento de la legislación vigente, presenta y apadrina ante la Facultad de Física de dicha Universidad la referida Tesis, firmando la presente en Barcelona, a diez de Marzo de mil novecientos ochenta.

Luis Garrido

A Araceli

Quiero expresar mi sincero agradecimiento al Profesor L. Garrido por la dirección de esta tesis y por su interés y ánimo en todo momento; y al Dr. M. San Miguel por sus sugerencias y colaboración en las publicaciones correspondientes de este trabajo.

También quiero dar las gracias al Dr. J. Marro por la lectura crítica del manuscrito de este trabajo, y a todos mis compañeros del Departamento de Física Teórica, en especial al Dr. P. Seglar, a J.M. Parra y a J. Pons.

Debo constar, especialmente, mi agradecimiento al Profesor R.M. Mazo de la Universidad de Oregón (USA) por sus orientaciones y correspondencia. Al Profesor P.C. Hemmer de la Universidad de Trondheim (Noruega) por introducirme en el problema de las ecuaciones de Smoluchowski exactas. Al Profesor R. Graham de la Universidad de Essen (Alemania) por mostrarme la importancia del trabajo de Stratonovich. A M. Hongler de la Universidad de Ginebra por las charlas sostenidas acerca de las ecuaciones exactamente resolubles y por su correspondencia.

du

NOTACION:

Este trabajo se divide en dos partes precedidas de un prólogo general, y seguidas de las conclusiones, perspectivas, apéndices y bibliografías. Cada parte consta de una introducción y varios capítulos o secciones, a su vez divididos en apartados. Las ecuaciones se numeran independientemente en cada capítulo. Cuando se citan ecuaciones de otro capítulo o parte se expresa explícitamente, así (I.2.25) indica la ecuación (25) del capítulo 2 de la parte primera. El indicativo de la Parte no se explicita dentro de la misma. Los apéndices se anotan con este mismo criterio pero usando letras para diferenciarlos entre sí. A fin de favorecer la autoconsistencia de cada parte o capítulo se han repetido las fórmulas más importantes, que creemos contribuirá a una mejor lectura del trabajo.



I N D I C E

	<u>Pág.</u>
MOTIVACION.	6
PARTE I: <u>PROCESOS MARKOVIANOS</u>	
INTRODUCCION.	20
1. ECUACION DE FOKKER-PLANCK Y DINAMICA DE <u>FOKKER-PLANCK</u>	
1.1. FORMALISMO OPERACIONAL	23
1.2. DINAMICA DE FOKKER-PLANCK.	30
2. <u>RESULTADOS EXACTOS</u>	36
2.1. ECUACIONES DE LANGEVIN LINEALES.	37
2.1,a) Movimiento Browniano en un fluido sometido a esfuerzo cortante.	44
2.1,b) Otros ejemplos físicos.	53
2.2. CASO NO LINEAL. MODELO DE KUBO	55
2.3. RELACION ENTRE UNA DINAMICA DETERMINISTA Y UNA DE FOKKER-PLANCK.	59
3. <u>DINAMICA CRITICA Y GRUPO DE RENORMALIZACION DINAMICO</u>	72
3.1. DINAMICA CRITICA Y ECUACION DE FOKKER- PLANCK.	82
3.1,a) Definiciones y Generalidades.	82
3.1,b) Punto Crítico e hipótesis dinámica.	85

	<u>Pág.</u>
3.1,c) Solución estacionaria de la ecuación de Fokker-Planck	89
3.1,d) Modelos.	91
3.2. DINAMICA CRITICA Y FORMALISMO OPERACIONAL .	97
3.2,a) Definiciones	97
3.2,b) Teoría Perturbativa.	102
3.2,c) Hipótesis Adiabática	111
3.2,d) Teorema de Fluctuación Disipación y Grupo de Renormalización estático. .	120
3.2,e) Aplicaciones	122
i) Modelos A y B	122
ii) Modelos C y D	137
 PARTE II: <u>PROCESOS NO MARKOVIANOS</u>	
INTRODUCCION	143
1. ECUACION DE FOKKER-PLANCK PARA SISTEMAS QUE OBEDECEN ECUACIONES DE LANGEVIN CON RUIDO <u>NO BLANCO.</u>	149
1.1. CASOS CON ECUACION DE FOKKER-PLANCK EXACTA.	152
1.1,a) Ecuaciones con arrastre lineal y difusión constante	152
1.1,b) Clase de modelos (no lineales) exac- tamente resolubles	154
1.1.b.i) Clase de modelos exactos con coeficientes independien- tes del tiempo	157

	<u>Pág.</u>
1.1.b.ii) Ecuaciones con arrastre nulo y difusión dependiente del tiempo.	160
1.1.b.iii) Ejemplos	163
1.1,c) Soluciones explícitas	165
1.2. DESARROLLO EN POTENCIAS DEL TIEMPO DE CORRE- LACION DE LA FUERZA ESTOCASTICA.	167
1.2,a) Límite ruido blanco	169
1.2,b) Aproximación en primer orden en el tiempo de correlación.	169
1.2,c) Aproximación en órdenes superiores en el tiempo de correlación	175
1.3. ESTUDIO DE LOS TERMINOS TRANSITORIOS EN LA ECUACION DE FOKKER-PLANCK.	175
1.4. DESARROLLOS RELACIONADOS CON LA PRESENTE DEDUCCION.	178
<u>2. TRANSICIONES DE FASE DE NO EQUILIBRIO</u>	184
2.1. CASO UNIDIMENSIONAL Y MODELOS EXACTOS.	188
2.1,a) Modelos exactos	191
2.1,b) Ejemplos de modelos exactos	194
2.1.b.i) Ecuación de Verhulst con término cuadrático fluctuante	195
2.1.b.ii) Un modelo bimodal	196
2.2. MODELOS APROXIMADOS.	199
2.2,a) Ecuación de Verhulst con término lineal fluctuante	199

	<u>Pág.</u>
2.2,b) Un modelo genético.	208
2.2.c) Oscilador paramétrico	213
<u>3. MOVIMIENTO BROWNIANO</u>	218
3.1. RESULTADOS EXACTOS. OSCILADOR ARMONICO.	223
3.1,a) Ecuación de Fokker-Planck	223
3.1,b) Oscilador sobreamortiguado.	232
3.1,c) " Crítico	236
3.1,d) " infraamortiguado.	237
3.1,e) Distribución inicial maxweliana para el momento	239
3.1,f) Movimiento Browniano de la partícula libre	242
3.2. RESULTADOS APROXIMADOS. POTENCIAL ANARMONICO	244
3.2,a) Correcciones a la ecuación de Smoluchowski.	244
3.2,b) Transitorios para las correcciones a la ecuación de Smoluchowski	251
3.2,c) Varias dimensiones.	254
3.3. MOVIMIENTO BROWNIANO EN ESPACIO FISICO CON RUIDO NO BLANCO.	257
3.4. COMENTARIOS.	261
CONCLUSIONES Y RESULTADOS	263
<u>PERSPECTIVAS</u>	273

APENDICES PARTE I

I.A. Transformación de la función de Correlación y Respuesta	277
I.B. Hipótesis Adiabática.	280
I.C. Transformada de Fourier de los Propagadores libres.	283
I.D. Integrales de las frecuencias	285

APENDICES PARTE II

II.A. Desarrollo de la función de correlación $\gamma(t,t')$	286
II.B. Evaluación de las derivadas temporales de la función Respuesta no promediada a tiempos iguales.	290
II.C. Explicitación de M_{pa} y de K_{pa}	292
II.D. Términos derivados de la derivada de orden tres	294
II.E. Cálculo de M_{ue}, K_{ume} y de la ecuación de Fokker-Planck para el Movimiento Browniano en tres dimensiones.	297
II.F. Ecuación de Fokker-Planck, con transitorios, para el sistema con memoria (3.85)	300
<u>REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS</u>	303

MOTIVACION

El estudio de la dinámica de un sistema físico macroscópico mediante sus ecuaciones microscópicas del movimiento tiene un interés innegable, pero posee también unas limitaciones muy poderosas. En primer lugar no siempre son bien conocidos sus componentes microscópicos ni las ecuaciones dinámicas que éstos obedecen. En segundo lugar, aun conociendo bien los componentes internos del sistema y sus ecuaciones del movimiento, el número de estas es tan elevado (del orden del número de Avogrado) que su tratamiento puede resultar imposible en la práctica. Por último, el hecho de que la observación sea siempre macroscópica nos asegura que bastan pocas variables (llamadas relevantes, "gruesas" o macroscópicas) para dar una buena descripción de los procesos que tienen lugar en esos sistemas. Esta última situación ha conducido a postular ecuaciones fenomenológicas del movimiento, para estas variables, basadas en principios físicos muy generales, como pueden ser: la conservación de masa, de la energía, del momento, etc; siendo la mayoría de ellas ecuaciones de continuidad.

Estas ecuaciones fenomenológicas consiguieron explicar muchos de los fenómenos observados, pero quedaba todavía por explicar las fluctuaciones completamente aleatorias que, por otra parte, también eran observadas. Dado el carácter completamente determinista de tales ecuaciones fenomenológicas, estaba claro que de ellas no se podía derivar ningún tipo de fenómeno probabilístico, como son las fluctuaciones.

Todas estas consideraciones han hecho que en los últimos años haya aumentado considerablemente el interés por explicar los problemas estadísticos referidos al equilibrio y al no equilibrio mediante ecuaciones diferenciales estocásticas para las variables relevantes del problema en estudio. El éxito de la descripción de los sistemas macroscópicos en términos de variables relevantes es debido principalmente a que el número elevado de grados de libertad que se han eliminado, que eran de variación rápida en el tiempo y corta en el espacio, se han tenido en cuenta dejando fluctuar a las variables relevantes.

Así pues, en analogía con la idea de Langevin para la dinámica de una partícula browniana, la dinámica de estos sistemas más complicados puede ser descrita mediante ecuaciones diferenciales de primer orden en el tiempo del tipo de la ecuación de Langevin en las que una parte es determinista y otra estocástica. Aunque existen otro tipo de descripciones nos limitaremos en este trabajo al estudio de las ecuaciones del tipo de Langevin.

En principio todas las propiedades macroscópicas, incluidas las fluctuaciones, tienen una justificación en las ecuaciones microscópicas de todos los grados de libertad del sistema. Un problema muy arduo es deducirlas a partir de ellas. Mori (1.965) desarrolló un formalismo, basado en técnicas de proyección operacional, que conduce a una ecuación diferencial estocástica en el sentido de que contiene una fuerza aleatoria cuyas propiedades solamente son conocidas en las cercanías del estado de equilibrio térmico.

Intentos para ampliar el tratamiento a situaciones lejos del equilibrio han sido realizados por diversos autores (Kawasaki y Gunton (1.973), Nordholm y Zwanzig (1.975), Grabert (1.977)). En particular este último ha desarrollado una ecuación exacta para las fluctuaciones alrededor de los valores medios dependientes del tiempo. En todos estos casos las ecuaciones resultantes tenían un carácter no markoviano señalado claramente por la aparición de términos con núcleos con memoria y fuerzas estocásticas con correlación no proporcional a una función delta. Llamaremos "ruidos no blancos" o "ruidos de color" a estas fuerzas estocásticas. En la práctica sin embargo, estas ecuaciones obtenidas, tipo Langevin, conllevan muchas dificultades técnicas relacionadas con la evaluación de los coeficientes de transporte que aparecen en tales ecuaciones.

Un tratamiento a un nivel intermedio, más detallado que la imagen macroscópica sin fluctuaciones pero menos detallado que ese complicado nivel que se sigue de un estudio microscópico exacto, parece, en principio, debería ser más provechoso. Y este es el camino que se sigue fundamentalmente hoy en día.

La manera de tener en cuenta las fluctuaciones en este nivel intermedio consiste en hacer aproximaciones acerca de las cantidades que aparecen en las ecuaciones deducidas por métodos proyectivos, pero reteniendo su correcta y fundamental estructura. Como ejemplo, destaquemos que para describir la dinámica de una partícula browniana en el seno de un fluido se parte de la ecuación de Newton

para dicha partícula y el efecto de las pequeñas partículas del fluido que actúan sobre ella se tiene en cuenta mediante una fuerza disipativa proporcional a la velocidad de la partícula y de una fuerza estocástica que depende de la temperatura del fluido.

Siguiendo esta manera de razonar, la aproximación más conocida es la de describir la dinámica de las variables relevantes por medio de un proceso continuo de Markov, siguiendo el modelo de las ecuaciones de Langevin, donde se toma que las fuerzas estocásticas son gaussianas y con propiedades de ruido blanco. Que un proceso estocástico real sea markoviano es una hipótesis simplificadora conveniente, pues permite obtener muchos resultados concretos mediante el uso de los métodos matemáticos de la teoría de los procesos de Markov (Stratonovich (1.963), Van Kampen (1.978), Santos (1.978)).

La equivalencia entre esta descripción y la correspondiente ecuación maestra, la ecuación de Fokker-Planck, es bien conocida y representa un concepto ampliamente usado en la descripción de estos fenómenos. Sin embargo, la justificación física de la aproximación de ruido blanco para la fuerza estocástica es a menudo dudosa y no bien comprendida. Puesto que existe una gran variedad de factores responsables de las fluctuaciones, pensamos que sería más satisfactorio que se tuviera en cuenta el carácter no markoviano o "coloreado" de las fuerzas estocásticas. Esto nos permitiría estudiar el efecto de la no "markovicidad" y también nos daría información sobre la validez de la

aproximación de tomar fuerzas estocásticas de ruido blanco, es decir, de la aproximación markoviana.

Pasamos a continuación a describir analíticamente estos conceptos de markovicidad y no markovicidad, ruido blanco y ruido coloreado, a fin de situar adecuadamente este trabajo de investigación.

Sea q una variable (unidimensional de momento, por sencillez) que puede tomar los valores $q_1(t_1), q_2(t_2), \dots, q_n(t_n)$ en los tiempos consecutivos $t_1 > t_2 > \dots > t_n$. Cuando no puede construirse una función $q(t)$ que determine el valor de q en cada instante t (conocida una condición inicial apropiada), sino que q puede tomar en cada instante un valor cualquiera dentro de un rango de variación, se dice que q es una variable aleatoria, y la sucesión de valores $\{q_i(t_i) | i=1, \dots, n\}$, o' $q(t)$ en breve, representa un proceso estocástico.

Sea $P(q_1, t_1 | q_2, t_2)$ la probabilidad condicional de que la variable q tome el valor q_1 en el instante t_1 si en el instante $t_2 < t_1$ tomó el valor q_2 . Si $P_2(q_1, t_1; q_2, t_2)$ es la densidad de probabilidad de que el proceso q tome el valor q_2 en el instante t_2 y el valor q_1 en el instante t_1 , entonces de estas definiciones se sigue la identidad (Regla de Bayes)

$$P_2(q_1, t_1; q_2, t_2) = P(q_1, t_1 | q_2, t_2) P_1(q_2, t_2) \quad (1)$$

donde $P_1(q_2, t_2)$ es la densidad de probabilidad de que la variable q tome el valor q_2 en el instante t_2 . De

manera similar se pueden definir densidades de probabilidad y probabilidades condicionadas para más sucesos.

Se dice que $q(t)$ es un proceso markoviano si para un conjunto de n tiempos correlativos $t_1 > t_2 > \dots > t_n$, se cumple que

$$P(q_1, t_1 | q_2, t_2; q_3, t_3; \dots; q_n, t_n) = P(q_1, t_1 | q_2, t_2) \quad (2)$$

O sea la probabilidad condicional de que en el instante t_1 tengamos el valor q_1 , sólo depende del último valor $q_2(t_2)$ y no de los valores anteriores. De aquí se sigue que la densidad de probabilidad de varios sucesos correlativos factoriza de la forma

$$P_n(q_1, t_1; q_2, t_2; \dots; q_n, t_n) = P(q_1, t_1 | q_2, t_2) P(q_2, t_2 | q_3, t_3) \dots P(q_{n-1}, t_{n-1} | q_n, t_n) P_1(q_n, t_n) \quad (3)$$

Por lo tanto un proceso de Markov queda completamente definido si conocemos la densidad de probabilidad de un suceso y la probabilidad condicional de dos sucesos correlativos temporalmente, mientras que un proceso aleatorio no markoviano requiere el conocimiento de todas las probabilidades $P_1, P_2, P_3 (q_1, t_1; q_2, t_2; q_3, t_3)$, etc.

A partir de estas definiciones se llega (Stratonovich (1.963), Haken (1.975), entre muchos otros) a la siguiente ecuación estocástica (o cinética) para la densidad de probabilidad de un suceso

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \left(-\frac{\partial}{\partial q} \right)^s (K_s(q) P(q,t)) \quad (4)$$

donde

$$K_s(q) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\langle (q(z) - q)^s \rangle}{\tau} \quad (5)$$

que suele conocerse como desarrollo de Kramers (1.940) - Moyal (1.949).

Por otra parte, los procesos markovianos están íntimamente ligados a ciertos procesos estocásticos representados por la función $\zeta(t)$ que aparece en las ecuaciones diferenciales estocásticas del tipo de Langevin y que tienen la siguiente forma

$$\dot{q}(t) = V(q(t)) + g(q(t))\zeta(t) \quad (6)$$

En estos casos las funciones de correlación de la fuerza estocástica $\zeta(t)$ son proporcionales a funciones deltas en la diferencia de tiempos (Stratonovich (1.963), Arnold (1.974)). Son principalmente importantes, por su sencillez en el tratamiento, aquellos procesos $\zeta(t)$ que son gaussianos, pues en este caso todos los términos $K_s(q)$ con $s > 2$ son nulos y (4) se reduce a

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q} (k_1(q) P(q,t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} k_2(q) P(q,t) \quad (7)$$

que es la bien conocida ecuación de Fokker-Planck o ecuación de difusión (en adelante el factor $1/2$ estará siempre incluido en $K_2(q)$).

A partir de (6) se deducen, como más adelante se verá,

los coeficientes $K_s(q)$ que en general pueden depender explícitamente del tiempo pero en el caso especial de que $\zeta(t)$ contenga toda la dependencia explícita en el tiempo de la ecuación (6) y además sea estacionario, entonces estos coeficientes son constantes.

A este proceso $\zeta(t)$ se le llama comunmente ruido blanco (seguimos a la descripción markoviana de (6)) pues por ser delta correlacionado la transformada de Fourier de su función de correlación es constante, igual que el espectro de la luz blanca. Si además se toma gaussiano y de media nula, basta para su descripción conocer su función de correlación, que es

$$\langle \zeta(t) \zeta(t') \rangle = 2D \delta(t-t') \quad (8)$$

donde el promedio $\langle \dots \rangle$ está tomado sobre la densidad de probabilidad gaussiana del proceso $\zeta(t)$, que a continuación discutiremos con un poco más de extensión, relacionándolo con otros procesos estocásticos conocidos.

Los procesos markovianos y gaussianos más famosos son: el proceso de Wiener, el proceso de Orstein-Uhlenbeck y el proceso de Langevin o ruido blanco gaussiano. El proceso de Wiener describe la posición de una partícula browniana en una dimensión, y está caracterizado por la densidad de probabilidad (Van Kampen, 1.978)

$$P_1(x,t) = (4\pi Dt)^{-1/2} \cdot \exp\left\{-\frac{x^2}{4Dt}\right\} \quad (9)$$

y por la probabilidad condicionada

$$P(x_1, t_1 | x_2, t_2) = (4\pi D(t_1 - t_2))^{-1/2} \cdot \exp\left\{-\frac{(x_1 - x_2)^2}{4D(t_1 - t_2)}\right\} \quad (10)$$

A partir de las cuales podemos calcular su función de correlación mediante

$$\langle X_1(t_1) X_2(t_2) \rangle = \int dx_1 dx_2 x_1 x_2 P(x_1, t_1 | x_2, t_2) P_1(x_2, t_2) = 2Dt_2 ; t_1 > t_2 \quad (11)$$

El proceso de Orstein-Uhlenbeck describe la velocidad de una partícula browniana en una dimensión, y viene representado por la densidad de probabilidad

$$P_1(p, t) = (2\pi D/\lambda)^{-1/2} \cdot \exp\left\{-\frac{p^2}{2D/\lambda}\right\} \quad (12)$$

y por la probabilidad condicionada

$$P(p_1, t_1 | p_2, t_2) = \left(2\pi \frac{D}{\lambda} (1 - e^{-2\lambda(t_1 - t_2)})\right)^{-1/2} \cdot \exp\left\{-\frac{(p_1 - p_2 e^{-\lambda(t_1 - t_2)})^2}{2\frac{D}{\lambda}(1 - e^{-2\lambda(t_1 - t_2)})}\right\} \quad (13)$$

Si hacemos uso de la definición (11) podemos obtener que para este proceso la correlación es

$$\langle p_1(t_1) p_2(t_2) \rangle = \frac{D}{\lambda} e^{-(t_1 - t_2)\lambda} \quad (14)$$

El proceso de Langevin $\zeta(t)$ o ruido blanco gaussiano no es más que el límite del proceso de Orstein-Uhlenbeck

para $p(t) = \lambda^{-1} \dot{z}(t)$ y $\lambda \rightarrow \infty$, en cuyo límite (14) se convierte en (8).

En función de este último proceso es fácil ahora expresar las ecuaciones diferenciales que obedecen los procesos anteriores. Así el proceso de Wiener puede definirse por

$$\dot{w}(t) = z(t) \quad ; \quad w(0) = 0 \quad (15)$$

usándose habitualmente la variable w para representarlo, mientras que el proceso de Orstein-Uhlenbeck satisface la ecuación diferencial

$$\dot{p}(t) = -\lambda p(t) + z(t) \quad (16)$$

Ahora a partir de (5) y (7) es fácil obtener las ecuaciones de Fokker-Planck para (15) y (16) que conducen a los resultados (9) - (10) y (12) - (13) respectivamente. Hemos visto pues las relaciones que existen entre estos tres procesos y que el proceso de ruido blanco gaussiano, es el límite del proceso de Orstein-Uhlenbeck

En los procesos reales, descritos por ecuaciones del tipo (6), la fuerza estocástica no tiene porque ser de ruido blanco (que es un proceso límite) sino que tendrá una función de correlación picuda con una cierta anchura temporal medida por τ , llamado tiempo de correlación y que coincide con λ^{-1} en el proceso de Orstein-Uhlenbeck, de tal manera que (8) se escribirá ahora en la forma

$$\langle z(t) z(t') \rangle = \gamma(t, t') \sim \frac{D}{\tau} \quad (17)$$

Para tiempos de correlación muy cortos, $\tau \rightarrow 0$, nos acercaríamos a la función delta de (8), como en (14).

Resumiento, (8) es una aproximación que tiene sentido si τ es un parámetro muy pequeño en comparación con cualquier intervalo de tiempo del sistema. En estas circunstancias se hace la sustitución (Stratonovich, 1.963)

$$\gamma(t, t') \longrightarrow 2 \delta(t - t') \int_0^{t \rightarrow \infty} \gamma(t, t') dt' \quad (18)$$

eligiendo la constante D como el valor de la integral. Esta sustitución convierte nuestro problema estocástico en uno markoviano. De no hacer esta aproximación el problema ya no es fácilmente tratable si bien puede encontrarse una ecuación estocástica similar a (4) para la densidad de probabilidad, lo cual no significa que $q(t)$ se haya reducido a un proceso de Markov, pues es imposible expresar, en este caso, la densidad de probabilidad de varios sucesos en la forma (3) (Stratonovich, 1.963; Hänggi, 1.978 a).

Con respecto a la hipótesis de "gaussianidad" de la fuerza estocástica $\zeta(t)$, tal como se supondrá siempre en este trabajo, es físicamente plausible como consecuencia de que a la multitud de factores desconocidos que influyen en ella podemos aplicarles el teorema del límite central (Haken, 1.977).

Un tratamiento matemático consistente para las ecuaciones del tipo (6), mediante un esquema perturbativo

no ha sido formulado hasta muy recientemente por Martin , Siggia y Rose (1.973). Este formalismo ha sido generalizado y ampliado por Deker y Haake (1.975), Phytian (1.975), Halperin, Hohenberg y Siggia (1.976), Enz y Garrido (1.976), Garrido y San Miguel (1.977, 1.978 a), San Miguel (1.980) entre otros, a diversos campos de la Física, en especial a los procesos estocásticos y entre ellos a los procesos críticos. Es de destacar las contribuciones al desarrollo de este formalismo de Enz y Garrido (1.976) para los sistemas que obedecen ecuaciones canónicas, y de Garrido y San Miguel (1.977, 1.978 a) y San Miguel (1.978) para los sistemas que obedecen ecuaciones estocásticas creando lo que actualmente se denomina la "Dinámica de Fokker-Planck".

En este trabajo de investigación seguiremos los desarrollos de estos últimos autores y nuestro objetivo será su aplicación tanto al tratamiento de Procesos Markovianos como a los Procesos no Markovianos, confirmando la fecundidad de dicho formalismo y su importancia en el tratamiento de los problemas estocásticos.

Este trabajo se ha de considerar en su doble aspecto de aplicación y fundamentación. Estará dividido en dos partes, la primera se referirá al estudio de ciertos problemas markovianos por medio del formalismo ya indicado y será principalmente una aplicación de los mismos en ecuaciones de Langevin lineales, no lineales y en fenómenos críticos. La segunda parte está dedicada al estudio de problemas no markovianos mediante la deducción de una ecuación maestra del tipo de Fokker-Planck, que corresponde

al aspecto de fundamentación, y a continuación se aplicará a problemas físicos de interés actual como son las transiciones de fase de no equilibrio y las ecuaciones de Smoluchowski del movimiento Browniano.

Se terminará este trabajo con una enumeración de los principales resultados obtenidos y con unos comentarios acerca de las posibles perspectivas que abre la línea de investigación que hemos desarrollado.

PARTE I : PROCESOS MARKOVIANOS

INTRODUCCION

En esta primera parte estudiaremos algunos procesos markovianos definidos todos ellos por ecuaciones del tipo de Langevin para las variables relevantes y donde las fuerzas estocásticas serán gaussianas, de media nula y función de correlación proporcional a una delta. Todos estos procesos serán estudiados desde el punto de vista del formalismo operacional o Dinámica de Fokker-Planck desarrollado por Garrido y San Miguel (1.977, 1.978 a) y San Miguel (1.978).

Estos problemas serán distintos entre sí, razón por la que se hará una introducción más detallada en sus capítulos respectivos, aunque el tratamiento será común a todos.

La aplicación de la Dinámica de Fokker-Planck a estos problemas tiene por objeto demostrar las ventajas de este formalismo en la resolución de ciertos problemas físicos de interés actual. Algunas de las aplicaciones serán la resolución de problemas concretos y otras la demostración de teoremas o fundamentación de teorías ya existentes, tal como describimos a continuación.

En el capítulo 1 haremos un resumen del formalismo operacional y su extensión a la Dinámica de Fokker-Planck, que tiene por objeto introducir los conceptos y principales resultados de esta teoría a fin de utilizarlos en las aplicaciones sucesivas.

El capítulo 2 está dedicado a aquellos resultados

exactos que hemos obtenido mediante la aplicación sistemática de la Dinámica de Fokker-Planck. Entre estos resultados destacamos la solución del sistema, más general posible, de ecuaciones lineales acopladas de Langevin sin las ambigüedades que existen en la solución standard conocida. Además se calcula explícitamente la función respuesta y la función de correlación de dos tiempos. Estos resultados generales servirán para resolver el problema de una partícula browniana en un fluido sometido a un esfuerzo cortante. Problema que resolveremos en espacio físico, mientras que hasta ahora sólo era conocida la solución para la posición de la partícula. También se expondrán otros problemas físicos de interés a los que se pueden aplicar estos resultados de forma inmediata.

A continuación saliéndonos del campo lineal, resolveremos un problema no lineal derivado del modelo de Kubo y cuyo tratamiento extenderemos a otros problemas no lineales que aparecen en los procesos biológicos.

Finalmente pondremos de manifiesto la equivalencia que existe entre la teoría perturbativa para una dinámica determinista y una de Fokker-Planck. La importancia de este resultado estriba en la unificación de dichas teorías y en ver que a partir del teorema de Wick de Enz y Garrido (1.976) para sistemas canónicos se puede deducir el Teorema de Wick de Garrido y San Miguel (1.977) para sistemas estocásticos.

El capítulo 3 está dedicado a la Dinámica Crítica y

el Grupo de Renormalización Dinámico, temas de considerable importancia hoy en día. Nuestro objetivo aquí será demostrar la aplicabilidad de la Dinámica de Fokker-Planck en este campo, especialmente en lo referente a la fundamentación de la teoría perturbativa diagramática utilizada por el Grupo de Renormalización y destacando principalmente la formulación de una Hipótesis Adiabática ausente hasta ahora en estos problemas.

El resumen de los resultados y las conclusiones se expondrá al final de la segunda parte.

1.- ECUACION DE FOKKER-PLANCK Y DINAMICA DE FOKKER-PLANCK

1.1.- Formalismo Operacional

En este capítulo inicial vamos a hacer un resumen de los formalismos sobre los que está basado el presente trabajo de investigación y que fueron introducidos por Martin, Rose y Siggia (1.973) y desarrollados, entre otros, por Enz y Garrido (1.976), Garrido y San Miguel (1.977, 1.978a) y San Miguel (1.978).

El punto de partida son las ecuaciones fenomenológicas del movimiento para un conjunto de variables macroscópicas, que también se suelen llamar relevantes o gruesas (Green, 1.952). Estas ecuaciones del movimiento son ecuaciones diferenciales de primer orden en el tiempo y su origen puede provenir de la proyección de ecuaciones microscópicas (Mori, 1.965) o ser puramente fenomenológico basado en ciertos criterios físicos (Holenberg y Halperin, 1.977). El objetivo que se persigue con estos formalismos es establecer una teoría perturbativa para el cálculo de las funciones termodinámicas de Green, es decir, las funciones de Correlación y Respuesta.

El estudio de la descripción dinámica de estos sistemas viene representado por las siguientes ecuaciones del movimiento para un conjunto de N variables gruesas

$$\dot{q}_\mu(t) = V_\mu(q_1(t), \dots, q_N(t), t) \quad \mu = 1, \dots, N \quad (1)$$

La solución de este sistema de ecuaciones diferenciales

dependerá de las condiciones iniciales, que tomaremos en $t_i = 0$, en la forma

$$q_\mu(t) = q_\mu(t; q_1, \dots, q_n) \quad (2)$$

$$q_\mu \equiv q_\mu(0) \quad (3)$$

El tratamiento de las ecuaciones (1) se simplifica mucho si introducimos los operadores $\hat{q}_\mu(t)$, conjugados de $q_\mu(t)$ y definidos sobre el espacio de las funciones $q_\mu(t)$. Estos operadores son conjugados en el sentido que su conmutador a tiempos iguales es

$$[\hat{q}_\mu(t), q_\nu(t)] = \delta_{\mu\nu} \quad (4)$$

, que es una igualdad operacional que actúa sobre una función a su derecha. En este formalismo, tanto $\hat{q}_\mu(t)$ como $q_\nu(t)$ son interpretados como operadores que actúan sobre funciones de $q_\mu(t)$ que a su vez dependen de los valores iniciales.

Estos operadores nos permiten introducir un Liouvilleiano asociado a (1)

$$L(\vec{q}(t), \hat{\vec{q}}(t), t) = \sum_\mu V_\mu(\vec{q}(t), t) \hat{q}_\mu(t) \quad (5)$$

donde empleamos notación vectorial para abreviar la dependencia en todas las variables $q_\mu(t)$. De acuerdo con (4) y (5) podemos expresar (1) en la forma

$$\dot{q}_\mu(t) = [L(\vec{q}(t), \hat{\vec{q}}(t), t), q_\mu(t)] \quad (6)$$

Puesto que (4) no determina al operador $\hat{q}_\mu(t)$, aunque se aprecia su carácter derivativo, tomaremos para este operador que en $t_i = 0$ tenga la expresión (San Miguel, 1.978)

$$\hat{q}_\mu \equiv \hat{q}_\mu(0) = \frac{\partial}{\partial q_\mu} \quad (7)$$

Con este valor inicial y para que se cumpla (4) a todo tiempo, basta que la evolución de $\hat{q}_\mu(t)$ se exprese en términos del Liouvilliano de la misma forma que en (7)

$$\dot{\hat{q}}_\mu(t) = [L(\vec{q}(t), \hat{q}(t), t), \hat{q}_\mu(t)] \quad (8)$$

Las ecuaciones (6), (7) y (8) determinan completamente el problema. La importancia de la introducción del operador $\hat{q}_\mu(t)$ radica en la posibilidad de definir de una manera natural la función respuesta a una fuerza externa, y establecer una teoría perturbativa bien fundamentada para el cálculo tanto de la función respuesta como de la función de correlación.

La parte probabilística de (1) estará en sus condiciones iniciales, así los promedios sobre ellas se realizarán mediante la introducción de la densidad de probabilidad $\rho(\vec{q}, 0)$ de las mismas. Si $A(\vec{q}(t))$ es una magnitud de la que queremos conocer su promedio estadístico, éste se definirá como

$$\langle A(\vec{q}(t)) \rangle = \int [dq] \rho(\vec{q}, 0) A(\vec{q}(t)) \quad (9)$$

y esta definición corresponde a la imagen de Heisenberg, o imagen operacional, en la que la evolución dinámica la

llevan los observables. La integración está definida sobre el dominio funcional de las variables q .

Sin embargo para estudiar las propiedades estadísticas de un sistema necesitamos conocer la respuesta del sistema a una fluctuación y la magnitud de dicha fluctuación. Esta última viene descrita por la función de correlación de dos observables a tiempos distintos y promediada sobre las condiciones iniciales. De acuerdo con (9) se define como

$$G_{\mu\nu}(t, t') \equiv \langle q_{\mu}(t) q_{\nu}(t') \rangle = \int [dq] \rho(\vec{q}, 0) \{ q_{\mu}(t) q_{\nu}(t') \} \quad (10)$$

La función respuesta a una perturbación del sistema viene dada por la variación en promedio de $q_{\mu}(t)$, respecto de un campo externo $z_{\nu}(t)$ añadido en (1) y acoplado a través de una función $g_{\mu\nu}(\vec{q}(t), t)$, y que expresamos en la forma

$$\bar{R}_{\mu\nu}(t, t') \equiv \left\langle \frac{\delta q_{\mu}(t)}{\delta z_{\nu}(t')} \right\rangle \quad (11)$$

Ahora las variables del nuevo sistema obedecen las ecuaciones (6) y (8) con un nuevo Liouvilliano (5)

$$L(\vec{q}(t), \hat{q}(t), t) = V_{\mu}(\vec{q}(t), t) \hat{q}_{\mu}(t) + g_{\mu\nu}(\vec{q}(t), t) z_{\nu}(t) \hat{q}_{\mu}(t) \quad (12)$$

donde hemos aplicado el convenio de Einstein para la suma de índices y, de momento, no decimos nada sobre la función $z_{\nu}(t)$. Pasando ahora a la imagen de interacción (Garrido y San Miguel, 1.978 a) y llamando $q_{\mu}^{\circ}(t)$, $\hat{q}_{\mu}^{\circ}(t)$

a los operadores cuya evolución está determinada por

$$L_0(\vec{q}, \hat{q}, t) = V_\mu(\vec{q}, t) \hat{q}_\mu, \text{ tenemos}$$

$$q_\mu(t) = S(0,t) q_\mu^0(t) S(t,0) \quad (13,a)$$

$$\hat{q}_\mu(t) = S(0,t) \hat{q}_\mu^0(t) S(t,0) \quad (13,b)$$

con el operador $S(0,t)$ definido por

$$S(0,t) = \bar{T} \exp \left\{ \int_0^t dt' g_{\mu\nu}(\vec{q}^0(t'), t') z_\nu(t') \hat{q}_\mu^0(t') \right\} \quad (14)$$

donde \bar{T} indica antiordenación temporal.

Derivando (13,a) respecto de $z_\nu(t')$ llegamos a

$$\frac{\delta q_\mu(t)}{\delta z_\nu(t')} = \left[\frac{\delta S(0,t)}{\delta z_\nu(t')} S(t,0), q_\mu(t) \right] \quad (15)$$

y teniendo en cuenta (14) obtenemos que (Garrido y San Miguel, 1.978 a)

$$\frac{\delta S(0,t)}{\delta z_\nu(t')} = \theta(t-t') S(0,t') g_{\rho\nu}(\vec{q}^0(t'), t') \hat{q}_\rho^0(t') S(t',t) \quad (16)$$

que sustituyendolo a (15) finalmente llegamos a

$$\frac{\delta q_\mu(t)}{\delta z_\nu(t')} = \theta(t-t') \left[g_{\rho\nu}(\vec{q}^0(t'), t') \hat{q}_\rho^0(t'), q_\mu(t) \right] \quad (17)$$

y tomando promedios sobre las condiciones iniciales obtenemos la función respuesta (11) buscada. La función de

acoplamiento $g_{\mu\nu}(\vec{q}, t)$, llamada cantidad canónica conjugada de $Z_\nu(t)$, tendrá un papel importante en el presente trabajo, y por lo tanto se indicará explícitamente su naturaleza en cada caso.

La definición (1) junto con (17) corresponde a la función respuesta total (no lineal) respecto de la fuerza perturbativa $Z_\nu(t)$ y que se utilizará principalmente en la Parte II de este trabajo. En la Parte I necesitaremos la función respuesta lineal respecto de otra fuerza externa, que llamaremos $f_\nu(t)$, y que a continuación definiremos.

Tomemos la siguiente ecuación del movimiento

$$\dot{\vec{q}}_\mu(t) = V_\mu(\vec{q}(t), t) + g_{\mu\nu}(\vec{q}(t), t) Z_\nu(t) + \Gamma_{\mu\nu} f_\nu(t) \quad (18)$$

el Liouvilliano del sistema es ahora (12) más el Liouvilliano de la nueva fuerza externa $f_\nu(t)$

$$L'(\vec{q}(t), \hat{\vec{q}}(t), t) = \Gamma_{\mu\nu} f_\nu(t) \hat{\vec{q}}_\mu(t) \quad (19)$$

ahora las variables $q_\mu(t)$, que evolucionan con el Liouvilliano (12), y las variables $q_\mu^f(t)$ que evolucionan con (12) más (19), están relacionadas mediante las ecuaciones equivalentes a (13,a) y (14)

$$q_\mu^f(t) = S^\dagger(0,t) q_\mu(t) S^\dagger(t,0) \quad (20,a)$$

$$S^\dagger(0,t) = \bar{T} \exp \int_0^t dt' \Gamma_{\mu\nu} f_\nu(t') \hat{\vec{q}}_\mu(t') \quad (20,b)$$

;desarrollando ésta última en primer orden y sustituyendo

en (20,a) obtenemos

$$q_{\mu}^t(t) = q_{\mu}(t) + \int_0^t \theta(t-t') [\Gamma_{\delta\nu} \hat{q}_{\delta}(t'), q_{\mu}(t')] f_{\nu}(t') dt' \quad (21)$$

y por lo tanto la función respuesta lineal viene dada por

$$\chi_{\mu\nu}(t,t') \equiv \left\langle \frac{\delta q_{\mu}^t(t)}{\delta f_{\nu}(t')} \right\rangle_{f \rightarrow 0} = \theta(t-t') \Gamma_{\delta\nu} \langle [\hat{q}_{\delta}(t'), q_{\mu}(t)] \rangle \quad (22)$$

Donde debemos resaltar la diferencia sustancial que existe entre (17) y (22). No sólo por el hecho de ser la primera (17) una función respuesta no lineal y la segunda (22) ser lineal, sino porque ambas funciones respuestas se refieren a fuerzas distintas. Si hacemos $\Gamma_{\delta\nu} = \Gamma_{\nu} \cdot \delta_{\delta,-\nu}$ entonces (22) se puede escribir como

$$\begin{aligned} \chi_{\mu\nu}(t,t') &= \theta(t-t') \Gamma_{\nu} \cdot \delta_{\delta,-\nu} \langle [\hat{q}_{\delta}(t'), q_{\mu}(t)] \rangle = \\ &= \Gamma_{\nu} \langle \bar{T} \{ q_{\mu}(t) \hat{q}_{-\nu}(t') \} \rangle = \Gamma_{\nu} R_{\mu,-\nu}(t,t') \end{aligned} \quad (23)$$

donde $R_{\mu\sigma}(t,t')$ es un propagador definido como

$$R_{\mu\sigma}(t,t') = \int [dq] \rho(\vec{q},0) \bar{T} \{ q_{\mu}(t) \hat{q}_{\sigma}(t') \} \quad (24)$$

que tiene la ventaja de tener un desarrollo perturbativo más simple (San Miguel, 1.978) que $\chi_{\mu\sigma}(t,t')$ y que se utilizará principalmente en el Capítulo 3 de esta primera parte.

1.2.- Dinámica de Fokker-Planck

Nuestro objetivo en este apartado consistirá en aplicar el formalismo descrito anteriormente cuando las variables relevantes obedecen unas ecuaciones del movimiento definidas a través de (12) pero donde $z_\nu(t)$ es una fuerza estocástica, gaussiana, de media nula y función de correlación

$$\langle z_\mu(t) z_\nu(t') \rangle = 2 D_{\mu\nu} \delta(t-t') \quad (25)$$

Para cada realización de $z_\nu(t)$ se tendrá una ecuación determinista a la que aplicaremos los resultados anteriores, y éstos tendrán sentido cuando se promedien sobre la densidad de probabilidad de las variables $z_\nu(t)$. Aparte de este promedio también se ha de considerar el promedio sobre las condiciones iniciales, por lo tanto los promedios estadísticos que aparezcan ahora se entenderán que son dobles, respecto de las variables $z_\nu(t)$ y respecto de las condiciones iniciales. Nuestro objetivo ahora es la eliminación del primer promedio de tal manera que quede incluido en la dinámica.

Para ello tomemos la ecuación que obedecen las variables $q_\mu(t)$ a partir de (12)

$$\dot{q}_\mu(t) = V_\mu(\vec{q}(t)) + g_{\mu\nu}(q(t)) z_\nu(t') \quad (26)$$

Para cada realización de $z_\nu(t)$, la trayectoria seguida por $q_\mu(t)$ tiene una forma complicada que podemos asimilarla a un punto representativo que se mueve a lo largo

del dominio de las variables q . Para un número grande de realizaciones de $z_\mu(t)$ obtendremos un número grande también de puntos representativos que se mueven de forma aleatoria. Estos puntos forman una especie de gas que se difunde y cuya densidad en cada punto es proporcional a la densidad de probabilidad (Stratonovich, 1.963), que es especificada en $t_i = 0$ por la distribución de las condiciones iniciales, $\rho(\vec{q}, 0)$.

La evolución dinámica de las variables $q_\mu(t)$ determinará la evolución de la densidad de puntos, y así $\rho(\vec{q}, t)$ especificará la densidad de los mismos en el tiempo t .

El conocimiento de $\rho(\vec{q}, t)$ es una manera de especificar el estado del sistema. Dado que $\rho(\vec{q}, t)$ describe la densidad de puntos representativos, cuando estos se mueven de acuerdo con (26), aquella ha de satisfacer una ecuación de continuidad que manifiesta la conservación del número de puntos representativos: (Kubo, (1.963); Van Kampen (1.975, 1.976); Santos (1.978))

$$\frac{\partial \rho(\vec{q}, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial q_\mu} (\dot{q}_\mu \rho(\vec{q}, t)) = - \frac{\partial}{\partial q_\mu} \left\{ (V_\mu(\vec{q}) + \sum_{\nu} g_{\mu\nu}(\vec{q}) z_\nu(t)) \rho(\vec{q}, t) \right\} \quad (27)$$

donde ahora q_μ indica la coordenada μ -ésima de un punto fijo q , y no la condición inicial.

La ecuación (27) se semeja mucho a la ecuación de Liouville pero no es la misma, pues nuestro fluido de puntos no tiene porque ser incomprensible. En el contexto

de los fenómenos estocásticos (27) es llamada la ecuación estocástica de Liouville, pero lo que nos interesa es hallar la ecuación de evolución de la densidad de probabilidad.

Sea $P(\vec{q}, t)$ la densidad de probabilidad de q determinada por (26), su relación con $\rho(\vec{q}, t)$ viene dada a través del lema de Van Kampen (1.975)

$$\langle \rho(\vec{q}, t) \rangle = P(\vec{q}, t) \quad (28)$$

donde el promedio es sobre la densidad de probabilidad de las fuerzas estocásticas $\zeta_\nu(t)$. Tomando ahora estos promedios en (27), tendremos

$$\frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial V_\mu(\vec{q})}{\partial q_\mu} P(\vec{q}, t) - \frac{\partial g_{\mu\nu}(\vec{q})}{\partial q_\mu} \langle \zeta_\nu(t) \rho(\vec{q}, t) \rangle \quad (29)$$

Para la obtención del primer término de la derecha se ha hecho uso de la independencia estadísticas de $\zeta_\nu(t)$ y q_μ pues en esta ecuación (29) q_μ es un punto fijo del espacio de las q , y no una variable que dependa de t ni de $\zeta_\nu(t)$. En cambio $\rho(\vec{q}, t)$ no puede salir del promedio pues depende funcionalmente de $\zeta_\nu(t)$ a través de (27).

Para realizar el promedio estadístico que hay en (29) haremos uso del teorema de Novikov (1.965), que nos asegura que si $\rho(\vec{q}, t)$ es un funcional de $\zeta_\nu(t)$ y ésta es una fuerza gaussiana de media nula y correlación (25) que corresponde a la aproximación de ruido blanco, pues estamos tratando un proceso markoviano, entonces el promedio buscado se

expresa como

$$\langle \zeta_\nu(t) \rho(\vec{q}, t) \rangle = \int_0^t 2D_{\nu\beta} \delta(t-t') \left\langle \frac{\delta \rho(\vec{q}, t)}{\delta \zeta_\beta(t')} \right\rangle \quad (30)$$

y teniendo en cuenta que $\rho(\vec{q}, t)$ puede expresarse como el promedio de $\delta(\vec{q}(t) - \vec{q})$ sobre la distribución $\rho(\vec{q}^0, 0)$ de las condiciones iniciales (Van Kampen, 1.975, 1.976)

$$\rho(\vec{q}, t) = \int d\vec{q}^0 \delta(\vec{q}(t) - \vec{q}) \rho(\vec{q}^0, 0) \quad (31)$$

la ecuación (30) puede escribirse en la forma

$$\langle \zeta_\nu(t) \rho(\vec{q}, t) \rangle = - \int_0^t 2D_{\nu\beta} \delta(t-t') \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \left\langle \frac{\delta q_\alpha(t)}{\delta \zeta_\beta(t')} \rho(\vec{q}, t) \right\rangle \quad (32)$$

Ahora la integral de la delta nos conduce al cálculo de la cantidad

$$\left. \frac{\delta q_\alpha(t)}{\delta \zeta_\beta(t')} \right|_{t' \rightarrow t} \quad (33)$$

que es la función respuesta, no promediada, respecto de la fuerza externa $\zeta_\beta(t')$ y cuyo cálculo de acuerdo con (17) es

$$\left. \frac{\delta q_\alpha(t)}{\delta \zeta_\beta(t')} \right|_{t' \rightarrow t} = g_{\alpha\beta}(\vec{q}(t)) \quad (34)$$

y sustituyendo en (32) llegamos finalmente a

$$\langle \zeta_\nu(t) \rho(\vec{q}, t) \rangle = - D_{\nu\beta} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} g_{\alpha\beta}(\vec{q}) P(\vec{q}, t) \quad (35)$$

donde se ha hecho uso de $\delta(\vec{q}(t) - \vec{q})$ en (31) para sacar $g_{\alpha\beta}(\vec{q}(t))$ fuera del promedio. También se ha utilizado (y se seguirá haciendo de la misma forma en todo este trabajo) que $\int_0^t \delta(t-t') dt' = \frac{1}{2}$ que corresponde a las reglas usuales del cálculo, y que conduce a la interpretación de Stratonovich (Arnold, 1.974).

Sustituyendo (35) en (29) obtenemos la ecuación de Fokker-Planck en la interpretación de Stratonovich (Arnold, 1.974)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} &= - \frac{\partial V_\mu(\vec{q})}{\partial q_\mu} P(\vec{q}, t) + \frac{\partial g_{\mu\nu}(\vec{q})}{\partial q_\mu} D_{\nu\beta} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} g_{\alpha\beta}(\vec{q}) P(\vec{q}, t) = \\ &= - \frac{\partial}{\partial q_\mu} \left(V_\mu(\vec{q}) + D_{\nu\beta} \left(\frac{\partial g_{\mu\nu}(\vec{q})}{\partial q_\alpha} \right) g_{\alpha\beta}(\vec{q}) \right) P(\vec{q}, t) + D_{\nu\beta} \frac{\partial^2}{\partial q_\mu \partial q_\alpha} g_{\mu\nu}(\vec{q}) g_{\alpha\beta}(\vec{q}) P(\vec{q}, t) \end{aligned} \quad (36)$$

Si escribimos ahora esta ecuación en términos de un operador L^+ que llamaremos Liouvilliano adjunto

$$\frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = L^+(\vec{q}(t), \hat{q}(t)) P(\vec{q}, t) \quad (37)$$

con

$$L^+(\vec{q}, \hat{q}) = \hat{q}_\mu \left(-V_\mu(\vec{q}) - D_{\nu\beta} \left(\frac{\partial g_{\mu\nu}(\vec{q})}{\partial q_\alpha} \right) g_{\alpha\beta}(\vec{q}) + \hat{q}_\alpha D_{\nu\beta} g_{\mu\nu}(\vec{q}) g_{\alpha\beta}(\vec{q}) \right) \quad (38)$$

obtendremos que la ecuación de Fokker-Planck corresponde

a la dinámica adjunta de una dinámica determinada por el Liouvilliano (San Miguel, 1.978)

$$L(\vec{q}, \hat{q}) = \left(V_{\mu}(\vec{q}) + D_{\nu\beta} \left(\frac{\partial g_{\mu\nu}(\vec{q})}{\partial q_{\alpha}} \right) g_{\alpha\beta}(\vec{q}) \right) \hat{q}_{\mu} + D_{\nu\beta} g_{\mu\nu}(\vec{q}) g_{\alpha\beta}(\vec{q}) \hat{q}_{\mu} \hat{q}_{\alpha} \quad (39)$$

y la dinámica generada por éste Liouvilliano se llamará de Fokker-Planck, que incluye en si misma el promedio sobre las realizaciones de $\vec{z}_{\nu}(t)$ a través de $D_{\mu\nu}$.

En el caso de fuerza estocástica aditiva, $g_{\mu\nu}(\vec{q}) = \delta_{\mu\nu}$ la expresión de (39) es más sencilla, al no aparecer el término suplementario del arrastre, llamado término espúreo,

$$L(\vec{q}, \hat{q}) = V_{\mu}(\vec{q}) \hat{q}_{\mu} + D_{\nu\mu} \hat{q}_{\nu} \hat{q}_{\mu} \quad (40)$$

La dinámica de las variables $q_{\mu}(t)$ y $\hat{q}_{\mu}(t)$ se define ahora de la misma forma que en el apartado anterior mediante las ecuaciones (6), (7) y (8) usando el Liouvilliano (39) o (40). Asimismo se definen las funciones de Correlación y Respuesta mediante las expresiones (10), (11), (17), (23), y (25), teniendo en cuenta en la definición de la función de Correlación que las variables $q_{\mu}(t)$ a tiempos distintos no conmutan.

La evolución de cualquier otro funcional de $q_{\mu}(t)$ y $\hat{q}_{\mu}(t)$, que no dependa explícitamente del tiempo, se expresa ahora en la forma

$$\frac{d}{dt} A(\vec{q}(t), \hat{q}(t)) = \left[L(\vec{q}(t), \hat{q}(t)), A(\vec{q}(t), \hat{q}(t)) \right] \quad (41)$$

siendo L (12) o (39) según el problema.

Finalizamos aquí la introducción de los formalismos que serán utilizados en los capítulos siguientes de este trabajo.

2.- RESULTADOS EXACTOS

En este capítulo estudiaremos algunos procesos markovianos que tienen solución exacta donde la idea fundamental y original en la resolución de los mismos está basada en considerar el término estocástico de la ecuación de Langevin como una perturbación y así introducirlo en la solución determinista mediante una imagen de interacción.

Empezaremos en el apartado 1 con la resolución de las ecuaciones de Langevin lineales acopladas más generales posibles. Los métodos empleados en la solución de este problema servirán para resolver las ecuaciones del movimiento y calcular los promedios estadísticos de una partícula browniana en un fluido sometido a esfuerzo cortante (San Miguel y Sancho, 1.979a) y también para estudiar otros problemas físicos semejantes.

En el apartado 2 resolveremos un problema no lineal correspondiente a un modelo análogo al de Kubo (1.963), resultado que extenderemos a otros modelos no lineales parecidos (Sancho y San Miguel, 1.979c).

En el apartado 3, y como aplicación general de estas técnicas, demostraremos (Garrido y Sancho, 1.978) la equivalencia entre las teorías perturbativas para una dinámica determinista y una dinámica de Fokker-Planck en el sentido de que ambas teorías perturbativas tienen exactamente los mismos diagramas, siendo su única diferencia la aparición del propagador estocástico (Garrido y San Miguel, 1.978a)

que se suma a la función de correlación determinista no perturbada. A la vez quedará demostrado que el Teorema de Wick para sistemas estocásticos (Garrido y San Miguel, 1.977) puede deducirse de manera natural a partir del Teorema de Wick para sistemas deterministas (Enz y Garrido, 1.976).

2.1.- Ecuaciones de Langevin Lineales

En este apartado obtendremos la solución exacta de un sistema lineal general de n dimensiones. Tal solución estará libre de los inconvenientes de la solución standard (Wang y Uhlenbeck, 1.945) y de esta forma demostraremos la utilidad del formalismo operacional de la Dinámica de Fokker-Planck (Garrido y San Miguel, 1.978a) especialmente deducido y apropiado para abordar ecuaciones de Langevin.

Los resultados obtenidos se aplicarán al caso de una partícula browniana en un fluido sometido a esfuerzo cortante (Shear flow) y a otros problemas físicos.

Empecemos por considerar el siguiente sistema de ecuaciones de Langevin

$$\dot{\vec{q}}_{T\mu}(t) = V_{\mu}(\vec{q}(t)) + \vec{z}_{\mu}(t) \quad (1)$$

donde $\vec{z}_{\mu}(t)$ es una fuerza estocástica gaussiana, de ruido blanco, con media nula y matriz constante de correlación, es decir

$$\langle \vec{z}_{\mu}(t) \rangle = 0 \quad (2)$$

$$\langle \vec{z}_{\mu}(t) \vec{z}_{\nu}(t') \rangle = 2D_{\mu\nu} \delta(t-t') \quad (3)$$

donde el promedio es sobre la función de distribución gaussiana de las $z_{\mu}(t)$.

Siguiendo el formalismo de la Dinámica de Fokker-Planck (Capítulo 1) se introducen los operadores $\hat{q}_{\mu}(t)$ de tal forma que los promedios estadísticos sobre las realizaciones de $z_{\mu}(t)$ estén ya incluidos en la nueva dinámica. Las ecuaciones del movimiento se escriben ahora en la forma

$$\dot{q}_{\mu}(t) = [L(\vec{q}(t), \vec{\hat{q}}(t)), q_{\mu}(t)] \quad (4)$$

$$\dot{\hat{q}}_{\mu}(t) = [L(\vec{q}(t), \vec{\hat{q}}(t)), \hat{q}_{\mu}(t)] \quad (5)$$

que se han de resolver con las condiciones iniciales

$$q_{\mu}(0) = q_{\mu} \quad (6)$$

$$\hat{q}_{\mu}(0) = \hat{q}_{\mu} = \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} \quad (7)$$

y donde el Liouvilliano de este problema es

$$L(\vec{q}(t), \vec{\hat{q}}(t)) = v_{\mu}(\vec{q}(t)) \hat{q}_{\mu}(t) + D_{\mu\nu} \hat{q}_{\mu}(t) \hat{q}_{\nu}(t) \quad (8)$$

Los promedios estadísticos se tomarán sobre las condiciones iniciales con la distribución de probabilidad $\rho(\vec{q}, 0)$. El valor medio, la función respuesta y la función de correlación vienen dados explícitamente por (1.9-11) (Garrido y San Miguel, 1.978a)

$$\langle q_{\mu}(t) \rangle = \int d\vec{q} \rho(\vec{q}, 0) q_{\mu}(t) \quad (9)$$

$$G_{\mu\nu}(t',t) = \langle q_{\mu}(t) q_{\nu}(t') \rangle = \int d\vec{q} \rho(\vec{q},0) \{ q_{\mu}(t) q_{\nu}(t') \}; \quad t' > t \quad (10)$$

$$\bar{R}_{\mu\nu}(t',t) = \left\langle \frac{\delta q_{\mu}(t')}{\delta z_{\nu}(t)} \right\rangle = \int d\vec{q} \rho(\vec{q},0) \{ \hat{q}_{\nu}(t) q_{\mu}(t') \}; \quad t' > t \quad (11)$$

En lo que sigue nos ocuparemos de obtener el valor exacto de (9)-(11), por medio de este formalismo, en el caso especial de que

$$V_{\mu}(\vec{q}(t)) = A_{\mu\nu} q_{\nu}(t) \quad (12)$$

donde $A_{\mu\nu}$ es una matriz constante. No supondremos, como habitualmente se hace en la literatura actual, que la matriz $A_{\mu\nu}$ es diagonalizable y que tiene autovalores no nulos. Estos dos aspectos no se incluyen en la solución standard de Wang y Uhlenbeck (1.945), pues en estos casos no sería aplicable.

Sea $B_{\mu\nu}$ la matriz que transforma $A_{\mu\nu}$ en su forma de Jordan $A'_{\mu\nu}$ por medio del siguiente cambio de coordenadas

$$Q_{\mu}(t) = B_{\mu\nu} q_{\nu}(t) \quad (13)$$

luego

$$A' = B A B^{-1} \quad (14)$$

Como consecuencia de (13) se han de introducir operadores $\hat{Q}_{\mu}(t)$ de la forma

$$\hat{Q}_{\mu}(t) = B^{-1}_{\nu\mu} \hat{q}_{\nu}(t) \quad (15)$$

Y de esta manera las nuevas variables cumplen las reglas de conmutación usuales

$$[\hat{Q}_\mu(t), Q_\nu(t)] = \delta_{\mu\nu} \quad (16)$$

El Liouvilliano transformado será

$$L(\vec{Q}(t), \vec{\hat{Q}}(t)) = A'_{\mu\nu} Q_\nu(t) \hat{Q}_\mu(t) + D'_{\mu\nu} \hat{Q}_\mu(t) \hat{Q}_\nu(t) \quad (17)$$

donde

$$D' = B D B^T \quad (18)$$

Las ecuaciones operacionales del movimiento (4) y (5) asociadas a (17) serán resueltas en dos etapas (Garrido y Sancho, 1.978). En la primera resolveremos el problema determinista, poniendo $D' = 0$, definido por

$$L_0(\vec{Q}(t), \vec{\hat{Q}}(t)) = A'_{\mu\nu} Q_\nu(t) \hat{Q}_\mu(t) \quad (19)$$

y en la segunda etapa el término estocástico del Liouvilliano

$$L_1(\vec{Q}(t), \vec{\hat{Q}}(t)) = D'_{\mu\nu} \hat{Q}_\mu(t) \hat{Q}_\nu(t) \quad (20)$$

será introducido por medio de una imagen de interacción.

Señalaremos por medio de un superíndice "0" los operadores cuya evolución está gobernada por L_0 y así, las ecuaciones (4) y (5) para el problema determinista serán entonces

$$\dot{Q}_\mu^\circ(t) = A'_{\mu\nu} Q_\nu^\circ(t) \quad (21)$$

$$\dot{\hat{Q}}_\mu^\circ(t) = -A'_{\nu\mu} \hat{Q}_\nu^\circ(t) \quad (22)$$

cuya solución la escribimos en la forma

$$Q_\mu^\circ(t) = \bar{A}_{\mu\nu}(t) Q_\nu \quad (23)$$

$$\hat{Q}_\mu^\circ(t) = \bar{A}_{\nu\mu}^{-1}(t) \hat{Q}_\nu \quad (24)$$

donde Q_ν, \hat{Q}_ν son las condiciones iniciales definidas como en (6) y (7), y $\bar{A}_{\mu\nu}(t)$ es obtenida fácilmente, debido a la forma de Jordan de $A'_{\mu\nu}$, resolviendo explícitamente (21) y (22) en cada caso particular. La matriz $\bar{A}_{\mu\nu}(t)$ viene en general definida por las ecuaciones

$$\dot{\bar{A}}(t) = A' \bar{A}(t) \quad (25)$$

$$\bar{A}(0) = \mathbb{1} \quad (26)$$

La solución completa $Q_\mu(t)$ está relacionada con $Q_\mu^\circ(t)$ por medio de la imagen de interacción (1.13) en la forma

$$Q_\mu(t) = S(0,t) Q_\mu^\circ(t) S(t,0) \quad (27)$$

donde $S(0,t)$ es el operador que introduce la interacción, en este caso la estocasticidad, y que viene definido por (1.14) (Garrido y San Miguel, 1.978a)

$$\begin{aligned} S(0,t) &= \bar{T} \exp \int_0^t L_1(\vec{Q}^\circ(z), \vec{\hat{Q}}^\circ(z)) dz = \\ &= \bar{T} \exp \int_0^t D'_{\mu\nu} \hat{Q}_\mu^\circ(z) \hat{Q}_\nu^\circ(z) dz = \exp \bar{D}_{\rho\sigma}(t) \hat{Q}_\rho \hat{Q}_\sigma; t > 0 \end{aligned} \quad (28)$$

donde \bar{T} es el operador de antiordenación temporal, irrelevante en este caso debido a la conmutatividad de $L_x(\vec{Q}^a(t), \vec{Q}^0(t))$ consigo mismo a diferentes tiempos, y además \bar{D} está definida por

$$\bar{D}_{\rho\sigma}(t) = \int_0^t \left(\bar{A}^{-1}(z) D' (\bar{A}^{-1}(z))^T \right)_{\rho\sigma} dz \quad (29)$$

Sustituyendo (29) en (27) y haciendo las conmutaciones llegamos a

$$Q_\mu(t) = \bar{A}_{\mu\beta}(t) \left\{ Q_\beta + 2 \bar{D}_{\beta\rho}(t) \hat{Q}_\rho \right\}$$

e invirtiendo (13), obtenemos la solución para las variables originales

$$q_\mu(t) = (B^{-1} \bar{A}(t))_{\mu\beta} \left\{ B_{\beta\alpha} q_\alpha + 2 (\bar{D}(t) B^{-1})_{\beta\alpha} \hat{q}_\alpha \right\} \quad (30)$$

Para el operador $\hat{Q}_\mu(t)$ podemos aplicar (27) obteniendo que no se ve afectado por $S(0,t)$, por lo tanto en las variables iniciales

$$\hat{q}_\mu(t) = (B^{-1} \bar{A}^{-1}(t) B)_{\nu\mu} \hat{q}_\nu \quad (31)$$

Las ecuaciones (30) y (31) son las soluciones exactas operacionales del problema lo que nos permitirá evaluar cualquier promedio estadístico a varios tiempos. La solución vendrá dada en función de matrices conocidas, B , $A(t)$ y $D(t)$ que dependerán de cada caso particular.

A partir (9), (10 y (11) el valor medio, la función de correlación y la función respuesta son calculadas y así obtenemos:

$$\langle q_{\mu}(t) \rangle = (B^{-1}A(t)B)_{\mu\nu} \langle q_{\nu} \rangle \quad (32)$$

$$G_{\mu\nu}(t',t) = (B^{-1}\bar{A}(t'))_{\mu\beta} \left\{ B G B^T + 2\bar{D}(t) \right\}_{\beta\alpha} (B^{-1}\bar{A}(t))_{\alpha\nu}^T \quad (33)$$

$$R_{\mu\nu}(t',t) = (B^{-1}\bar{A}(t')\bar{A}^{-1}(t)B)_{\mu\nu} \quad ; \quad t' > t \quad (34)$$

donde $\langle q_{\nu} \rangle$ y $G_{\mu\nu} = G_{\mu\nu}(0,0) = \langle q_{\mu} q_{\nu} \rangle$ están referidas a sus correspondientes valores en el tiempo inicial $t = 0$ y promediados con $\rho(\vec{q}, 0)$.

En el límite $t', t \rightarrow \infty$ con $t' - t$ finito obtenemos a partir de (33) y (34) las soluciones estacionarias, si las hubiere, independientes de las condiciones iniciales. Esta solución estacionaria existirá si $\text{Re}(\lambda_{\mu}) < 0$ para todo μ (λ_{μ} son los valores propios de $A_{\mu\nu}$), que no será nuestro caso pues permitiremos λ_{μ} nulos.

Si en (33) hacemos $t = t' \rightarrow \infty$ obtenemos, si existe este límite, la forma explícita de la llamada varianza. Si suponemos $A_{\mu\nu}$ diagonal, la varianza se puede expresar como

$$\sigma_{\mu\nu} = -B_{\mu\gamma}^{-1} \frac{2D_{\gamma\beta}}{\lambda_{\gamma} + \lambda_{\beta}} B_{\nu\beta}^{-1} \quad (35)$$

que aparece en la solución tradicional (Wang y Uhlenbeck, 1.945) de la ecuación de Fokker-Planck en la forma de

$$A\sigma + \sigma A^T = -2D \quad (36)$$

Debemos puntualizar que no existe solución, en general, de esta última ecuación cuando la matriz A tiene autovalores λ_μ nulos, como se puede ver en la solución formal (35). En tal caso no existe solución estacionaria para todas las variables y la tradicional solución de la ecuación de Fokker-Planck en función de σ definida por (36) carece de sentido. Sin embargo nuestra solución (33) es siempre válida pues existe la solución (23), (24) y por lo tanto (29) para cualquier λ_μ tendiendo a cero, tal como veremos en los apartados siguientes (fórmulas (50) y (104)).

El ejemplo más trivial que tiene valores λ_μ nulos es la partícula browniana libre, sobre la que luego volveremos a insistir.

2.1.a) Movimiento browniano en un fluido sometido a esfuerzo cortante (Shear flow).

Muchos trabajos en partículas coloidales emplean como punto de partida una ecuación convectiva de difusión o ecuación de Smoluchowski que es equivalente a una ecuación de Langevin para la posición de partículas brownianas (Hess y Klein, 1.978). Esta ecuación, que es una aproximación válida para elevado coeficiente de fricción o tiempos suficientemente grandes (Chandrasekhar, 1.943), es en la mayoría de los casos muy difícil de resolver debido a la existencia de fuerzas externas o internas. Puesto que

siempre es interesante estudiar situaciones para las cuales exista una solución completa, presentaremos aquí la solución exacta de las ecuaciones del movimiento en espacio fásico (posición y velocidad) para partículas brownianas no interactuantes dentro de un fluido sometido a esfuerzo cortante (Shear flow).

El límite de tiempos grandes de esta solución, corresponde a la aproximación de Smoluchowski que se convierte en exacta en ese límite, y de la cual haremos un estudio más general en el capítulo 2 de la segunda parte.

La solución exacta, para este problema, en espacio fásico, no ha sido obtenida hasta ahora (San Miguel y Sancho, 1.979 a). La aproximación de Smoluchowski ha sido resuelta por Van de Ven (1.977).

El movimiento browniano de una partícula en un fluido sometido a esfuerzo cortante es un problema lineal en seis dimensiones, que es reducible a cuatro dimensiones, pues, como veremos, dos de ellas no intervienen en el proceso. A pesar de su linealidad, la solución en modo alguno es trivial, porque la matriz de los coeficientes de las ecuaciones deterministas del movimiento no puede diagonalizarse y además tiene autovalores nulos. Por estas razones, la solución standard ya conocida (Wang y Uhlenbeck, 1.945) para problemas lineales carece en este caso de sentido, y por lo tanto aplicaremos los resultados obtenidos en el apartado anterior.

A fin de reducir el sistema de seis a cuatro dimensio-

nes, tomaremos un fluido plano con una distribución estacionaria de velocidades

$$\vec{u} = (0, ax_1) \quad (37)$$

correspondiente a un esfuerzo cortante $P_{x_1x_2} = cte \cdot \delta_{i_1} \delta_{j_2}$. La dirección perpendicular a este plano (x_1, x_2) es independiente de los procesos en este plano, y su solución se obtiene fácilmente como veremos en el apartado 2.1.b).

Una partícula browniana en este fluido estará influenciada por una fuerza de fricción sistemática que supondremos proporcional a la velocidad relativa de la partícula (Ley de Stokes),

$$\vec{F} = -\lambda'(\vec{v} - \vec{u}) \quad (38)$$

donde \vec{v} es la velocidad instantánea de la partícula y λ' es la constante positiva de amortiguamiento; también habrá una fuerza estocástica $\vec{z}(t) = (z_1(t), z_2(t))$.

Sustituyendo (37) en (38) podemos escribir las ecuaciones del movimiento para la posición y la velocidad de la partícula, que son

$$\dot{v}_1(t) = -\lambda' v_1(t) + z_1(t) \quad (39)$$

$$\dot{v}_2(t) = -\lambda' v_2(t) + \lambda' a x_1(t) + z_2(t) \quad (40)$$

$$\dot{x}_1(t) = v_1(t) \quad (41)$$

$$\dot{x}_2(t) = v_2(t) \quad (42)$$

donde

$$\lambda = \frac{\lambda'}{m} \quad (43)$$

La otra dirección tiene ecuaciones del movimiento idénticas a (39) y (41), pero como no intervienen en este proceso no se tendrán en cuenta.

Ciertamente, estas cuatro ecuaciones pueden reducirse introduciendo las bien conocidas soluciones de (39) y (41) (Movimiento browniano libre) en (40). En realidad esto no simplifica el cálculo explícito. Por esta razón, y para demostrar la aplicabilidad del esquema general desarrollado anteriormente lo seguiremos aquí paso por paso. El conjunto de ecuaciones (39) - (42) es de la forma (1) con

$$A = \begin{pmatrix} -\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & \lambda a & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad D = \begin{pmatrix} D & 0 & 0 & 0 \\ 0 & D & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (44) - (45)$$

Las matrices relevantes del apartado anterior son obtenidas fácilmente y resultan ser

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda^{-1} & -a^{-1} & 1 & 0 \\ \lambda^{-1} & 0 & 1 & 0 \\ -2\lambda^{-2} & (a\lambda)^{-1} & -\lambda^{-1} & a^{-1} \end{pmatrix} \quad (46)$$

$$A' = \begin{pmatrix} -\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (47)$$

$$\bar{A}(t) = \begin{pmatrix} e^{-\lambda t} & 0 & 0 & 0 \\ te^{-\lambda t} & e^{-\lambda t} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & t & 1 \end{pmatrix} \quad (48)$$

$$B^{-1} \cdot \bar{A}(t) = \begin{pmatrix} e^{-\lambda t} & 0 & 0 & 0 \\ -ate^{-\lambda t} & -ae^{-\lambda t} & a & 0 \\ -\lambda^{-1}e^{-\lambda t} & 0 & 1 & 0 \\ (a\lambda^{-2} - a\lambda^{-1}t)e^{-\lambda t} & a\lambda^{-1}e^{-\lambda t} & at & a \end{pmatrix} \quad (49)$$

Y la matriz simétrica $D(t)$ se obtiene a partir de su definición (29), utilizando las ecuaciones (18), (46), (48), resultando que sus coeficientes son:

$$\begin{aligned}
\bar{D}_{11}(t) &= D(2\lambda)^{-1} (e^{+2\lambda t} - 1) \\
\bar{D}_{12}(t) &= D(2\lambda)^{-1} \left\{ \left(\frac{3}{2}\lambda^{-1} - t \right) e^{2\lambda t} - \frac{3}{2}\lambda^{-1} \right\} \\
\bar{D}_{22}(t) &= D(2\lambda)^{-1} \left\{ (t^2 - 3\lambda^{-1}t + \frac{5}{2}\lambda^{-2} - a^{-2}) e^{2\lambda t} - \frac{5}{2}\lambda^{-2} - a^{-2} \right\} \\
\bar{D}_{13}(t) &= D\lambda^{-2} (e^{\lambda t} - 1) \\
\bar{D}_{23}(t) &= -D\lambda^{-2} \left\{ (t - 2\lambda^{-1}) e^{\lambda t} + 2\lambda^{-1} \right\} \\
\bar{D}_{33}(t) &= D\lambda^{-2} t \\
\bar{D}_{14}(t) &= -D\lambda^{-2} \left\{ (t + \lambda^{-1}) e^{\lambda t} - \lambda^{-1} \right\} \\
\bar{D}_{24}(t) &= D\lambda^{-2} \left\{ (t^2 - t\lambda^{-1} - \lambda^{-2} - a^{-2}) e^{\lambda t} + \lambda^{-2} + a^{-2} \right\} \\
\bar{D}_{34}(t) &= -D \left\{ \frac{t^2\lambda^{-2}}{2} + 2\lambda^{-3}t \right\} \\
\bar{D}_{44}(t) &= D \left\{ \frac{t^3\lambda^{-2}}{3} + 2t^2\lambda^{-3} + 4t\lambda^{-4} + ta^{-2}\lambda^{-2} \right\}
\end{aligned} \tag{50}$$

y donde D no es más que el coeficiente de difusión de las fuerzas estocásticas $\xi_1(t)$ y $\xi_2(t)$, pues su correlación es

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2D \cdot \delta_{ij} \delta(t-t') \tag{51}$$

Por medio de las anteriores matrices puede obtenerse fácilmente la solución operacional exacta (30), que a continuación vamos a discutir.

En primer lugar las ecuaciones (39) y (41) corresponden al movimiento browniano libre en la dirección x_1 , y es fácil de comprobar que los valores obtenidos, a partir de nuestra solución general (32) - (34), para los promedios $\langle X_1(t) \rangle, \langle V_1(t) \rangle, \langle X_1(t)X_1(t') \rangle, \langle V_1(t)V_1(t') \rangle$ y $\langle X_1(t)V_1(t') \rangle$ reproducen los ya bien conocidos resultados del movimiento browniano libre (Chandrasekhar, 1.943 y apartado 2.1.b) y esta es la razón para prescindir de la coordenada x_2 , cuyas soluciones serían idénticas a las x_1 .

Lo específico aparecerá pues en la dirección x_2 . Las soluciones (32) y (33) son en este caso

$$\begin{aligned} \langle X_2(t) \rangle = & \left\{ 2a\kappa^{-2}(e^{-\kappa t} - 1) + at\kappa^{-1}(e^{-\kappa t} - 1) \right\} \langle V_1 \rangle + \\ & + \kappa^{-1}(1 - e^{-\kappa t}) \langle V_2 \rangle + \left\{ a\kappa^{-1}(e^{-\kappa t} - 1) + at \right\} \langle X_1 \rangle + \langle X_2 \rangle \end{aligned} \quad (52)$$

$$\langle V_2(t) \rangle = a \left\{ \kappa^{-1} - e^{-\kappa t}(\kappa^{-1} + t) \right\} \langle V_1 \rangle + e^{-\kappa t} \langle V_2 \rangle + a(1 - e^{-\kappa t}) \langle X_1 \rangle \quad (53)$$

Es interesante resaltar que dada la solución para $\langle X_1(t) \rangle$

$$\langle X_1(t) \rangle = \kappa^{-1}(1 - e^{-\kappa t}) \langle V_1 \rangle + \langle X_1 \rangle \quad (54)$$

tenemos que en el límite de tiempos grandes

$$\langle V_2(t) \rangle \sim a \langle X_1(t) \rangle \quad (55)$$

es decir, en este límite el valor medio de la velocidad de la partícula browniana coincide con el campo de velocidades (37) que tomamos para el fluido.

A fin de calcular las funciones de correlación elegiremos como distribución inicial

$$\rho(\vec{x}, \vec{v}, 0) = \delta(\vec{x}-0) \cdot \delta(\vec{v}-0) \quad (56)$$

de tal manera que $G_{\mu\nu} = 0$. Estamos considerando pues, que la partícula browniana se encuentra inicialmente en el origen de coordenadas con velocidad nula.

A partir de (33) y usando (49) y (50) puede calcularse cualquier función de correlación. En especial los resultados más relevantes son:

$$\langle V_2(t)^2 \rangle = D\kappa^{-1}(1 - e^{-2\lambda t}) + Da^2 \left\{ 2t\kappa^{-2} - \frac{11}{2}\kappa^{-3} + e^{-2\lambda t} \left(-t^2\kappa^{-1} - 3t\kappa^{-2} - \frac{5}{2}\kappa^{-3} \right) + e^{-\lambda t} (4t\kappa^{-2} + 8\kappa^{-3}) \right\} \quad (57)$$

$$\langle X_1(t)X_2(t) \rangle = Da\kappa^{-2} \left\{ t^2 - 4t\kappa^{-1} + 11\kappa^{-2} + \left(\frac{5}{2}\kappa^{-1} + t \right) e^{-2\lambda t} - 8\kappa^{-2} e^{-\lambda t} \right\} \quad (58)$$

$$\langle X_2(t)^2 \rangle = D\kappa^{-2} \left\{ 2t - 4\kappa^{-1}(1 - e^{-\lambda t}) + \kappa^{-1}(1 - e^{-2\lambda t}) \right\} + Da^2\kappa^{-2} \left\{ \frac{2}{3}t^3 - 4t^2\kappa^{-1} + 8t\kappa^{-2} - \frac{3}{2}\kappa^{-3} + e^{-2\lambda t} \left(-t^2\kappa^{-1} - 5t\kappa^{-2} - \frac{13}{2}\kappa^{-3} \right) + e^{-\lambda t} \left(-4t^2\kappa^{-1} - 8t\kappa^{-2} + 8\kappa^{-3} \right) \right\} \quad (59)$$

y en el límite de tiempos grandes

$$\langle X_1(t)X_2(t) \rangle \sim Da\kappa^{-2}t^2 \quad (60)$$

$$\langle X_2(t)^2 \rangle \sim \frac{2}{3}Da^2\kappa^{-2}t^3 \quad (61)$$

que muestra una dependencia en t^3 para $\langle X_2(t)^2 \rangle$ en comparación con la dependencia lineal en t para $\langle X_1(t)^2 \rangle$ (Chandrasekhar, 1.943).

Los resultados (60) y (61) están de acuerdo con el límite de tiempos grandes de la aproximación de Smoluchowski (Van de Ven, 1.977), pero nuestros resultados (58) y (59) muestran la dependencia exacta en el tiempo.

La influencia de cualquier otra condición inicial diferente de (56) puede igualmente estudiarse a partir de nuestra solución general (32) - (34). Si en (57) - (59) hacemos $a = 0$, obtenemos, como era de esperar, los resultados conocidos del movimiento browniano libre.

Es interesante mencionar que las ecuaciones de Langevin para $x_1(t)$, $x_2(t)$, equivalentes a la aproximación de Smoluchowski (Van de Ven, 1.977) se escriben en la forma

$$\dot{X}_1(t) = \frac{\xi_1(t)}{\lambda} \quad (62)$$

$$\dot{X}_2(t) = a X_1(t) + \frac{\xi_2(t)}{\lambda} \quad (63)$$

y pueden ser resueltas fácilmente por medio de nuestra solución general (32) - (34), coincidiendo con (57) - (59) en el límite de tiempos grandes.

Una obtención más detallada de la aproximación de Smoluchowski y sus correcciones se realizará en el capítulo 3 de la segunda parte.

2.1.b) Otros ejemplos físicos

Describiremos brevemente algunos ejemplos físicos en los que son aplicables las técnicas desarrolladas en este apartado.

En primer lugar consideraremos el movimiento browniano de una partícula libre, que viene descrito por las ecuaciones

$$\dot{p}(t) = -\lambda p(t) + \zeta(t) \quad (64)$$

$$\dot{q}(t) = p(t) \quad (65)$$

donde q es la posición y p el momento.

La matriz A es en este caso

$$A = \begin{pmatrix} -\lambda & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (66)$$

y éste es el caso más trivial que posee un valor propio nulo.

Es interesante hacer notar que a fin de obtener el resultado conocido de Orstein (Chandrasekhar, 1.943) para $\langle q(t)^2 \rangle$, a partir de la solución general (33), se ha de tomar como distribución inicial $P(q,p,0) = f(p) \cdot g(q)$ y suponer para $f(p)$ una distribución Maxwelliana de tal manera que

$$\langle p q \rangle = 0 \quad (67)$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{D}{\lambda} \quad (68)$$

y así se obtiene a partir de (33) que

$$\langle q(t)^2 \rangle - \langle q^2 \rangle = \frac{2D}{\lambda^2} \left(t + \frac{1}{\lambda} (e^{-\lambda t} - 1) \right) \quad (69)$$

que es el resultado buscado. En este formalismo queda bien claro cuales son las hipótesis que se toman.

El segundo ejemplo es el movimiento browniano de una partícula sometida a un potencial armónico, y que viene descrito por las ecuaciones

$$\dot{p}(t) = -\lambda p(t) - \omega_0^2 q(t) + \zeta(t) \quad (70)$$

$$\dot{q}(t) = p(t) \quad (71)$$

Este sistema pertenece al caso general (12) y las técnicas desarrolladas anteriormente son aplicables. Obteniéndose los resultados ya conocidos (Chandrasekhar, 1.943).

El tercer ejemplo consiste en una partícula cargada dentro de un campo electromagnético.

Las ecuaciones de Langevin son en este caso

$$m \ddot{\vec{x}} = -a \dot{\vec{x}} + e (\vec{E} + \dot{\vec{x}} \wedge \vec{B}) + \vec{\zeta}(t) \quad (72)$$

Si tomamos $\vec{E} = (E, 0, 0)$ y $\vec{B} = (0, 0, B)$ podemos escribir (72)

en la forma

$$\dot{V}_x(t) = -\lambda V_x(t) + \alpha B V_y(t) + \alpha E + \frac{z_x(t)}{m} \quad (73, a)$$

$$\dot{V}_y(t) = -\lambda V_y(t) - \alpha B V_x(t) + \frac{z_y(t)}{m} \quad (73, b)$$

$$\dot{V}_z(t) = -\lambda V_z(t) + \frac{z_z(t)}{m} \quad (73, c)$$

$$\dot{X}(t) = V_x(t) \quad (73, d)$$

$$\dot{Y}(t) = V_y(t) \quad (73, e)$$

$$\dot{Z}(t) = V_z(t) \quad ; \quad \lambda = \frac{a}{m} \quad ; \quad \kappa = \frac{e}{m} \quad (73, f)$$

donde podemos aplicar el procedimiento operacional a las tres primeras ecuaciones y mediante una simple integración temporal obtener las tres últimas. No desarrollaremos más este ejemplo pues, aunque no conocemos que haya sido resuelto, la aplicación del formalismo es inmediata, aunque larga.

2.2.- Caso no lineal. Modelo de Kubo

En este apartado obtendremos resultados exactos para un problema no lineal caracterizado porque la difusión no es constante.

El modelo considerado representa una partícula libre amortiguada de momento $p(t)$; su ecuación del movimiento es

$$\dot{p}(t) = -\lambda p(t) \quad (74)$$

donde su constante de amortiguamiento se dejará fluctuar de acuerdo con

$$\lambda \rightarrow \lambda - \zeta(t) \quad (75)$$

$\zeta(t)$ es la fuerza estocástica de ruido blanco y correlación

$$\langle \zeta(t) \zeta(t') \rangle = 2D \delta(t-t') \quad (76)$$

En estas condiciones la ecuación de Langevin, análoga al modelo de Kubo (1.963), es

$$\dot{p}(t) = -\lambda p(t) + p(t) \zeta(t) \quad (77)$$

En el modelo original de Kubo λ es una constante imaginaria y la variable $p(t)$ es compleja.

Tomando la interpretación de Stratonovich, obtenemos que el Liouvilliano asociado a (77) es (1.39)

$$\mathcal{L}(p(t), \beta(t)) = \mathcal{L}_0(p(t), \beta(t)) + \mathcal{L}_1(p(t), \beta(t)) \quad (78)$$

con

$$\mathcal{L}_0(p(t), \beta(t)) = (-\lambda + D) p(t) \beta(t) \quad (79)$$

$$\mathcal{L}_1(p(t), \beta(t)) = D p(t)^2 \hat{\beta}(t)^2 \quad (80)$$

El procedimiento a seguir ahora es el mismo que en el apartado 2.1. Después de resolver el problema determinista ($\mathcal{L}_1 = 0$) introducimos la estocasticidad mediante una imagen de interacción.

Obviamente las soluciones deterministas son

$$p^{\circ}(t) = e^{(D-\lambda)t} p \quad (81)$$

$$\hat{p}^{\circ}(t) = e^{(\lambda-D)t} \hat{p} \quad (82)$$

La forma especial de L_1 es tal que en la imagen de interacción es independiente del tiempo, y así, conmuta consigo mismo a diferentes tiempos. De esta forma el operador de evolución resulta ser

$$S(0,t) = \exp \{ Dt p^2 \hat{p}^2 \} \quad (83)$$

Ahora es posible calcular $p(t)$ y $\hat{p}(t)$ por medio de este operador, como se hizo en (27). Si bien en este caso la serie resultante no es fácil de obtener, acontece que los términos de la serie que contribuyen a la función de correlación de orden n son sólo aquellos que contienen potencias de \hat{p} hasta el orden $n-1$. De esta forma se puede calcular exactamente la función de correlación de dos variables así como la función respuesta.

En primer orden en \hat{p} , obtenemos, (Sancho y San Miguel, 1.979 c)

$$p(t) = e^{(D-\lambda)t} (p + (e^{2Dt} - 1) p^2 \hat{p}) \quad (84)$$

y por lo tanto

$$\langle p(t) \rangle = e^{(D-\lambda)t} \langle p \rangle \quad (85)$$

$$\langle p(t) p(t') \rangle = e^{(D-\lambda)t} \cdot e^{(3D-\lambda)t'} \langle p^2 \rangle ; t' > t \quad (86)$$

Para obtener la función respuesta necesitamos conocer $\hat{p}(t)$, que obtenemos de igual forma que antes mediante el operador $S(o, t)$, y que resulta ser

$$\hat{p}(t) = e^{(\lambda-D)t} \hat{p} - 2 e^{(\lambda-D)t} \int_0^t p \hat{p}^2 dt \quad (87)$$

La función respuesta asociada (11) es entonces

$$\bar{R}(t', t) = e^{(D-\lambda)t'} \langle p \rangle \quad (88)$$

El modelo original de Kubo ha sido recientemente analizado por Fox (1.979).

Es interesante mencionar que el procedimiento anterior da también resultados exactos si L_1 se modifica en la forma

$$L_1(p(t), \hat{p}(t)) = D p(t) \hat{p}(t)^2 \quad ; \quad \gamma = \frac{2n-1}{n} \quad \text{o} \quad \gamma = \frac{2(n-1)}{n} \quad (89)-(90)$$

donde \underline{n} es un número natural. Un caso particular, $n = 1$, ha sido considerado por Bailey (1.964) en el estudio de crecimiento de poblaciones.

2.3.- Relación entre una dinámica determinista y una de Fokker-Planck.

Recientemente ha recibido una atención creciente las teorías perturbativas para sistemas clásicos estadísticos descritos por ecuaciones del movimiento para un conjunto de variables gruesas (Martin, Siggia y Rose (1.973), Phytian (1.975), Enz y Garrido (1.976), Garrido y San Miguel (1.978 a)).

Los sistemas físicos estudiados en dichas referencias son de dos clases: sistemas que obedecen ecuaciones deterministas del movimiento y sistemas que obedecen ecuaciones estocásticas del movimiento. Las últimas son ampliamente aplicadas a la descripción de los fenómenos de dinámica crítica entre otros.

Nuestro objetivo, en este apartado, será establecer una conexión entre las teorías perturbativas correspondientes a ambos sistemas, probando que ambas teorías son equivalentes, en el sentido de que existe una relación biunívoca entre sus respectivos diagramas y una relación simple entre sus propagadores libres.

Empezaremos con una corta descripción de los sistemas gobernados por ecuaciones deterministas y después estudiaremos los sistemas que obedecen ecuaciones estocásticas del tipo de Langevin.

En 1.976, Enz y Garrido, desarrollaron una teoría perturbativa sistemática para la obtención de las funciones

termodinámicas de Green para sistemas clásicos canónicos. Estos sistemas pertenecen a la clase más general de sistemas deterministas que vienen definidos por ecuaciones diferenciales de la forma

$$\dot{\bar{\Psi}}_{\mu}(t) = \sum_{\nu} \bar{L}_{\mu\nu} \bar{\Psi}_{\nu}(t) + F_{\mu}(\bar{\Psi}(t), t) \quad (91)$$

donde $\bar{\Psi}(t)$ son las variables gruesas o relevantes que describen el sistema físico. $F_{\mu}(\bar{\Psi}(t), t)$ es una función polinómica de dichas variables que contiene la dependencia no lineal. Como se puede observar en (91) el término lineal está diagonalizado.

Siguiendo el formalismo operacional introducimos un nuevo conjunto de variables $\hat{\Psi}(t)$, de tal manera que las ecuaciones del movimiento se escriben ahora en la forma

$$\dot{\hat{\Psi}}_{\mu}(t) = [\bar{L}, \hat{\Psi}_{\mu}(t)] \quad (92)$$

$$\dot{\hat{\Psi}}_{\nu}(t) = [\bar{L}, \hat{\Psi}_{\nu}(t)] \quad (93)$$

donde el operador Liouvilliano es en este caso

$$\bar{L} = \bar{L}_0 + \bar{L}_1 = \sum_{\mu} \sum_{\nu} \bar{L}_{\mu\nu} \hat{\Psi}_{\mu}(t) \hat{\Psi}_{\nu}(t) + \sum_{\mu} F_{\mu}(\bar{\Psi}(t), t) \hat{\Psi}_{\mu}(t) \quad (94)$$

Las funciones estadísticas de Green no perturbadas se obtienen a partir de (10) y (11) haciendo $F_{\mu}(\bar{\Psi}(t), t) = 0$, y son

$$\bar{G}_{\mu\nu}^{\circ}(t, t') = \langle \bar{T} \{ \bar{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t) \bar{\Psi}_{\nu}^{\circ}(t') \} \rangle = W_{\mu}(t) W_{\nu}(t') \langle \Psi_{\mu} \Psi_{\nu} \rangle \quad (95)$$

$$\bar{R}_{\mu\nu}^{\circ}(t, t') = \langle \bar{T} \{ \bar{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t) \hat{\Psi}_{\nu}^{\circ}(t') \} \rangle = \theta(t-t') \delta_{\mu\nu} W_{\mu}(t-t') \quad (96)$$

donde

$$\begin{aligned}\bar{\Psi}_\mu^\circ(t) &= W_\mu(t) \Psi_\mu = e^{\lambda_\mu t} \Psi_\mu & ; & \Psi_\mu = \bar{\Psi}_\mu(0) \\ \hat{\Psi}_\mu^\circ(t) &= W_\mu(-t) \hat{\Psi}_\mu = e^{-\lambda_\mu t} \hat{\Psi}_\mu & ; & \hat{\Psi}_\mu = \hat{\Psi}_\mu(0)\end{aligned}\quad (97)$$

que se obtienen de la solución de las ecuaciones (92) y (93) para el caso no perturbado ($F_\mu = 0$). \bar{T} es un operador de ordenación antitemporal, irrelevante en (95) pues las variables conmutan, y $\langle \dots \rangle$ es el promedio estadístico sobre $\rho(\Psi)$, que es la distribución inicial del sistema.

En 1.978, Garrido y San Miguel, establecieron una teoría perturbativa para el tratamiento de ecuaciones de Langevin. Estas ecuaciones fenomenológicas del movimiento para las variables relevantes son estocásticas y se escriben en la forma

$$\dot{\Psi}_\mu(t) = \lambda_\mu \Psi_\mu(t) + F_\mu(\Psi(t), t) + \zeta_\mu(t) \quad (98)$$

donde $\zeta_\mu(t)$ es una fuerza estocástica, gaussiana, de media nula y espectro de ruido blanco, es decir, sus propiedades matemáticas son (2) y (3).

Como podemos observar la ecuación (98) es idéntica a (91) salvo la fuerza estocástica. Las variables $\Psi(t)$ se escriben sin barra para distinguirlas de las variables $\bar{\Psi}(t)$ deterministas. En lo que sigue una barra superior indicará pertenencia al problema determinista.

En las circunstancias especificadas para (98), dicha

ecuación de Langevin es equivalente a una ecuación de Fokker-Planck (Graham, 1.973), sobre la que volveremos más adelante en el capítulo 3.

Igualmente que en casos anteriores se introducen las variables $\hat{\Psi}(t)$ y el Liouvilliano correspondiente resulta ser (1.40)

$$L_0 = \sum_{\mu} \left(\langle \dot{\Psi}_{\mu}(t) \rangle + \sum_{\nu} D_{\mu\nu} \hat{\Psi}_{\nu}(t) \right) \hat{\Psi}_{\mu}(t) \quad (99, a)$$

$$L_1 = \sum_{\mu} F_{\mu}(\Psi(t), t) \hat{\Psi}_{\mu}(t) \quad (99, b)$$

Las ecuaciones del movimiento para las variables $\Psi_{\mu}(t)$ y $\hat{\Psi}_{\mu}(t)$ se definen de igual forma que en (92) y (93).

A fin de desarrollar la teoría perturbativa vamos a calcular las funciones de Green no perturbadas. Si hacemos $F_{\mu} = 0$, las ecuaciones del movimiento para las variables son:

$$\dot{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t) = [L_0, \Psi_{\mu}^{\circ}(t)] = \langle \dot{\Psi}_{\mu}(t) \rangle + \sum_{\nu} \varepsilon D_{\mu\nu} \hat{\Psi}_{\nu}^{\circ}(t) \quad (100)$$

$$\dot{\hat{\Psi}}_{\mu}^{\circ}(t) = [L_0, \hat{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t)] = -\langle \dot{\Psi}_{\mu}(t) \rangle \hat{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t) \quad (101)$$

donde se ha hecho uso de que $D_{\mu\nu}$ es simétrica. Como podemos observar, estas ecuaciones son las mismas que en el caso determinista salvo el término $D_{\mu\nu}$, y por lo tanto para obtener la solución seguiremos el esquema desarrollado al principio de este capítulo y consideraremos el término $L_3 = \sum_{\mu\nu} D_{\mu\nu} \hat{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t) \hat{\Psi}_{\nu}^{\circ}(t)$ como una perturbación al

problema determinista, definido únicamente por

$L_0 = \sum_{\mu} \lambda_{\mu} \psi_{\mu}^{\circ}(t) \hat{\psi}_{\mu}^{\circ}(t)$ que es el Liouvilliano correspondiente a un sistema determinista no perturbado. Las condiciones iniciales serán las mismas ($\psi(0) = \bar{\psi}(0) = \psi$).

De acuerdo con las ecuaciones (27) y (28) tenemos

$$S_3(0,t) = \bar{T} \exp \int_0^t L_3(\bar{\psi}^{\circ}(z), \hat{\psi}^{\circ}(z)) dz \quad (102)$$

$$\psi_{\mu}^{\circ}(t) = S_3(0,t) \bar{\psi}_{\mu}^{\circ}(t) S_3(t,0) \quad (103)$$

de esta forma introducimos la estocasticidad sobre las variables deterministas. De acuerdo con las soluciones (97)

$$\begin{aligned} \int_0^t L_3(\bar{\psi}^{\circ}(z), \hat{\psi}^{\circ}(z)) dz &= \sum_{\mu\nu} D_{\mu\nu} \hat{\psi}_{\mu} \hat{\psi}_{\nu} \int_0^t e^{-(\lambda_{\mu} + \lambda_{\nu})z} dz = \\ &= - \sum_{\mu\nu} \frac{D_{\mu\nu}}{\lambda_{\mu} + \lambda_{\nu}} \left(e^{-(\lambda_{\mu} + \lambda_{\nu})t} - 1 \right) \hat{\psi}_{\mu} \hat{\psi}_{\nu} \end{aligned} \quad (104)$$

El operador \bar{T} es irrelevante en este caso, pues

$$[L_3(z), L_3(z')] = 0$$

y por lo tanto

$$S_3(0,t) = \exp \left\{ - \sum_{\mu\nu} \frac{D_{\mu\nu}}{\lambda_{\mu} + \lambda_{\nu}} \left(e^{-(\lambda_{\mu} + \lambda_{\nu})t} - 1 \right) \hat{\psi}_{\mu} \hat{\psi}_{\nu} \right\} \quad (105)$$

Y aplicando el conocido desarrollo en términos de conmutadores a (103), obtenemos que

$$\psi_{\mu}^{\circ}(t) = e^{\lambda_{\mu}t} \psi_{\mu} - e^{\lambda_{\mu}t} \sum_{\nu} \frac{D_{\mu\nu}}{\lambda_{\mu} + \lambda_{\nu}} \left(e^{-(\lambda_{\mu} + \lambda_{\nu})t} - 1 \right) \psi_{\nu} \quad (106)$$

los siguientes términos son nulos en virtud de que el primer conmutador es proporcional a $\hat{\psi}$ y por lo tanto conmuta con $\hat{\psi}_\alpha \hat{\psi}_\beta$. Repitiendo el mismo proceso a $\hat{\psi}^\circ(t)$ obtenemos que no varía,

$$\hat{\psi}_\mu^\circ(t) = S_3(0,t) \hat{\psi}_\mu^\circ(t) S_3(t,0) = \mathcal{W}_\mu(-t) \hat{\psi}_\mu = \hat{\psi}_\mu^\circ(t) \quad (107)$$

El resultado (106) también se puede expresar como

$$\psi_\mu^\circ(t) = \bar{\psi}_\mu^\circ(t) - \hat{\beta}_\mu^\circ(t) \quad (108)$$

donde

$$\hat{\beta}_\mu^\circ(t) = \sum_\rho \frac{2D_{\rho\mu}}{\lambda_\rho + \lambda_\mu} \left\{ \mathcal{W}_\rho(-t) - \mathcal{W}_\mu(t) \right\} \hat{\psi}_\rho \quad (109)$$

que luego será de gran utilidad.

Pasamos ahora a calcular las funciones de Green, definidas en la misma forma que en (95) y (96), pero teniendo en cuenta que ahora las variables $\psi^\circ(t)$ no conmutan a tiempos distintos, de esta forma

$$G_{\mu\nu}^\circ(t,t') = \langle \bar{T} \{ \psi_\mu^\circ(t) \psi_\nu^\circ(t') \} \rangle = \theta(t-t') \langle \psi_\nu^\circ(t') \psi_\mu^\circ(t) \rangle + \theta(t'-t) \langle \psi_\mu^\circ(t) \psi_\nu^\circ(t') \rangle \quad (110)$$

$$R_{\mu\nu}^\circ(t,t') = \langle \bar{T} \{ \psi_\mu^\circ(t) \hat{\psi}_\nu^\circ(t') \} \rangle = \theta(t-t') \langle \hat{\psi}_\nu^\circ(t') \psi_\mu^\circ(t) \rangle \quad (111)$$

La función respuesta no tiene el término en $\theta(t'-t)$ pues en este caso tendríamos un operador $\hat{\psi}_\nu^\circ(t')$ a la derecha, y dado su carácter derivativo su contribución sería nula. Teniendo en cuenta esto y las soluciones (106) y

(107) la función respuesta (111) resulta ser

$$R_{\mu\nu}^{\circ}(t,t') = \theta(t-t') \delta_{\mu\nu} e^{\lambda_{\mu}(t-t')} \quad (112)$$

exactamente la misma que en el caso determinista (96).

Realizando los mismos pasos la función de correlación queda

$$G_{\mu\nu}^{\circ}(t,t') = \theta(t-t') \langle \{ \bar{\Psi}_{\nu}^{\circ}(t') \bar{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t) - \hat{B}_{\nu}^{\circ}(t) \bar{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t) \} \rangle + \\ \theta(t'-t) \langle \{ \bar{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t) \bar{\Psi}_{\nu}^{\circ}(t') - \hat{B}_{\mu}^{\circ}(t) \bar{\Psi}_{\nu}^{\circ}(t') \} \rangle =$$

$$(\theta(t-t') + \theta(t'-t)) \langle \bar{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t) \bar{\Psi}_{\nu}^{\circ}(t') \rangle - \theta(t-t') \langle \hat{B}_{\nu}^{\circ}(t) \bar{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t) \rangle - \\ - \theta(t'-t) \langle \hat{B}_{\mu}^{\circ}(t) \bar{\Psi}_{\nu}^{\circ}(t') \rangle \quad (113)$$

y teniendo en cuenta (109) y que $\langle \hat{\Psi}_{\rho} \Psi_{\mu} \rangle = \delta_{\rho\mu}$ obtenemos

$$\langle \hat{B}_{\nu}^{\circ}(t) \bar{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t) \rangle = \frac{2D_{\mu\nu}}{\lambda_{\mu} + \lambda_{\nu}} \left\{ \omega_{\mu}(-t') - \omega_{\nu}(t') \right\} \omega_{\mu}(t) \quad (114)$$

y un resultado similar para $\langle \hat{B}_{\mu}^{\circ}(t) \bar{\Psi}_{\nu}^{\circ}(t') \rangle$. Resumiendo todos los resultados podemos expresar (113) en la forma (Garrido y San Miguel, 1.978 a)

$$G_{\mu\nu}^{\circ}(t,t') = \bar{G}_{\mu\nu}^{\circ}(t,t') + U_{\mu\nu}^{\circ}(t,t') \quad (115)$$

donde $U_{\mu\nu}^{\circ}(t,t')$ es un nuevo término originado por la estocasticidad

$$U_{\mu\nu}^{\circ}(t,t') = \theta(t-t') \frac{2D_{\mu\nu}}{\lambda_{\mu} + \lambda_{\nu}} \left(\omega_{\nu}(t') - \omega_{\mu}(-t') \right) \omega_{\mu}(t) + \\ + \theta(t'-t) \frac{2D_{\mu\nu}}{\lambda_{\mu} + \lambda_{\nu}} \left(\omega_{\mu}(t) - \omega_{\nu}(-t) \right) \omega_{\nu}(t') \quad (116)$$

Vemos pues que el único efecto, en el problema no perturbado, debido a la fuerza estocástica es añadir un término a la función de correlación libre. Este hecho nos permitirá obtener un teorema de Wick para los sistemas estocásticos a partir del teorema de Wick deducido para los sistemas deterministas y a la vez constatamos la perfecta equivalencia que existe entre los diagramas de ambas teorías perturbativas. Pasamos pues al estudio de la teoría perturbativa.

Para introducir la perturbación F_μ lo hacemos a través del operador $S(0,t)$, (Enz y Garrido, 1.976), definido de la forma

$$S(t,t') = \begin{cases} \bar{T} \exp \int_t^{t'} dz L_4(\psi^0(z), \hat{\psi}^0(z), z) & ; t' > t \\ T \exp \int_t^{t'} dz L_4(\psi^0(z), \hat{\psi}^0(z), z) & ; t' < t \end{cases} \quad (117)$$

donde L_4 está dado por (99), y los operadores $\psi_\mu(t)$ vienen dados por

$$\psi_\mu(t) = S(0,t) \psi_\mu^0(t) S(t,0) \quad (118)$$

y análogamente para $\hat{\psi}_\mu(t)$. De esta forma la función de correlación perturbada será

$$\begin{aligned} G_{\mu\nu}(t,t') &= \langle \bar{T} \{ \psi_\mu(t) \psi_\nu(t') \} \rangle = \langle \bar{T} \{ S(0,t) \psi_\mu^0(t) S(t,0) S(0,t') \psi_\nu^0(t') S(t',0) \} \rangle = \\ &= \langle \bar{T} \{ S(0,t) \psi_\mu^0(t) S(t,t') \psi_\nu^0(t') S(t',0) \} \rangle \quad (119) \end{aligned}$$

donde hemos utilizado la propiedad de grupo de $S(0,t)$. Si añadimos a la derecha de (119) un término $S(0,t^m)$ con $t^m \gg \max(t, t')$, no cambiamos nada, pues por las propiedades derivativas de L_A

$$(S(0,t^m) \cdot 1) = 1 \quad (120)$$

y así (119) se reduce a

$$G_{\mu\nu}(t,t') = \langle \bar{T} \{ S(0,t) \psi_{\mu}^{\circ}(t) S(t,t') \psi_{\nu}^{\circ}(t') S(t',t^m) \} \rangle = \\ \langle \bar{T} \{ S(0,t^m) \psi_{\mu}^{\circ}(t) \psi_{\nu}^{\circ}(t') \} \rangle \quad (121)$$

donde se ha tenido en cuenta que \bar{T} antiordenará todo lo incluido entre los corchetes y por lo tanto distribuirá al operador S donde le corresponda.

Si ahora desarrollamos en serie el operador $S(0,t^m)$, aparecerán integrales temporales sobre los tiempos intermedios, y tendremos además que (121) se compone de promedios estadísticos de la forma

$$\langle \bar{T} \{ \phi_{\mu_1}^{\circ}(t_1) \dots \phi_{\mu_n}^{\circ}(t_n) \} \rangle \quad (122)$$

donde $\phi_{\mu}^{\circ}(t_{\mu})$ puede ser $\psi_{\mu}^{\circ}(t_{\mu})$ ó $\hat{\psi}_{\mu}^{\circ}(t)$. El teorema de Wick nos determinará la estructura de estos términos.

A continuación demostraremos el teorema de Wick para sistemas estocásticos a partir únicamente del teorema de Wick para sistemas deterministas. Este último teorema nos

asegura (Enz y Garrido, 1.976) que los promedios antiordenados sobre las variables $\bar{\Psi}^\circ(t)$, $\hat{\Psi}^\circ(t)$ se pueden escribir

$$\begin{aligned} \langle \bar{\tau} \{ \bar{\Psi}_{\mu_i}^\circ(t_i) \dots \hat{\Psi}_{\mu_i}^\circ(t_i) \dots \bar{\Psi}_{\mu_j}^\circ(t_j) \dots \} \rangle &= \sum_{\text{parejas}} \langle \bar{\tau} \{ \dots \hat{\Psi}_{\mu_i}^\circ(t_i) \dots \bar{\Psi}_{\mu_j}^\circ(t_j) \dots \} \rangle = \\ &= \sum_{\text{parejas}} \langle \bar{\tau} \{ \dots x_i \dots x_j \dots \} \rangle \cdot \langle \bar{\tau} \{ \hat{\Psi}_{\mu_i}^\circ(t_i) \bar{\Psi}_{\mu_j}^\circ(t_j) \} \rangle \quad (123) \end{aligned}$$

Aunque (123) está particularizada a una determinada pareja, en realidad tenemos tres clases de parejas

$$\hat{\Psi}_{\mu_i}^\circ(t_i) \bar{\Psi}_{\mu_j}^\circ(t_j) \quad ; \quad \hat{\Psi}_{\mu_i}^\circ(t_i) \hat{\Psi}_{\mu_j}^\circ(t_j) \quad ; \quad \bar{\Psi}_{\mu_i}^\circ(t_i) \bar{\Psi}_{\mu_j}^\circ(t_j) \quad (124)$$

de las cuales, la segunda da contribución nula.

Dada la propiedad distributiva del promedio estadístico, podemos generalizar el resultado (123) al siguiente caso

$$\begin{aligned} \langle \bar{\tau} \{ \dots (\bar{\Psi}_{\mu_i}^\circ(t_i) + \hat{\Psi}_{\mu_i}^\circ(t_i)) \dots \bar{\Psi}_{\mu_j}^\circ(t_j) \dots \} \rangle &= \\ = \langle \bar{\tau} \{ \dots \bar{\Psi}_{\mu_i}^\circ(t_i) \dots \bar{\Psi}_{\mu_j}^\circ(t_j) \dots \} \rangle &= \langle \bar{\tau} \{ \dots \hat{\Psi}_{\mu_i}^\circ(t_i) \dots \bar{\Psi}_{\mu_j}^\circ(t_j) \dots \} \rangle = \\ = \sum_{\text{parejas}} \langle \bar{\tau} \{ \dots x_i \dots x_j \dots \} \rangle \cdot \langle \bar{\tau} \{ (\bar{\Psi}_{\mu_i}^\circ(t_i) + \hat{\Psi}_{\mu_i}^\circ(t_i)) \bar{\Psi}_{\mu_j}^\circ(t_j) \} \rangle \quad (125) \end{aligned}$$

y este resultado nos servirá para calcular los promedios estadísticos en una dinámica estocástica que serán de la forma

$$\langle \bar{T} \{ \Psi_{\mu_1}^{\circ}(t_1) \dots \Psi_{\mu_i}^{\circ}(t_i) \dots \hat{\Psi}_{\mu_j}^{\circ}(t_j) \dots \} \rangle \quad (126)$$

y que de acuerdo con (107) y (108) que sustituimos en (126), obtenemos

$$\langle \bar{T} \{ (\bar{\Psi}_{\mu_1}^{\circ}(t_1) - \hat{B}_{\mu_1}^{\circ}(t_1)) \dots (\bar{\Psi}_{\mu_i}^{\circ}(t_i) - \hat{B}_{\mu_i}^{\circ}(t_i)) \dots \hat{\Psi}_{\mu_j}^{\circ}(t_j) \dots \} \rangle \quad (127)$$

donde el operador $\hat{B}_{\mu}^{\circ}(t)$ es lineal en los operadores $\hat{\Psi}^{\circ}(t)$ y por lo tanto se le puede aplicar (125).

Las parejas posibles que se pueden dar en (127) serán

$$(\bar{\Psi}_{\mu_i}^{\circ}(t_i) - \hat{B}_{\mu_i}^{\circ}(t_i)) (\bar{\Psi}_{\mu_j}^{\circ}(t_j) - \hat{B}_{\mu_j}^{\circ}(t_j)) \quad (128)$$

$$(\bar{\Psi}_{\mu_i}^{\circ}(t_i) - \hat{B}_{\mu_i}^{\circ}(t_i)) \hat{\Psi}_{\mu_j}^{\circ}(t_j) \quad (129)$$

$$\hat{\Psi}_{\mu_i}^{\circ}(t_i) \hat{\Psi}_{\mu_j}^{\circ}(t_j) \quad (130)$$

La última pareja al promediar dará contribución nula y las otras dos no son más que

$$\langle \bar{T} \{ (128) \} \rangle = \bar{G}_{\mu_i \mu_j}^{\circ}(t_i, t_j) + U_{\mu_i \mu_j}^{\circ}(t_i, t_j) \quad (131)$$

$$\langle \bar{T} \{ (129) \} \rangle = R_{\mu_i \mu_j}^{\circ}(t_i, t_j) \quad (132)$$

de acuerdo con (112) - (114).

Por sucesivas aplicaciones de estos resultados sobre el promedio que queda en (125) llegamos al resultado general

$$\langle \bar{T} \{ \phi_{\mu_1}^{\circ}(t_1) \dots \phi_{\mu_n}^{\circ}(t_n) \} \rangle = \sum_{\substack{\text{configuraciones} \\ \text{de parejas} \\ \mu_i, \bar{\nu}_i}} \prod_{i=1}^n \langle \bar{T} \{ \phi_{\mu_i}^{\circ}(t_i) \phi_{\bar{\nu}_i}^{\circ}(t_i) \} \rangle \quad (133)$$

donde $\phi^{\circ}(t)$ es $\psi^{\circ}(t)$ o $\hat{\psi}^{\circ}(t)$, y los promedios sobre parejas son de las clases (131) o (132).

Este resultado (133) es el mismo que el de Enz y Garrido, (1.976), pero ahora es válido para sistemas estocásticos. Obviamente (133) tiene una expresión diagramática sobre la que más adelante se insistirá.

Sumarizando las conclusiones relativas a este resultado (133) (Garrido y Sancho, 1.978):

- 1) Ambas teorías perturbativas tienen los mismos desarrollos funcionales en términos de \bar{R}° , \bar{G}° y R° , G° respectivamente, y por lo tanto tienen los mismos diagramas asociados.
- 2) Los resultados de una dinámica determinista son directamente aplicables a una dinámica estocástica, haciendo únicamente la sustitución

$$\bar{G}_{\mu\nu}^{\circ} \rightarrow \bar{G}_{\mu\nu}^{\circ} + U_{\mu\nu}^{\circ}$$

pues la función respuesta no perturbada es la misma en ambos casos (134).

- 3) Queda pues demostrado que el Teorema de Wick de Garrido y San Miguel (1.977) es derivable del de Enz y Garrido (1.976). Los puntos 1 y 2 se encuentran implícitamente en Garrido y San Miguel (1.978 a). En cuanto a los

términos espúreos que Garrido y San Miguel (1.978 a) introducen en su Teorema de Wick, y que aquí se han obviado, son originados por las condiciones iniciales no gaussianas y por lo tanto es un problema que también está incluido en el Teorema de Wick determinista. La razón para no tenerlos en cuenta, es porque no añadennada nuevo a lo que pretendíamos demostrar. Por consiguiente siempre hemos tomado implícitamente que $\rho(\psi, 0)$ es una distribución gaussiana.

3.- DINAMICA CRITICA Y GRUPO DE RENORMALIZACION DINAMICO

Cuando un sistema está en el punto crítico o se encuentra cerca de él, ocurren anomalías en las propiedades dinámicas del mismo, así como en las propiedades estáticas.

Las propiedades dinámicas de un sistema son cantidades como por ejemplo: coeficientes de transporte, tiempos de relajación, funciones de correlación a varios tiempos y respuesta lineal a perturbaciones dependientes del tiempo. Todas ellas dependen de las ecuaciones del movimiento y no están determinadas simplemente por la función de distribución de equilibrio.

Las propiedades estáticas son cantidades como: coeficientes termodinámicos, funciones de correlación a un tiempo y respuesta lineal a perturbaciones independientes del tiempo; y que son determinadas por la función de distribución de equilibrio.

Las anomalías de todas estas cantidades consisten en un comportamiento singular cerca del punto crítico y que se puede caracterizar por medio de exponentes (críticos) y leyes de escala.

Los fenómenos críticos estáticos dependen de la dimensionalidad d del espacio, del número n de componentes de la variable relevante, del rango de las fuerzas y de las impurezas presentes. Los fenómenos críticos dinámicos aparte de los factores estáticos anteriores, dependen de las

leyes de conservación de las variables y de las fuerzas de origen canónico.

Los modelos teóricos propuestos para explicar estos fenómenos son semimicroscópicos y estocásticos, y su origen es más o menos fenomenológico pues existen grandes dificultades para su deducción microscópica. No obstante existen unos criterios físicos para su obtención que a continuación resumimos.

Consideremos un sistema físico descrito por un conjunto de variables clásicas $\phi_{\mu}(t)$, que incluyen los correspondientes momentos. Su evolución vendrá dada por las ecuaciones del movimiento, que de acuerdo con la Mecánica Clásica se expresarán en función del Hamiltoniano del sistema $\mathcal{H}[\phi]$, a través de los corchetes de Poisson

$$\frac{d}{dt}\phi_{\mu}(t) = [\phi_{\mu}(t), \mathcal{H}[\phi(t)]] = \sum_{\mu'} W_{\mu\mu'} \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi_{\mu'}(t)} \quad (1)$$

donde

$$W_{\mu\mu'} = [\phi_{\mu}, \phi_{\mu'}] = -[\phi_{\mu'}, \phi_{\mu}] \quad (2)$$

El conjunto ϕ_{μ} suele ser muy numeroso, y es conveniente considerar un subconjunto Ψ_{μ} , y promediar sobre las restantes variables. Las nuevas variables Ψ_{μ} , que llamaremos variables gruesas o relevantes (Green, 1.952), serán necesariamente estocásticas, y estamos interesados ahora en su ecuación de evolución.

Estas variables Ψ_{μ} , serán de variación amplia en el

espacio por lo que tendrán asociado un vector de onda de longitud pequeña.

Como se pretende expresar la dinámica para las variables $\Psi_{\mu}(t)$ a través de un Hamiltoniano efectivo se requieren importantes condiciones :

a) Equilibrio térmico:

La función de distribución del equilibrio ha de tener la forma

$$P_{eq}(\Psi) \sim e^{-H[\Psi]} \quad (3)$$

que ha de ser consistente con la Mecánica Estadística y describir correctamente las propiedades estáticas del sistema. Este Hamiltoniano efectivo incluye el factor $1/k_B T$ de Boltzman.

b) Relajación hacia el equilibrio.

La función de Probabilidad $P(\Psi, t)$ debe relajarse hacia $P_{eq}(\Psi)$ para tiempos grandes.

c) Causalidad.

En presencia de un campo externo $f(t')$, los valores esperados de $\langle \Psi_{\mu}(t) \rangle$ sólo dependerán de $f(t')$, para $t > t'$. Esto se reflejará en que la función respuesta tenga un factor de la forma $\theta(t-t')$.

d) Existencia del Teorema de Fluctuación-Disipación.

Mediante dicho teorema se relacionan la función de correlación y la función respuesta lineal en el estado

estacionario; y se obtienen los resultados estáticos a partir de los dinámicos. Este teorema ha sido probado para muchos sistemas físicos con toda clase de generalidad por Garrido y San Miguel (1.978 a).

Todas estas condiciones se han de tener en cuenta a la hora de definir un modelo fenomenológico para la descripción de los fenómenos críticos. Los modelos fenomenológicos más sencillos son el A y el B de Halperin y otros (1.974), que son puramente disipativos y que a continuación resumimos.

A semejanza de la ecuación del movimiento para una partícula browniana libre

$$\dot{p}(t) = -\lambda p(t) + \zeta(t) \quad (4)$$

que en función de su Hamiltoniano $H = \frac{p^2}{2m}$, puede expresarse como,

$$\dot{p}(t) = -\lambda' \frac{\partial H}{\partial p} + \zeta(t) \quad (5)$$

se define una ecuación fenomenológica del movimiento para la variable relevante $\psi_\mu(t)$,

$$\dot{\psi}_\mu(t) = -\Gamma_\mu \frac{\delta H}{\delta \psi_\mu(t)} + \zeta_\mu(t) \quad (6)$$

donde, $\mu = (\vec{q}, i)$ en un conjunto de índices que contiene el vector de onda \vec{q} , y otros, como el nº de componentes; Γ_μ es el coeficiente cinético y $H[\psi]$ es el funcional de energía libre o Hamiltoniano afectivo del modelo de Ginzburg-Landau-Wilson,

$$\mathcal{H}[\psi] = \frac{1}{2} \sum_{\mu} (r_0 + q^2) \psi_{\mu} \psi_{-\mu} + u_0 \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4} (\psi_{\mu_1} \psi_{\mu_2}) (\psi_{\mu_3} \psi_{\mu_4}) \delta_{\mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \mu_4, 0} \quad (7)$$

donde los sumatorios indican que se suman los índices vectoriales y se integran los vectores de onda hasta un corte Λ . A fin de que (6) describa un proceso Markoviano se toma que la fuerza estocástica $\xi_{\mu}(t)$ sea gaussiana y de momentos

$$\begin{aligned} \langle \xi_{\mu}(t) \rangle &= 0 \\ \langle \xi_{\mu}(t) \xi_{\mu'}(t') \rangle &= 2 \Gamma_{\mu} \delta_{\mu, \mu'} \delta(t-t') \end{aligned} \quad (8)$$

En estas circunstancias el sistema puede describirse alternativamente por una ecuación de Fokker-Planck para la distribución de probabilidad $P(\psi, t)$ (Graham, 1.973), que toma la forma

$$\frac{\partial P(\psi, t)}{\partial t} = \sum_{\mu} \Gamma_{\mu} \frac{\partial}{\partial \psi_{\mu}} \left[\frac{\partial}{\partial \psi_{\mu}} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \psi_{\mu}} \right] P(\psi, t) \quad (9)$$

y cuya solución estacionaria es de la forma deseada

$$P_{st}(\psi) \sim e^{-\mathcal{H}[\psi]} \quad (10)$$

que corresponde a la distribución de equilibrio de Ginzburg-Landau-Wilson.

En el caso gaussiano ($u_0 = 0$) es fácil demostrar (más adelante se hará) que la función respuesta lineal a una fuerza perturbativa, en espacio ω , es

$$\chi(q, \omega)^{-1} = r_0 + q^2 - \frac{i\omega}{\Gamma_q} \quad (11)$$

y entonces el coeficiente cinético Γ_q se puede definir como

$$\Gamma_q \equiv \frac{\partial}{\partial(-i\omega)} \chi(q, \omega)^{-1} \Big|_{\omega=0} \quad (12)$$

definición que se extiende al caso no lineal. En el modelo A, $\Gamma_q = \Gamma_0$, no se conserva el parámetro de orden $\psi_m(t)$, y en el modelo B, $\Gamma_q = q^2 \Gamma_0$, si que se conserva.

Una teoría sobre dinámica crítica ha de poder calcular los exponentes críticos que determinan el comportamiento singular de las cantidades físicas de interés y encontrar las leyes de escala que satisface la función respuesta. Pero los fenómenos críticos están caracterizados principalmente porque en ellos intervienen un número muy elevado de grados de libertad y a diferencia de otros problemas físicos no es posible hacer simplificaciones y reducir este número cerca del punto crítico.

Pensemos, por ejemplo, en un gas. Tiene millones de moléculas y por lo tanto grados de libertad del mismo orden, pero para su comportamiento macroscópico precisamos de pocas variables. Esta drástica simplificación es imposible hacerla en las cercanías del punto crítico. Todos los grados de libertad microscópicos contribuyen en el comportamiento macroscópico y discontinuo del sistema a la temperatura crítica.

El Grupo de Renormalización nace como una herramienta matemática para abordar estos problemas, que pueden considerarse como uno de los más difíciles de la Física actual.

El primer paso matemático del Grupo de Renormalización es reducir el número de grados de libertad a un conjunto inferior de grados efectivos de libertad que incluyan el efecto de los anulados. Esta reducción es iterativa, y el factor de reducción es $b > 1$

Si inicialmente teníamos un Hamiltoniano H_0 , que representaba la estática de nuestro sistema y que describía las interacciones entre los grados de libertad, después de la reducción tendremos otro H_1 que nos describirá las interacciones entre los nuevos grados efectivos de libertad. Si llamamos R_q a este procedimiento de reducir grados de libertad y construir el nuevo Hamiltoniano efectivo, tenemos que

$$R_q(H_0) = H_1 \quad ; \quad R_q(H_1) = H_2 \quad \dots \quad \text{ect} \quad (13)$$

Un resultado matemático interesante es que el procedimiento iterativo tenga un punto fijo,

$$R_q(H^*) = H^* \quad (14)$$

Y aquí es donde Kadanoff (1.976) introduce su idea de que el Hamiltoniano crítico ha de ser un punto fijo, pues experimentalmente se observa que el sistema es invariante por cambio de escala en ese punto (Wegner, 1.976), y la operación de renormalizar es una transformación de escala principalmente. H^* no hace referencia a H_0 , y así queda incluida la idea de universalidad, es decir, que hamiltonianos iniciales diferentes tienen el mismo comportamiento crítico.

Estas ideas permanecieron infructuosas hasta que Wilson (1.971) pudo convertirlas en cálculos explícitos y obtener el valor de los exponentes críticos. El Grupo de Renormalización definido por Wilson y Kogut (1.974) se aplicó únicamente a fenómenos críticos estáticos y su formalismo está basado en los diagramas de tipo Feynman.

El éxito espectacular de este tratamiento en la obtención de resultados concretos ha morivado fuertemente los intentos de su generalización a los fenómenos críticos dinámicos (Halperin , Hohenberg y Ma, 1.972). El resultado, si bien importante por su aplicación deja sin embargo problemas pendientes, destacando a nuestro juicio, la fundamentación matemática de los formalismos empleados, así como la clarificación de las hipótesis utilizadas (Halperin, Hohenberg y Siggia, 1.976).

En las referencias antes citadas apenas se hace alguna justificación del formalismo usado, ni de las hipótesis empleadas, dedicándose mayormente a la exposición de resultados.

Existe un intento de clarificación matemática de estos formalismos (Enz, 1.977), pero dicho tratamiento adolece de errores ya puestos de manifiesto por San Miguel (1.978).

Hemos de resaltar que existen otros formalismos matemáticos para tratar los fenómenos críticos, distintos del de Wilson, entre los que podemos citar aquellos que utilizan ecuaciones de Callan-Symanzik. Por ejemplo Jansen(1.976); Bausch, Jansen y Wagner (1.976), que siguiendo el trabajo

de De Dominicis, Brezin y Zinn-Justin (1.975); parten de un Lagrangiano mecánico cuántico en límite clásico para describir las ecuaciones del movimiento de los campos, y toman como operador relevante un nuevo Lagrangiano completamente clásico donde aparece un operador conjugado del campo que no es más que $\hat{\Psi}$ del formalismo operacional. Un tratamiento parecido podemos encontrarlo en Yamada , Ohta y Kawasaki (1.977).

Otro formalismo introducido para describir los fenómenos críticos dinámicos es el basado en la aplicación del Grupo de Renormalización sobre la ecuación de Fokker-Planck. Yahata (1.974) parte de una ecuación de Fokker-Planck para un sistema que se relaja, cuya probabilidad estacionaria es la de Wilson. La solución formal de la ecuación de Fokker-Planck se expresa como una integral de camino, y aplica el Grupo de Renormalización a esta solución.

Suzuki (1.973) a partir de la ecuación de Fokker-Planck define un Liouvilliano sobre el que aplica el Grupo de Renormalización en forma de una teoría perturbativa no diagramática. En esta línea hay que incluir a Kawasaki y Gunton (1.976) que expresan el Grupo de Renormalización en forma de ecuaciones diferenciales para los parámetros, obtenidas a partir de la transformación del Liouvilliano por la aplicación del Grupo de Renormalización, en una línea ya introducida por Wilson y Kogut (1.974) y Wegner (1.976) en estática.

En este capítulo emplearemos el formalismo matemático desarrollado por Garrido y San Miguel (1.977 y 1.978 a),

a fin de clarificar y fundamentar tanto los formalismos que emplean diagramas de tipo Feynman como los que derivan de la ecuación de Fokker-Planck.

En el apartado 3.1 veremos los resultados que se pueden obtener al aplicar el Grupo de Renormalización a la ecuación de Fokker-Planck; y en el apartado 3.2 fundamentaremos la teoría perturbativa, basada en el formalismo operacional, que se aplica en el Grupo de Renormalización Dinámico derivado del Grupo de Renormalización estático de Wilson.

3.1.- Dinámica crítica y ecuación de Fokker-Planck

3.1.a) Definiciones y Generalidades.

La estática de un sistema físico estadístico está determinada por el Hamiltoniano del sistema. Esta es pues la magnitud relevante en este problema y el Grupo de Renormalización Estático estudia sus propiedades de transformación bajo el mismo.

Para la descripción de la Dinámica Crítica necesitamos otra magnitud que no puede ser el Hamiltoniano. Esta magnitud será el operador Liouvilliano. La elección del Liouvilliano viene determinada porque este operador define toda la evolución temporal del sistema físico, ya sea mediante la ecuación del movimiento de las variables relevantes (Formalismo Operacional)

$$\dot{\psi}_m(t) = [L, \psi_m(t)] \quad ; \quad \dot{\hat{\psi}}_m(t) = [L, \hat{\psi}_m(t)] \quad (15)$$

o bien por medio de la ecuación de evolución de la función de distribución (Ecuación de Fokker-Planck),

$$\frac{\partial P(\psi, t)}{\partial t} = L^+ P(\psi, t) \quad (16)$$

donde L^+ no es más que el operador adjunto de L . Ambas descripciones son equivalentes (Graham, 1.973).

Por razones de consistencia (Kuramoto, 1.974; De Dominicis y otros, 1.975; Enz, 1.977; entre otras referencias) se ha de poder derivar de una manera natural el Grupo de

Renormalización Estático a partir del Grupo de Renormalización Dinámico, tanto en la descripción (15) como en la (16).

Vamos ahora a extender la idea intuitiva de Kadanoff sobre la estática crítica a la dinámica en el punto crítico. En dicho punto el Hamiltoniano era invariante por el Grupo de Renormalización estático y esto era motivado porque el sistema era espacialmente invariante por un cambio de escala.

Algo parecido ocurre en dinámica crítica. A medida que nos acercamos al punto crítico, el sistema evoluciona más lentamente y de aquí deducimos intuitivamente que salvo una transformación de dilatación del tiempo, el sistema en el punto crítico habrá de ser también invariante por el Grupo de Renormalización Dinámico.

Esta invarianza no se aplicará al operador Liouvilliano, sino a las ecuaciones del movimiento, y de la invarianza de éstas obtendremos un resultado para \mathcal{L}^c (Liouvilliano en el punto crítico).

Ahora pasamos a definir el Grupo de Renormalización Dinámico siguiendo la idea de Wilson y obtendremos algunos resultados de su aplicación formal sobre la ecuación de Fokker-Planck.

Las transformaciones originadas por la aplicación del Grupo de Renormalización serán efectuadas por el operador R'_1 . Este operador realizará las operaciones siguientes:

- 1ª) Integración de las variables $\psi_\mu(t)$, $\mu = (\vec{q}, i)$, con $\frac{\Lambda}{b} < |q| < \Lambda$. Este paso corresponde a la eliminación de las variables más microscópicas, y que vendrá representada por el operador, que llamaremos G_1
- 2ª) Cambios de escala para todas las variables, definidos por medio del operador T_ρ (Kuramoto, 1.974), y que explicitamos

$$\begin{aligned} T_\rho(q) &= q' = qb \\ T_\rho(\psi_\mu(t)) &= \psi'_\mu(t') = b^{-1 - \frac{d}{2} + \frac{\gamma}{2}} \cdot \psi_\mu(t) \\ T_\rho(t) &= t' = t \cdot b^{-z} \quad b = e^\rho > 1 \end{aligned} \quad (17)$$

Donde b indica el factor de reducción, d es la dimensionalidad del espacio, γ es un exponente crítico estático y z es un exponente crítico dinámico.*

Podemos ver que para $\rho=0$ ($b=1$), tenemos el operador identidad para T_ρ , e igualmente para el operador G_1 .

Teniendo en cuenta los puntos 1º y 2º podemos expresar el operador del Grupo de Renormalización Dinámico de la forma

$$R'_\rho = T_\rho \circ G_1 \quad (18)$$

* Si hubiera más de una variable relevante, se tendría que generalizar (17), y definir también la transformación de las nuevas variables. Esto conduce a la definición de tantos exponentes z como variables (Kawasaki y Gunton, 1.976) y exige una reformulación adecuada del formalismo.

que luego utilizaremos.

Estos dos puntos, 1º y 2º, son los mismos del Grupo de Renormalización Estático, salvo la transformación del tiempo. Todos los autores coinciden en ellos, pero difieren en la realización práctica del primer punto para el que se emplean diversos formalismos: formalismo operacional y diagramas de Feynman, operadores de Proyección, o ecuaciones de Callan-Symanzik.

3.1.b) Punto crítico e hipótesis dinámica

Tomemos la ecuación (16) y apliquémosle el operador R_e' a ambos lados

$$R_e' \left(\frac{\partial P}{\partial t} \right) = R_e'(L^+P) \quad (19)$$

sustituyendo (18) y usando (17), obtenemos

$$\frac{1}{e^{-zP}} \frac{\partial P_e}{\partial t} = R_e'(L^+P) = L_e^+ P_e \quad (20)$$

donde P_e es la transformada de P por R_e' , y además hemos definido L_e^+ a través de imponer que (Kawasaki y Gunton, 1.976)

$$R_e'(L^+P) = L_e^+ P_e \quad (21)$$

Después de esto reescribimos (20) en la forma

$$\frac{\partial P_e}{\partial t} = e^{-zP} L_e^+ P_e \quad (22)$$

a fin de que se parezca lo más posible a la ecuación inicial (16). Si al Liouvilliano inicial L^+ lo llamamos L_1^+ y a su transformado de acuerdo con (21) L_{1e}^+ , entonces escribiendo (22) en la forma

$$\frac{\partial P_e}{\partial t} = L_2^+ P_e \quad (23)$$

obtenemos que el nuevo Liouvilliano, que nos deja la ecuación de Fokker-Planck del mismo tipo que la inicial, se relaciona con el inicial como

$$L_2^+ = e^{-2\beta} L_{1e}^+ \quad (24)$$

donde observamos que el nuevo Liouvilliano no es únicamente el transformado del anterior.

El procedimiento lo podemos iterar, aplicando sucesivamente R_{β} , a fin de encontrar un punto fijo para esta transformación. El resultado final habrá de ser una ecuación de Fokker-Planck fija,

$$\frac{\partial P^*}{\partial t} = L^{*+} P^* \quad (25)$$

donde L^{*+} es el Liouvilliano correspondiente a la ecuación fija. Si ahora aplicamos el operador R_{β} sobre (25) obtenemos de acuerdo con (22)

$$\frac{\partial P_e^*}{\partial t} = e^{2\beta} L_e^{*+} P_e^* \quad (26)$$

y por otra parte por ser (25) punto fijo, se tendrá que escribir

$$\frac{\partial P_e^*}{\partial t} = L^{*+} P_e^* \quad (27)$$

lo que nos conduce a que L^{*+} se ha de transformar como

$$L^{*+} = e^{-z\ell} L_e^{*+} \quad (28)$$

para todo ℓ , a fin de que (25) sea invariante. Se observa pues como L^{*+} no es invariante, a diferencia de lo que sucede en estática con H^* .

Vamos a conectar ahora el punto fijo con el punto crítico. Por la hipótesis del Grupo de Renormalización Estático tenemos que los Hamiltonianos crítico y fijo están relacionados de la forma

$$\lim_{\ell \rightarrow \infty} R_\ell H^c = H^* \quad (29)$$

donde H^c es el Hamiltoniano en el punto crítico. Esta ecuación nos indica que para $\ell \rightarrow \infty$, H^c es un punto fijo.

Generalizamos (29) a la Dinámica Crítica mediante la hipótesis

$$\lim_{\ell \rightarrow \infty} R_\ell' \left(\frac{\partial P^c}{\partial t} = L^{c+} P^c \right) = \left(\frac{\partial P^*}{\partial t} = L^{*+} P^* \right) \quad (30)$$

En este caso, la ecuación diferencial para P , en $T = T_c$, es un punto fijo por la aplicación de R_ℓ' para $\ell \rightarrow \infty$.

L^{c+} no es más que L^+ en $T = T_c$, es decir el Liouvilliano crítico.

Vamos ahora a recuperar la hipótesis estática a par-

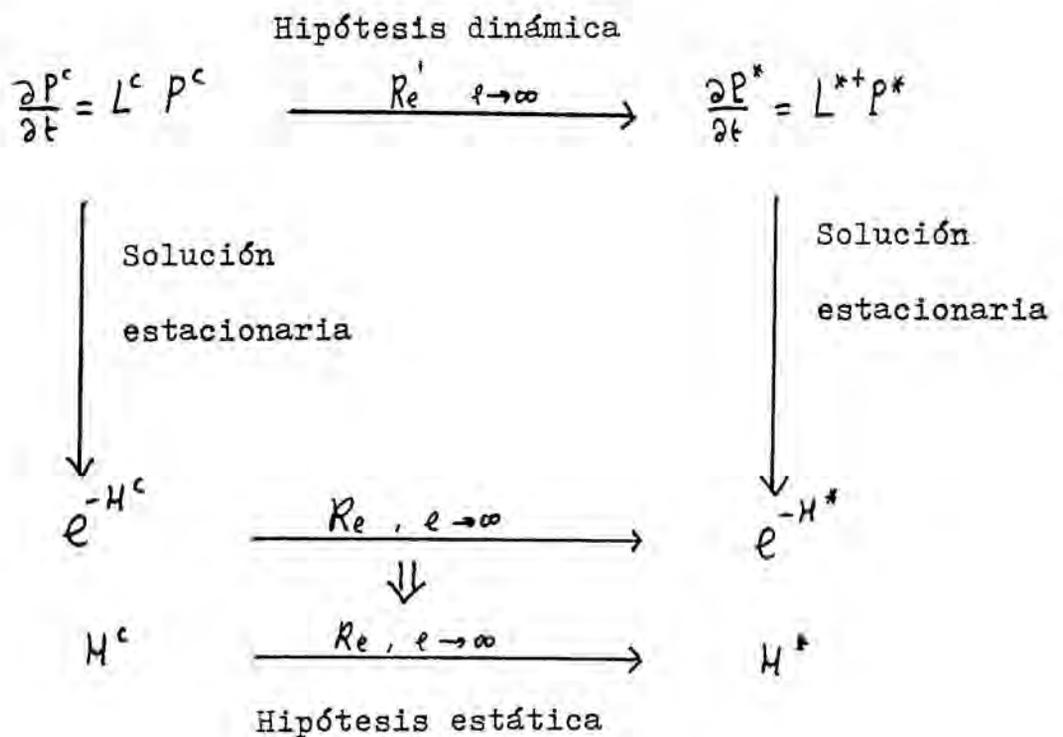
tir de la hipótesis dinámica y por lo tanto el Grupo de Renormalización estático a partir del Grupo de Renormalización Dinámico.

La ecuación (25) tiene como solución estacionaria

$$P_{st} \sim e^{-H^*} \quad (31)$$

y la ecuación (27) tiene la misma solución. Por lo tanto P_{st} es invariante por R_λ . La invarianza de la solución estacionaria nos hace recuperar la invarianza de H^* , de acuerdo con el Grupo de Renormalización estático; resultado aplicable también al punto crítico.

Resumimos estas relaciones mediante el siguiente diagrama



donde apreciamos explícitamente que de la hipótesis dinámica y de las soluciones estacionarias obtenemos la hipótesis estática, que era nuestro objetivo en este apartado.

3.1.c) Solución estacionaria de la ecuación de Fokker-Planck.

Hemos visto en el apartado anterior que la manera de conectar el Grupo de Renormalización estático con el Grupo de Renormalización Dinámico era a través de la solución estacionaria de la ecuación de Fokker-Planck. También vimos anteriormente que los modelos fenomenológicos dinámicos han de tener como solución estacionaria la correspondiente a su estática.

Vamos pues a estudiar las condiciones sobre los diferentes términos de la ecuación de Fokker-Planck a fin de obtener la estática correcta.

La dinámica crítica se estudia a partir de ecuaciones fenomenológicas del tipo de Langevin, que de forma más general que en (6) escribimos

$$\dot{\psi}_\mu(t) = \Lambda_\mu(\psi(t), t) + \xi_\mu(t) \quad (32)$$

donde la fuerza estocástica $\xi_\mu(t)$ tiene las propiedades ya enumeradas en (8). $\Lambda_\mu(\psi(t), t)$ es el término llamado de arrastre. La ecuación de Fokker-Planck asociada a (32) es (1.36)

$$\frac{\partial P(\psi, t)}{\partial t} = \sum_\mu \hat{\psi}_\mu \left\{ -\Lambda_\mu(\psi, t) + \sum_\nu D_{\mu\nu} \hat{\psi}_\nu \right\} P(\psi, t) \quad (33)$$

donde $D_{\mu\nu}$ es la matriz de correlación de las fuerzas estocásticas.

Dado que estamos interesados en que (33) tenga solución estacionaria de la forma (3), podemos descomponer el término de arrastre en dos partes (Graham, 1.973)

$$\Lambda_{\mu}(\psi, t) = J_{\mu}(\psi, t) - \int_{\mu} \frac{\partial H[\psi]}{\partial \psi_{\mu}} \quad (34)$$

El término J_{μ} corresponde a la parte organizada y reversible del movimiento y que puede provenir de una descripción canónica que no se perdió al pasar de las variables microscópicas a las variables gruesas o relevantes.

El segundo término de (34) hace referencia a la parte irreversible y disipativa del movimiento.

Puesto que estamos interesados en que la solución estacionaria sea del tipo (3), sustituimos dicha solución en (33) e igualamos a cero

$$\sum_{\mu} \frac{\partial}{\partial \psi_{\mu}} \left\{ -J_{\mu}(\psi) + \int_{\mu} \frac{\partial H[\psi]}{\partial \psi_{\mu}} + \sum_{\nu} D_{\mu\nu} \frac{\partial}{\partial \psi_{\nu}} \right\} e^{-H[\psi]} = 0 \quad (35)$$

Después de efectuar las derivaciones y comparar término a término encontramos las siguientes condiciones

$$D_{\mu\nu} = \int_{\mu} \delta_{\mu,-\nu} \quad (36)$$

$$\sum_{\mu} \left(\frac{\partial J_{\mu}(\psi)}{\partial \psi_{\mu}} - J_{\mu}(\psi) \frac{\partial H[\psi]}{\partial \psi_{\mu}} \right) = 0 \quad (37)$$

La primera de ellas no es más que la relación de Einstein entre el coeficiente de correlación de la fuerza estocástica y el coeficiente de fricción o cinético.

Si el origen de $J_m(\psi)$ es canónico se podrá escribir en función de $H[\psi]$ en la forma (Enz y Garrido, 1.976)

$$J_m(\psi) = - \sum_{\nu} d_{\mu\nu} \frac{\partial H[\psi]}{\partial \psi_{\nu}} \quad (38)$$

donde $d_{\mu\nu}$ es una matriz constante antisimétrica. Sustituyendo (38) en (37) se llega a la expresión

$$\sum_{\mu\nu} \left(d_{\mu\nu} \frac{\partial H[\psi]}{\partial \psi_{\nu}} \cdot \frac{\partial H[\psi]}{\partial \psi_{\mu}} - d_{\mu\nu} \frac{\partial^2 H[\psi]}{\partial \psi_{\mu} \partial \psi_{\nu}} \right) = 0 \quad (39)$$

que es manifiestamente cierta debido a la antisimetría de $d_{\mu\nu}$ y a la simetría de sus correspondientes factores.

Para los casos distintos de (38) se ha de comprobar explícitamente (37), como vamos a hacer a continuación.

3.1.d) Modelos

Vamos a discutir diversos modelos que aparecen en la literatura actual sobre Dinámica Crítica.

Empezaremos con un modelo para describir la dinámica de un sistema ferromagnético isótropo de Heisenberg, que tiene la ventaja de ser de una única variable y que incluye, a su vez, otros modelos. Está caracterizado por el

Liouvilliano adjunto siguiente

$$L^+ = \sum_{q,\alpha} \frac{\partial}{\partial \Psi_{q,\alpha}} \left\{ -J_{q,\alpha}(\Psi) + \sqrt{g} \left(\frac{\partial H[\Psi]}{\partial \Psi_{q,\alpha}} + \frac{\partial}{\partial \Psi_{q,\alpha}} \right) \right\} \quad (40)$$

donde ya hemos tenido en cuenta la relación de Einstein (36) y además el índice $\mu=(q, \alpha)$ está desglosado debido a que aparecen explícitamente los componentes vectoriales de Ψ_q en el término de arrastre reversible, $J_{q,\alpha}(\Psi)$.

Este término tiene su origen en el producto vectorial de $\vec{\Psi}$ con $\frac{\partial H[\Psi]}{\partial \vec{\Psi}}$, que lo explicitaremos por medio del tensor, $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$, completamente antisimétrico

$$J_{q,\alpha}(\Psi) = \lambda_0 \sum_{\kappa} \sum_{\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \Psi_{q,\kappa,\beta} \frac{\partial H[\Psi]}{\partial \Psi_{\kappa,\gamma}} \quad (41)$$

donde λ_0 es la constante de acoplamiento.

Para comprobar que este sistema tenga la solución estacionaria correspondiente, necesitamos comprobar (37), y sustituyendo (41) en (37) obtenemos

$$\lambda_0 \left\{ \sum_{q} \sum_{\kappa} \sum_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \left[\frac{\partial \Psi_{q,\kappa,\beta}}{\partial \Psi_{q,\alpha}} \frac{\partial H}{\partial \Psi_{\kappa,\gamma}} + \Psi_{q,\kappa,\beta} \frac{\partial^2 H}{\partial \Psi_{q,\alpha} \partial \Psi_{\kappa,\gamma}} - \Psi_{q,\kappa,\beta} \frac{\partial H}{\partial \Psi_{\kappa,\gamma}} \frac{\partial H}{\partial \Psi_{q,\alpha}} \right] \right\} = \quad (42)$$

$$= \lambda_0 \left\{ \sum_{q} \sum_{\kappa} \sum_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \left[\delta_{q,\kappa,q} \cdot \delta_{\beta\alpha} \frac{\partial H}{\partial \Psi_{\kappa,\gamma}} + \Psi_{q,\kappa,\beta} \frac{\partial^2 H}{\partial \Psi_{q,\alpha} \partial \Psi_{\kappa,\gamma}} - \Psi_{q,\kappa,\beta} \frac{\partial H}{\partial \Psi_{\kappa,\gamma}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \Psi_{q,\alpha}} \right] \right\} = 0$$

que ciertamente es igual a cero, pues todos los sumandos son simétricos respecto a dos índices, (el primero en α y β ; y los dos últimos en α y γ), y están contraídos con

tensor completamente antisimétrico.

El Hamiltoniano que se toma para este modelo es el correspondiente de Ginzburg-Landau-Wilson (7).

Si tomamos $\lambda_0 = 0$ obtenemos los modelos A y B (Halperin y otros, 1.974) dependiendo si el parámetro de orden $\Psi_q(t)$ no se conserva (Modelo A con $\Gamma_q = \Gamma_0$) o se conserva (Modelo B con $\Gamma_q = q^2 \Gamma_0$). Estos dos modelos son puramente disipativos.

Otra manera de caracterizar este modelo es a través de sus parámetros, que en este caso son cuatro ($\nu_0, u_0, \Gamma_0, \lambda_0$). Los dos primeros corresponden únicamente a la estática que es la correspondiente al modelo de Wilson (1.974).

Pasamos ahora a discutir los modelos que tienen dos variables, entre los que cabe destacar el que describe el comportamiento del Helio superfluido (Kawasaki y Gunton, (1.976); Halperin, Hohenberg y Siggia (1.976)).

Su Liouvilliano adjunto es

$$L^+ = \sum_{\mu} \Gamma_{\mu} \left\{ \frac{\partial}{\partial \Psi_{\mu}} \left(\frac{\partial}{\partial \Psi_{\mu}} + \frac{\partial H}{\partial \Psi_{\mu}} \right) + \frac{\partial}{\partial \Psi_{\mu}} \left(\frac{\partial}{\partial \Psi_{\mu}} + \frac{\partial H}{\partial \Psi_{\mu}} \right) \right\} + \sum_{\mu} \xi_{\mu} \frac{\partial}{\partial S_{\mu}} \left(\frac{\partial}{\partial S_{\mu}} + \frac{\partial H}{\partial S_{\mu}} \right) - \sum_{\mu} \lambda_0 \left\{ i \left(\frac{\partial \Psi_{\mu}}{\partial \Psi_{\mu}} \frac{\partial H}{\partial S_{\mu}} - \frac{\partial \Psi_{\mu}}{\partial S_{\mu}} \frac{\partial H}{\partial \Psi_{\mu}} \right) - i \left(\frac{\partial \Psi_{\mu}}{\partial S_{\mu}} \frac{\partial H}{\partial \Psi_{\mu}} - \frac{\partial \Psi_{\mu}}{\partial \Psi_{\mu}} \frac{\partial H}{\partial S_{\mu}} \right) \right\} \quad (43)$$

donde $\Psi_{\mu} = \Psi_{\mu}^*$ pues las variables Ψ son complejas, mientras que S_{μ} son reales. Podemos ver que el Liouvilliano tiene tres partes diferenciadas, las dos primeras corresponden a los términos de arrastre irreversible y difusión

para cada una de las variables, y el último término corresponde al acoplamiento entre variables.

En los dos primeros términos ya se ha tenido en cuenta la relación de Einstein (36) para cada variable, por lo tanto queda por comprobar la condición (37). En este caso es más sencillo comprobar que el tercer término de (43) al aplicarlo sobre $\rho_{st} \sim e^{-H}$ da cero. Explicitando los pasos

$$\sum_{\mu} \lambda_0 \left\{ i \left(\frac{\partial \psi_{\mu}}{\partial s_{\mu}} \frac{\partial H}{\partial s_{\mu}} - \frac{\partial \psi_{-\mu}}{\partial s_{-\mu}} \frac{\partial H}{\partial s_{-\mu}} \right) - i \left(\frac{\partial \psi_{\mu}}{\partial s_{\mu}} \frac{\partial H}{\partial \psi_{\mu}} - \frac{\partial \psi_{-\mu}}{\partial s_{-\mu}} \frac{\partial H}{\partial \psi_{-\mu}} \right) \right\} e^{-H} =$$

$$= \sum_{\mu} \lambda_0 \left\{ i \left(\frac{\partial H}{\partial s_{\mu}} + \psi_{\mu} \frac{\partial^2 H}{\partial \psi_{\mu} \partial s_{\mu}} - \psi_{\mu} \frac{\partial H}{\partial s_{\mu}} \frac{\partial H}{\partial \psi_{\mu}} - \frac{\partial H}{\partial s_{\mu}} - \psi_{-\mu} \frac{\partial^2 H}{\partial \psi_{-\mu} \partial s_{-\mu}} + \psi_{-\mu} \frac{\partial H}{\partial s_{-\mu}} \frac{\partial H}{\partial \psi_{-\mu}} \right) \right\} e^{-H} + \text{parte}$$

y que se puede ver que es idénticamente nulo al recorrer el sumatorio los índices $+\mu$ y $-\mu$.

El Hamiltoniano elegido para estos sistemas es el de Ginzburg -Landau-Wilson (7) más dos términos nuevos

$$H[\psi, s] = \sum_{\mu} \frac{1}{2} (r_0 + q^2) \psi_{\mu} \psi_{\mu} + u_0 \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4} (\psi_{\mu_1} \psi_{\mu_2}) (\psi_{\mu_3} \psi_{\mu_4}) \delta_{\mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \mu_4, 0} +$$

$$+ \sum_{\mu} \frac{1}{2c_0} s_{\mu} s_{\mu} + \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu_3} v_0 s_{\mu_1} (\psi_{\mu_2} \psi_{\mu_3}) \delta_{\mu_1 + \mu_2 + \mu_3, 0} \quad (44)$$

donde el último término corresponde al acoplamiento entre variables.

Si hacemos $\lambda_0 = 0$, obtenemos los modelos C y D de

Halperin, Hohenberg y Ma, (1.976). Donde ahora S_μ será la energía y Ψ el parámetro de orden. El parámetro ξ_μ será igual a $\lambda^E q^L$, lo que significa que la energía se conserva. Si Ψ_μ no se conserva tenemos el modelo C con $\Gamma_\mu = \Gamma_0$ y si se conserva tendremos el modelo D con $\Gamma_\mu = q^2 \Gamma_0$

Los parámetros que describen este modelo son $(r_0, u_0, c_0, v_0, \Gamma_0, \lambda^E, \lambda_0)$. Los cuatro primeros corresponden a la estática.

Pasamos ahora a la descripción de otro modelo principalmente indicado para la descripción de sistemas clásicos que obedecen una dinámica canónica y disipativa a la vez (Enz, 1.977)

El Liouvilliano es

$$L^+ = \sum_{\mu} \frac{\partial}{\partial u_{\mu}} \left(-\frac{\partial H}{\partial p_{\mu}} \right) + \sum_{\mu} \frac{\partial}{\partial p_{\mu}} \left(\frac{\partial H}{\partial u_{\mu}} \right) + \sum_{\mu} \Gamma_{\mu} \frac{\partial}{\partial p_{\mu}} \left(\frac{\partial H}{\partial p_{\mu}} + \frac{\partial}{\partial p_{-\mu}} \right) + \sum_{\mu} \lambda_{\mu} \frac{\partial}{\partial \epsilon_{\mu}} \left(\frac{\partial H}{\partial \epsilon_{\mu}} + \frac{\partial}{\partial \epsilon_{-\mu}} \right) \quad (45)$$

donde tenemos tres variables relevantes, u_{μ} , p_{μ} , ϵ_{μ} , y u_{μ} , p_{μ} son variables canónicas conjugadas.

Los dos últimos términos contienen la parte correspondiente al arrastre irreversible y a la difusión de las variables p_{μ} (momento) y ϵ_{μ} (energía). Dado que los dos primeros términos son canónicos se pueden escribir en la forma (38) y por lo tanto se cumple idénticamente (37).

El Hamiltoniano que se toma en este caso es

$$\begin{aligned}
 H[p, u, \varepsilon] = & \frac{1}{2} \sum_{\mu} \frac{1}{\rho} p_{\mu} p_{-\mu} + \frac{1}{2} \sum_{\mu} \rho \omega_{\mu}^2 u_{\mu} u_{-\mu} + \frac{1}{2} \sum_{\mu} \frac{1}{Q} \varepsilon_{\mu} \varepsilon_{-\mu} + \\
 & + \gamma \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu_3} (u_{\mu_1} u_{\mu_2}) \varepsilon_{\mu_3} \cdot \delta_{\mu_1 + \mu_2 + \mu_3, 0} + u_0 \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4} (u_{\mu_1} u_{\mu_2}) (u_{\mu_3} u_{\mu_4}) \cdot \delta_{\mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \mu_4, 0}
 \end{aligned} \tag{46}$$

que es del mismo tipo que (44) más el primer término de "energía cinética".

Los parámetros que describen este modelo son $(\rho, \omega_{\mu}, Q, \gamma, u_0, \Gamma_{\mu}, \lambda_{\mu})$, correspondiendo los cinco primeros a la estática. Con respecto a los diferentes valores de Γ_{μ} y λ_{μ} se pueden hacer los mismos comentarios que en el modelo anterior.

Hemos visto pues como la ecuación de Fokker-Planck nos ha permitido comprobar, de una manera elegante, las propiedades estacionarias de estos sistemas. Pasaremos ahora a la aplicación del formalismo operacional en la Dinámica Crítica, que creemos es más adecuado para los cálculos explícitos.

3.2.- Dinámica Crítica y Formalismo Operacional

3.2.a) Definiciones

Hemos visto como mediante la ecuación de Fokker-Planck aplicada a los fenómenos críticos dinámicos, ha sido posible relacionar las hipótesis estática y dinámica del Grupo de Renormalización para el punto crítico.

En este apartado estamos interesados en obtener diversos resultados mediante el uso del formalismo operacional. Estos resultados se referirán especialmente a la fundamentación de las técnicas diagramáticas derivadas del empleo de ecuaciones del tipo de Langevin para la descripción de los fenómenos críticos.

A diferencia de la estática, la dinámica de un sistema físico estocástico viene determinada por un Liouvilliano \mathcal{L} (Formalismo Operacional) o su adjunto \mathcal{L}^+ (Ecuación de Fokker-Planck). Este operador es un polinomio funcional en las variables $\psi(t)$ y $\hat{\varphi}(t)$ con unos coeficientes que pueden depender de los índices de dichas variables. Estos coeficientes, llamados parámetros del sistema, y que en el apartado anterior se explicitaron para los diferentes modelos, nos definen también nuestro problema. Los parámetros en dinámica son los de la estática más los coeficientes de Onsager y los que hacen referencia al acoplamiento entre modos que corresponden a la parte reversible del arrastre. Está claro que los primeros han de estar incluidos pues la estática se ha de poder derivar de la dinámica.

Los segundos hacen referencia a las relaciones entre difusión y disipación, y los últimos tienen su origen, en algunos casos, en la parte canónica de las ecuaciones del movimiento.

Vamos ahora a describir de una forma general como se aplican las operaciones del Grupo de Renormalización Dinámico en el formalismo operacional.

Supongamos que nuestro Liouvilliano tiene inicialmente tres parámetros (Modelos A y B de Halperin, Hohenberg y Ma, 1.974)

$$(v_{\mu}, u_{\mu}, \Gamma_{\mu}) \quad (47)$$

los dos primeros correspondientes a la estática y el tercero a la dinámica. La aplicación de R_{λ}^* transformará los parámetros en otros,

$$R_{\lambda}^*(v_{\mu}, u_{\mu}, \Gamma_{\mu}) = (v_{\mu}', u_{\mu}', \Gamma_{\mu}', \dots) \quad (48)$$

dejando abierta la posibilidad de que aparezcan nuevos parámetros, que por razones de consistencia habrán de ser irrelevantes en el sentido de Wilson (De Dominicis y Peliti, 1.978).

Los parámetros que definan L^* también serán fijos en el punto crítico por la aplicación de R_{λ}^*

$$R_{\lambda}^*(v_{\mu}^*, u_{\mu}^*, \Gamma_{\mu}^*, \dots) = (v_{\mu}^*, u_{\mu}^*, \Gamma_{\mu}^*, \dots) \quad (49)$$

La ecuación (48) nos define unas leyes de recursión de los

parámetros nuevos en función de los antiguos,

$$\begin{aligned}
 r_{\mu}' &= f(r_{\mu}, u_{\mu}, \Gamma_{\mu}) \\
 u_{\mu}' &= g(r_{\mu}, u_{\mu}, \Gamma_{\mu}) \\
 \Gamma_{\mu}' &= h(r_{\mu}, u_{\mu}, \Gamma_{\mu})
 \end{aligned}
 \tag{50}$$

Estas leyes nos permitirán encontrar los puntos fijos, imponiendo

$$\begin{aligned}
 r_{\mu}^* &= f(r_{\mu}^*, u_{\mu}^*, \Gamma_{\mu}^*) \\
 u_{\mu}^* &= g(r_{\mu}^*, u_{\mu}^*, \Gamma_{\mu}^*) \\
 \Gamma_{\mu}^* &= h(r_{\mu}^*, u_{\mu}^*, \Gamma_{\mu}^*)
 \end{aligned}
 \tag{51}$$

y mediante estos resultados obtener los exponentes críticos, de una forma similar a como se hace en estática (Wilson y Kogut, (1.974); Fisher (1.974)).

El problema pues es llegar a las relaciones de recursión (50). Para lograr este objetivo utilizamos la idea que subyace en todo el Grupo de Renormalización, sea estático o dinámico, y es que después de aplicar las transformaciones del grupo, el problema sigue teniendo el mismo aspecto funcional salvo la variación en los parámetros. Esto se traduce en que las funciones de Correlación y Respuesta se les impone que sigan siendo similares a las iniciales después de aplicar el Grupo de Renormalización.

A modo de ejemplo y adelantándonos al estudio de casos explícitos, supongamos que en nuestro problema (modelo A de Halperin y otros, 1.974) la función respuesta libre

($U_0=0$) es

$$\chi^{0-1}(q, \omega) = (r + q^2) - \frac{i\omega}{\Gamma_0} \quad (52)$$

y los parámetros r y Γ_0 los podemos definir de la forma

$$r = \chi^{0-1}(q, \omega) \Big|_{\substack{q=0 \\ \omega=0}} \quad (53)$$

$$\Gamma_0^{-1} = \frac{\partial}{\partial(i\omega)} \chi^{0-1}(q, \omega) \Big|_{\substack{q=0 \\ \omega=0}} \quad (54)$$

La idea anterior se traduce ahora en definir los nuevos parámetros transformados por el grupo, como

$$r' = \chi'^{-1}(q', \omega') \Big|_{\substack{q'=0 \\ \omega'=0}} \quad (55)$$

$$\Gamma'^{-1} = \frac{\partial}{\partial(-i\omega')} \chi'^{-1}(q', \omega') \Big|_{\substack{q'=0 \\ \omega'=0}} \quad (56)$$

y además se añade otra relación

$$1 = \frac{\partial}{\partial q'^2} \chi'^{-1}(q', \omega') \Big|_{\substack{q'=0 \\ \omega'=0}} \quad (57)$$

que tiene por objeto que el coeficiente de q'^2 en (52) se mantenga igual a la unidad.

Si tenemos en cuenta ahora como se transforma la función respuesta lineal (Apéndice I,A) al efectuar la transformación de las variables, podemos expresar las relaciones anteriores en la forma

$$r' = b^{2-\gamma} \chi^{\gamma-1}(q, \omega) \Big|_{\substack{q=0 \\ \omega=0}} \quad (58, a)$$

$$\Gamma^{-1} = b^{2-\gamma-z} \frac{\partial}{\partial(-i\omega)} \chi^{\gamma-1}(q, \omega) \Big|_{\substack{q=0 \\ \omega=0}} \quad (58, b)$$

$$1 = b^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial q^2} \chi^{\gamma-1}(q, \omega) \Big|_{\substack{q=0 \\ \omega=0}} \quad (58, c)$$

donde $\chi^{\gamma}(q, \omega)$ es la función respuesta calculada mediante la teoría perturbativa y donde el superíndice, γ , indica que las integraciones del vector de onda \vec{q} , se han realizado entre $\frac{\Lambda}{b}$ y Λ .

Las ecuaciones (58), y las que por generalización del procedimiento hubiera que introducir, ya contienen las dos operaciones del Grupo de Renormalización dinámico definidas en el apartado 3.2.a). La ley de recursión para el parámetro u , se obtiene a partir de la función de correlación de cuatro variables.

Las ecuaciones (58,a y c) son las mismas que en estática, mientras que (58,b) corresponde únicamente a la dinámica y sirve para obtener el exponente crítico dinámico z de estos modelos.

El siguiente paso es obtener las leyes de escala. Estas se definen a través de la hipótesis de escala dinámica (Ferrelly y otros, 1.967) que establece que la función respuesta $\chi(q, \omega)$ tiene la forma

$$\chi(q, \omega) = \chi(q) \cdot Y\left(\frac{\omega}{\Omega_0 \xi^{-z}}, \frac{q}{\xi^{-1}}, \frac{k_0 \Delta T}{|f_y|^{1/\beta} \xi^\delta}\right) \quad (59)$$

donde k_0, Ω_0 son constantes; $\Delta T = T - T_c$; β, δ son exponentes críticos estáticos y z es el exponente crítico dinámico; f_y es la fuerza exterior con respecto a la cual se calcula la función respuesta y ξ es la longitud de correlación característica.

La función Y ha de estar normalizada de tal manera que $Y(0, y, x) = 1$, a fin de que para $\omega = 0$, (59) se convierta en la correspondiente función respuesta estática.

Como hemos visto, los resultados más importantes que se esperan obtener del Grupo de Renormalización Dinámico dependen del cálculo de la función respuesta $\chi(q, \omega)$. Este será pues nuestro objetivo en el desarrollo que sigue.

3.2.b) Teoría perturbativa

Como vimos en el apartado anterior, los resultados del Grupo de Renormalización Dinámico se obtienen principalmente del cálculo de la función Respuesta y ésta se ha de obtener necesariamente mediante una teoría perturbativa bien fundamentada.

Creemos que una teoría perturbativa que se adapta muy bien a este tipo de problemas es la desarrollada por Garrido y San Miguel (1.977, 1.978 a y b); San Miguel, (1.978). Dicha teoría tenía como principal objetivo la

obtención de las funciones termodinámicas de Green, funciones de Correlación y Respuesta, para un sistema que obedeciera una ecuación estocástica del tipo de Langevin, mediante técnicas diagramáticas similares a las de Muchos Cuerpos.

Nuestro objetivo será la aplicación de esta teoría al cálculo de la función Respuesta de la dinámica crítica. Tal aplicación no es inmediata y haremos hincapié principalmente en los puntos nuevos que aparecerán al tratar de extender dicha teoría a este tipo de fenómenos.

De acuerdo como se definió (1.23) la función Respuesta lineal $\chi_{\mu\nu}(t, t')$ en función del propagador $R_{\mu\nu}(t, t')$, tendremos pues que calcular esta función $R_{\mu\nu}(t, t')$.

Mediante el teorema de Wick discutido en el apartado (2.3) la función $R_{\mu\nu}(t, t')$ se puede obtener perturbativamente en función de los propagadores libres correspondientes (2.131 y 132) y cada uno de los órdenes es expresable diagramáticamente.

Todos los diagramas que contribuyen a $R_{\mu\nu}(t, t')$ tienen un tronco de líneas R° , que es debido a que R° a tiempos iguales se toma igual a cero, y por consiguiente no hay diagramas desconectados.

Definiendo una autoenergía propia, $\Pi_{\mu\nu}^T(t, t')$, de $R_{\mu\nu}(t, t')$ como la suma de partes de diagramas conectados al resto por medio de dos líneas R° , una entrante y otra saliente, y que no es separable cortando una línea R° ,

podemos expresar $R_{\mu\nu}(t, t')$ de la siguiente forma
(San Miguel, 1.978)

$$\begin{array}{c} \Longrightarrow \\ R \end{array} = \begin{array}{c} \longrightarrow \\ R^0 \end{array} + \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \circlearrowleft \pi^T \end{array} + \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \circlearrowleft \pi^T \end{array} \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \circlearrowleft \pi^T \end{array} + \dots \quad (60)$$

donde $\Pi_{\mu\nu}^T(t, t')$ es la suma de todos los diagramas de autoenergía propios. Lo anterior puede expresarse mediante una ecuación de Dyson

$$\begin{array}{c} \Longrightarrow \\ \Longrightarrow \end{array} = \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \longrightarrow \end{array} + \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \circlearrowleft \pi^T \end{array} \begin{array}{c} \Longrightarrow \\ \Longrightarrow \end{array} \quad (61)$$

Todos estos pasos son muy similares a los que se hacen en la Teoría de Muchos Cuerpos (Fetter y Walecka, 1.971)

La expresión analítica de (61) es, (San Miguel, 1.978)

$$R_{\mu\nu}(t, t') = R_{\mu\nu}^0(t, t') + \sum_{\alpha\beta} \int_0^{\infty} dt_1 \int_0^{\infty} dt_2 R_{\mu\alpha}^0(t, t_1) \Pi_{\alpha\beta}^T(t_1, t_2) R_{\beta\nu}(t_2, t') \quad (63)$$

que como puede apreciarse no es inmediatamente simplificable en espacio ω , que es por otra parte, el adecuado para el Grupo de Renormalización Dinámico. Para que se pudiera transformar por Fourier, lo que mejoraría notablemente su expresión, (63) tendría que escribirse en la forma

$$R_{\mu\nu}(t-t') = R_{\mu\nu}^0(t-t') + \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 R_{\mu\alpha}^0(t-t_1) \Pi_{\alpha\beta}^T(t_1-t_2) R_{\beta\nu}(t_2-t') \quad (64)$$

donde los índices repetidos se suman.

La primera dificultad que se nos presenta para pasar de (63) a (64) es que la función de correlación libre (2,131) no depende de la diferencia de tiempos como bien puede apreciarse en sus dos componentes (2,95) y (2,116).

La segunda dificultad es que es necesario extender las integrales temporales de $-\infty$ a $+\infty$. Estas dificultades serán resueltas mediante una hipótesis adiabática adaptada a estos procesos estocásticos y que más adelante definiremos. Ahora vamos a estudiar las posibilidades de la expresión (64).

Definimos en primer lugar los propagadores en espacio de Fourier de la forma siguiente

$$R_{\mu\nu}(t-t') \equiv R_{\mu\nu}(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega z} R_{\mu\nu}(\omega) \quad (65)$$

y sustituyendo esta expresión para cada propagador en (64) obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega z} R_{\mu\nu}(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega z} R_{\mu\nu}^0(z) + \\ &+ \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 e^{-i\omega_1 z_1} R_{\mu\alpha}^0(\omega_1) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 e^{-i\omega_2 z_2} \Pi_{\alpha\beta}^T(\omega_2) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_3 e^{-i\omega_3 z_3} R_{\beta\nu}(\omega_3) \end{aligned} \quad (66)$$

y sustituyendo en el último término

$$z_1 = t - t_1 \quad ; \quad z_2 = t_1 - t_2 \quad ; \quad z_3 = t_2 - t' \quad (67)$$

se puede expresar éste en la forma

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_3 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{it_1(\omega_1 - \omega_2)} \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 e^{it_2(\omega_2 - \omega_3)} e^{-i\omega_1 t} e^{i\omega_3 t'} R_{\mu\alpha}^{\circ}(\omega_1) \Pi_{\alpha\beta}^T(\omega_2) R_{\beta\nu}(\omega_3) = \\
 & = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_3 (2\pi)\delta(\omega_1 - \omega_2) (2\pi)\delta(\omega_2 - \omega_3) e^{-i\omega_1 t} e^{i\omega_3 t'} R_{\mu\alpha}^{\circ}(\omega_1) \Pi_{\alpha\beta}^T(\omega_2) R_{\beta\nu}(\omega_3) = \\
 & = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 e^{-i\omega_1(t-t')} R_{\mu\alpha}^{\circ}(\omega_1) \Pi_{\alpha\beta}^T(\omega_1) R_{\beta\nu}(\omega_1) \tag{68}
 \end{aligned}$$

que es la misma definición de transformada de Fourier que (65), pues podemos poner ω en vez de ω_1 por ser variable muda. Sustituyendo (68) en (66) obtenemos la ecuación de Dyson (64) en variable ω

$$R_{\mu\nu}(\omega) = R_{\mu\nu}^{\circ}(\omega) + R_{\mu\alpha}^{\circ}(\omega) \Pi_{\alpha\beta}^T(\omega) R_{\beta\nu}(\omega) \tag{69}$$

de la cual es fácil despejar $R_{\mu\nu}(\omega)$. En el caso de que las matrices fueran diagonales, $R_{\mu}(\omega)$, vendría dada explícitamente en la forma

$$R_{\mu}^{-1}(\omega) = R_{\mu}^{\circ-1}(\omega) - \Pi_{\mu}^T(\omega) \tag{70}$$

expresión que nos será de mucha utilidad en el Grupo de Renormalización.

A continuación vamos a obtener algunos resultados

útiles para la interpretación de diagramas.

Supongamos que tenemos una fuerza no lineal $F_{\mu}(\psi(t), t)$ en la ecuación (2,98) que depende de tres variables $\psi(t)$, y a la que corresponde un Liouvilliano de interacción

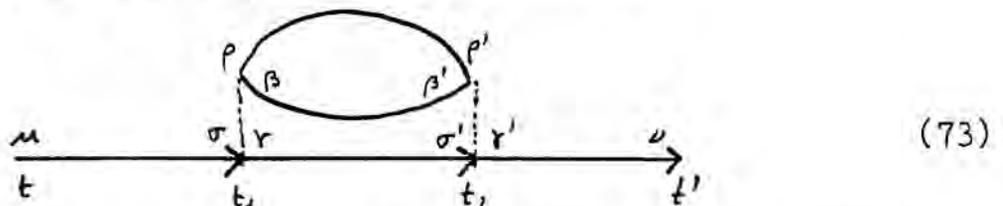
$$L_I \sim \sum_{\sigma \rho \beta \gamma} \psi_{\sigma}(t) \psi_{\rho}(t) \psi_{\beta}(t) \hat{\psi}_{\gamma}(t) \delta_{\sigma+\rho+\beta-\gamma, 0} \quad (71)$$

que diagramáticamente expresamos como

$$L_I \sim \begin{array}{c} \swarrow \beta \quad \searrow \gamma \\ \vdots \\ \swarrow \sigma \quad \searrow \rho \end{array} \quad (72)$$

donde la línea correspondiente a $\hat{\psi}_{\gamma}(t)$ se ha diferenciado de las demás y el punteado no es más que el vértice de interacción.

Un diagrama de segundo orden de la función $R_{\mu\nu}(t, t')$ tendrá, por ejemplo, la forma siguiente



donde el vector indica R° y la línea a G° . Explicando dicho diagrama tenemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 R_{\mu\sigma}^{\circ}(t-t_1) R_{\gamma\sigma'}^{\circ}(t_1-t_2) G_{\beta\beta'}^{\circ}(t_1-t_2) G_{\rho\rho'}^{\circ}(t_2-t_1) R_{\gamma\nu}^{\circ}(t_2-t') \delta_{\rho+\beta+\gamma-\sigma, 0} \delta_{\rho'+\beta'+\gamma'-\sigma', 0} \quad (74)$$

donde las deltas de Kroneker son debidas a la interacción.

Si ahora sustituimos (65) en (74) para cada propagador, obtenemos

$$\frac{1}{(2\pi)^5} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \delta_{\rho+\beta+\gamma-\sigma,0} \cdot \delta_{\rho'+\beta'+\gamma'-\sigma',0} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_1 z_1} R_{\mu\sigma}^{\circ}(\omega_1) d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_2 z_2} R_{\gamma\sigma'}(\omega_2) d\omega_2 \cdot$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_3 z_3} G_{\rho\rho'}^{\circ}(\omega_3) d\omega_3 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_4 z_4} G_{\beta\beta'}^{\circ}(\omega_4) d\omega_4 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_5 z_5} R_{\gamma'\nu}^{\circ}(\omega_5) d\omega_5 \quad (75)$$

donde sustituyendo

$$z_1 = t - t_1 ; \quad z_2 = t_1 - t_2 ; \quad z_5 = t_2 - t' \quad (76)$$

$$\frac{1}{(2\pi)^5} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3 d\omega_4 d\omega_5 \delta_{\rho+\beta+\gamma-\sigma,0} \cdot \delta_{\rho'+\beta'+\gamma'-\sigma',0} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{it_1(\omega_1 - \omega_2 - \omega_3 - \omega_4)} dt_1 \cdot$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{it_2(\omega_2 + \omega_3 + \omega_4 - \omega_5)} dt_2 \cdot e^{-i\omega_1 t} e^{i\omega_5 t'} R_{\mu\sigma}^{\circ}(\omega_1) R_{\gamma\sigma'}^{\circ}(\omega_2) G_{\rho\rho'}^{\circ}(\omega_3) G_{\beta\beta'}^{\circ}(\omega_4) R_{\gamma'\nu}^{\circ}(\omega_5) =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3 d\omega_4 d\omega_5 \delta_{\rho+\beta+\gamma-\sigma,0} \cdot \delta_{\rho'+\beta'+\gamma'-\sigma',0} \cdot \delta(\omega_1 - \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) \cdot$$

$$\delta(\omega_2 + \omega_3 + \omega_4 - \omega_5) \cdot e^{-i\omega_1 t} e^{i\omega_5 t'} R_{\mu\sigma}^{\circ}(\omega_1) R_{\gamma\sigma'}^{\circ}(\omega_2) G_{\rho\rho'}^{\circ}(\omega_3) G_{\beta\beta'}^{\circ}(\omega_4) R_{\gamma'\nu}^{\circ}(\omega_5) \quad (77)$$

donde aparece un resultado conocido en Teoría de Muchos Cuerpos, que las frecuencias asociadas a cada propagador se conservan en un vértice.

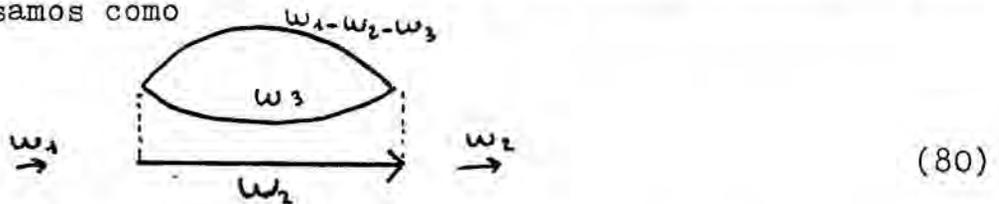
Si integramos ahora ω_4 , obtenemos una $\delta(\omega_4 - \omega_5)$ que nos indica que la frecuencia de entrada es igual a la de salida. Integrando ahora ω_5 (77) se convierte en

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 d\omega_2 d\omega_3 e^{-i\omega_1(t-t')} R_{\mu\sigma}^{\circ}(\omega_1) \cdot R_{\gamma\sigma'}^{\circ}(\omega_2) G_{\beta\beta'}^{\circ}(\omega_3) G_{\rho\rho'}^{\circ}(\omega_1 - \omega_2 - \omega_3) R_{\delta'\nu}^{\circ}(\omega_1) \cdot \delta_{\rho+\beta+\gamma-\sigma,0} \cdot \delta_{\rho'+\beta'+\gamma'-\sigma',0} \quad (78)$$

que agrupamos en la forma

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_1 z} R_{\mu\sigma}^{\circ}(\omega_1) d\omega_1 \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 R_{\gamma\sigma'}^{\circ}(\omega_2) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_3 G_{\beta\beta'}^{\circ}(\omega_3) G_{\rho\rho'}^{\circ}(\omega_1 - \omega_2 - \omega_3) \right] \cdot R_{\delta'\nu}^{\circ}(\omega_1) \delta_{\rho+\beta+\gamma-\sigma,0} \cdot \delta_{\rho'+\beta'+\gamma'-\sigma',0} \quad (79)$$

y de donde concluimos que el término entre corchetes es el que contribuye a la autoenergía, que diagramáticamente lo expresamos como

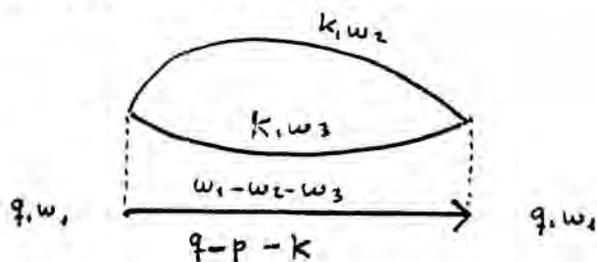


donde incluimos ya la conservación de $\underline{\omega}$ en cada vértice.

Con respecto a los índices griegos, como veremos más adelante, la función $R_{\gamma\sigma}^{\circ}$ contiene una delta $\delta_{\gamma,\sigma'}$ mientras que la función $G_{\beta\beta'}^{\circ}$ contiene una delta $\delta_{\beta,\beta'}$ y respectivamente igual el resto de propagadores. Teniendo en cuenta esto, la expresión (79) tiene las siguientes funciones deltas, cuyos índices repetidos iremos sumando

$$\begin{aligned}
& \delta_{\mu,\sigma} \cdot \delta_{r,\sigma'} \cdot \delta_{r',\rho'} \cdot \delta_{r,-\rho'} \cdot \delta_{\gamma',\nu} \cdot \delta_{r+\beta+\gamma-\sigma,0} \cdot \delta_{r'+\beta'+\gamma'-\sigma',0} = \\
& = \delta_{\mu,\sigma} \cdot \delta_{r\nu} \cdot \delta_{r+\beta+\gamma-\sigma,0} \cdot \delta_{-r-\beta+\nu-r,0} = \delta_{\mu,\sigma} \cdot \delta_{r+\beta+\nu-\sigma,0} \cdot \delta_{r+\beta,0} = \\
& = \delta_{\mu,\sigma} \cdot \delta_{\nu-\sigma,0} = \delta_{\mu,\nu}
\end{aligned} \tag{90}$$

y así llegamos a que los índices inicial y final han de ser los mismos, índices que corresponden a los vectores de onda y a los componentes vectoriales. Resumiendo todos estos resultados, la expresión correspondiente a la autoenergía de este diagrama será



$$\tag{91}$$

donde se ha tenido en cuenta la conservación del vector de onda y de la frecuencia en cada vértice. Además las variables internas han de estar sumadas o integradas. Explicando analíticamente (91) tenemos

$$\int_p \int_q \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_3}{2\pi} R_{q-p-k}^{\circ}(\omega_1 - \omega_2 - \omega_3) \cdot G_x^{\circ}(\omega_2) G_p^{\circ}(\omega_3) \tag{92}$$

donde las integrales sobre p y q serán definidos por el Grupo de Renormalización Dinámico.

Concluimos, por tanto, que los diagramas se interpretan de la misma forma que en Teoría de Muchos Cuerpos (Fetter y Walecka, 1.971) o Cuántica de Campos (Mattuck (1.967) y Lurie (1.968)).

Una mayor explicitación de los diagramas se llevará a cabo en el apartado de las Aplicaciones.

3.2.c) Hipótesis Adiabática

La hipótesis adiabática es un supuesto sobre las condiciones iniciales del problema físico que tiene por objeto simplificar el cálculo, al sustituir las condiciones iniciales arbitrarias por otras conocidas y que suelen estar relacionadas con el problema no perturbado.

En Teoría de Muchos Cuerpos (Fetter y Walecka, 1.971) la hipótesis adiabática consiste en suponer que a $t = -\infty$ la perturbación no ha aparecido aún, y que a $t = \infty$ ha desaparecido, de tal forma que en $t = 0$ tenemos el problema completo. Mediante esta hipótesis, y para Hamiltonianos no dependientes explícitamente del tiempo, los cálculos diagramáticos de la teoría perturbativa son efectuados en espacio ω , lo que representa una gran simplificación de los mismos.

En la teoría de los procesos estocásticos, entre los que se incluyen los fenómenos críticos, también se ha desarrollado un método perturbativo, basado en diagramas del tipo de Feynman (Halperin, Hohenberg y Ma (1.972, 1.974, 1.976); Halperin, Hohenberg y Siggia (1.976)) en la cual interesa tener, por las mismas razones, una hipótesis adiabática simplificadora. Pero dado que estos procesos

no son isótopos en el tiempo, la hipótesis adiabática, en el sentido de la Teoría de Muchos Cuerpos, no se podrá hacer, o si se hace será imponiendo fuertes restricciones al sistema físico. Un sistema estocástico que se dirige a su estado estado estacionario tiene una evolución muy definida en el tiempo. El estado inicial es distinto del estado final a no ser que nos encontremos en el estado estacionario desde el principio.

Si hacemos una hipótesis sobre el estado del sistema en $t = -\infty$, por ejemplo que dicho estado corresponda al estado estacionario del sistema no perturbado, entonces en $t = +\infty$ no tendremos el sistema en el mismo estado, como en Teoría de Muchos Cuerpos, sino en el estado estacionario correspondiente a todo el problema, y que son distintos. Así pues, desaparece la simetría entre $t = -\infty$ y $+\infty$, excepto en el caso en que el estado estacionario de todo el problema sea el estado inicial, por lo que no existirá evolución temporal y las magnitudes que dependan de dos tiempos dependerán de su diferencia únicamente. Este es el caso en que es factible poner los propagadores estadísticos en espacio ω y simplificar los cálculos.

La hipótesis adiabática es pues apropiada cuando tenemos estados del sistema bien determinados, caso de la Teoría de Muchos Cuerpos, o de encontrarnos en un estado estacionario en la Teoría de los Procesos Estocásticos.

Nuestro objetivo, en este apartado, será formular la hipótesis adiabática, que habitualmente se emplea y no se define en los trabajos sobre el Grupo de Renormalización

Dinámico, señalando las restricciones que es necesario hacer sobre el sistema físico, y derivando sus implicaciones en la teoría diagramática desarrollada en el apartado anterior. Estas restricciones no serán importantes en el Grupo de Renormalización Dinámico, pero si en otros problemas físicos donde las condiciones iniciales sean fundamentales, por ejemplo en la descomposición espinodal (Langer, Bar-on y Miller (1.975); Marro, Lebowitz y Kalos (1.979)). También discutiremos su empleo en el Grupo de Renormalización dinámico, así como la relación que existe entre esta hipótesis y las condiciones iniciales estacionarias.

Los objetivos señalados se consiguen mediante dicha hipótesis al reducir el cálculo de los promedios estadísticos sobre $\rho(\psi, 0)$ a otro cálculo sobre $\rho^0(\psi, 0)$ que es la probabilidad estacionaria del problema no perturbado y que posee la propiedad fundamental de ser gaussiana.

Tomemos la función $R_{\mu\nu}(t, t')$ definida en (2.11), y mediante el resultado (Apéndice I, B, ecuación 14)

$$\rho(\psi, 0) = (S^+(-\infty, 0)\rho^0(\psi, 0)) \quad (93)$$

que sustituiremos en ella, para obtener

$$\begin{aligned} R_{\mu\nu}(t, t') &= \int [d\psi] (S^+(-\infty, 0)\rho^0(\psi, 0) \bar{T} \{ \psi_\mu(t) \psi_\nu(t') \}) = \\ &= \int [d\psi] \rho^0(\psi, 0) S(-\infty, 0) \bar{T} \{ \psi_\mu(t) \psi_\nu(t') \} = \langle S(-\infty, 0) \bar{T} \{ \psi_\mu(t) \psi_\nu(t') \} \rangle_0 \end{aligned} \quad (94)$$

donde se ha hecho uso de que S^+ es el operador adjunto de S .

Teniendo en cuenta ahora que S es el operador que introduce la interacción, expresamos (94)

$$\begin{aligned}
 R_{\mu\nu}(t,t') &= \int [d\psi] \rho^0(\psi,0) S(-\infty,0) \bar{T} \left\{ S(0,t) \psi_\mu^0(t) S(t,0) S(0,t') \hat{\psi}_\nu^0(t') S(t',0) \right\} = \\
 &= \int [d\psi] \rho^0(\psi,0) S(-\infty,0) \bar{T} \left\{ S(0,t) \psi_\mu^0(t) S(t,t') \hat{\psi}_\nu^0(t') S(t',0) \right\} \quad (95)
 \end{aligned}$$

añadiendo $S(0,t^m)$ con $t^m \gg \max(t,t')$ a la derecha llegamos a que podemos expresar $R_{\mu\nu}(t,t')$ como

$$R_{\mu\nu}(t,t') = \int [d\psi] \rho^0(\psi,0) \bar{T} \left\{ S(-\infty,t^m) \psi_\mu^0(t) \hat{\psi}_\nu^0(t') \right\} \quad (96)$$

De esta expresión sacamos dos consecuencias importantes

- Los promedios estadísticos sobre condiciones iniciales han quedado reducidos a promedios sobre la función de distribución $\rho^0(\psi,0)$, proporcional a $\exp\{-\mathcal{H}[\psi]\}$.
- Podemos extender las integrales temporales de $-\infty$ a $+\infty$, pues el operador $S(-\infty,t^m)$ es equivalente a poner $S(-\infty,\infty)$, dado su carácter derivativo y que no tiene más que una constante a su derecha.

Estos dos puntos son los que nos permitirán pasar de (63) a (64), para lo cual hemos de ver antes si en éstas condiciones el propagador $G_{\mu\nu}^0(t,t')$ depende de la diferencia de tiempos.

La función de correlación $G_{\mu\nu}^0(t,t)$ se verá afectada en el sentido que

$$\langle \Psi_\mu \Psi_\nu \rangle \rightarrow \langle \Psi_\mu \Psi_\nu \rangle_0 \quad (97)$$

como puede comprobarse al hacer $S(-\infty, t^m) = 1$ (caso no perturbado) en la ecuación equivalente a (96) para

$G_{\mu\nu}(t, t')$. Hemos de observar que (97) sólo se puede usar con la hipótesis adiabática. Caso de hacerlo sin esta hipótesis, el problema seguiría siendo no transformable al espacio ω .

Tomando la expresión de $G_{\mu\nu}^0(t, t')$ en (2.115) y sustituyendo explícitamente la dependencia temporal de sus partes (2.95) y (2.116) llegamos a

$$\begin{aligned} G_{\mu\nu}^0(t, t') &= e^{\lambda_\mu t + \lambda_\nu t'} \cdot \langle \Psi_\mu \Psi_\nu \rangle_0 - \theta(t-t') \frac{\partial D_{\mu\nu}}{\lambda_\mu + \lambda_\nu} \left(e^{\lambda_\mu(t-t')} - e^{\lambda_\mu t + \lambda_\nu t'} \right) - \\ &\quad - \theta(t'-t) \frac{\partial D_{\mu\nu}}{\lambda_\mu + \lambda_\nu} \left(e^{\lambda_\nu(t'-t)} - e^{\lambda_\mu t + \lambda_\nu t'} \right) = \\ &= e^{\lambda_\mu t + \lambda_\nu t'} \cdot \left\{ \langle \Psi_\mu \Psi_\nu \rangle_0 + \frac{\partial D_{\mu\nu}}{\lambda_\mu + \lambda_\nu} \right\} - \theta(t-t') \frac{\partial D_{\mu\nu}}{\lambda_\mu + \lambda_\nu} e^{\lambda_\mu(t-t')} - \theta(t'-t) \frac{\partial D_{\mu\nu}}{\lambda_\mu + \lambda_\nu} e^{\lambda_\nu(t'-t)} \end{aligned} \quad (98)$$

Observamos pues que tenemos dos partes muy diferenciadas, la primera depende de la suma de tiempos, y los dos últimos términos dependen de la diferencia de tiempos que es lo que nos interesa. Por lo tanto vemos que el primer término será nulo* si

* Otra manera de conseguir esto es calculando los propagadores libres a partir de un tiempo inicial $t_i \rightarrow -\infty$, si el sistema es disipativo.

$$\langle \Psi_\mu \Psi_\nu \rangle_0 = - \frac{2D_{\mu\nu}}{\lambda_\mu + \lambda_\nu} \quad (99)$$

Condición que vamos a comprobar en los diferentes modelos de la Dinámica Crítica si se quiere utilizar las propiedades simplificadoras de la hipótesis adiabática.

En todos los modelos del apartado 3.1,d) la parte lineal proviene únicamente del término cuadrático del Hamiltoniano efectivo

$$H_0[\psi] = \frac{1}{2} \sum_\mu a(\mu) \psi_\mu \psi_{-\mu} \quad (100)$$

al que corresponde una densidad de probabilidad estacionaria y gaussiana

$$\rho^0(\psi) = \frac{e^{-H_0[\psi]}}{Z} \quad ; \quad Z = \int [d\psi] e^{-H_0[\psi]} \quad (101)$$

por lo tanto el coeficiente λ_μ del término lineal de la ecuación de Langevin será

$$\lambda_\mu = -\Gamma_\mu a(\mu) \quad ; \quad \lambda_\mu = \lambda_{-\mu} \quad (102)$$

El promedio estadístico de (99) está calculado entre otros, por Wilson y Kogut (1.974) y es

$$\langle \Psi_\mu \Psi_\nu \rangle_0 = \frac{\delta_{\mu,-\nu}}{a(\mu)} \quad (103)$$

si ahora tomamos la relación de Einstein entre $D_{\mu\nu}$ y Γ_μ (3.36) junto con (102), la parte derecha de (99) se transforma en

$$\frac{-2D_{\mu\nu}}{\lambda_\mu + \lambda_\nu} = \frac{-2\Gamma_\mu \delta_{\mu,-\nu}}{\lambda_\mu + \lambda_{-\mu}} = \frac{-2\Gamma_\mu \delta_{\mu,-\nu}}{2\lambda_\mu} = \frac{-\Gamma_\mu \delta_{\mu,-\nu}}{-\Gamma_\mu a(\mu)} = \frac{\delta_{\mu,-\nu}}{a(\mu)} \quad (104)$$

que es igual a (103) como queríamos demostrar.

Así pues los propagadores libres R° y G° serán ahora

$$R_{\mu\nu}^\circ(t,t') = R_{\mu\nu}^\circ(t-t') = \theta(t-t') \delta_{\mu\nu} e^{\lambda_\mu(t-t')} \quad (105)$$

$$G_{\mu\nu}^\circ(t,t') = G_{\mu\nu}^\circ(t-t') = \frac{\delta_{\mu-\nu}}{a(\mu)} \left\{ \theta(t-t') e^{\lambda_\mu(t-t')} + \theta(t'-t) e^{\lambda_\nu(t'-t)} \right\} \quad (106)$$

que dependen de la diferencia de tiempos y por lo tanto los podemos transformar por Fourier, obteniendo (Apéndice I.C)

$$R_{\mu\nu}^\circ(\omega) = \frac{-\delta_{\mu\nu}}{\lambda_\mu + i\omega} \quad (107)$$

$$G_{\mu\nu}^\circ(\omega) = \frac{2\Gamma_\mu \delta_{\mu-\nu}}{\lambda_\mu^2 + \omega^2} \quad (108)$$

y la función respuesta libre (1.23) $\chi_{\mu\nu}^\circ(\omega)$ será en este caso

$$\chi_{\mu\nu}^\circ(\omega) = \frac{-\Gamma_\mu \delta_{\mu-\nu}}{\lambda_\mu + i\omega} \quad (109)$$

Estos tres propagadores libres son los que se utilizarán en la teoría perturbativa diagramática.

Para acabar este apartado vamos a hacer una observación importante y es que utilizar una hipótesis adiabática es equivalente a promediar con condiciones iniciales estacionarias en $t = 0$. Este resultado es importante pues establece una equivalencia entre hipótesis adiabática y distribución inicial estacionaria. Pasamos a desarrollar este punto.

Los promedios con $\beta_{st}(\psi, 0)$ quedan definidos de la forma usual, por ejemplo

$$\begin{aligned}
 G_{\mu\nu}(t, t') &= \bar{T} \langle \psi_\mu(t) \psi_\nu(t') \rangle = \int [d\psi] \beta_{st}(\psi, 0) \bar{T} \{ \psi_\mu(t) \psi_\nu(t') \} = \\
 &= \int [d\psi] \beta_{st}(\psi, 0) \{ \theta(t-t') \psi_\nu(t') \psi_\mu(t) + \theta(t'-t) \psi_\mu(t) \psi_\nu(t') \} = \\
 &= \theta(t-t') \int [d\psi] \beta_{st}(\psi, 0) e^{L t'} \psi_\nu e^{L(t-t')} \psi_\mu e^{-L t} + \theta(t'-t) \int [d\psi] \beta_{st}(\psi, 0) e^{L t} \psi_\mu e^{L(t-t')} \psi_\nu e^{-L t'}
 \end{aligned} \tag{110}$$

donde hemos supuesto que L no depende explícitamente de t , siendo entonces $e^{L t}$ el operador de evolución explícita en el tiempo en la imagen operacional. Además por definición de distribución estacionaria

$$L^+ \beta_{st}(\psi, 0) = 0 \tag{111}$$

entonces

$$e^{L^+ t} \beta_{st}(\psi, 0) = \beta_{st}(\psi, 0) \tag{112}$$

y además $e^{-L t} = 1$ si está a la derecha de (110). Teniendo en cuenta todo esto llegamos a que

$$G_{\mu\nu}(t, t') = \theta(t-t') \int [d\psi] \beta_{st}(\psi, 0) \psi_\nu e^{L(t-t')} \psi_\mu + \theta(t'-t) \int [d\psi] \beta_{st}(\psi, 0) \psi_\mu e^{L(t-t')} \psi_\nu \tag{113}$$

que depende manifiestamente de la diferencia de tiempos.

Por otra parte mediante la hipótesis adiabática la función de Correlación es

$$G_{\mu\nu}(t,t') = \int [d\psi] (S^+(-\infty,0) \rho^0(\psi,0) \bar{T} \{ \psi_\mu(t) \psi_\nu(t') \}) \quad (114)$$

y si como suponemos (110) y (114) son equivalentes, entonces se habrá de cumplir que

$$\rho_{st}(\psi,0) = (S^+(-\infty,0) \rho^0(\psi,0)) \quad (115)$$

que es el mismo resultado obtenido con la hipótesis adiabática (93) pero en este caso tenemos $\rho_{st}(\psi,0)$ en vez de $\rho(\psi,0)$.

Es fácil comprender que (115) ha de ser cierta. Pensamos que si en $t = -\infty$ tenemos $\rho^0(\psi,0)$, entonces para llegar a $t = 0$ tiene que transcurrir un intervalo de tiempo infinito y por lo tanto el sistema que evoluciona hacia el estado estacionario ha de llegar necesariamente a dicho estado y esto es independiente de cualquier $\rho^0(\psi,0)$. Si hemos elegido un $\rho^0(\psi,0) \sim e^{-H_0}$ ha sido precisamente para poder trabajar en espacio ω . Es decir se toma la condición más simplificadora y con más sentido físico, pues $\rho^0(\psi,0)$ no es más que la distribución estacionaria del problema libre.

El interés de esta equivalencia está en que podemos aplicar los teoremas de Fluctuación-Disipación al tratamiento con hipótesis adiabática, pues dichos teoremas fueron probados tomando condiciones iniciales estacionarias

(Garrido y San Miguel (1.978 a); San Miguel (1.978)), y dichos teoremas son importantes en el Grupo de Renormalización Dinámico para poder deducir la estática crítica a partir de la Dinámica Crítica.

Finalmente hemos de destacar que esta hipótesis adiabática no se encuentra formulada en la literatura aunque implícitamente se hace uso de ella.

3.2.d) Teorema de Fluctuación Disipación y Grupo de Renormalización.

Vamos a ver como mediante del Teorema de Fluctuación Disipación podemos relacionar la función de Correlación estática con la función respuesta lineal dinámica y de esta forma obtener el Grupo de Renormalización Estático a partir del Dinámico.

Partimos del Teorema de Fluctuación Disipación probado con toda generalidad por Garrido y San Miguel (1.978 a) para sistemas en el estado estacionario. Tal como vimos en el apartado anterior este teorema es aplicable en nuestro caso pues la hipótesis adiabática que hacemos es equivalente a tomar condiciones iniciales estacionarias como hacen dichos autores.

Mediante este teorema se obtiene la siguiente relación entre los dos propagadores $G_{\mu\nu}(t, t')$ y $\chi_{\mu\nu}(t, t')$

$$\chi_{\mu\nu}(t-t') = -\theta(t-t') \frac{\partial G_{\mu\nu}(t-t')}{\partial t} \quad (116)$$

donde es manifiesto su carácter estacionario.

Tomemos $t - t' = \tau$ e integremos z entre $-\infty$ y $+\infty$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi_{\mu\nu}(z) dz = - \int_{0^+}^{\infty} \frac{\partial G_{\mu\nu}(z)}{\partial z} dz = - G_{\mu\nu}(z) \Big|_{0^+}^{\infty} \quad (117)$$

;si nuestro sistema evoluciona hacia un estado estacionario es plausible suponer que $G_{\mu\nu}(\infty) = 0$ (No hay correlación entre ψ 's muy distanciadas temporalmente). Por lo tanto (117) se escribirá

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi_{\mu\nu}(z) dz = G_{\mu\nu}(z=0) \quad (118)$$

Donde no hay ambigüedad posible entre $z = 0, 0^+, 0^-$, ya que las variables conmutan a tiempos iguales.

Y puesto que la integral temporal de $\chi_{\mu\nu}(z)$ corresponde a su transformada de Fourier con $\omega = 0$, obtenemos

$$\chi_{\mu\nu}(\omega=0) = G_{\mu\nu}(z=0) \quad (119)$$

y así relacionamos la transformada de Fourier de la función respuesta lineal en $\omega = 0$ con la función de Correlación estática, pues de la expresión (3,113), llegamos haciendo $t - t' = z = 0$, a

$$G_{\mu\nu}(t-t') \Big|_{t-t'=0} = \int [d\psi] \beta_{st}(\psi, 0) \psi_{\mu} \psi_{\nu} = \int [d\psi] \frac{e^{-H[\psi]}}{Z} \psi_{\mu} \psi_{\nu} \quad (120)$$

que no es más que la definición de la función de Correlación

estática que se usa en el Grupo de Renormalización Estático (Wilson y Kogut (1.974); Barber (1.977)).

Por lo tanto los resultados del Grupo de Renormalización Estático que se obtengan a través de $G_{\mu\nu}(0)$, serán deducidos de forma inmediata a través del cálculo de $\chi_{\mu\nu}(\omega)$ en el Grupo de Renormalización Dinámico con sólo hacer $\omega=0$. Esto nos da la prescripción para obtener los resultados estáticos a partir de los dinámicos, que utilizaremos en el apartado siguiente.

3.2,e) Aplicaciones

En los apartados anteriores de este capítulo 3 hemos descrito los conceptos del Grupo de Renormalización Dinámico y desarrollado la teoría perturbativa adecuada a él, pero todo ello ha sido hecho de una manera formal y ahora pasaremos a aplicarla a casos concretos, detallando lo mejor posible todas las técnicas y prescripciones que se han de utilizar a fin de comprender la literatura actual sobre el tema. En este sentido cabe destacar que en los artículos pioneros de Halperin, Hohenberg y Ma (1.972,1.974) no se hace una discusión y fundamentación explícita de los formalismos utilizados siendo confusa incluso la definición de los propagadores libres. Creemos que este apartado contribuirá tanto a la fundamentación de dichos formalismos como a su adecuada comprensión.

i) Modelos A y B.

Empezaremos con los modelos más sencillos, de una sola variable y que son puramente disipativos. Estos modelos

fueron definidos en el apartado 3.1,d) y vienen descritos por una ecuación del movimiento de la forma

$$\dot{\Psi}_{\mu}(t) = -\sqrt{\mu} \frac{\partial H[\Psi(t)]}{\partial \Psi_{\mu}(t)} + \xi_{\mu}(t) \quad (121)$$

donde el Hamiltoniano es el de Ginzburg-Landau-Wilson (7) que explicitamos en la forma

$$H[\Psi(t)] = \sum_i \int_q \frac{1}{2} (v_0 + q^2) \Psi_{q,i}(t) \Psi_{q,i}(t) + \sum_{i,j} \int_{q_1, q_2, q_3, q_4} u_0 (\Psi_{q_1,i}(t) \Psi_{q_2,i}(t)) (\Psi_{q_3,j}(t) \Psi_{q_4,j}(t)) \delta(q_1 + q_2 + q_3 + q_4) \quad (122)$$

El índice $\mu = (\vec{q}, i)$ se ha desdoblado en dos; \vec{q} que será el vector de onda (y en el que a partir de ahora quitaremos la flecha) y el índice i de las componentes vectoriales del parámetro de orden.

La notación de las integrales es la empleada por Wilson y Kogut (1.974)

$$\int_q \equiv \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{0 < |q| < \Lambda} d^d q \quad (123)$$

donde Λ es un corte. Y las funciones deltas se interpretan como

$$\delta(q+q') \equiv (2\pi)^d \cdot \delta^d(q+q') \quad (124)$$

A fin de no complicar las expresiones es usual prescindir del subíndice i y de sus sumatorios correspondientes \sum_i , pero nosotros sólo prescindiremos del sumatorio.

La fuerza estocástica que aparece en (121) tiene las propiedades de ser gaussiana de media nula y correlación

$$\langle \xi_{q,i}(t) \xi_{q',j}(t') \rangle = 2 D_{q,q'} \delta_{ij} \delta(t-t') \quad (125)$$

y a fin de tener solución estacionaria se ha de cumplir la relación de Einstein (36) que en este caso se expresará como

$$D_{q,q'} = \Gamma_q \delta(q+q') \quad (126)$$

donde observamos que el coeficiente de Onsager Γ_q no depende del índice vectorial y es real. El Liouvilliano asociado a (121) y (122) será de acuerdo con (1.40) ó (2.98) y (2.99)

$$\begin{aligned} L = & - \int_q \Gamma_q (r_0 + q^2) \psi_{q,i}(t) \hat{\psi}_{q,i}(t) + \int_q \Gamma_q \hat{\psi}_{q,i}(t) \hat{\psi}_{-q,i}(t) - \\ & - 4 U_0 \int_{q_1, q_2, q_3, q_4} \Gamma_{q_1} (\psi_{q_1,i}(t) \psi_{q_2,i}(t)) (\psi_{q_3,j}(t) \hat{\psi}_{q_4,j}(t)) \delta(q_1 + q_2 + q_3 - q_4) \end{aligned} \quad (127)$$

donde el último término corresponderá al Liouvilliano de Interacción. Los propagadores libres se obtendrán fácilmente de sus expresiones (107-109) haciendo las sustituciones correspondientes a estos modelos

$$L_{\mu} \equiv -\Gamma_q (r_0 + q^2) \quad (128, a)$$

$$\delta_{\mu, \nu} \equiv \delta(q+q_1) \delta_{ij} \quad (128, b)$$

$$\delta_{\mu\nu} \equiv \delta(q-q_1) \delta_{ij} \quad (129)$$

Así pues los propagadores libres se escriben explícitamente

$$G_{q_i; q_j}^{\circ}(\omega) = \frac{2\sqrt{q} \delta(q+q_i) \delta_{ij}}{\sqrt{q}^2 (r_0+q^2)^2 + \omega^2} \quad (130, a)$$

$$R_{q_i; q_j}^{\circ}(\omega) = \frac{\delta(q-q_i) \delta_{ij}}{\sqrt{q} (r_0+q^2) - i\omega} \quad (130, b)$$

$$\chi_{q_i; q_j}^{\circ}(\omega) = \frac{\sqrt{q} \delta(q+q_i) \delta_{ij}}{\sqrt{q} (r_0+q^2) - i\omega} \quad (130, c)$$

y teniendo en cuenta ahora de que dadas las funciones deltas los propagadores no dependerán de dos índices sino de uno solo, podemos definir unos nuevos propagadores

$$G^{\circ}(q, \omega) = \frac{2\sqrt{q}}{\sqrt{q}^2 (r_0+q^2)^2 + \omega^2} \quad (131, a)$$

$$R^{\circ}(q, \omega) = \frac{1}{\sqrt{q} (r_0+q^2) - i\omega} \quad (131, b)$$

$$\chi^{\circ}(q, \omega) = \frac{\sqrt{q}}{\sqrt{q} (r_0+q^2) - i\omega} = \frac{1}{(r_0+q^2) - \frac{i\omega}{\sqrt{q}}} \quad (131, c)$$

que es como suelen aparecer en la literatura. Los propagadores $G^{\circ}(q, \omega)$ y $R^{\circ}(q, \omega)$ se encuentran en Halperin Hohenberg y Siggia (1.976), y $G^{\circ}(q, \omega)$ y $\chi^{\circ}(q, \omega)$ se encuentran en Halperin, Hohenberg y Ma (1.976), pero sin una detallada justificación en su obtención y con diferencias notables de notación. Su interpretación de los

propagadores dentro de los diagramas es poco clara y se presta a confusiones. Pensamos que nuestro tratamiento clarifica estos aspectos y es una prueba más de las ventajas del formalismo operacional.

Para obtener los resultados del Grupo de Renormalización Dinámico en estos modelos necesitamos calcular $\chi(q, \omega)$. A partir de la ecuación de Dyson (69) para el propagador $R(q, \omega)$ que escribimos en la forma

$$R(q, \omega) = R^0(q, \omega) + R^0(q, \omega) \Pi^T(q, \omega) R(q, \omega) \quad (132)$$

donde multiplicando por \sqrt{q} obtenemos la ecuación de Dyson para la función Respuesta lineal

$$\chi(q, \omega) = \chi^0(q, \omega) + \chi^0(q, \omega) \frac{\Pi^T(q, \omega)}{\sqrt{q}} \chi(q, \omega) \quad (133)$$

y definiendo ahora una nueva autoenergía para la función $\chi(q, \omega)$

$$\Sigma_1(q, \omega) = \frac{\Pi^T(q, \omega)}{\sqrt{q}} \quad (134)$$

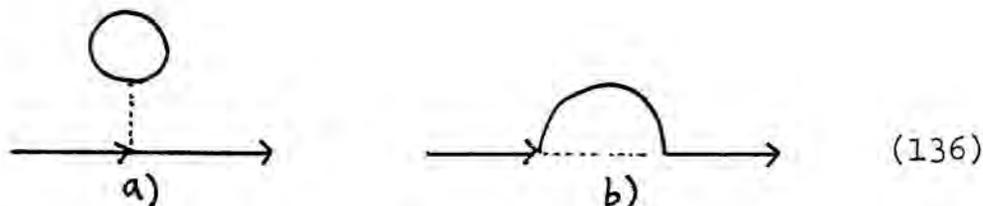
podemos despejar $\chi(q, \omega)$

$$\chi^{-1}(q, \omega) = \chi^{0-1}(q, \omega) - \Sigma_1(q, \omega) \quad (135)$$

Así pues sólo nos queda por calcular $\Pi^T(q, \omega)$ por medio de la teoría diagramática desarrollada anteriormente y que a continuación aplicamos al cálculo de los primeros ordenes.

Los diagramas que contribuyen en primer orden a R o χ

son

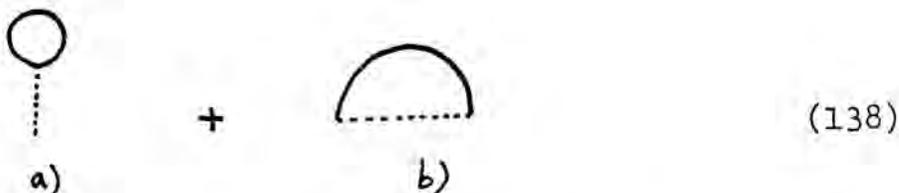


donde \longrightarrow , --- son respectivamente los propagadores R° y G° , y el punteado se refiere al valor del vértice de interacción que tiene una contribución

$$\dots \equiv -4u_0\sqrt{q} \tag{137}$$

siendo el índice q el correspondiente al índice del propagador R° que incide sobre el vértice.

Los diagramas correspondientes a la autoenergía $\Pi^\Gamma(q, \omega)$ son



que a continuación calculamos explícitamente usando (92) y (131)

$$\begin{aligned} \begin{array}{c} \text{Diagram a)} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} &\equiv \sum_i \int_p \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\beta}{2\pi} (-4u_0\sqrt{q}) \delta_{ii} G^\circ(p, \beta) = -4u_0\sqrt{q} \sum_i \delta_{ii} \int_p \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\beta}{2\pi} G^\circ(p, \beta) = \\ &= -4u_0\sqrt{q} n \int_p \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\beta}{2\pi} \frac{1}{\Gamma_p^2 (\Gamma_0 + p^2)^2 + \beta^2} = -4u_0\sqrt{q} n \int_p \frac{1}{\Gamma_0 + p^2} \end{aligned} \tag{139}$$

donde \underline{n} es el número de componentes vectoriales de la

variable $\psi(t)$, y la integral sobre β está hecha en el Apéndice I.D (I.D.4).

El segundo diagrama tiene una contribución

$$\begin{array}{c} \text{Diagrama: } \rightarrow i \text{---} \overset{p, \beta}{\text{curva}} \text{---} j \rightarrow \\ \text{Etiquetas: } q, \omega \text{ y } j, \omega \end{array} \equiv \int_p \int_{-a}^0 \frac{d\beta}{2\pi} (-4 u_0 \sqrt{q}) G^0(p, \beta) = -4 u_0 \sqrt{q} 2 \int_p \frac{1}{r_0 + p^2} \quad (140)$$

pero aquí aparece un factor combinatorio 2 , pues si observamos la interacción podemos ver que hay dos formas de conectar los índices \underline{i} con los \underline{j}

Resumiendo, la contribución de primer orden es

$$\Pi^T(q, \omega)^{1)} = -(n+2) 4 u_0 \sqrt{q} \int_p \frac{1}{r_0 + p^2} \quad (141)$$

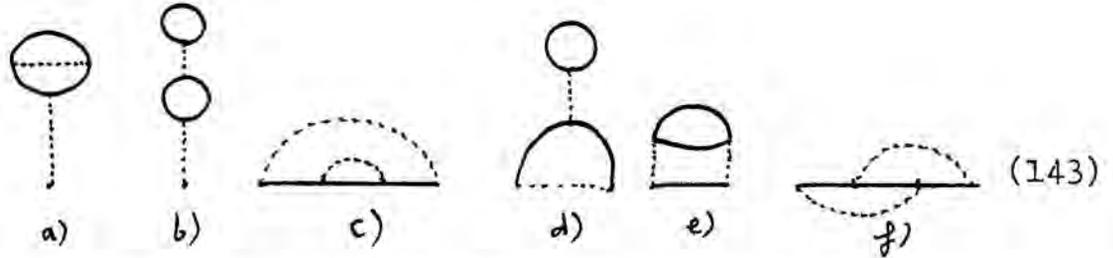
y de acuerdo con (134)

$$\Sigma^1(q, \omega)^{1)} = -(n+2) 4 u_0 \int_p \frac{1}{r_0 + p^2} \quad (142)$$

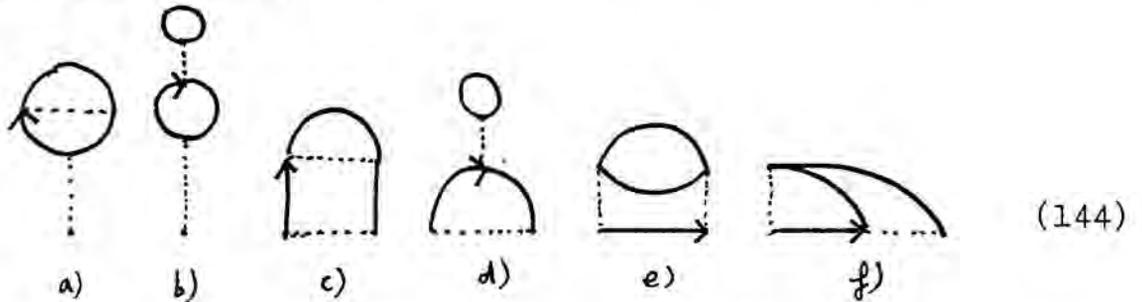
donde la integral sobre \underline{p} se extenderá a los límites $\frac{\Lambda}{b} < |p| < \Lambda$, que corresponde a la operación del Grupo de Renormalización Dinámico de integrar los modos más microscópicos, de acuerdo con el apartado 3.1.a).

Los diagramas de segundo orden que contribuyen a la autoenergía son similares a los de Teoría de Muchos Cuerpos (Fetter y Walecka, 1.971) para una interacción del

tipo Ψ^4 , y que reproducimos a continuación



En nuestro caso estos diagramas se representan de la siguiente manera



y cada uno de ellos tiene un factor combinatorio de acuerdo con las posibles y compatibles formas de ordenar los propagadores G^0 y R^0 .

No es necesario calcular todos estos diagramas pues si renormalizamos el parámetro r_0 , lo que se denomina renormalización de la temperatura, que consiste en definir un nuevo parámetro r de la misma forma que en el Grupo de Renormalización estático (Barber, 1.977)

$$r = r_0 - \Sigma(0,0) \quad (145)$$

donde

$$\Sigma(0,0) = \Sigma(q,\omega) \Big|_{\substack{q=0 \\ \omega=0}}$$

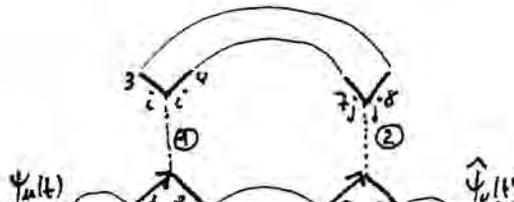
De esta forma la ecuación (135) para la función Respuesta lineal se escribirá

$$\begin{aligned}
\chi(q, \omega)^{-1} &= \chi^0(q, \omega)^{-1} - \Sigma'(q, \omega) = r_0 + q^2 - \frac{i\omega}{\sqrt{q}} - \Sigma'(q, \omega) = \\
&= r_0 - \Sigma'(0, 0) + q^2 - \frac{i\omega}{\sqrt{q}} - \left(\Sigma'(q, \omega) - \Sigma'(0, 0) \right) = \\
&= r + q^2 - \frac{i\omega}{\sqrt{q}} - \left(\Sigma'(q, \omega) - \Sigma'(0, 0) \right) \quad (146)
\end{aligned}$$

y a partir de ahora se sustituye r_0 por r en todos los propagadores libres. Este parámetro r tiende a cero cuando nos acercamos a la temperatura crítica.

Puesto que de la autoenergía $\Sigma'(q, \omega)$ hemos de restar $\Sigma'(0, 0)$, todos aquellos diagramas que no dependen del vector de onda y frecuencia exteriores no contribuirán de ninguna manera en (146) y por lo tanto no nos hemos de preocupar de calcularlos. Los diagramas que no contribuyen son los cuatro primeros, a), b), c), d), luego nos limitaremos a calcular los diagramas e) y f). Los diagramas de primer orden (138) quedan también incluidos entre los simplificados.

El diagrama e) tiene dos variantes e-1 y e-2. Pasamos a numerar y etiquetar todos sus elementos a fin de estudiarlo con todo detalle

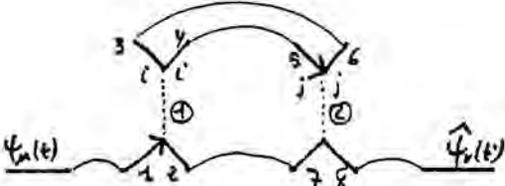
e-1 \equiv  (146)

Para conectar las líneas 3 y 4 con 7 y 8 tenemos dos formas distintas, lo que implica un coeficiente combinatorio 2. Las conexiones de los índices vectoriales i, j , darán una contribución

$$\sum_{i,j} \delta_{ij} \delta_{ij} = \sum_i \delta_{ii} = n \quad (147)$$

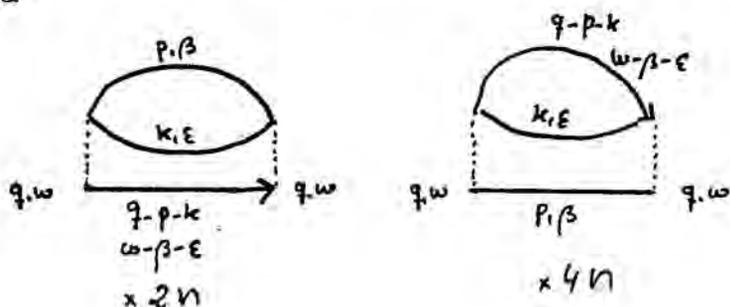
Este diagrama tiene pues un factor $2n$. La permutación de las interacciones 1 y 2 se compensa con el factor del desarrollo del operador $S(o,t)$.

El diagrama e - 2 se origina al invertir una interacción

e-2 \equiv  (148)

La conexión de la línea 2 con 7 y 8 se puede hacer de dos maneras, y la conexión de las líneas 3 y 4 con 5 y 6 se puede hacer de otras dos formas. En total hay un factor 4 junto con otro factor n correspondiente a los índices vectoriales como antes.

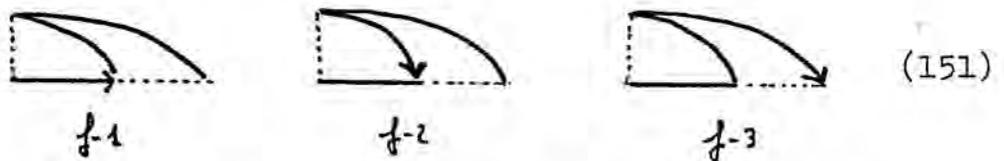
Resumimos los dos diagramas e) de la autoenergía $\Pi^T(q, \omega)$ con sus respectivos vectores de onda y frecuencia

 (149)

y que explícitamente se expresan

$$\begin{aligned}
 e) &= 6n \int \int \int \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{d\beta}{2\pi} (-4u_0\sqrt{q})(-4u_0\sqrt{q-p-k}) G^\circ(k,\varepsilon) G^\circ(p,\beta) R^\circ(q-p-k, \omega-\varepsilon-\beta) = \\
 &= 6n4^2u_0^2\sqrt{q} \int \int \int \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{d\beta}{2\pi} \sqrt{q-p-k} G^\circ(k,\varepsilon) G^\circ(p,\beta) R^\circ(q-p-k, \omega-\varepsilon-\beta) \quad (150)
 \end{aligned}$$

El diagrama f) tiene tres variantes en función de la posición del propagador R°



Vamos a estudiar el primero de ellos con detalle



Hay cuatro posibilidades de conectar 3 y 4 con 6, 7 y 8, lo que da un factor 4, y por otra parte el análisis de los índices vectoriales da que no hay contribución de los mismos. Analizando los otros dos diagramas se llega a los mismos resultados. El factor total del diagrama f) será 12, y si lo expresamos explícitamente obtenemos

$$f) = 12 \cdot 4^2 \cdot u_0^2 \sqrt{q} \int \int \int \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{d\beta}{2\pi} \sqrt{q-p-k} \cdot G^\circ(p,\beta) \cdot G^\circ(k,\varepsilon) R^\circ(q-p-k, \omega-\varepsilon-\beta) \quad (153)$$

Sumando (150) y (153) obtenemos la contribución de segundo orden para $\Sigma(q, \omega)$, y usando (134) finalmente llegamos a que

$$\Sigma_1'(q, \omega)^2 = 6(n+2)4^2 u_0 \int \int \int \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{d\beta}{2\pi} \Gamma_{q-p, k} G^0(p, \beta) G^0(k, \varepsilon) R^0(q-p-k, \omega - \varepsilon - \beta) \quad (154)$$

que está de acuerdo con los resultados de Halperin, Hohenberg y Ma (1.972) y Enz (1.977). Este resultado es el que se utiliza para obtener los principales resultados del Grupo de Renormalización Dinámico para los modelos A y B.

Para explicitar más la ecuación (154) sustituimos el valor de los propagadores en (131)

$$\begin{aligned} \Sigma_1'(q, \omega)^2 &= 6(n+2)4^2 u_0 \int \int \int \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{d\beta}{2\pi} \frac{2\Gamma_k}{\Gamma_k^2(r+k^2)^2 + \varepsilon^2} \cdot \frac{2\Gamma_p}{\Gamma_p^2(r+p^2)^2 + \beta^2} \cdot \\ &\cdot \frac{\Gamma_{q-p, k}}{\Gamma_{q-p, k}(r+(q-p-k)^2) - i(\omega - \varepsilon - \beta)} = 6(n+2)4^2 u_0^2 \int \int \int \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{2\Gamma_k}{\Gamma_k^2(r+k^2)^2 + \varepsilon^2} \cdot \\ &\cdot \int \frac{d\beta}{2\pi} \frac{2\Gamma_p}{\Gamma_p^2(r+p^2)^2 + \beta^2} \cdot \frac{\Gamma_{q-p, k}}{\Gamma_{q-p, k}(r+(q-p-k)^2) - i(\omega - \varepsilon - \beta)} \end{aligned}$$

y haciendo la integración de β (Apéndice I.D)

$$\Sigma_1'(q, \omega)^2 = 6(n+2)4^2 u_0^2 \int \int \int \frac{\Gamma_k \Gamma_{q-p, k}}{(r+p^2)} \frac{d\varepsilon}{2\pi} \frac{2}{\{\Gamma_k^2(r+k^2)^2 + \varepsilon^2\} \{\Gamma_{q-p, k}(r+(q-p-k)^2) + \Gamma_q(r+p^2) - i\omega\}}$$

e integrando de la misma forma ε

$$\sum (q, \omega)^2 = G(n+2) \psi^2 u_0^2 \iint_{p, k} \frac{\Gamma_{q-p-k}}{(r+p^2)(r+k^2) \{ \Gamma_{q-p-k}(r+(q-p-k)^2) + \Gamma_p(r+p^2) + \Gamma_k(r+k^2) - i\omega \}} \quad (155)$$

donde únicamente quedan por hacer las integrales sobre los vectores de onda. Para obtener cierta información muy interesante es necesario expresar (155) de otra forma, a tal fin utilizaremos las siguientes notaciones

$$\Gamma_q(r+q^2) = \Omega_q \quad (156, a)$$

$$(r+q^2) = \Theta_q \quad (156, b)$$

para cada uno de los diferentes vectores de onda. La doble integración de (155) se expresará ahora

$$I = \iint_{p, k} \frac{\Gamma_{q-p-k}}{\Theta_p \Theta_k \{ \Omega_{q-p-k} + \Omega_p + \Omega_k - i\omega \}} \quad (157)$$

e intercambiando índices (157) equivale a las otras dos expresiones siguientes

$$I = \iint_{p, k} \frac{\Gamma_k}{\Theta_p \Theta_{q-p-k} \{ \Omega_k + \Omega_p + \Omega_{q-p-k} - i\omega \}} \quad (158)$$

$$I = \iint_{p, k} \frac{\Gamma_p}{\Theta_{q-p-k} \cdot \Theta_k \{ \Omega_p + \Omega_{q-p-k} + \Omega_k - i\omega \}} \quad (159)$$

y sumando (157), (158) y (159) obtenemos

$$\begin{aligned}
 3I &= \iint_{p,k} \frac{1}{\{-\Omega_p + \Omega_k + \Omega_{q-p-k} - i\omega\}} \left\{ \frac{\sqrt{q-p-k}}{\mathcal{O}_p \mathcal{O}_k} + \frac{\sqrt{k}}{\mathcal{O}_p \mathcal{O}_{q-p-k}} + \frac{\sqrt{p}}{\mathcal{O}_{q-p-k} \mathcal{O}_k} \right\} = \\
 &= \iint_{p,k} \frac{\{-\Omega_p + \Omega_k + \Omega_{q-p-k}\}}{\mathcal{O}_p \cdot \mathcal{O}_k \cdot \mathcal{O}_{q-p-k} \{-\Omega_p + \Omega_k + \Omega_{q-p-k} - i\omega\}} \quad (160)
 \end{aligned}$$

y por lo tanto (155) se expresará ahora como

$$\begin{aligned}
 \Sigma(q, \omega)^2 &= 32(n+2)u_0^2 \iint_{p,q} \frac{1}{(r+p^2)(r+k^2)(r+(q-p-k)^2)} \cdot \\
 &\cdot \left\{ \frac{\sqrt{p}(r+p^2) + \sqrt{k}(r+k^2) + \sqrt{q-p-k}(r+(q-p-k)^2)}{\sqrt{p}(r+p^2) + \sqrt{k}(r+k^2) + \sqrt{q-p-k}(r+(q-p-k)^2) - i\omega} \right\} \quad (161)
 \end{aligned}$$

que es el resultado obtenido por Hohenberg y Halperin

(1.977) y Enz (1.977) entre otros. Si en (161) tomamos

$$\begin{aligned}
 \sqrt{q} &= \sqrt{0} && \text{tenemos la autoenergía para el modelo A y si} \\
 \sqrt{q} &= \sqrt{0 \cdot q^2} && \text{es la correspondiente al modelo B.}
 \end{aligned}$$

Para encontrar las leyes de recursión dinámicas basta hacer las integrales de los vectores de onda entre los límites Λ/b y Λ para $d = 4$, y luego aplicar las ecuaciones correspondientes a (58).

Para obtener la ley de escala (59) para valores finitos de q y ω , utilizamos (I.A.15), en la forma (Hohenberg y Halperin, 1.977)

$$\chi^{-1}(q, \omega) = b^{(-2+\eta)\ell} \chi^{-1}(q', \omega') \quad (162)$$

y explicitando más

$$\chi^{-1}(q, \omega) = b^{(-2+\eta)\ell} \left[r_\ell + q^2 b^{2\ell} - \frac{i\omega b^{2\ell}}{\sqrt{q'\ell}} - \Sigma'_\ell(q, \omega) \right] \quad (163)$$

donde ℓ indica el número de veces que se ha aplicado el Grupo de Renormalización Dinámico y la autoenergía, $\Sigma'_\ell(q, \omega)$, se ha calculado ahora en función de los parámetros, r_ℓ , u_ℓ , Γ_ℓ , haciendo las integrales de los vectores de onda entre 0 y \sqrt{b}^ℓ . Así pues (163) representa la función Respuesta lineal para los modos ψ_μ más macroscópicos.

De la ecuación (161) es muy fácil deducir el Grupo de Renormalización Estático, pues de acuerdo con el resultado (119) obtenemos que $\Sigma(q, 0)$ ha de ser la autoenergía de la función de correlación estática. Efectivamente, si hacemos $\omega = 0$ en (161) obtenemos

$$\Sigma(q, \omega)^{(1)} = 32(n+2)u_0^2 \int_p \int_k \frac{1}{(r+p^2)(r+k^2)(r+(q-p-k)^2)} \quad (164)$$

que es el conocido resultado correspondiente a la estática (Wilson y Kogut (1.974); Barber (1.977)).

Pasamos ahora al estudio de los modelos B y C, prescindiendo de los detalles que ya se han visto de estos modelos.

ii) Modelos C y D

Estos modelos de dos variables vienen definidos por las siguientes ecuaciones fenomenológicas del movimiento

$$\dot{\Psi}_\mu(t) = -\Gamma_\mu \frac{\partial H[\Psi(t), \xi(t)]}{\partial \Psi_\mu(t)} + \zeta_\mu(t) \quad (165)$$

$$\dot{\xi}_\mu(t) = -\Gamma_\mu^E \frac{\partial H[\Psi(t), \xi(t)]}{\partial \xi_\mu(t)} + \eta_\mu(t) \quad (166)$$

donde $\Psi_\mu(t)$ es el parámetro de orden y $\xi_\mu(t)$ representa la energía que estará acoplada a $\Psi_\mu(t)$. Las fuerzas estocásticas $\zeta_\mu(t)$ y $\eta_\mu(t)$ son estadísticamente independientes entre si, gaussianas, de media nula y correlación

$$\langle \eta_\mu(t) \eta_\nu(t') \rangle = 2D_{\mu\nu}^E \delta(t-t') \quad (167, a)$$

$$\langle \zeta_\mu(t) \zeta_\nu(t') \rangle = 2D_{\mu\nu} \delta(t-t') \quad (167, b)$$

El Hamiltoniano efectivo es (44) sustituyendo la variable S_μ por ξ_μ .

Y de acuerdo con (2,98) y (2,99) el Liouvilliano $L = L_0 + L_1$ será

$$L_0 = \sum_\mu \Gamma_\mu \Psi_\mu(t) \hat{\Psi}_\mu(t) + \sum_\mu \Gamma_\mu^E \xi_\mu(t) \hat{\xi}_\mu(t) + \sum_{\mu\nu} D_{\mu\nu} \hat{\Psi}_\mu(t) \Psi_\nu(t) + \sum_{\mu\nu} D_{\mu\nu}^E \hat{\xi}_\mu(t) \xi_\nu(t) \quad (168)$$

$$\begin{aligned}
L_I = & -4 U_0 \sum_{\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4} \Gamma_{\mu} \Psi_{\mu_1}(t) \Psi_{\mu_2}(t) \Psi_{\mu_3}(t) \hat{\Psi}_{\mu_4}(t) \delta_{\mu_1 + \mu_2 + \mu_3 - \mu_4, 0} - \\
& -2 \gamma_0 \sum_{\mu_1, \mu_2} \Gamma_{\mu} \xi_{\mu_1}(t) \Psi_{\mu_2}(t) \hat{\Psi}_{\mu}(t) \delta_{\mu_1 + \mu_2, \mu} - \gamma_0 \sum_{\mu_1, \mu_2} \Gamma_{\mu}^E \Psi_{\mu_1}(t) \Psi_{\mu_2}(t) \hat{\xi}_{\mu}(t) \delta_{\mu_1 + \mu_2, \mu} \quad (169)
\end{aligned}$$

donde

$$\gamma_{\mu} = -\sqrt{g} (r_0 + q^i) \quad (170, a)$$

$$\gamma_{\mu}^E = -\sqrt{\frac{g}{c_0}} \quad (170, b)$$

pues igual que en los modelos anteriores $\mu = (q, i)$.

A fin de obtener los propagadores libres hemos de resolver primero las ecuaciones del movimiento de las variables no perturbadas, que de acuerdo con su definición (2.92) y (2.93) y el Liouvilliano (168) resultan ser

$$\dot{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t) = \gamma_{\mu} \Psi_{\mu}^{\circ}(t) + 2 \sum_{\nu} D_{\mu\nu} \hat{\Psi}_{\nu}^{\circ}(t) \quad (171, a)$$

$$\dot{\hat{\Psi}}_{\mu}^{\circ}(t) = -\gamma_{\mu} \hat{\Psi}_{\mu}^{\circ}(t) \quad (171, b)$$

$$\dot{\xi}_{\mu}^{\circ}(t) = \gamma_{\mu} \xi_{\mu}^{\circ}(t) + 2 \sum_{\nu} D_{\mu\nu}^E \hat{\xi}_{\nu}^{\circ}(t) \quad (172, a)$$

$$\dot{\hat{\xi}}_{\mu}^{\circ}(t) = -\gamma_{\mu} \hat{\xi}_{\mu}^{\circ}(t) \quad (172, b)$$

Y como cada una de las variables está desacoplada de la otra, las soluciones serán las mismas que en el ejemplo anterior para la variable $\Psi_{\mu}(t)$, (ecuaciones (131)).

Para la otra variable $\xi_{\mu}(t)$ definimos los propagadores libres

$$D_{\mu\nu}^{\circ}(t,t') = \bar{T} \langle \xi_{\mu}^{\circ}(t) \xi_{\nu}^{\circ}(t') \rangle \quad (173,a)$$

$$R_{\mu\nu}^{\text{E}_0}(t,t') = \bar{T} \langle \xi_{\mu}^{\circ}(t) \hat{\xi}_{\nu}^{\circ}(t') \rangle \quad (173,b)$$

y definiendo la función Respuesta lineal libre $S^{\circ}(q,\omega)$ de igual forma que en (109) llegamos a que su expresión explícita es idéntica a (131)

$$D^{\circ}(q,\omega) = \frac{2\sqrt{q}^{\text{E}}}{\left(\frac{\sqrt{q}^{\text{E}}}{c_0}\right)^2 + \omega^2} \quad (174,a)$$

$$R^{\circ\text{E}}(q,\omega) = \frac{1}{\frac{\sqrt{q}^{\text{E}}}{c_0} - i\omega} \quad (174,b)$$

$$S^{\circ}(q,\omega) = \frac{\sqrt{q}^{\text{E}}}{\frac{\sqrt{q}^{\text{E}}}{c_0} - i\omega} \quad (174,c)$$

donde se ha hecho uso de las relaciones de Einstein

$$D_{\mu\nu} = \Gamma_{\mu} \delta_{\mu-\nu} \quad (175,a)$$

$$D_{\mu\nu}^{\text{E}} = \Gamma_{\mu}^{\text{E}} \delta_{\mu-\nu} \quad (175,b)$$

Estos propagadores los representaremos diagramáticamente mediante los símbolos

$$\begin{aligned} G^{\circ}(q,\omega) &\equiv \text{—————} \\ R^{\circ}(q,\omega) &\equiv \text{—————} \longrightarrow \\ D^{\circ}(q,\omega) &\equiv \text{~~~~~} \\ R^{\circ\text{E}}(q,\omega) &\equiv \text{~~~~~} \longrightarrow \end{aligned} \quad (175)$$

Cada una de las funciones Respuesta lineal, $\chi(q, \omega)$ y $S(q, \omega)$ obedece una ecuación de Dyson (133), de las que se obtienen dos ecuaciones idénticas a (135)

$$\chi^{-1}(q, \omega) = \chi^{0-1}(q, \omega) - \Sigma^1(q, \omega) \quad (176, a)$$

$$S^{-1}(q, \omega) = S^{0-1}(q, \omega) - \Sigma^E(q, \omega) \quad (176, b)$$

Si representamos los términos del Liouvilliano de interacción (169) mediante los diagramas

$$L_I \equiv \begin{array}{c} \diagup \\ \text{---} \\ \diagdown \end{array} -4u_0 \sqrt{q} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \\ \diagdown \end{array} -2\gamma_0 \sqrt{q} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \\ \diagdown \end{array} -\gamma_0 \sqrt{q}^E \quad (177)$$

obtendremos que los diagramas de segundo orden correspondientes a la autoenergía de $\chi(q, \omega)$ son

$$\Sigma^1(q, \omega)^2) = \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \quad (178)$$

donde el último de ellos corresponde a los diagramas e) y f) de los modelos anteriores. El diagrama de segundo orden correspondiente a la autoenergía de $S(q, \omega)$ es

$$\Sigma^E(q, \omega)^2) = \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \quad (179)$$

Para la aplicación del Grupo de Renormalización a este modelo se siguen los pasos del caso anterior y se obtienen los resultados conocidos (Halperin, Hohenberg y

Siggia (1.977), Enz (1.977)), que no explicitamos.

Nuestro objetivo en este apartado de las Aplicaciones no ha sido obtener resultados nuevos en el Grupo de Renormalización Dinámico sino en ver como se ha de aplicar la teoría perturbativa del formalismo operacional, desarrollado por Garrido y San Miguel (1.978 a), a este tipo de problemas. Creemos que el resultado es importante en sí, pues los formalismos utilizados hasta la fecha carecían de la suficiente claridad y presentaban ambigüedades en su desarrollo (San Miguel (1.978)), entre las que destacamos la no diferenciación diagramática de los propagadores R° y G° y la ausencia de una hipótesis adiabática bien establecida que permita tratar el problema de las condiciones iniciales siempre soslayado en la literatura, y que es un resultado original de esta investigación.

La no diferenciación de los propagadores libres conduce a una carencia de claridad en los diagramas al no quedar bien establecido que líneas corresponden a R° ó G° y a la vez dificulta la comprensión de los teoremas de Fluctuación-Disipación.

Con respecto a la hipótesis adiabática Halperin, Hohenberg y Ma (1.972, 1.974) nunca la mencionan en sus artículos a excepción de un comentario muy breve en otro artículo más reciente de Halperin, Hohenberg y Siggia (1.976).

Un resumen de estas técnicas perturbativas y sus diferentes versiones realizado por J.D. Gunton, P.Sahni y M. San Miguel aparecerá en el volumen 8 (Critical Dynamics) de la serie editada por Domb y Green.

PARTE II : PROCESOS NO MARKOVIANOS

INTRODUCCION

Las hipótesis de ruido blanco y de gaussianidad empleadas hasta este momento para las fuerzas estocásticas, representan una gran simplificación pues, como ya se ha visto, entonces el proceso es markoviano y obedece exactamente una ecuación de Fokker-Planck. La hipótesis de ruido blanco, aunque no con esta denominación, tiene su origen en los trabajos clásicos de Einstein sobre el movimiento Browniano. Esta hipótesis es una aproximación matemática conveniente, pero las fuerzas estocásticas reales son necesariamente de color, con un tiempo de correlación más o menos pequeño, siendo el ruido blanco el límite de tiempo de correlación nulo.

A pesar de la simplificación que introduce la hipótesis de ruido blanco surgen, sin embargo, ambigüedades matemáticas que dan origen a diversas interpretaciones de la ecuación diferencial estocástica (I.1.26) entre las que destacan la de Stratonovich y la de Itô (Arnold, 1.974). El origen de ambas está en el valor dado a la correlación del proceso de Wiener, $W(t)$, relacionado con $\zeta(t)$ en la forma $\zeta(t) = \frac{dW(t)}{dt}$, con su incremento en el mismo tiempo. Mientras Itô asigna un incremento hacia adelante en el tiempo que conduce a una correlación nula, Stratonovich considera un incremento simétrico con correlación no nula. Estas diferencias se aprecian en la ecuación de Fokker-Planck asociada a ambas interpretaciones, y consisten en la aparición de un término de arrastre en la interpreta-

ción de Stratonovich (I.1.39) para los ruidos no aditivos. Es el llamado arrastre "espúreo".

La interpretación de Stratonovich es la preferida en un contexto físico, y ello por dos razones principales: a) Invariancia de los términos de arrastre y difusión por cambios de variable (Ryter, 1.978) y ; b) Teorema de Wong y Zakai (Arnold, 1.974), que demuestra que la interpretación de Stratonovich corresponde al límite de una sucesión de ecuaciones estocásticas unidimensionales con ruidos de tiempo de correlación finito pero tendiendo a cero.

El desarrollo que presentaremos más adelante tendrá, como límite de ruido blanco la interpretación de Stratonovich, lo que nos permitirá comprobar esta aproximación y a la vez será un argumento más a favor de la interpretación de Stratonovich.

Como ya comentamos anteriormente (Motivación) estas ecuaciones estocásticas pueden tener un origen microscópico, sin embargo, también pueden ser deducidas por otros procedimientos. Por ejemplo, a partir de ecuaciones puramente fenomenológicas y deterministas introducidas para explicar la evolución de un cierto sistema físico, químico, biológico u otros, en los cuales algún parámetro multiplicativo o aditivo se hace fluctuar de la forma, $\alpha_{\mu} \rightarrow \alpha_{\mu} + \zeta_{\mu}(t)$ donde la fluctuación $\zeta_{\mu}(t)$ es ahora la fuerza estocástica. Este origen tiene sentido pues podemos pensar que ciertos parámetros que determinan el sistema no son fijos en modo alguno, por ejemplo la comida disponible en un sistema biológico, y por lo tanto la evolución y su posterior

estado estacionario, si lo hubiere, del sistema pueden depender sensiblemente de este tipo de fluctuaciones. Estas podrán ser controladas o no, pero siempre supondremos que son gaussianas, de media nula y de correlación conocida.

En general un proceso no markoviano es reducible a uno markoviano ampliando y eligiendo adecuadamente las nuevas variables (Van Kampen, 1.978) lo que de alguna forma significa volver a su origen microscópico, pero este proceso tiene un interés muy relativo pues conduce a complicaciones. A modo de ejemplo, para un problema en una dimensión es conocida la solución estacionaria de su ecuación de Fokker-Planck, dato de mucho interés; sin embargo este resultado es muy pocas veces conocido en dos o más dimensiones. Además en los casos que veremos, las nuevas variables darían cuenta de la evolución del ruido de color en función del ruido blanco, lo que no añade nada importante si el tiempo de correlación del ruido de color es pequeño, pues este parámetro puede usarse para obtener la ecuación de Fokker-Planck aproximada, como haremos, para las variables que en realidad interesan.

Este procedimiento de ampliación tiene su importancia cuando el ruido de color tiene tiempo de correlación grande en comparación con otros parámetros del sistema. Esto implicará otro tipo de desarrollos que sólo brevemente discutiremos en un caso concreto.

En esta segunda parte de este trabajo discutiremos y estudiaremos ecuaciones diferenciales estocásticas del

tipo de Langevin (I.1.26) con fuerzas estocásticas con tiempo de correlación no nulo. Nuestro objetivo principal será la deducción de una ecuación maestra para la densidad de probabilidad de un suceso, y su estudio y aplicación en diferentes situaciones de interés. Además nos interesará que esta ecuación maestra sea de la forma de una ecuación de Fokker-Planck. En general esto no será posible y serán estudiados diversos casos y excepciones, razón por la que intentaremos hacer un desarrollo perturbativo en un parámetro pequeño, al tiempo de correlación de la fuerza estocástica coloreada, tal que nos permita, para un cierto rango de valores de las variables, desprestigiar los términos que no sean de la forma de Fokker-Planck.

La razón fundamental de este objetivo estriba en que las ecuaciones maestras de la forma de la ecuación de Fokker-Planck tienen interesantes propiedades matemáticas, han sido bien estudiadas, y se conocen muchas de sus soluciones por lo que son fácilmente manejables. En cualquier otro caso las ecuaciones diferenciales son muy difíciles de tratar y se han de abordar mediante cálculo numérico y haciendo siempre truncaciones en un determinado orden. Nuestra truncación consistirá en quedarnos con los términos de la forma de la ecuación de Fokker-Planck, si bien encontraremos casos en los que la ecuación obtenida será exactamente de la forma de Fokker-Planck. Debemos aclarar sin embargo que la existencia de ecuaciones que tienen la forma de Fokker-Planck no está en desacuerdo con el carácter no markoviano del proceso estocástico. La ecuación de Fokker-Planck que deduciremos y usaremos, aunque tenga la misma

forma, no es una auténtica ecuación de Fokker-Planck para un proceso estacionario o no, gaussiano o no y de Markov (Fox, 1.977b) en el sentido que su solución fundamental no sirve para hallar la probabilidad condicional para todo tiempo. Sin embargo dicha ecuación servirá para el estudio de procesos estacionarios o no, gaussianos o no y no markovianos en el sentido que su solución será la densidad de probabilidad de un sólo suceso y únicamente se podrá utilizar correctamente para calcular promedios estadísticos a un solo tiempo y no servirá, en modo alguno, para calcular promedios multitemporales.

Este punto ha sido recientemente discutido con relación a las técnicas de transformación que permiten evitar la memoria en la ecuación de Langevin y pasar a una ecuación del mismo tipo con coeficientes dependientes del tiempo. Se había dado por supuesto (Fox, 1.977b) que aunque el proceso original con memoria era no markoviano y estacionario, después de la transformación se tenía un proceso no estacionario pero markoviano. Actualmente ha quedado ya bien establecido (Fox, 1.977a), (Hänggi y otros, 1.978) que si un proceso es no markoviano no se puede quitar esta cualidad a no ser mediante algún procedimiento de tomar límites o ampliar el número de variables.

El trabajo que presentamos en esta parte II se ha estructurado de la siguiente forma. En el capítulo 1 se presenta la deducción de una ecuación de la forma de Fokker-Planck para un sistema que obedezca ecuaciones de Langevin con fuerzas estocásticas de tiempo de correlación pequeño.

Se estudiarán también aquí los llamados sistemas exactos o exactamente resolubles.

Los restantes capítulos están dedicados a la aplicación de la ecuación obtenida anteriormente a diversos problemas de interés. En el capítulo 2 estudiaremos el efecto del ruido de color en el caso de transiciones de fase que se realizan estando el sistema fuera del estado de equilibrio, llamadas transiciones de fase de no equilibrio, campo de muy reciente investigación. Con este fin se analizan varios modelos conocidos.

Finalmente en el capítulo 3 nos dedicaremos principalmente al estudio del Movimiento Browniano en el espacio de posiciones, que es un ejemplo físico concreto de como la eliminación de variables conduce a un proceso no markoviano, y que ha captado gran interés en los últimos años principalmente por la posible extensión de sus resultados a otros problemas físicos (sistemas coloidales, solitones) y cuya importancia nos fue señalado por los profesores R.M. Mazo y P.C. Hemmer.

En todos estos campos contribuimos con resultados originales y predicciones, confirmando de una manera notable la utilidad de la ecuación de la forma de Fokker-Planck deducida para sistemas no markovianos que presentamos en el capítulo 1.

Se terminará esta parte con una enumeración de los principales resultados obtenidos en este trabajo y con unos comentarios acerca de las perspectivas futuras de la línea de investigación que hemos desarrollado.

1.- ECUACION DE FOKKER-PLANCK PARA SISTEMAS QUE OBEDECEN
ECUACIONES DE LANGEVIN CON RUIDO NO BLANCO

Nuestro propósito, en este capítulo, es estudiar bajo qué condiciones existe una ecuación de la forma de Fokker-Planck para la densidad de probabilidad de un proceso estocástico definido por N ecuaciones de Langevin del tipo

$$\dot{q}_\mu(t) = V_\mu(\vec{q}(t), t) + g_{\mu\nu}(\vec{q}(t), t) \zeta_\nu(t) \quad (1)$$

donde $\zeta_\nu(t)$ son fuerzas estocásticas o ruidos gaussianos, de media nula y función de correlación

$$\langle \zeta_\mu(t) \zeta_\nu(t') \rangle = \gamma_{\mu\nu}(t, t') \quad (2)$$

La conocida dificultad de elegir la interpretación de Itô o Stratonovich para la ecuación (1) aquí no aparece pues por ser $\zeta_\nu(t)$ una fuerza estocástica coloreada, no es delta correlacionada; característica que es el origen de dicha dificultad.

Para cada realización de la fuerza estocástica $\zeta_\nu(t)$ podemos considerar (Kubo (1.963); Van Kampen (1.975, 1.976); San Miguel (1.978); Garrido y San Miguel (1.978b); Santos (1.978)) un conjunto de sistemas obedeciendo (1). La probabilidad de encontrar el sistema en el punto q_μ en el tiempo t viene dada por la densidad de probabilidad $\rho(\vec{q}, t)$ que obedece la ecuación de continuidad o también llamada ecuación de "Liouville estocástica" (Véase apartado I.1.2)

$$\frac{\partial \rho(\vec{q}, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} (V_{\mu}(\vec{q}, t) + \int_{\mu\nu}(\vec{q}, t) \zeta_{\nu}(t)) \rho(\vec{q}, t) \quad (3)$$

donde V_{μ} y $\int_{\mu\nu}$ son considerados como un punto fijo en el espacio de las q 's.

La solución $q_{\mu}(t)$ de (1) para cada realización de $\zeta_{\nu}(t)$ es un funcional de $\zeta_{\nu}(t)$ y de las condiciones iniciales q_{μ}°

$$q_{\mu}(t) = q_{\mu}([\vec{\zeta}(t)], \vec{q}^{\circ}, t) \quad (4)$$

Por otra parte $\rho(\vec{q}, t)$ puede expresarse como el promedio de $\delta(\vec{q}(t) - \vec{q})$ sobre una distribución elegida $\rho(\vec{q}^{\circ}, 0)$ de las condiciones iniciales

$$\rho(\vec{q}, t) = \int d^n \vec{q}^{\circ} \delta(\vec{q}(t) - \vec{q}) \rho(\vec{q}^{\circ}, 0) \quad (5)$$

Van Kampen (1.975) demostró, y ello es físicamente claro, que la densidad de probabilidad $P(\vec{q}, t)$ para el proceso estocástico $q_{\mu}(t)$ definido por (1) viene dado por el promedio de $\rho(\vec{q}, t)$ sobre las realizaciones de $\zeta_{\nu}(t)$

$$P(\vec{q}, t) = \langle \rho(\vec{q}, t) \rangle \quad (6)$$

De las ecuaciones (3) y (6) tenemos

$$\frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q_\mu} (v_\mu(\vec{q}, t)) P(\vec{q}, t) - \frac{\partial}{\partial q_\mu} g_{\mu\nu}(\vec{q}, t) \langle \vec{z}_\nu(t) \rho(\vec{q}, t) \rangle \quad (7)$$

donde el promedio que aparece es sobre las $\vec{z}_\nu(t)$.

Puesto que $\rho(\vec{q}, t)$ es un funcional de $\vec{z}_\nu(t)$ a través de (3) y como las fuerzas $\vec{z}_\nu(t)$ son gaussianas, aplicamos el Teorema de Novikov (1.965) que establece para cada funcional $\phi[\vec{z}(t)]$ de las fuerzas gaussianas $\vec{z}_\nu(t)$, el siguiente resultado

$$\langle \vec{z}_\mu(t) \phi[\vec{z}(t)] \rangle = \int_0^t dt' \gamma_{\mu\alpha}(t, t') \left\langle \frac{\delta \phi[\vec{z}(t)]}{\delta z_\alpha(t')} \right\rangle \quad (8)$$

y puesto que $\rho(\vec{q}, t)$ es un funcional de $\vec{z}_\nu(t)$ tenemos

$$\begin{aligned} \langle \vec{z}_\nu(t) \rho(\vec{q}, t) \rangle &= \int_0^t dt' \gamma_{\nu\alpha}(t, t') \left\langle \frac{\delta \rho(\vec{q}, t)}{\delta z_\alpha(t')} \right\rangle = \\ &= -\frac{\partial}{\partial q_\rho} \int_0^t \gamma_{\nu\alpha}(t, t') \int d^n \vec{q}' \rho(\vec{q}', 0) \left\langle \delta(\vec{q}(t) - \vec{q}') \frac{\delta q_\rho(t)}{\delta z_\alpha(t')} \right\rangle dt' \quad (9) \end{aligned}$$

donde se ha hecho uso de (5) y de las propiedades de derivación de la delta. Sustituyendo (9) en (7) llegamos a la siguiente ecuación (San Miguel y Sancho 1.979c)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial q_\mu} v_\mu(\vec{q}, t) P(\vec{q}, t) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial q_\mu} g_{\mu\nu}(\vec{q}, t) \frac{\partial}{\partial q_\rho} \int_0^t dt' \gamma_{\nu\alpha}(t, t') \left\langle \frac{\delta q_\rho(t)}{\delta z_\alpha(t')} \right\rangle P(\vec{q}, t) \quad (10) \end{aligned}$$

que se parece mucho a una ecuación de Fokker-Planck. Obviamente si $\frac{\delta q_p(t)}{\delta \bar{z}_\alpha(t)}$ es independiente de q° y de $\bar{z}(t)$ entonces en el segundo término de (10) aparecería $P(\bar{q}, t)$. En general esto no es así, y nuestro objetivo fundamental es como tratar este término a fin de que aparezca $P(\bar{q}, t)$ y de que se mantenga la forma de ecuación de Fokker-Planck.

El problema se ha reducido ahora al cálculo de la cantidad $\frac{\delta q_p(t)}{\delta \bar{z}_\alpha(t)}$ que no es más que la función respuesta no promediada de $q_p(t)$ respecto de la fuerza externa $\bar{z}_\alpha(t)$. Las severas restricciones impuestas a $\frac{\delta q_p(t)}{\delta \bar{z}_\alpha(t)}$ y la imposibilidad práctica de evaluarla limitan la aplicación práctica de este resultado de una manera exacta. En verdad un conocimiento exacto de esta cantidad requiere la solución de (1) lo que en general es imposible. Nuestro objetivo a continuación será considerar los casos en los cuales (10) puede reducirse a una ecuación de Fokker-Planck exacta o aproximada.

Empezaremos por los casos en los que se puede obtener dicha ecuación exactamente.

1.1.-CASOS CON ECUACION DE FOKKER-PLANCK EXACTA

1.1.a) Ecuaciones con arrastre lineal y difusión constante.

El caso más general y a la vez simple a que se pueden

reducir las ecuaciones lineales, viene definido por

$$V_{\mu}(\vec{q}, t) = A_{\mu\nu}(t) q_{\nu} + B_{\mu}(t) \quad (11)$$

$$g_{\mu\nu}(\vec{q}, t) = \delta_{\mu\nu} \quad (12)$$

La ecuación (1) se convierte entonces en

$$\dot{q}_{\mu}(t) = A_{\mu\nu}(t) q_{\nu}(t) + B_{\mu}(t) + \zeta_{\mu}(t) \quad (13)$$

Para resolver esta ecuación hacemos el cambio

$$p_{\mu}(t) = C_{\mu\alpha}(t) q_{\alpha}(t) \quad (14)$$

con

$$\dot{C}_{\mu\alpha}(t) = -C_{\mu\nu}(t) A_{\nu\alpha}(t)$$

De aquí la ecuación para las p_{μ} es

$$\dot{p}_{\mu}(t) = C_{\mu\alpha}(t) (B_{\alpha}(t) + \zeta_{\alpha}(t)) \quad (15)$$

cuya solución es fácilmente obtenible en la forma

$$p_{\mu}(t) = \int_0^t C_{\mu\alpha}(t') (B_{\alpha}(t') + \zeta_{\alpha}(t')) dt' + p_{\mu}(0) \quad (16)$$

Invirtiendo (14) llegamos a la solución deseada

$$q_{\mu}(t) = C_{\mu\alpha}^{-1}(t) \int_0^t C_{\alpha\nu}(s) (B_{\nu}(s) + \zeta_{\nu}(s)) ds + C_{\mu\alpha}^{-1}(t) C_{\alpha\beta}(0) q_{\beta}(0) \quad (17)$$

Dado que tenemos la dependencia explícita en $\zeta_{\nu}(s)$ podemos calcular la función respuesta no promediada $\frac{\delta q_{\mu}(t)}{\delta \zeta_{\alpha}(t')}$

$$\begin{aligned} \frac{\delta q_{\beta}(t)}{\delta z_{\alpha}(t')} &= C_{\beta\nu}^{-1}(t) \int_0^t C_{\nu\sigma}(s) \frac{\delta z_{\sigma}(s)}{\delta z_{\alpha}(t')} ds = \\ &= C_{\beta\nu}^{-1}(t) \int_0^t C_{\nu\sigma}(s) \delta(s-t') \delta_{\sigma\alpha} ds = C_{\beta\nu}^{-1}(t) C_{\nu\alpha}(t') \end{aligned} \quad (18)$$

con $t > t' > 0$

Por lo tanto podemos sustituir en (10) y obtener la ecuación de Fokker-Planck exacta

$$\frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} (A_{\mu\nu}(t) q_{\nu} + B_{\mu}(t)) P(\vec{q}, t) + \frac{\partial^2}{\partial q_{\mu} \partial q_{\nu}} D_{\mu\nu}(t) P(\vec{q}, t) \quad (19)$$

donde la difusión depende del tiempo y viene dada por

$$D_{\mu\nu}(t) = \int_0^t dt' \gamma_{\mu\alpha}(t, t') C_{\nu\beta}^{-1}(t) C_{\beta\alpha}(t') \quad (20)$$

Observamos pues que la fuerza estocástica coloreada sólo contribuye en este caso con una nueva difusión. Veremos más adelante en ejemplos concretos que esto representa una renormalización de la difusión con respecto al caso de tener una fuerza estocástica delta correlacionada (ruido blanco).

1.1.b) Clase de modelos (no lineales) exactamente resolubles.

En esta clase de modelos incluiremos todos aquellos que por un cambio de variables pueden pasar a tener arrastre lineal y difusión constante (San Miguel 1.979).

Vamos a estudiar cuales son las condiciones necesarias y en algunos casos también suficientes para que un sistema de N ecuaciones de Langevin sea transformable, mediante un cambio de variables, en otro con arrastre lineal y difusión constante en las variables.

Partimos de la ecuación (1) y suponemos que las nuevas variables $Q_\mu(q)$ obedecerán la siguiente ecuación estocástica

$$\dot{Q}_\mu(t) = \beta_{\mu\kappa}(t) Q_\kappa(t) + \alpha_\mu(t) + \gamma_{\mu\kappa}(t) \xi_\kappa(t) \quad (21)$$

donde $\beta_{\mu\kappa}(t)$, $\alpha_\mu(t)$, $\gamma_{\mu\kappa}(t)$ pueden ser funciones únicamente del tiempo, y para las que, a partir de ahora, no escribiremos su dependencia explícita. El cambio de variables también puede depender del tiempo y lo expresamos de la forma

$$Q_\mu = Q_\mu(\vec{q}, t) \quad (22)$$

derivando esta ecuación respecto del tiempo, obtenemos

$$\dot{Q}_\mu = \frac{\partial Q_\mu}{\partial t} + \frac{\partial Q_\mu}{\partial q_\nu} \dot{q}_\nu = \frac{\partial Q_\mu}{\partial t} + \frac{\partial Q_\mu}{\partial q_\nu} (V_\nu + g_{\nu\kappa} \xi_\kappa) \quad (23)$$

Si comparamos término a término con (21) llegamos al siguiente par de ecuaciones

$$\frac{\partial Q_\mu}{\partial t} + \frac{\partial Q_\mu}{\partial q_\nu} V_\nu = \alpha_\mu + \beta_{\mu\kappa} Q_\kappa \quad (24)$$

$$\frac{\partial Q_\mu}{\partial q_\nu} g_{\nu\kappa} = \gamma_{\mu\kappa} \quad (25)$$

Estas condiciones son necesarias y suficientes pero pretendemos expresarlas de forma más completa, es decir, en una única condición que luego nos permita otros tratamientos.

Suponiendo que $g_{\kappa\sigma}^{-1}$ exista, la ecuación (25) se puede escribir como

$$\frac{\partial Q_\mu}{\partial q_\sigma} = \gamma_{\mu\kappa} g_{\kappa\sigma}^{-1} \quad (26)$$

y que sustituimos en (24)

$$\frac{\partial Q_\mu}{\partial t} + \gamma_{\mu\kappa} g_{\kappa\nu}^{-1} v_\nu = \alpha_\mu + \beta_{\mu\kappa} Q_\kappa \quad (27)$$

Ahora derivemos esta ecuación respecto de q_p

$$\frac{\partial}{\partial q_p} \frac{\partial Q_\mu}{\partial t} + \gamma_{\mu\kappa} \frac{\partial}{\partial q_p} (g_{\kappa\nu}^{-1} v_\nu) = \beta_{\mu\kappa} \frac{\partial Q_\kappa}{\partial q_p} \quad (28)$$

intercambiando las derivadas respecto de t y q_p , y haciendo uso otra vez de (26)

$$\frac{\partial}{\partial t} (\gamma_{\mu\kappa} g_{\kappa p}^{-1}) + \gamma_{\mu\kappa} \frac{\partial}{\partial q_p} (g_{\kappa\nu}^{-1} v_\nu) = \beta_{\mu\kappa} \gamma_{\kappa\sigma} g_{\sigma p}^{-1} \quad (29)$$

Si hacemos la derivada temporal y multiplicamos por la derecha por $g_{\rho\delta}$ obtendremos

$$\dot{\gamma}_{\mu\delta} + \gamma_{\mu\kappa} \left(\frac{\partial}{\partial t} g_{\kappa\rho}^{-1} \right) g_{\rho\delta} + \gamma_{\mu\kappa} \frac{\partial}{\partial q_p} (g_{\kappa\nu}^{-1} v_\nu) g_{\rho\delta} = \beta_{\mu\kappa} \gamma_{\kappa\delta} \quad (30)$$

Y si finalmente multiplicamos por $\gamma_{\sigma\mu}^{-1}$ por la izquierda, podemos agrupar los términos en la forma

$$\left(\frac{\partial g_{\rho\delta}^{-1}}{\partial t} \right) g_{\rho\delta} + \frac{\partial}{\partial q_p} (g_{\sigma\nu}^{-1} v_\nu) g_{\rho\delta} = \gamma_{\sigma\mu}^{-1} (\beta_{\mu\kappa} \gamma_{\kappa\delta} - \dot{\gamma}_{\mu\delta}) = f_{\sigma\delta}(t) \quad (31)$$

donde podemos observar que el lado derecho depende únicamente del tiempo y por lo tanto ha de ser independiente de q_μ , lo que nos conduce a que lo mismo ha de suceder en el lado izquierdo. Esta es la condición que queríamos encontrar y que es una condición necesaria obtenida a partir de la hipótesis de que exista el cambio de variables (22). Esta condición generaliza de forma no trivial resultados unidimensionales previos (Hänggi 1.978b).

Para ver que la condición (31) es también suficiente se ha de poder obtener a partir de ella el cambio de variables (22), lo que siempre es posible en una dimensión. A continuación discutiremos algunos modelos interesantes en los que se comprueba la suficiencia de (31).

1.1.b,i) Clase de modelos exactos con coeficientes
independientes del tiempo.

Consideremos aquellos modelos en los que $V_\mu(q)$ y

$g_{\mu\nu}(\vec{q})$ son explícitamente independientes del tiempo. Además como tenemos libertad en la elección de las funciones α, β, γ , vamos a considerarlas constantes. En estos supuestos la ecuación (31) se convierte en

$$\frac{\partial}{\partial q_r} (g_{\sigma\nu}^{-1} v_\nu) g_{\rho\delta} = \gamma_{\sigma\mu}^{-1} \beta_{\mu\kappa} \gamma_{\kappa\delta} \quad (32)$$

o bien

$$\frac{\partial}{\partial q_r} (g_{\sigma\nu}^{-1} v_\nu) = \gamma_{\sigma\mu}^{-1} \beta_{\mu\kappa} \gamma_{\kappa\delta} g_{\delta\gamma}^{-1} \quad (33)$$

y de esta última es inmediato comprobar la igualdad

$$\frac{\partial}{\partial q_\rho} g_{\delta\gamma}^{-1} = \frac{\partial}{\partial q_r} g_{\delta\beta}^{-1} \quad (34)$$

que se interpreta como que $g_{\mu\alpha} g_{\kappa\nu}$ puede entenderse como una métrica euclídea en la formulación covariante de la ecuación de Fokker-Planck (Graham (1.977); Garrido, Lurie y San Miguel (1.979)), y que es la condición de integrabilidad para la ecuación (26), a través de la cual definimos el cambio de variables

$$dQ_\mu = \gamma_{\mu\kappa} g_{\kappa\sigma}^{-1} dq_\sigma \quad (35)$$

y sustituyendo (33) podemos integrar esta ecuación y obtener el cambio buscado

$$Q_\mu = \beta_{\mu\alpha}^{-1} \gamma_{\alpha\rho} g_{\rho\nu}^{-1} v_\nu + B'_\mu \quad ; \quad B'_\mu = \text{cte} \quad (36)$$

A partir de esta solución podemos comprobar la ecuación

diferencial satisfecha por Q_μ . Derivando respecto del tiempo

$$\dot{Q}_\mu = \beta_{\mu\alpha}^{-1} \gamma_{\alpha\rho} \frac{\partial}{\partial q_\sigma} (g_{\rho\nu}^{-1} v_\nu) \dot{q}_\sigma \quad (37)$$

y haciendo uso de (1) y de (33)

$$\dot{Q}_\mu = \beta_{\mu\alpha}^{-1} \gamma_{\alpha\rho} \gamma_{\rho\gamma}^{-1} \beta_{\gamma\kappa} \gamma_{\kappa\delta} g_{\delta\sigma}^{-1} (v_\sigma + g_{\sigma\lambda} z_\lambda) = \gamma_{\mu\delta} g_{\delta\sigma}^{-1} v_\sigma + \gamma_{\mu\delta} z_\delta \quad (38)$$

si multiplicamos (36) por la izquierda por $\beta_{\sigma\mu}$ obtenemos

$$\gamma_{\sigma\rho} g_{\rho\nu}^{-1} v_\nu = \beta_{\sigma\mu} Q_\mu - \beta_{\sigma\mu} B'_\mu$$

que sustituimos en (38) y así finalmente llegamos a la ecuación (21)

$$\dot{Q}_\mu = \beta_{\mu\nu} Q_\nu - \beta_{\mu\nu} B'_\nu + \gamma_{\mu\kappa} z_\kappa \quad (39)$$

que es una ecuación con arrastre lineal y difusión constante, y además con los coeficientes independientes del tiempo, tal como pretendíamos.

Por lo tanto la condición (32) derivada de (31) para estos modelos es también una condición suficiente de que los mismos son modelos exactos, pues a partir de dicha condición hemos definido las nuevas variables que obedecen la ecuación lineal deseada (21).

Este conjunto de modelos coincide con el estudiado por San Miguel (1.979) y que están definidos a partir de tomar un arrastre para (1) de la forma

$$V_\mu = g_{\mu\alpha} \left(A_{\alpha\nu} \int g_{\nu\beta}^{-1} dq_\beta + B_\alpha \right) ; A_{\alpha\nu}, B_\alpha : \text{ctes} \quad (40)$$

y de suponer la igualdad (34).

Como se puede fácilmente comprobar (40) cumple idénticamente la condición de suficiencia (32), y por lo tanto estos modelos son exactamente resolubles. Además no es necesario suponer (34) pues es simplemente un resultado deducible a partir de (32).

También hemos de destacar que esta clase de modelos es única pues están definidos mediante la condición (32), si bien hay cierta libertad en tomar los parámetros α, β, γ . En dicha referencia (San Miguel, 1.979) se toma

$$\gamma_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} ; \beta_{\alpha\nu} = A_{\alpha\nu} ; \alpha_\mu = B_\mu$$

1.1.b,ii) Clase de modelos exactos con arrastre
nulo y difusión dependiente del tiempo.

Vamos a estudiar otros modelos incluidos en la condición (31). En este caso supondremos

$$\beta = \alpha = 0 ; \gamma = \gamma(t) \quad (41)$$

y también tomaremos que $V_\mu(\vec{q})$ y $g_{\mu\nu}(\vec{q})$ no dependen explícitamente del tiempo. En estas condiciones (31) se escribirá

$$\frac{\partial}{\partial q_p} (g_{\sigma\nu}^{-1} v_\nu) g_{\rho\delta} = -\gamma_{\sigma\mu}^{-1} \dot{\gamma}_{\mu\delta} \quad (42)$$

como el lado derecho sólo puede depender del tiempo y el izquierdo es independiente de él, la única solución es que los dos miembros sean iguales a la misma constante

$$\gamma_{\sigma\mu}^{-1} \dot{\gamma}_{\mu\delta} = -C_{\sigma\delta} \quad (43)$$

$$\frac{\partial}{\partial q_p} (g_{\sigma\nu}^{-1} v_\nu) g_{\rho\delta} = C_{\sigma\delta} \quad (44)$$

Multiplicando (43) por la izquierda por $\gamma_{\kappa\sigma}$

$$\dot{\gamma}_{\kappa\delta} = -\gamma_{\kappa\sigma} C_{\sigma\delta} \quad (45)$$

cuya solución puede escribirse formalmente como

$$\gamma_{\kappa\delta}(t) = \gamma_{\kappa\delta}(0) (\exp -Gt)_{\sigma\delta} \quad (46)$$

Definiendo el cambio de variables igual que en el caso anterior (35) obtenemos que viene dado por

$$Q_\mu = \gamma_{\mu\kappa}(t) C_{\kappa\rho}^{-1} g_{\rho\sigma}^{-1} v_\sigma \quad (47)$$

tomando nula la constante arbitraria. Es fácil comprobar ahora qué ecuación del movimiento satisface $Q_\mu(t)$. Si derivamos respecto del tiempo

$$\dot{Q}_\mu = \gamma_{\mu\kappa} C_{\kappa\rho}^{-1} g_{\rho\sigma}^{-1} V_\sigma + \gamma_{\mu\kappa} C_{\kappa\rho}^{-1} \frac{\partial}{\partial \dot{q}_\nu} (g_{\rho\sigma}^{-1} V_\sigma) \dot{q}_\nu$$

y usando (44), (45) y (1)

$$\begin{aligned} \dot{Q}_\mu &= -\gamma_{\mu\delta} C_{\delta\kappa} C_{\kappa\rho}^{-1} g_{\rho\sigma}^{-1} V_\sigma + \gamma_{\mu\kappa} C_{\kappa\rho}^{-1} C_{\rho\delta} g_{\delta\nu}^{-1} (V_\nu + g_{\nu\sigma} \dot{z}_\sigma) = \\ &= -\gamma_{\mu\rho} g_{\rho\sigma}^{-1} V_\sigma + \gamma_{\mu\kappa} g_{\kappa\nu}^{-1} V_\nu + \gamma_{\mu\kappa} g_{\kappa\nu}^{-1} g_{\nu\sigma} \dot{z}_\sigma \end{aligned}$$

llegamos a que

$$\dot{Q}_\mu(t) = \gamma_{\mu\kappa}(t) \dot{z}_\kappa(t) \quad (48)$$

tal como queríamos demostrar. Hemos visto pues la suficiencia de (31) para esta clase de sistemas, caracterizados porque $V_\mu(\vec{q})$ y $g_{\mu\nu}(\vec{q})$ son explícitamente independientes del tiempo. En casos distintos de estos la suficiencia de (31) no es comprobable de una forma general.

Estos sistemas (48) también pertenecen a la clase definida por San Miguel (1.979) pues la condición (44) es la misma, si bien aquí hemos tenido en cuenta la arbitrariedad en la elección de α, β, γ , y hemos tomado (41). Por otra parte en dicha referencia únicamente se considera ruido blanco, por lo tanto todos sus resultados referentes a la interpretación de Stratonovich son igualmente válidos para ruido coloreado.

A continuación vamos a resumir algunos ejemplos ilus-

trativos en los que estos resultados, relativos a los cambios de variable, son aplicables.

1.1.b.iii) Ejemplos

Destaquemos en primer lugar el modelo propuesto por Gomatan (1.974) para describir dos especies interactuantes. Dicho modelo está caracterizado por las siguientes ecuaciones

$$\dot{q}_1 = \beta_1 q_1 - b_{11} q_1 \log q_1 - b_{12} q_1 \log q_2 \quad (49)$$

$$\dot{q}_2 = -\beta_2 q_2 + b_{21} q_2 \log q_1 - b_{22} q_2 \log q_2 \quad (50)$$

que corresponden a una autointeracción del tipo Gompertz y con los términos de interacción entre especies del mismo tipo. Becus (1.979) ha tratado formalmente y con fuerzas estocásticas este modelo.

Si dejamos fluctuar el vector $\vec{\beta} = (\beta_1, \beta_2)$ alrededor de un valor medio $\vec{\beta}'$ en la forma

$$\vec{\beta} = \vec{\beta}' + \vec{\zeta}(t) \quad (51)$$

entonces obtenemos que el término en la fuerza estocástica sería explícitamente

$$g_{\mu\nu}(\vec{q}) \zeta_\nu(t) = g_{\mu\nu}(t) \delta_{\mu\nu} \zeta_\nu(t) \quad (52)$$

Es fácil ver que este modelo cumple la condición (31), y por lo tanto existe un cambio de variables (36) que podemos tomarlo en la forma

$$Q_{\mu} = \log q_{\mu} \quad (53)$$

que linealiza el sistema inicial. Tenemos pues que el sistema (49-50) es exactamente resoluble cualquiera que sea el tipo de fuerza estocástica $\zeta_{\mu}(t)$.

Otro ejemplo, que proponemos aquí por primera vez, sería un modelo de interacción de dos especies basado en la ecuación de Verhulst que se ha manifestado fructífera en el tratamiento de problemas como el crecimiento de poblaciones, ecuaciones cinéticas para el modelo químico de Schlögl y como ecuación macroscópica para el modelo simple del laser.

El sistema que proponemos es el siguiente

$$\dot{q}_1 = \beta_1 q_1 - b_{11} q_1^2 - b_{12} \frac{q_1^2}{q_2} \quad (54)$$

$$\dot{q}_2 = -\beta_2 q_2 + b_{21} \frac{q_2^2}{q_1} - b_{22} q_2^2 \quad (55)$$

donde el término de interacción entre especies depende del producto de una de ellas por su fracción relativa respecto a la otra especie.

En este modelo se hacen fluctuar los parámetros externos que gobiernan la autointeracción, de la siguiente forma

$$b_{11} \rightarrow b'_{11} - \zeta_1(t) \quad (56)$$

$$b_{22} \rightarrow b'_{22} - \zeta_2(t) \quad (57)$$

Igualmente en este caso es fácil ver que se cumple la ecuación (31) y mediante el cambio

$$Q_\mu = -\frac{1}{q_\mu} \quad (58)$$

(54-55) se reducen a un sistema lineal exactamente resoluble.

Un análisis detallado de las predicciones para estos modelos y de su significado físico puede ser tema de una posterior investigación. Estos ejemplos se han citado sólo como exponente del tipo de sistemas que pueden analizarse por estos métodos.

Estos ejemplos pertenecen al apartado 1.1.b,i). Ejemplos correspondientes al apartado 1.1.b,ii) se pueden encontrar en Hongler (1.979), De Pascuale y Tombesi (1.979), pero no nos extenderemos en ellos.

1.1.c Soluciones explícitas

La solución para $P(\vec{q}, t)$ tanto para el caso lineal (19) como para el caso exactamente soluble (40) es bien

conocida (Haken 1.975, entre otros) e igualmente válida para ruido coloreado

$$P(\vec{q}, t) = P(\vec{Q}(q), t) \left\| \frac{\partial(\vec{Q})}{\partial(\vec{q})} \right\| = \quad (58)$$

$$= (2\pi^n \|\sigma(t)\|)^{-1/2} \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \bar{\sigma}_{\mu\nu}^{-1}(t) (Q_\mu(\vec{q}) - \bar{Q}_\mu(\vec{q}, t)) (Q_\nu(\vec{q}) - \bar{Q}_\nu(\vec{q}, t)) \right\} \cdot \left\| \frac{\partial(\vec{Q})}{\partial(\vec{q})} \right\|$$

y donde $\bar{Q}_\mu(\vec{q}, t)$ es la solución determinista ($\zeta_\mu = 0$) de la ecuación lineal (21) y $\bar{\sigma}_{\mu\nu}(t)$ cumple la siguiente ecuación diferencial

$$\dot{\bar{\sigma}}_{\mu\nu}(t) = \beta_{\mu\alpha} \bar{\sigma}_{\alpha\nu}(t) + \bar{\sigma}_{\mu\alpha}(t) \beta_{\alpha\nu} + 2 D_{\mu\nu}(t) \quad (59)$$

con $\beta_{\mu\alpha}$ matriz del arrastre.

Para el caso exacto l.l.b, i), $\left\| \frac{\partial(\vec{Q})}{\partial(\vec{q})} \right\|$ es el Jacobiano del cambio y en el caso l.l.a), ($Q_\mu = q_\mu$), el Jacobiano es la unidad. Si los valores propios de $\beta_{\mu\nu}$ no tienen todos la parte real negativa, no existe solución estacionaria. El resultado (58) es igualmente válido para coeficientes dependientes del tiempo (Tomita y otros, 1.974).

1.2.-DESARROLLO EN POTENCIAS DEL TIEMPO DE CORRELACION
DE LAS FUERZAS ESTOCASTICAS

Los casos estudiados en los apartados anteriores tenían todos ecuación de Fokker-Planck exacta. Ahora vamos a estudiar aquellos casos en que esto no es posible, pero en los que postularemos que tenemos un parámetro pequeño, el tiempo de correlación, en el que desarrollaremos la ecuación para la densidad de probabilidad. Como hemos visto en la introducción suele tomarse por conveniencia que la fuerza estocástica es delta correlacionada. Esta suposición es en verdad una aproximación del ruido físico real con una correlación temporal muy pequeña. Vamos a ver pues cual es el efecto de considerar pequeño pero finito el tiempo de correlación.

En primer lugar dado que las correlaciones $\chi_{\mu\nu}(t, t')$ de las fuerzas estocásticas aparecen en (10) dentro de una integral vamos a considerarlas en el sentido de distribuciones (recuérdese que para el ruido blanco la correlación es una delta) y de esta forma vamos a desarrollar la distribución $\chi_{\mu\nu}(t, t')$ en serie de deltas y sus derivadas en la forma (Sancho y San Miguel, 1.979a)

$$\chi_{\mu\nu}(t, t') = 2D \delta_{\mu\nu} \left\{ \delta(t-t') + z_{\mu} \frac{d}{dt} \delta(t-t') + z_{\mu}^2 \frac{d^2}{dt^2} \delta(t-t') + \dots \right\} \quad (60)$$

cuya justificación puede verse en el Apéndice II.A.(II.A.8)

Dado que las fuerzas estocásticas, sin pérdida de generalidad, las hemos tomado estocásticamente independientes en el sentido que (2) es proporcional a $\delta_{\mu\nu}$, z_{μ} no

es más que el tiempo de correlación de la fuerza estocástica ζ_μ . Un ejemplo en el que se visualiza (60) corresponde a tomar una fuerza estocástica coloreada producida por un proceso de Orstein-Uhlenbeck definido por

$$d\zeta_\mu(t) = -\zeta_\mu^{-1}(\zeta_\mu(t)dt - dW(t)) \quad (61)$$

donde $W(t)$ es el proceso Wiener y su derivada temporal $\frac{dWt}{dt}$ es el ruido blanco con correlación $2D\delta(t-t')$ (Van Kampen, 1.978).

En estas circunstancias la función de correlación de las $\zeta_\mu(t)$ es

$$Y_{\mu\nu}(t,t') = \frac{D}{\zeta_\mu} \delta_{\mu\nu} \exp\left\{-\frac{|t-t'|}{\zeta_\mu}\right\} \quad (62)$$

cuyo desarrollo es (60). Para correlaciones más generales véase el apéndice II.A. Todo el proceso que sigue ahora tiene por objeto tratar de evaluar la integral en (10) a partir del desarrollo (60), donde, como recalcamos en el apéndice II.A, hemos prescindido de los efectos transitorios. Es decir a todos los efectos el límite superior t de la integración de (10) pasa a $t \rightarrow \infty$. Si no fuera así el desarrollo (60) habría que corregirlo. Este problema de los transitorios para los casos no exactos, pues los exactos no tienen esta dificultad, se deja para el final de esta parte.

El procedimiento que vamos a seguir será ir sustituyendo y evaluando cada uno de los términos en (60) y como podemos ver, en (10) irán apareciendo sucesivamente la función

respuesta y sus derivadas temporales a tiempos iguales. Estas serán calculadas en el Apéndice II.B. (San Miguel y Sancho 1.979b).

1.2.a) Límite de ruido blanco

Corresponde al orden cero en ζ_μ y por lo tanto sólo contribuye el primer término del desarrollo (60), y que incluye la función respuesta a tiempos iguales (II.B.12). Sustituyéndola en (10) obtenemos que la ecuación de Fokker-Planck en aproximación ruido blanco es

$$\frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q_\mu} V_\mu(\vec{q}, t) P(\vec{q}, t) + D \frac{\partial}{\partial q_\mu} g_{\mu\alpha}(\vec{q}, t) \frac{\partial}{\partial q_\beta} g_{\beta\alpha}(\vec{q}, t) P(\vec{q}, t) \quad (63)$$

que ya fue deducida anteriormente en (I.1.36).

1.2.b) Aproximación en primer orden en el tiempo de correlación.

En este punto es donde empiezan a aparecer las complicaciones y los resultados más interesantes y originales respecto a la literatura actual.

Esta aproximación incluye el término de ruido blanco más el término debido al sumando proporcional a ζ_μ en el desarrollo (60). Esta última contribución corresponde a la derivada de la función respuesta por un signo menos debido a la integración de la derivada de la delta.

La corrección debida a ζ_μ en el segundo sumando de (10) será

$$\frac{\partial}{\partial q_\mu} g_{\mu\alpha}(\vec{q}, t) \frac{\partial}{\partial q_\beta} D z_\alpha \int_0^t \left(\frac{d}{dt'} \delta(t-t') \right) \frac{\delta q_\beta(t)}{\delta z_\alpha(t')} = - \frac{\partial}{\partial q_\mu} g_{\mu\alpha}(\vec{q}, t) \frac{\partial}{\partial q_\beta} D z_\alpha \frac{d}{dt} \frac{\delta q_\beta(t)}{\delta z_\alpha(t')} =$$

$$- D z_\alpha \frac{\partial}{\partial q_\mu} g_{\mu\alpha}(\vec{q}, t) \frac{\partial}{\partial q_\beta} M_{\beta\alpha}(\vec{q}, t) - D z_\alpha \frac{\partial}{\partial q_\mu} g_{\mu\alpha}(\vec{q}, t) \frac{\partial}{\partial q_\beta} K_{\beta\gamma\alpha}(\vec{q}, t) \zeta_\gamma(t) \quad (64)$$

donde hemos usado (II.B.4).

Ahora sólo queda sustituir en (10), pero en este caso (II.B.4) deja de cumplir la hipótesis de ser independiente de $\zeta_\mu(t)$ y por lo tanto (10) se ha de escribir

$$\frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial V_\mu(\vec{q}, t)}{\partial q_\mu} + D \frac{\partial}{\partial q_\mu} g_{\mu\alpha}(\vec{q}, t) \frac{\partial}{\partial q_\beta} \left\{ g_{\beta\alpha}(\vec{q}, t) - z_\alpha M_{\beta\alpha}(\vec{q}, t) \right\} \right] P(\vec{q}, t) +$$

$$+ D \frac{\partial}{\partial q_\mu} g_{\mu\alpha}(\vec{q}, t) \frac{\partial}{\partial q_\beta} z_\alpha K_{\beta\gamma\alpha}(\vec{q}, t) \langle \zeta_\gamma(t) \rho(\vec{q}, t) \rangle \quad (65)$$

Los primeros dos términos del lado derecho de (65) tienen la forma de ecuación de Fokker-Planck e incluyen el primer orden en los tiempos de correlación ζ_μ . El tercer término contiene aún un promedio estadístico que debe hacerse aplicando otra vez el teorema de Novikov tal como fue hecho en (7). Este promedio introduce nuevas derivaciones sobre q_μ y por lo tanto rompe la forma de la ecuación de Fokker-Planck. Concluimos por tanto que en general no existe ecuación de Fokker-Planck en primer orden en ζ_μ .

Este resultado no se encuentra en la literatura y nuestro propósito en lo que sigue es estudiar extensamente sus consecuencias y los casos que si tienen ecuación de Fokker-Planck en primer orden en Z_r , y aún en más órdenes. Parecería obvio que será en aquellos casos en que $K_{\beta\gamma\alpha}$ sea idénticamente nulo, pero encontraremos alguna excepción en que esto no es así.

1.2.b,i) $K_{\beta\gamma\alpha} = 0$

El caso más obvio corresponderá a los procesos aditivos ($g_{\mu\nu} = cte$) tal como puede apreciarse en (II.B.16), siendo también obvio el caso de una dimensión, sobre el que haremos un estudio intensivo más adelante (Capítulo 2).

Otro caso en el que $K_{\beta\gamma\alpha} = 0$ es cuando $g_{\mu\nu}^{-1}(q)$ existe y satisface la condición de holonomía (34) (Graham (1.977); Garrido, Lurie y San Miguel (1.979); Garrido (1.980)). Esta condición nos asegura que por medio de un cambio no lineal de coordenadas (35) el proceso (1) puede reescribirse como un proceso aditivo, es decir puede transformarse en un proceso estocástico con difusión constante para el que obviamente $K_{\beta\gamma\alpha} = 0$.

De todas maneras, sin utilizar la existencia del cambio (35), demostraremos en el Apéndice II.C. que cuando se cumple la condición de holonomía (34) entonces tenemos que

$$M_{\beta\alpha} = -g_{\beta\sigma} \frac{\partial}{\partial q_\sigma} (g_{\sigma\gamma}^{-1} V_\gamma) g_{\rho\alpha} ; K_{\beta\gamma\alpha} \equiv 0 \quad (66)$$

En este caso la ecuación de Fokker-Planck (65) se escribirá (San Miguel y Sancho, 1.979c)

$$\frac{\partial P(\vec{q},t)}{\partial t} = -\frac{\partial V_{\mu}(\vec{q},t)}{\partial q_{\mu}} P(\vec{q},t) +$$

$$+ D \frac{\partial g_{\mu\alpha}(\vec{q},t)}{\partial q_{\mu}} \frac{\partial g_{\beta\sigma}(\vec{q},t)}{\partial q_{\beta}} \left\{ \delta_{\sigma\alpha} - Z_{\alpha} \frac{\partial}{\partial q_{\beta}} (g_{\sigma\gamma}^{-1}(\vec{q},t) V_{\gamma}(\vec{q},t)) g_{\mu\alpha}(\vec{q},t) \right\} P(\vec{q},t) \quad (67)$$

donde se aprecia claramente la corrección en Z_{α} . Esta ecuación es uno de los resultados fundamentales de este trabajo.

Observemos ahora que si se cumple condición (32) obtenemos una ecuación de Fokker-Planck normal con una renormalización de la difusión. Efectivamente usando (32) llegamos a

$$\frac{\partial P(\vec{q},t)}{\partial t} = -\frac{\partial V_{\mu}(\vec{q},t)}{\partial q_{\mu}} P(\vec{q},t) + \frac{\partial g_{\mu\alpha}(\vec{q},t)}{\partial q_{\mu}} \frac{\partial}{\partial q_{\beta}} (\vec{q},t) D \left\{ \delta_{\sigma\alpha} - Z_{\alpha} C_{\sigma\alpha} \right\} P(\vec{q},t) \quad (68)$$

como cabría esperar dado que en este caso la ecuación (32) nos asegura que existe un cambio (35) ó (36) que conduce a una ecuación de Fokker-Planck exacta. Y esto es cierto para todos los órdenes en las correcciones en Z_{μ}^n . Al final la serie sería sumable y obtendríamos un $D_{\mu\alpha}(t)$ para $t \rightarrow \infty$ correspondiente a (20).

Se omitirá la demostración general de ésto, por ser excesivamente larga y tediosa, pero el procedimiento es el mismo que el descrito en el Apéndice II.C.

1.2.b,ii) $K_{\beta\gamma\alpha} \neq 0$, con existencia de ecuación de Fokker-Planck.

Nos corresponde estudiar ahora el último sumando de la ecuación (65)

$$-D \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} g_{\mu\alpha}(\vec{q}, t) \frac{\partial}{\partial q_{\beta}} z_{\alpha} K_{\beta\gamma\alpha}(\vec{q}, t) \langle \bar{z}_{\gamma}(t) \rho(\vec{q}, t) \rangle \quad (69)$$

aplicando ahora al promedio $\langle \dots \rangle$ el teorema de Novikov (9) (por claridad prescindiremos de las dependencias explícitas) tenemos que (69) se convierte en

$$D \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} g_{\mu\alpha} \frac{\partial}{\partial q_{\beta}} z_{\alpha} K_{\beta\gamma\alpha} \frac{\partial}{\partial q_{\gamma}} \int_0^t dt' \gamma_{\beta\alpha'}(t, t') \frac{\delta q_{\alpha}(t)}{\delta \bar{z}_{\alpha'}(t')} \quad (70)$$

donde si sustituimos el primer término de (60) junto con (II.B.12) llegamos a

$$D^2 \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} g_{\mu\alpha} \frac{\partial}{\partial q_{\beta}} z_{\alpha} K_{\beta\gamma\alpha} \frac{\partial}{\partial q_{\gamma}} g_{\alpha\gamma} P(\vec{q}, t) \quad (71)$$

que tiene tres derivaciones sobre $P(\vec{q}, t)$ y por lo tanto en principio no tendremos ecuación de Fokker-Planck. La suposición que haremos ahora para obviar este escollo será tomar $z_{\mu} = z$. En lo que sigue haremos conmutaciones con las derivaciones en (71) hasta ver que el término en tres derivaciones juntas es nulo y a su vez los términos restantes los agruparemos en la forma de la ecuación de Fokker-Planck.

En el apéndice II.D, obtenemos las contribuciones de (71). Sustituyendo la fórmula (II.D.8) por el último término de (65) llegamos a la ecuación de Fokker-Planck más general para el caso $\zeta_\mu = Z$, en primer orden en Z , (Por razones obvias no incluiremos la dependencia explícita en \vec{q} y t)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial q_\mu} \left(V_\mu - D^2 Z \left(\frac{\partial}{\partial q_\rho} \left(\frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_\alpha} K_{\mu\rho\alpha} \right) \right) q_{\rho\gamma} + D^2 Z \left(\frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_\rho} \right) \left(\frac{\partial K_{\rho\gamma\alpha}}{\partial q_\alpha} \right) q_{\mu\gamma} \right) P(\vec{q}, t) + \\ & + \frac{\partial}{\partial q_\mu} g_{\mu\alpha} \frac{\partial}{\partial q_\rho} \left(D q_{\rho\alpha} - D Z M_{\rho\alpha} - D^2 Z \left(\frac{\partial K_{\rho\gamma\alpha}}{\partial q_\alpha} \right) q_{\mu\gamma} \right) P(\vec{q}, t) + \\ & - D^2 Z \frac{\partial^2}{\partial q_\mu \partial q_\rho} \left(\frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_\alpha} \right) \left(K_{\mu\rho\alpha} q_{\mu\gamma} + K_{\rho\gamma\alpha} q_{\mu\gamma} \right) P(\vec{q}, t) \quad (72) \end{aligned}$$

Esta ecuación es uno de los resultados originales de la presente investigación. Dejamos para más adelante los comentarios a la misma y su relación con la literatura sobre este tema.

También existe otro caso con $K_{\rho\gamma\alpha} \neq 0$ en el que podemos tener ecuación de Fokker-Planck en primer orden en ζ_μ . Dado que este caso está incluido en el Movimiento Browniano en varias dimensiones, dejaremos su estudio para ese apartado (Apartado 3.2.c).

1.2.c) Aproximación en órdenes superiores en el tiempo de correlación.

Sólo dedicaremos unas palabras para comentar este punto. En general hemos visto que si en primer orden en ζ_μ ya hay excepciones para encontrar casos en los que exista ecuación de Fokker-Planck, mayores problemas habrá en el segundo orden. O bien, si existe ecuación de Fokker-Planck en orden ζ_μ^2 , es porque el sistema es de la clase de los exactos y lo es en todo orden en ζ_μ^n , o bien es un caso especial que sólo puede encontrarse por estudio explícito del mismo. Existe un caso de éstos, y probaremos que existe ecuación de Fokker-Planck hasta el orden ζ^3 inclusive. Pero este ejemplo pertenece al movimiento Browniano y será estudiado en ese apartado (Apartado 3.3.).

1.3.-TRANSITORIOS

En las deducciones hechas en todo este apartado se ha prescindido de los transitorios. Es decir nos hemos limitado a estudiar la ecuación de Fokker-Planck para tiempos grandes comparados con el tiempo de correlación. Vamos pues a estudiar la influencia del ruido coloreado en los estadios iniciales del tiempo. Obviamente este estudio sólo se hará para las clases de modelos no exactos, pues los exactos incluyen el tiempo de una manera completa (Ecuaciones 20 y 58). Los transitorios que nos quedemos habrán de ser del mismo orden que la aproximación.

El punto de partida es la ecuación (10) y ahora en vez de hacer el desarrollo de la distribución $\gamma_{\nu\alpha}(t, t')$ en la forma (60), desarrollaremos por Taylor la función respuesta no promediada $\frac{\delta q_{\rho}(t)}{\delta z_{\alpha}(t')}$ como función de t' en el punto t ,

$$\frac{\delta q_{\rho}(t)}{\delta z_{\alpha}(t')} = \frac{\delta q_{\rho}(t)}{\delta z_{\alpha}(t)} \Big|_{t'=t} - \frac{d}{dt'} \frac{\delta q_{\rho}(t)}{\delta z_{\alpha}(t')} \Big|_{t'=t} (t-t') + \dots \quad (73)$$

Sustituyendo en (10) y efectuando las integrales temporales llegamos a

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} v_{\mu}(\vec{q}, t) P(\vec{q}, t) + A_{\nu\alpha}(t) \frac{\partial q_{\mu\nu}(\vec{q}, t)}{\partial q_{\mu}} \frac{\partial}{\partial q_{\rho}} \frac{\delta q_{\rho}(t)}{\delta z_{\alpha}(t')} \Big|_{t'=t} \cdot P(\vec{q}, t) - \\ & - C_{\nu\alpha}(t) \frac{\partial q_{\mu\nu}(\vec{q}, t)}{\partial q_{\mu}} \frac{\partial}{\partial q_{\rho}} \frac{d}{dt'} \frac{\delta q_{\rho}(t)}{\delta z_{\alpha}(t')} \Big|_{t'=t} \cdot P(\vec{q}, t) \end{aligned} \quad (74)$$

donde

$$A_{\nu\alpha}(t) = \int_0^t v_{\nu\alpha}(t, t') dt' \quad (75)$$

$$C_{\nu\alpha}(t) = \int_0^t (t-t') \gamma_{\nu\alpha}(t, t') dt' \quad (76)$$

En el caso concreto de tomar el proceso de Orstein-Uhlenbeck (61) y (62)

$$A_{vd}(t) = D \delta_{vd} (1 - e^{-t/z_v}) \tag{77,a}$$

$$C_{vd}(t) = D \delta_{vd} z_v (1 - e^{-t/z_v} - \frac{t}{z_v} e^{-t/z_v}) \tag{77,b}$$

Parece como si a primera vista el tercer sumando de (77) fuera de orden z_v^{-1} , en vez de ser de orden cero como los otros dos sumandos. Basta hacer un pequeño cálculo para cerciorarse de que, para $t < z_v$, el término es de orden cero; y para $t > z_v$ entonces domina la exponencial y también es de orden cero. Esto se ve claramente representando los tres sumandos, fig.1.

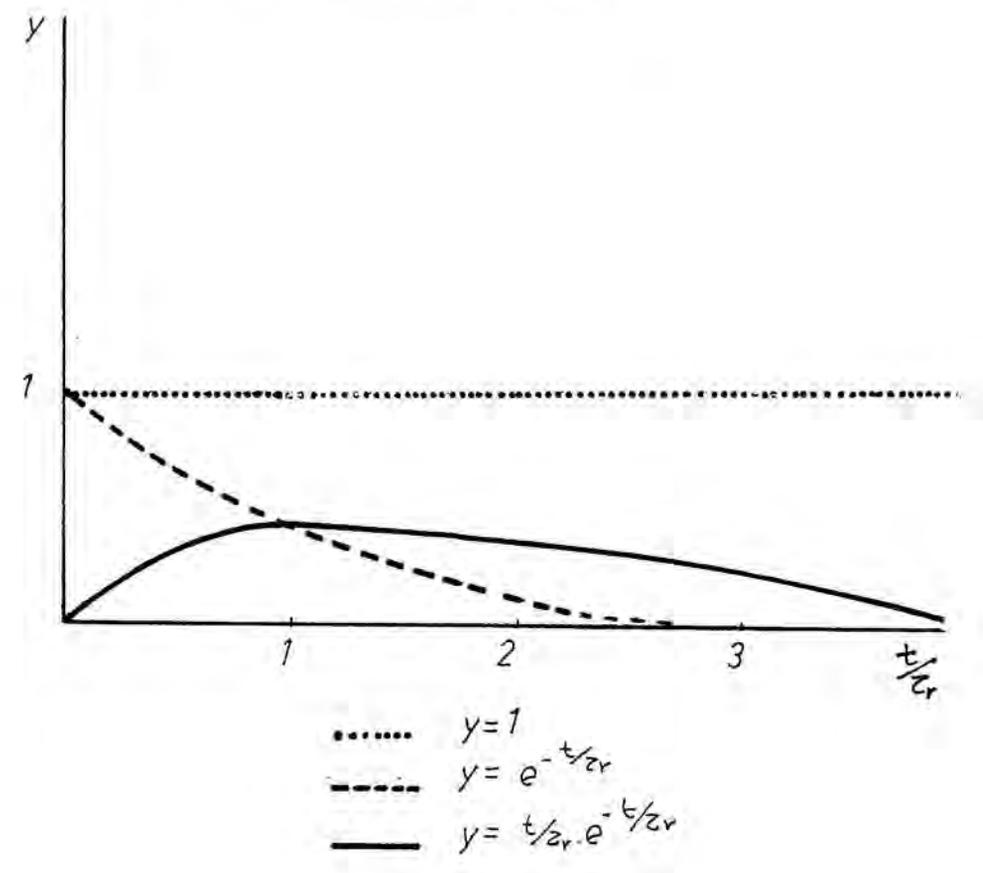


fig 1

Como podemos observar los transitorios sólo introducen

unos coeficientes dependientes del tiempo y las ecuaciones (10) y (65) quedan en la misma forma, así como las ecuaciones derivadas (67), (68) y (72). Para $t \gg Z$, tenemos la concordancia deseada con las ecuaciones citadas.

1.4.-DESARROLLOS RELACIONADOS CON LA PRESENTE DEDUCCION

Antes de acabar este capítulo vamos a hacer algunos comentarios en conexión con otros tratamientos similares a este problema del ruido no blanco.

Stratonovich (1.963) ha tratado este problema para el caso de una dimensión y sin emplear la hipótesis de gaussianidad de la fuerza estocástica $\xi_{\mu}(t)$. Ha discutido la validez de (63) como límite del tiempo de correlación nulo de la fuerza estocástica. En su discusión evalúa la primera corrección a la versión unidimensional de (63), con la cual está de acuerdo nuestro resultado (64), pero para él, el parámetro Z no juega ningún papel importante, no es un desarrollo en ese parámetro lo que él trata de evaluar.

Los puntos principales y diferentes de nuestra derivación están en la utilización del teorema de Novikov y la subsiguiente aparición de la función respuesta, mientras que la derivación de Stratonovich está basada en un método completamente diferente y bastante oscuro*, que ha hecho

*Véase por ejemplo los comentarios del traductor del libro de Stratonovich en el prefacio del mismo y dedicados al suplemento del capítulo 4 de dicho libro, donde Stratonovich deduce tal ecuación.

que su resultado haya permanecido hasta ahora en el olvido de la literatura actual.

Su condición de la validez del desarrollo es

$$\varepsilon \frac{\partial F}{\partial q} \tau_{\text{cor}} \ll 1 \quad (78)$$

para una ecuación estocástica del movimiento de la forma

$$\dot{q} = \varepsilon F[q, \xi(t)] = f(q) + g(q)\xi(t) \quad (79)$$

y donde τ_{cor} viene definido a través de

$$\tau_{\text{cor}} = \frac{2}{K} \varepsilon^2 \int_{-\infty}^0 |z| K[F, F_z] dz \quad (80)$$

con

$$K = 2 \varepsilon^2 \int_{-\infty}^0 K[F, F_z] dz \quad (81)$$

y

$$K[F, F_z] = \langle F F_z \rangle - \langle F \rangle \langle F_z \rangle \quad (82)$$

por lo tanto la obtención de τ_{cor} implica la solución de (79) generalmente irresoluble, salvo casos exactos. De aquí deducimos que la condición (78) es formal y en modo alguno utilizable.

En cambio en nuestro tratamiento la condición de validez para nuestra aproximación de Fokker-Planck (65) con

$K_{\beta\alpha} = 0$, podríamos expresarla en la forma

$$Z_{\alpha} M_{\beta\alpha}(\vec{q}, t) \ll g_{\beta\alpha}(\vec{q}, t) \quad (83)$$

donde todos los elementos que intervienen son conocidos, tanto $g_{\beta\alpha}$ que es un dato, como $M_{\beta\alpha}$ expresado en (II.B.5) y así como Z_{α} , calculado a través de (76) extendiendo la integral a $t \rightarrow \infty$

$$Z_{\alpha} \delta_{\nu\alpha} = \int_0^{\infty} (t-t') \gamma_{\nu\alpha}(t, t') dt' \quad (84)$$

, tiene un significado físicamente más claro.

Además la claridad de nuestro tratamiento nos ha permitido extenderlo a N dimensiones (Stratonovich no calcula la aproximación en este caso) y encontrar los términos transitorios.

Van Kampen (1.974, 1.976) ha estudiado este problema y también para ecuaciones diferenciales estocásticas más generales por medio de desarrollo por cumulantes. Ha obtenido un desarrollo en potencias de $\kappa(\kappa Z)^n$ donde κ es un parámetro multiplicativo contenido en el término estocástico en la forma $\kappa.g(q, t). \zeta(t)$. Este autor no parte del carácter gaussiano para la fuerza estocástica $\zeta(t)$ pero tampoco estudia el caso de diferentes ζ_{μ} . Por otra parte, aquí únicamente desarrollamos en potencias de Z y como podemos ver en nuestra solución general (72) y luego veremos en el capítulo dedicado al movimiento browniano, obtenemos en general términos que no tienen factores de la forma $\kappa(\kappa Z)^n$, (téngase en cuenta que $D \sim \kappa^2$).

La derivación de Van Kampen puede entenderse como una solución perturbativa de (3) la cual es al final promediada. El término en que se perturba es el que contiene $\zeta(t)$ y el subsiguiente promedio de los operadores de evolución es hecho utilizando el desarrollo en cumulantes.

Desde nuestro punto de vista es interesante discutir cómo la función respuesta ha de manejarse para obtener sus resultados. Por simplicidad trabajaremos en una dimensión y demostraremos que su corrección de primer orden al ruido blanco puede obtenerse a partir de (10) si en vez de desarrollar $\gamma(t, t')$, la función respuesta es evaluada en orden cero en $\zeta(t)$. Esto significa que la evolución temporal de $q(q(t'))\hat{q}(t')$ en (II.B.11) es aproximada por la evolución dada por $L_0(\hat{q}, q) = V(q)\hat{q}$, lo cual, de hecho, es considerar la función respuesta lineal desde un tiempo inicial t . El segundo término de (1.10) (en una dimensión) se convierte entonces en

$$\begin{aligned}
 & \int_0^t dt' \gamma(t, t') \hat{q} g(q) \hat{q} e^{v(q)\hat{q}(t'-t)} g(q) e^{-v(q)\hat{q}(t'-t)} \left[e^{v(q)\hat{q}(t'-t)} \hat{q} e^{-v(q)\hat{q}(t'-t)}, q \right] P(q, t) = \\
 & = \int_0^t dt' \gamma(t, t') \hat{q} g(q) e^{\hat{q}v(q)(t'-t)} \hat{q} g(q) e^{-v(q)\hat{q}(t'-t)} \left[e^{v(q)\hat{q}(t'-t)} e^{-\hat{q}v(q)(t'-t)} \hat{q}, q \right] P(q, t) = \\
 & = \int_0^\infty dt' \gamma(t, t') \frac{\partial}{\partial q} g(q) e^{\hat{q}v(q)(t'-t)} \frac{\partial}{\partial q} g(q) e^{-\hat{q}v(q)(t'-t)} P(q, t)
 \end{aligned}
 \tag{85}$$

donde en el último paso el límite de integración t ha sido reemplazado por ∞ lo cual conlleva a despreciar los transitorios, implícitamente despreciados en (60).

La ecuación (10) con (85) es el resultado de Van Kampen obtenido mediante el procedimiento de sólo quedarse el primer cumulante. Esto no significa que (85) es exacta para las fuerzas estocásticas gaussianas (Van Kampen 1.976). Esta ecuación es establecida para ser válida en orden $\kappa^2 \mathcal{Z}$ únicamente. De hecho (85) contiene todos los órdenes en \mathcal{Z} y ha de hacerse un posterior desarrollo para quedarse únicamente con los términos de orden \mathcal{Z} .

En primer orden, el desarrollo de las exponenciales de (85) lleva a

$$e^{\hat{q}V(q)(t'-t)} e^{-\hat{q}V(q)(t'-t)} \simeq \hat{q}g(q) - (t'-t)\hat{q}g'(q)\left(\frac{\partial V(q)}{\partial q}g(q)\right) \quad (86)$$

y cuando (86) es sustituida en (85) y evaluada la integral temporal con una $\gamma(t, t')$ de la forma (62), entonces se recupera la versión unidimensional de (64) en la forma (67).

Los órdenes superiores de (86) contribuyen en \mathcal{Z}^n y conservan la forma de Fokker-Planck, pero sería inconsistente quedárselos sin introducir otros términos provenientes de una mejor evaluación de la función respuesta.

Las dificultades del método de Van Kampen son más patentes en N dimensiones donde su desarrollo es extremada-

mente complejo.

Referente a los criterios de validez, Van Kampen no da ninguna prescripción, a no ser (αz) muy pequeño, y esto es en parte debido a la dificultad de calcular un orden superior, en su formalismo, para establecer las comparaciones.

Una discusión de estos formalismos y de otros relacionados puede encontrarse en Santos (1.978).

Tanto Stratonovich como Van Kampen consideran fuerzas estocásticas no gaussianas, sin embargo para aquellas fuerzas estocásticas de media nula nuestros resultados coinciden con los de ellos en primer orden en \mathcal{Z} , salvo las excepciones señaladas. Esto es debido a que las correcciones no gaussianas aparecen en órdenes superiores. Por lo tanto nuestros resultados son también válidos en primer orden en \mathcal{Z} para fuerzas estocásticas no gaussianas.

Pensamos pues, por todas estas razones, que el método que proponemos representa en sí mismo una contribución original e importante a esta parte de la Física de los procesos estocásticos no markovianos.

2.- TRANSICIONES DE FASE DE NO EQUILIBRIO

Es un hecho experimental bien establecido hoy en día que ciertos sistemas son capaces de autoorganizarse y de adquirir un estado estacionario que sólo puede explicarse dinámicamente. Por ejemplo el caso de un estado metaestable. Si el sistema es llevado suficientemente lejos del equilibrio y las leyes lineales dejan de ser válidas entonces el sistema puede evolucionar hacia estados que muestran hechos cualitativamente nuevos y que necesitan disipar energía para mantenerse en ellos.

El punto esencial es que dicho comportamiento sólo aparece si la evolución del sistema está gobernada por leyes no lineales. Como consecuencia de dicha no linealidad es difícil su tratamiento y así el comportamiento macroscópico de dichos sistemas lejos del equilibrio se ha investigado analizando modelos concretos. Como la evolución de estos sistemas está gobernado por ecuaciones fenomenológicas no lineales, para ciertos valores críticos de un parámetro externo pueden aparecer nuevos tipos de solución (estados). Al mismo tiempo las propiedades de estabilidad de un estado inicial pueden cambiar. Estos fenómenos son similares a las transiciones de fase de primer y segundo orden de la Mecánica Estadística de equilibrio, y por esa razón se les denomina transiciones de fase de no equilibrio.

La cinética química nos proporciona muchos ejemplos de estas transiciones. Dichos fenómenos han sido, en primer lugar, analizados al nivel puramente determinista de

su ecuación de evolución. Cuando el importante papel de las fluctuaciones se tuvo en cuenta se pasó a un análisis estocástico del problema.

Un buen resumen de todos estos conceptos puede encontrarse en el libro *Synergetics* de Haken (1.977).

En este apartado nos ocuparemos de la influencia de las fuerzas estocásticas externas en los procesos de no equilibrio. En efecto, muchas de estas transiciones son debidas a un parámetro controlado externamente y sujeto, en general, a fluctuaciones. Estas fluctuaciones pueden influenciar profundamente el comportamiento del sistema. Hemos de destacar que estas fluctuaciones son esenciales en situaciones como dinámica de poblaciones, o en otros casos en los que los parámetros externos no son controlables o bien lo son pero interesa hacerlos fluctuar para observar si existen nuevos efectos. Este último aspecto ha cobrado últimamente cierta importancia en la inmunología de tumores (Lefever y Horsthemke, 1.979).

Recientemente ha sido bien establecido (Horsthemke y Malek Mansour (1.976); Arnold, Horsthemke y Lefever (1.978); Kitahara, Horsthemke y Lefever (1.979)) que la presencia del ruido externo puede inducir transiciones de fase de no equilibrio ausentes en el análisis determinista de las ecuaciones del movimiento. También han sido presentadas evidencias experimentales de estos fenómenos (Kawakubo, Kabashima y Tsuchiya (1.978); Kabashima y Kawakubo (1.979); Kabashima, Kogure, Kawakubo y Okada (1.979)). En primer

lugar han sido obtenidos resultados exactos para el estado estacionario de sistemas descritos por una única variable bajo la idealización de ruido externo blanco (Hors-
themke y Malek Mansour (1.976)).

Una pregunta inmediata se presenta en este contexto y es hasta qué punto el ruido blanco es una aproximación acertada para los ruidos reales o si la finitud del tiempo de correlación del ruido externo puede ocasionar nuevos fenómenos. Para responder a esta pregunta podemos considerar la influencia del ruido coloreado, por ejemplo, un ruido producido por un proceso de Orstein Uhlembeck (1.61).

La principal dificultad aparece, como ya hemos visto, porque no podemos continuar en el marco de los procesos de Markov a no ser que aumentemos las variables (Por ejemplo: las variables físicas más las correspondientes al ruido real). En el caso de una dimensión, que es el que trataremos ahora, esto nos lleva a un problema de dos variables markoviano pero cuya solución estacionaria es conocida en muy pocos casos. Una solución aproximada fue dada por Arnold y otros (1.978) pero para el caso de ruido externo de gran tiempo de correlación, es decir, en el extremo opuesto del ruido blanco y por lo tanto no da información acerca de la aproximación de ruido blanco. Insistiremos en este método cuando estudiemos el modelo genético (Apartado 2.2.b).

Por otra parte existen algunos resultados exactos, con ruido real, para la obtención de la densidad de probabili-

dad estacionaria. Kitahara y otros (1.979) han obtenido estos resultados a partir de considerar un caso muy especial de ruido externo, el llamado proceso dicotómico de Markov (Van Kampen, 1.976). Este proceso está caracterizado en primer lugar por el hecho de tomar la variable estocástica $\mathfrak{Z}(t)$ solamente dos valores posibles y opuestos con igual probabilidad, y en segundo lugar por tener la misma función de correlación que el proceso de Orstein-Uhlenbeck (1.62).

Nuestro tratamiento de estos problemas empezará en el apartado 2.1 por aplicar los resultados obtenidos en el capítulo 1 para el caso particular de una dimensión pues todos los casos que estudiaremos en este capítulo tendrán esta característica. A la vez estudiaremos con detalle el significado físico de todos los pasos a fin de clarificar el funcionamiento práctico de las ecuaciones diferenciales estocásticas con ruido de color. En este apartado incluiremos también casos exactos.

En el apartado 2.2.a) estudiaremos el mismo proceso que Kitahara y otros (1.979) pero con el ruido coloreado definido en (1.62); y en 2.2.b) haremos lo mismo con el modelo genético.

El apartado 2.2.c) será dedicado a la interpretación de los resultados experimentales de Kawakubo y otros (1.978) bajo el punto de vista de la presente teoría desarrollada para procesos no markovianos.

2.1.-CASO UNIDIMENSIONAL Y MODELOS EXACTOS

Consideremos la siguiente ecuación diferencial unidimensional para la variable macroscópica $q(t)$

$$\dot{q}(t) = f(q(t)) + \kappa g(q(t)) \quad (1)$$

donde κ será un parámetro externo.

El análisis determinista de (1) nos conduce a que los estados estacionarios serán aquellos para los cuales $\dot{q} = 0$. Así pues igualando (1) a cero podemos obtener una serie de soluciones, q^0 , que dependen del valor del parámetro κ . Y así decimos que κ gobierna la transición de un estado estacionario a otro. La estabilidad de dichos estados se obtiene a partir de la ecuación

$$\left. \frac{d}{dq} (f(q) + \kappa g(q)) \right|_{q=q^0} < 0 \quad (2)$$

que proviene de suponer que la parte derecha de (1) es una fuerza que deriva de un potencial generalizado y entonces (2) es la condición de mínimo de dicho potencial. Si (2) es igual a cero se denomina estabilidad marginal y si es mayor que cero el estado estacionario es inestable (Hors-
themke, 1.978).

Como κ es un parámetro que depende de las condiciones externas estará sujeto a fluctuaciones alrededor de un valor medio. Estas fluctuaciones se tendrán en cuenta si sustituimos en (1)

$$\kappa \rightarrow \kappa + \zeta(t) \quad (3)$$

donde $\zeta(t)$ será el ruido externo que da cuenta de tales fluctuaciones y K será ahora el valor medio. Esto nos lleva a la siguiente ecuación estocástica

$$\dot{q}(t) = f(q(t)) + \alpha g(q(t)) + g(q(t)) \zeta(t) \quad (4)$$

El efecto de esta nueva fuerza estocástica será la aparición de fenómenos nuevos, distintos de los obtenidos mediante el análisis determinista. Uno de estos fenómenos puede ser la aparición de un nuevo estado estacionario y por lo tanto la aparición de una nueva fase (Horsthemke y Malek Mansour, 1.976). Supondremos que $\zeta(t)$ es ruido coloreado correspondiente al proceso de Orstein-Uhlenbeck unidimensional definido en (1.61) con τ tiempo de correlación y D intensidad de las fluctuaciones.

La ecuación de Fokker-Planck asociada a (4) para la densidad de probabilidad y válida en primer orden en τ , no es mas que (1.65) sin índices y obviamente con $K_{\beta\gamma\alpha} = 0$; y que escribiremos en la forma (Sancho y San Miguel, 1.979a)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q,t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial q} (f(q) + \alpha g(q)) P(q,t) + D \frac{\partial}{\partial q} g(q) \frac{\partial}{\partial q} h(q) P(q,t) = \\ &= -\frac{\partial}{\partial q} (f(q) + \alpha g(q) + D g'(q) h(q)) P(q,t) + D \frac{\partial^2}{\partial q^2} g(q) h(q) P(q,t) \quad (5) \end{aligned}$$

donde

$$h(q) = g(q) - \tau M(q) = g(q) - \tau (f'(q) g'(q) - f'(q) g(q)) \quad (6)$$

En primer lugar observamos que el dominio de definición de esta ecuación de Fokker-Planck cambia respecto a la correspondiente a ruido blanco $h(q) = g(q)$; pues sólo será válida (5) para aquellos q tales que la difusión efectiva $Dg(q)h(q)$ sea positiva.

En la aproximación de ruido blanco tal dominio está definido por $Dg^2(q) > 0$, mientras que en este caso existe una restricción más

$$1 + z g(q) \left(\frac{f(q)}{g(q)} \right)' > 0 \quad (7)$$

que es otra forma de escribir $\frac{h(q)}{g(q)}$.

Por esta razón (5) sólo nos permite, en general, considerar un intervalo reducido de q respecto al análisis del ruido blanco. En efecto, para los puntos en los cuales (7) se anula, el esquema de aproximación pierde su sentido pues el primer orden en z en (6) es del mismo orden que el término de ruido blanco. Los contornos no físicos de (5) aparecen porque la aproximación de z pequeño es no uniforme para todos los valores de q .

Otra pregunta que naturalmente aparece es sobre cual es el dominio de q y de los parámetros del problema (1) para los que la aproximación (5) en primer orden en z sea correcta. Será correcta siempre que los términos correctivos sean pequeños frente al ruido blanco (1.83) y que los términos de orden superior, en nuestro desarrollo, puedan

con seguridad despreciarse. Esto será analizado en cada caso particular.

En orden ε^2 la forma de ecuación de Fokker-Planck desaparece excepto si se cumple la condición (1.33) que en este caso unidimensional se reduce a

$$g(q) \left(\frac{f(q) + \alpha g(q)}{g(q)} \right)' = cte \quad (8)$$

pero esta no es más que la condición necesaria y suficiente para que (1) se convierte en una ecuación lineal con difusión constante cuando se expresa en la nueva variable Q

$$Q = \int g^{-1}(q) dq \quad (9)$$

y en este caso existe ecuación de Fokker-Planck en todos los órdenes de ε .

2.1.a) Modelos exactos

Es interesante considerar esta clase de modelos exactos a fin de ver más claramente el sentido de la aproximación hecha en la obtención de (5): eligiendo

$$f(q) = A Q(q) g(q) \quad (10)$$

la ecuación (8) se satisface automáticamente y (1) se transforma en

$$\dot{Q}(t) = A Q(t) + \alpha + \beta(t) \quad (11)$$

La ecuación de Fokker-Planck será (1.19) para el caso unidimensional

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q}(Aq + \alpha)P(q,t) + \frac{\partial^2}{\partial q^2}D(t)P(q,t) \quad (12)$$

con $D(t)$, calculado a partir de (1.20) y que resulta ser

$$D(t) = \frac{D}{1-Az} \left(1 - \exp\{-\{(z^{-1}-A)t\}\} \right) \quad (13)$$

Como ya señalamos en 1.1.a), para estos modelos la única diferencia que aparece con respecto a la aproximación de ruido blanco es la sustitución de D por el coeficiente dependiente de t , $D(t)$. En el estado estacionario esto conduce a reemplazar D por $\frac{D}{1-A}$. Así pues, el efecto total de un z no nulo es una renormalización del coeficiente de difusión.

La aproximación (5) en este modelo consiste, usando (6), en tomar

$$h(q) = q(q) (1 + zA) \quad (14)$$

que conduce a tomar una $D(t)$,

$$D(t) \simeq D(1 + zA) \quad (15)$$

Esta aproximación con respecto al resultado exacto (13) consta de dos pasos: desprestigiar la exponencial decreciente

en $D(t)$ (que corresponde a despreciar los transitorios implicado por (1.60)) y después desarrollar en primer orden en ζ .

Podemos también analizar en estos modelos como el dominio de definición de la ecuación se restringe por la aproximación: el dominio de definición de la ecuación de Fokker-Planck no se modifica en la ecuación exacta pues $D(t) > 0$ (para $A < 0$). Sin embargo en la ecuación aproximada (15) la difusión se hace negativa para $1 + \zeta A < 0$ y por lo tanto estamos restringidos a $|\zeta A| < 1$. En efecto, y de acuerdo con los comentarios generales antes hechos, para otros valores de A la serie de Taylor usada en (15) no converge y carece de todo sentido.

En estos modelos exactos la condición $|\zeta A| < 1$ es también la que nos permite despreciar los términos superiores a ζ .

Veamos ahora que conclusiones generales pueden sacarse de (5). Bajo apropiadas condiciones de contorno, que luego se discutirán, la solución estacionaria, $\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = 0$, de (5) es

$$P_{st}(q) = \frac{N}{h(q)} \exp \left\{ \int \frac{f(q) + \alpha g(q)}{Dg(q)h(q)} dq \right\} \quad (16)$$

y sus extremos relativos se obtienen haciendo $\frac{dP_{st}(q)}{dq} = 0$, que conduce a la siguiente ecuación

$$f(q) + \alpha g(q) - Dg(q)g'(q) + D\tau g(q)(g''(q)f(q) - g(q)f''(q)) = 0 \quad (17)$$

Los dos primeros términos de (17) dan los extremos estacionarios de la ecuación determinista, que corresponden a hacer $D = 0$.

Los tres primeros términos son los extremos relativos correspondientes al caso de ruido blanco, $\tau = 0$. El último término representa las correcciones introducidas, en los extremos relativos, debidas al valor finito de τ . Este término puede contribuir con pequeñas correcciones en su posición, pero también puede introducir otros nuevos extremos relativos ausentes en el análisis determinista y de ruido blanco. Estos nuevos extremos pueden ser interpretados como nuevos estados macroscópicos que aparecen debidos al valor finito de τ . Debe destacarse que en el caso de ruido aditivo ($g = ct$), el último término de (17) también modifica los resultados deterministas, que no son modificados en el análisis de ruido blanco.

Después de estas consideraciones generales vamos a pasar al estudio de ejemplos concretos.

2.1.b) Ejemplos de modelos exactos.

Vamos a estudiar dos modelos que aparecen en la literatura actual.

2.1.b,i) Ecuación de Verhulst con término
cuadrático fluctuante.

Consideraremos aquí un caso especial de la ecuación fenomenológica (1), dada por

$$\dot{q}(t) = \alpha' q(t)^2 + \alpha q(t) \quad , \quad q \geq 0 \quad (18)$$

Esta ecuación es una de las ecuaciones no lineales más simples y tiene diferentes significados en diferentes contextos (Haken, 1.977): ecuación de Verhulst para el crecimiento de una población, ecuación cinética para el modelo químico de Schlögl y ecuación macroscópica para modelo simple del laser. El análisis determinista da como posibles estados estacionarios $q_1 = 0$; $q_2 = -\frac{\alpha}{\alpha'}$. Existiendo sólo estados estables si $\alpha' < 0$. Entonces si $\alpha < 0$, sólo existe un estado estacionario, q_1 , que es además estable. En el caso opuesto, $\alpha > 0$, hay dos estados estacionarios, q_2 es estable y q_1 inestable.

Si en esta ecuación dejamos fluctuar α' , entonces se satisface la condición (8) y el modelo tiene solución exacta mediante el cambio (9)

$$Q = -\frac{1}{q} \quad (19)$$

Cuya solución es (1.58) en una dimensión.

La solución estacionaria existe para $\alpha > 0$ y para cualquier valor de α' y viene definida para todo $q \geq 0$ por:

$$P_{st}(q) = \frac{1}{(2\pi D'/\alpha)^{1/2} q^2} \exp \left\{ - \frac{(-q^{-1} - (\frac{\alpha'}{\alpha}))^2}{2D'/\alpha} \right\} \quad (20)$$

$$D' = \frac{D}{1 + \alpha \tau} \quad (21)$$

Tal como se mencionó antes, para esta clase de modelos exactos el efecto total de τ no nulo es una renormalización de D ; en este caso D es reemplazado por D' .

La solución estacionaria tiende a cero para $q \rightarrow 0$ y $q \rightarrow \infty$ y tiene un único máximo en

$$q_{tm} = \begin{cases} -\left(\frac{\alpha'}{4D'}\right) \left[-1 + \left(1 + \frac{8D'\alpha}{\alpha'^2}\right)^{1/2} \right] ; \alpha' < 0 \\ \left(\frac{\alpha'}{4D'}\right) \left[1 + \left(1 + \frac{8D'\alpha}{\alpha'^2}\right)^{1/2} \right] ; \alpha' > 0 \end{cases} \quad (22)$$

Para $\alpha' < 0$, q_{tm} está relacionado con el correspondiente al estado estacionario determinista pues $q_{tm} \rightarrow -\alpha/\alpha'$ cuando $D' \rightarrow 0$. Por otro lado, q_{tm} para $\alpha' > 0$ no tiene análogo determinista y representa un estado macroscópico nuevo producido por las fluctuaciones externas.

2.1.b,ii) Un modelo bimodal

Corresponde a la siguiente ecuación diferencial estocástica

$$\dot{q}(t) = -\alpha \tanh(\gamma q(t)) - \frac{\beta}{\cosh(\gamma q(t))} \zeta(t) \quad (23)$$

Hongler (1.979) desarrolla este modelo ampliándolo a dos dimensiones y para tal fin añade otra ecuación diferencial estocástica para el ruido $\zeta(t)$ (ver (1.61))

$$d\zeta(t) = -\zeta^{-1}(\zeta(t)dt - dW(t)) \quad (24)$$

Por pertenecer este modelo (23) a la clase de modelos exacta, cumple (8), y tenemos que por ser $g(q) = \frac{\beta}{\cosh(\gamma q)}$, el cambio de variable es

$$Q = \frac{1}{\gamma\beta} \operatorname{senh}(\gamma q) \quad (25)$$

y además la ecuación (17) de los extremos relativos será

$$\left(-\beta\gamma + \frac{2(z^{-1} + \alpha\gamma)}{Dz^{-1}\gamma\beta} \cosh^2(\gamma q) \right) \operatorname{senh}(\gamma q) = 0 \quad (26)$$

cuyas soluciones son

$$q = 0$$

$$\cosh^2(\gamma q) = \frac{\gamma^2 \beta^2 D}{2(1 + \alpha\gamma z^{-1})} \quad (27)$$

Esta última ecuación, para valores fijos de γ, β, α , sólo tiene solución si D y z adquieren determinados

valores. Representando los extremos relativos en función de D'

$$D' = \frac{D}{1 + \alpha \gamma z^{-1}} \quad (28)$$

de acuerdo con la figura 1 y sus correspondientes $Pst(q)$, (Fig. 2)

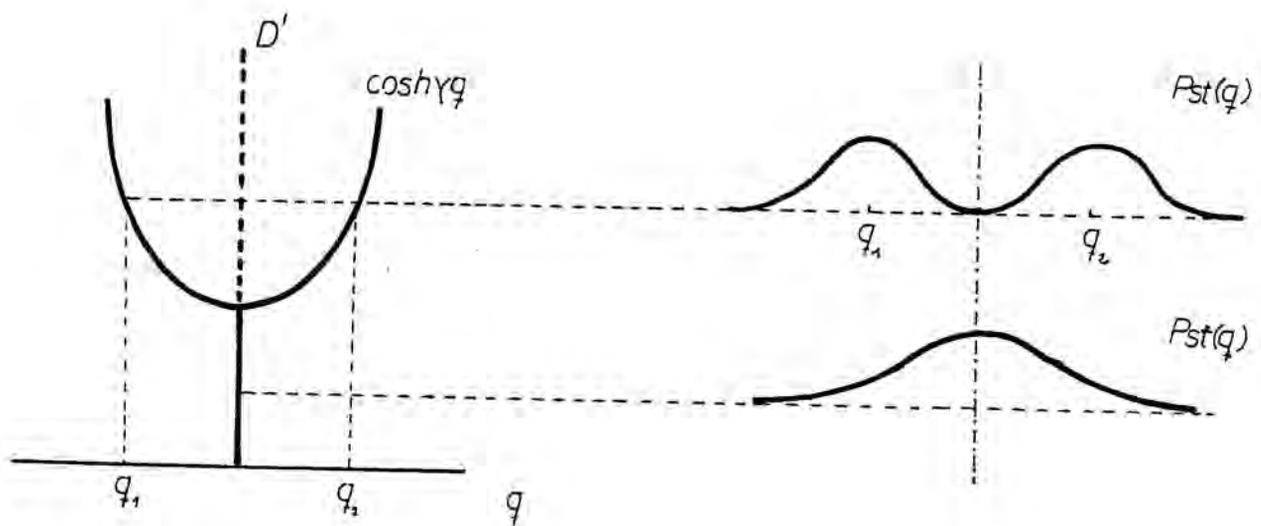


fig. 1

fig. 2

para $\gamma^2 \beta^2 D' = 2$ tenemos el valor crítico. Si

$$D' > \frac{2}{\gamma^2 \beta^2} \quad (29)$$

entonces la solución $q=0$ es un mínimo y tenemos dos

máximos; y para

$$D' < \frac{2}{\gamma^2 \beta^2} \quad (30)$$

sólo hay un máximo para $q = 0$. Tenemos pues una transición de fase de no equilibrio debida a dos parámetros, D que es la intensidad del ruido externo, y a τ , tiempo de correlación del ruido externo, a través de un único parámetro D' . Es decir que esta transición puede conseguirse o bien cambiando $D \rightarrow D'$ dentro de la aproximación ruido blanco, o bien para una D fija, cambiando τ .

Este modelo (23) es una aproximación al modelo introducido por Horsthemke (1.978) para el modelo genético

$$\dot{q}(t) = -q(t) + \left(q(t)^2 - \frac{1}{4} \right) \beta(t), \quad q \in \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right]$$

si tomamos en (23) $\alpha = \frac{1}{2}$, $\beta = \frac{1}{4}$ y $\gamma = 2$, y desarrollamos en $q = 0$.

2.2.- MODELOS APROXIMADOS

En este apartado consideraremos tres modelos:

2.2.a) Ecuación de Verhulst con término lineal fluctuante.

En este caso la ecuación de partida será (18) pero ahora dejaremos fluctuar α . Elegiremos $\alpha' = 1$ y nos res-

tringiremos a valores positivos de α de tal manera que siempre estemos por encima del valor crítico determinista $\alpha = 0$.

La solución exacta no es conocida en este caso, así que estudiaremos con detalle las implicaciones de la ecuación de Fokker-Planck (5) para este modelo.

La cantidad definida en (6) es

$$h(q) = q(1 - \tau q) \quad (31)$$

y de acuerdo con (16) la distribución de probabilidad estacionaria será

$$P_{st}(q) = N q^{\frac{\alpha}{D}-1} \cdot (1 - \tau q)^{(1 - \tau(\alpha + D))/2D} \quad (32)$$

que está definida en el intervalo $(0, \tau^{-1})$ y que puede normalizarse para $\alpha < \tau^{-1}$. En el caso de ruido blanco ($\tau \rightarrow 0$) el resultado de Horsthemke y Malek-Mansour (1.976) se recupera

$$P_{st}(q) = N q^{\frac{\alpha}{D}-1} \cdot e^{-\frac{q}{D}} \quad (33)$$

que está definido para $q \in [0, \infty)$

El comportamiento de $P_{st}(q)$ en los extremos del intervalo de definición es como sigue

$$\begin{aligned} P_{st}(0) &= 0 & \text{para } D < \alpha \\ P_{st}(0) &= \infty & \text{" } D > \alpha \\ P_{st}(\tau^{-1}) &= 0 & \text{" } D < \tau^{-1} - \alpha \\ P_{st}(\tau^{-1}) &= \infty & \text{" } D > \tau^{-1} - \alpha \end{aligned} \quad (34)$$

Con respecto a los extremos relativos de $Pst(q)$, el valor finito de τ no introduce ninguno nuevo, que no estuviera ya en el análisis de ruido blanco. Aparte de los extremos en $q=0$ y $q=\tau^{-1}$ existe un único extremo en $q = (\alpha - D)/(1 - 2\tau D)$, que es un máximo para $D < \alpha, D < \tau^{-1}\alpha$ y un mínimo para $D > \alpha, D > \tau^{-1}\alpha$ y que no está definido para otros valores de los parámetros.

Los resultados anteriores están resumidos en el diagrama de fases de la figura 3, donde la forma de $Pst(q)$ está representada para las diferentes regiones definidas por los valores de los parámetros.

La ecuación de Fokker-Planck (5) representa el primer orden en τ por lo tanto, las implicaciones de este diagrama de fase tendrán mucho mayor significado a medida que nos desplazamos hacia la izquierda. En particular la región E para la que $Pst(q)$ no es normalizable carece de todo significado. Las regiones C y D no existen en el límite de ruido blanco y por lo tanto el análisis de la ecuación de Fokker-Planck (5) demuestra la posibilidad de nuevas transiciones de no equilibrio como $A \leftrightarrow C, D$; $B \leftrightarrow C, D$; y $C \leftrightarrow D$. Por otro lado, el valor crítico de D para la transición $A \leftrightarrow B$ de ruido blanco, no depende de τ y es el mismo que en el caso de ruido blanco, pero el máximo de $Pst(q)$ en B es desplazado del valor $(\alpha - D)$ hacia $(\alpha - D)/(1 - 2\tau D)$.

El diagrama de fase de la figura 3 puede compararse con el de Kitahara y otros (1.979), (ver figura 4), donde la probabilidad estacionaria para este modelo es exacta-



mente evaluada tomando como ruido externo un proceso dicotómico de Markov, correspondiente al intervalo $\varphi \in (0, \alpha + \sqrt{D\tau})$

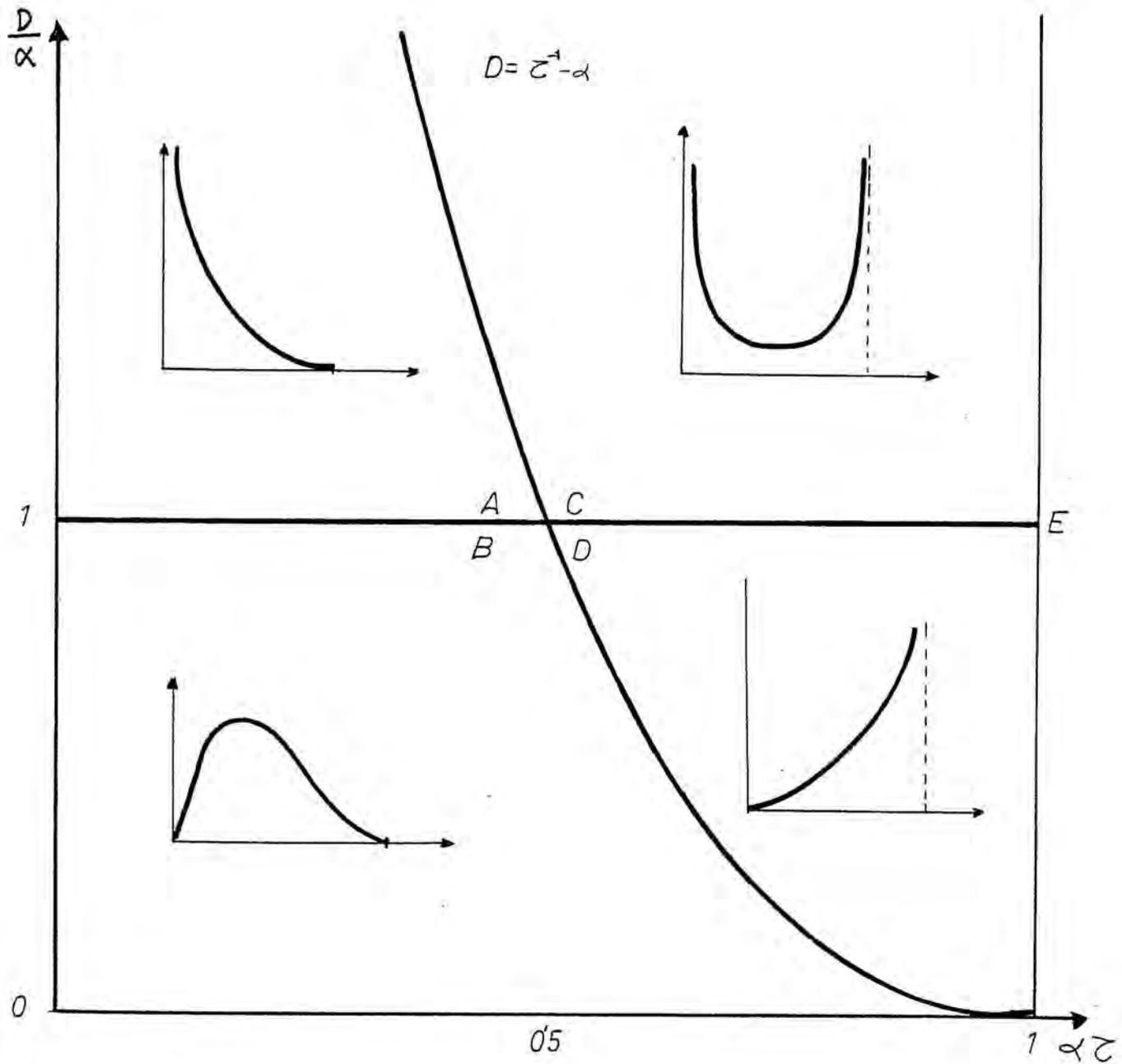


fig 3

Nuestros resultados basados en (5) están en un muy buen acuerdo cualitativo con los de Kitahara y otros (1.979), en la existencia de las cuatro regiones A,B,C,D y en la forma de $Pst(q)$ en estas regiones.

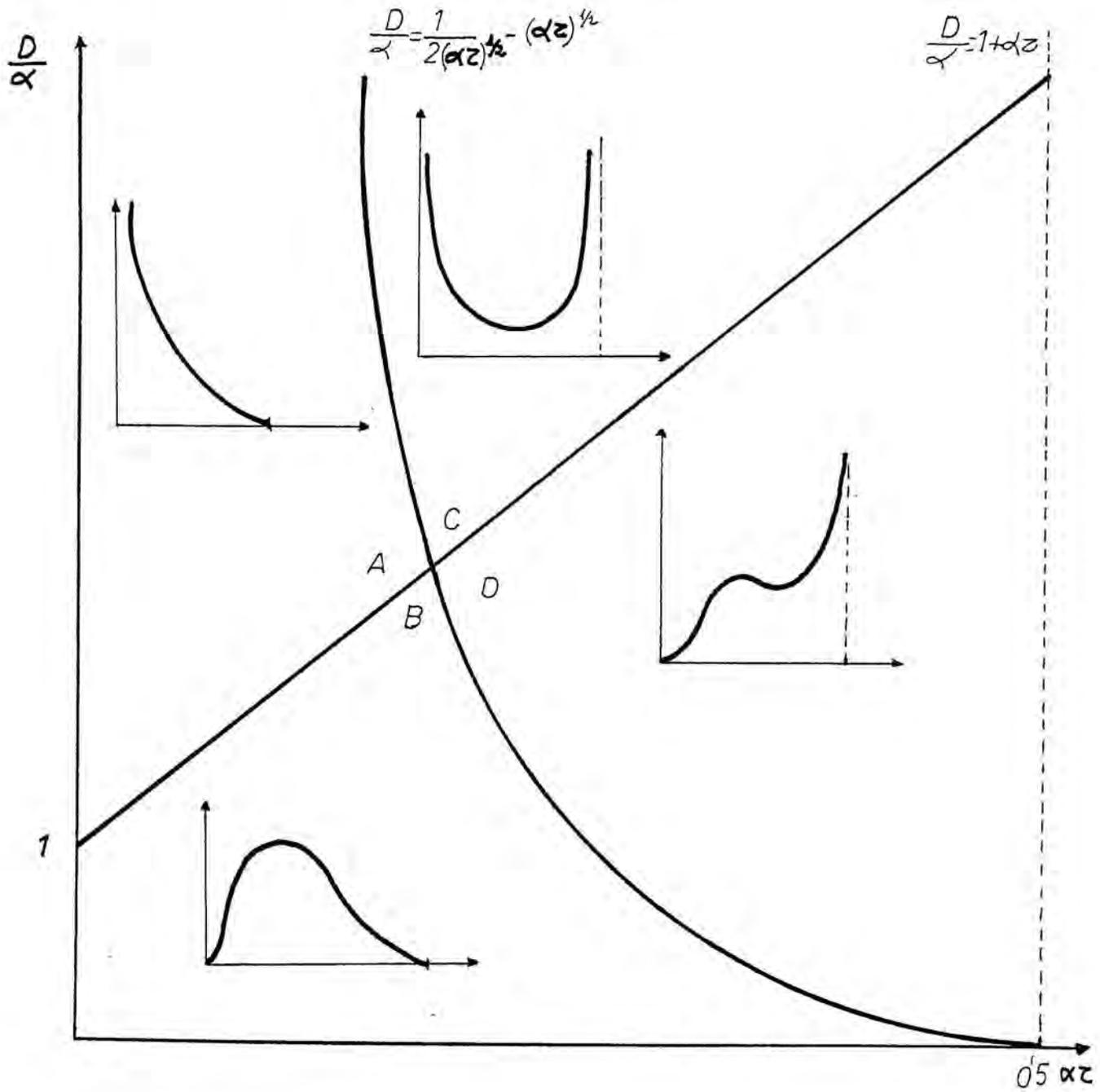


fig 4

Las principales diferencias entre ambos resultados son las siguientes:

- i) Nuestro contorno inferior, $q=0$, no depende de los parámetros, mientras que dichos autores encuentran otras fases posibles con diferente contorno inferior (No representado en fig. 4).
- ii) En nuestra región D no existe extremo relativo de $Pst(q)$.

En los comentarios anteriores no hemos mencionado los problemas relativos a las condiciones de contorno y al dominio de validez de la aproximación en primer orden en τ .

Con respecto a las condiciones de contorno hemos de señalar que estos procesos están completamente definidos por sus coeficientes de arrastre y de difusión en la ecuación de Fokker-Planck (5) ($f(q) + \alpha g(q) + D'g(q)h(q)$ y $g(q)h(q)$ respectivamente). Y los contornos que se derivan de estos coeficientes son aquellos puntos en los que se anula la difusión o se hace infinito el arrastre (Goel y Richter-Dyn, 1.974).

Para la clasificación de estos contornos seguiremos el esquema de Gihman y Skorohod (1.979) que coincide sustancialmente con el esquema presentado por Goel y Richter-Dyn (1.974). Aunque los criterios que dan los primeros autores son deducidos para ecuaciones estocásticas interpretadas en el sentido de Ito, estos criterios son igualmente aplicables en nuestro caso, pues siguiendo el razonamiento de Goel y Richter-Dyn (1.974), el anterior esquema está expresado en función de los coeficientes de la

ecuación de Fokker-Planck correspondiente sin hacer ninguna referencia a cómo se dedujo ésta (Feller, 1.952).

Un contorno se dice natural, en el sentido de dichos autores, si el proceso difusivo nunca lo alcanza incluso en un tiempo infinito. La condición analítica para un contorno natural es que

$$L_1(q_0) = \int_{q_0}^{\beta} n(q) dq = \infty \quad (35)$$

$$n(q) = \exp \left\{ - \int_{\beta}^q \frac{f(q') + \alpha q(q') + D q(q') h(q')}{D q(q') h(q')} dq' \right\} \quad (36)$$

Si $L_1(q_0)$ es finito entonces se ha de calcular la siguiente cantidad

$$L_2(q_0) = \int_{q_0}^{\beta} \frac{dq}{D q(q) h(q) n(q)} \int_{\beta}^q dq' n(q') \quad (37)$$

y si es infinita entonces el contorno se llama atractivo. En este caso el proceso alcanza el contorno si el tiempo se hace infinito. Por lo tanto los contornos naturales y atractivos son inaccesibles, la probabilidad queda atrapada entre dos de ellos, y no se necesitan imponer otras condiciones de contorno.

Si $L_1(q_0)$ y $L_2(q_0)$ son finitos y la cantidad

$$L_3(q_0) = \int_{q_0}^{\beta} \frac{dq}{Dg(q)h(q)\pi(q)} \quad (38)$$

también es finita, entonces el contorno se llama regular, es además accesible y por lo tanto se han de imponer condiciones de contorno, por ejemplo: que el contorno sea absorbente o reflector.

En el ejemplo presente los contornos se obtienen a partir de igualar la difusión a cero

$$h(q)g(q) = q^2(1-zq) = 0 \quad (39)$$

que nos da los puntos $q_0 = 0$ y $q_0 = z^{-1}$. Un cálculo largo nos proporciona los valores de las cantidades L_1, L_2 y L_3 en dichos contornos, y que reunimos en la tabla 1.

$q_0 = 0$	$q_0 = z^{-1}$
$L_1(0) = \infty, \kappa > 0$	$L_1(z^{-1}) = \infty ; D \leq z^{-1} - \kappa$
	$\left. \begin{array}{l} L_1(z^{-1}) < \infty \\ L_2(z^{-1}) < \infty \\ L_3(z^{-1}) < \infty \end{array} \right\} D > z^{-1} - \kappa$

Tabla 1

Encontramos pues que $q_0 = 0$ es siempre un contorno natural, pues α siempre es positivo, y $q_0 = z^{-1}$ es natural únicamente en las regiones A, B. Esto concuerda con el hecho de que dichas regiones son las correspondientes al ruido blanco en el límite $z \rightarrow 0$. En las otras regiones, C y D, el contorno $q_0 = z^{-1}$ es regular y por lo tanto se han de imponer condiciones de contorno. Luego la probabilidad estacionaria (16) es la verdadera solución en las regiones A y B, y solamente la solución formal en C y D.

Este aspecto es en verdad irrelevante para la existencia de las nuevas transiciones estudiadas que aparecen en el análisis de (5) para este modelo.

En cuanto a las condiciones de validez comentamos anteriormente que (5) tiene solamente un completo significado cuando los términos de orden superior en z pueden despreciarse respecto de los de cero y primer orden. Puede demostrarse que esta condición (para este modelo) es independiente del valor q , pero restringe el dominio de los parámetros por medio de la condición $D \ll (z^{-1}\alpha)/4$.

En vista de estos resultados podemos concluir que para las regiones C y D, la ecuación (5) debe considerarse solamente como un modelo matemático de Fokker-Planck cuyas implicaciones hemos analizado con más detalle a fin de establecer comparación con los resultados de Kitahara y otros (1.979).

2.2.b) Un modelo genético

Consideremos la siguiente ecuación fenomenológica

$$\dot{q}(t) = \frac{1}{2} - q(t) + \alpha q(t)(1 - q(t)) \quad (40)$$

en la cual dejaremos α fluctuar. Esta ecuación representa el modelo genético discutido por Horsthemke (1.978) o bien una ecuación de cinética química (Arnold y otros, 1.978). Por simplicidad consideraremos el caso en el cual el valor medio de α es nulo. Esto conduce a poner $\alpha = 0$ en la ecuación general (3).

Nuestro interés consiste en estudiar como el valor finito de τ puede cambiar el valor crítico de D para el cual la transición tiene lugar. La solución estacionaria (16) está definida en el intervalo limitado por los puntos en los cuales la difusión efectiva en (5) es nula,

$$g(q)h(q) = D q(1-q) \left[(1+\tau) q(1-q) - \tau/2 \right] = 0 \quad (41)$$

que tiene como soluciones, aparte de las ya conocidas $q=0$ y $q=1$, correspondientes al caso de ruido blanco,

$$q_{1,2} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \left(1 - \frac{2\tau}{1+\tau} \right)^{1/2} \right] \quad (42)$$

por lo tanto (5) y (16) están definidas en un intervalo reducido (q_1, q_2) con respecto al caso de ruido blanco $(0,1)$. Es fácil ver que para τ pequeños, q_1 y q_2 son contornos naturales satisfaciendo la correspondiente

condición (35), y además

$$P_{st}(q_1) = P_{st}(q_2) = 0 \quad (43)$$

La ecuación para los extremos relativos es en este modelo

$$\frac{1}{2} - (D(1+z) + 1)q + 3D(1+z)q^2 - 2D(1+z)q^3 = 0 \quad (44)$$

cuyas soluciones son

$$q_{m_1} = \frac{1}{2} \quad (45)$$

$$q_{m_2, m_3} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \left(1 - \frac{2}{D(1+z)} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (46)$$

El extremo q_{m_1} no depende de D ni de z y es un máximo para $D < \frac{2}{1+z}$ y un mínimo para $D > \frac{2}{1+z}$. Los extremos q_{m_2} y q_{m_3} sólo existen para $D > \frac{2}{1+z}$ y entonces son máximos. Así pues, $D = \frac{2}{1+z}$ es el valor crítico para el cual una distribución con un máximo pasa a tener dos. Este proceso corresponde cualitativamente al de la figura 1. La separación de los máximos se incrementa con el valor de D . Estos comportamientos obtenidos en primer orden en z están en completo acuerdo con los resultados de Arnold y otros, (1.978) obtenidos para valores grandes de z : disminución del valor crítico D con respecto al ruido blanco y movimiento de los máximos hacia los extremos cuando el valor de D está por encima de un valor crítico. En este ejemplo el prescindir de los tér-

minos del orden siguiente está garantizado por la condición $\tau^{-1} \gg 4D + 1$ para todo q en el intervalo de definición.

Pasaremos ahora a discutir el método de Arnold y otros (1.978) (Sancho y San Miguel, 1.979a) para tratamiento de ruidos coloreados en el extremo opuesto al ruido blanco (τ grande).

Consideramos que la argumentación de estos autores está basada en conceptos de teoría ergódica un tanto oscuros especialmente si tenemos en cuenta que lo que en realidad hacen es algo muy sencillo y tan clásico como la eliminación adiabática (Haken, 1.977) pero a la inversa.

Consideremos la ecuación de partida (40)

$$\dot{q} = \frac{1}{\tau} - q + q(1-q)\zeta(t) \quad (47)$$

donde α se ha sustituido por el ruido coloreado de tiempo de correlación grande. Añadimos ahora la ecuación del ruido, del tipo de Orstein-Uhlenbeck

$$\dot{\zeta}(t) = -\tau^{-1}(\zeta(t) - \sigma \dot{W}(t)) \quad (48)$$

donde $\dot{W}(t)$ es ahora el ruido blanco.

La eliminación adiabática consiste en suponer que hay unas variables más rápidas que otras es decir que alcanzan antes el equilibrio. En el caso clásico (τ pequeño) suele tomarse a $\zeta(t)$ como variable rápida y por

lo tanto haciendo $\dot{\zeta}(t) = 0$ en (48) llegamos a

$$\zeta(t) = \sigma \dot{w}(t) \quad (49)$$

que sustituyendo en (47) conduce a una ecuación estocástica con ruido blanco

$$\dot{q} = \frac{1}{2} - q + q(1-q)\sigma \dot{w}(t) \quad (50)$$

y que es la aproximación de orden cero de nuestro desarrollo general (5). Estos autores suponen que τ es tan grande que ahora $\zeta(t)$ es una variable lenta frente a q que se ha convertido en rápida (pensamos que esto es una enorme simplificación no del todo justificable sin estudiar los parámetros que intervienen en (47) y que dichos autores no hacen).

Con esta suposición, basta eliminar adiabáticamente q de (47) haciendo $\dot{q} = 0$ y despejando $\zeta(t)$ tenemos que

$$\zeta(t) = \frac{q - \frac{1}{2}}{q(1-q)} \quad (51)$$

y así llegamos a que $\zeta(t) = \zeta(q)$.

Por otra parte como (48) es una ecuación cerrada en la $\zeta(t)$ es conocida su ecuación de Fokker-Planck

$$\frac{\partial P(\zeta, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \zeta} (\tau^{-1} \zeta P(\zeta, t)) + \tau^{-2} \sigma^2 \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2} P(\zeta, t) \quad (52)$$

cuya solución estacionaria es la bien conocida gaussiana

$$P_{st}(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\frac{\sigma^2}{z}}} \exp\left\{-\frac{z z^2}{2\sigma^2}\right\} \quad (53)$$

Y puesto que $z(t) = z(q)$ podemos en el caso estacionario considerar la $P_{st}(q)$ a través de (53)

$$P_{st}(q) = P_{st}(z(q)) \left| \frac{dz(q)}{dq} \right| =$$

$$= \frac{\left(\frac{1}{z} - q\right)^2 + \frac{1}{4}}{\sqrt{2\pi\frac{\sigma^2}{z}} \cdot q^2(1-q)^2} \cdot \exp\left\{-\left(\frac{q - \frac{1}{z}}{q(1-q)}\right)^2 / 2\frac{\sigma^2}{z}\right\} \quad (53)$$

que es el resultado presentado por dichos autores.

Obviamente (53) carece de sentido para $z \rightarrow 0$ y por lo tanto no da información sobre la aproximación de ruido blanco.

Acabemos por destacar que todavía no se ha encontrado un tratamiento matemático sistemático de los procesos con ruido coloreado de tiempo de correlación grande, a excepción de los casos exactos tratados en los capítulos 1 y 2. Un método adaptado a $z = \frac{1}{\lambda}$ grande ($\lambda =$ coef. de fricción) es el introducido por Stratonovich (1.963) y seguido por otros autores (Risken y Vollmer, 1.979), que se ha aplicado al movimiento browniano únicamente. Consiste en que mediante un cambio de variables, se pasa de las variables posición y velocidad a las variables energía mecánica y posición. Su extensión a otros problemas toda-

vía no se ha hecho. Pensamos que esta investigación abre alguna perspectiva en esa dirección.

Y como punto final a estos apartados 2.2.a) y b), hemos de destacar que aunque nuestro análisis está hecho para pequeños tiempos de correlación, hemos encontrado en los dos ejemplos no exactos un acuerdo cualitativo muy bueno con respecto al modelo exacto de Kitahara y otros (1.979) para la ecuación de Verhulst y con el análisis del modelo genético en el límite de tiempo de correlación grande (Arnold y otros, 1.978).

2.2.c) Oscilador Paramétrico

En una serie de trabajos muy recientes (ver referencias en Kabashima y Kawakubo, 1.979) se ha conseguido reproducir, mediante un dispositivo experimental, transiciones de fase de no equilibrio en un oscilador paramétrico, al que a continuación vamos a aplicar nuestro tratamiento, con el interés especial de que en este caso hay resultados experimentales.

Sin entrar en los detalles experimentales, la ecuación diferencial estocástica que dichos autores obtienen para dicho proceso viene dada por

$$\dot{q}(t) = (\alpha - \gamma)q(t) - \beta q(t)^3 + q(t)\zeta(t) \quad (54)$$

donde $q(t)$ es la amplitud de la corriente oscilante a la salida del dispositivo experimental, α es un parámetro

proporcional a la corriente de alimentación, γ y β son parámetros fijos característicos de los circuitos empleados y $\zeta(t)$ es el ruido estocástico externo de intensidad D y que estos autores aproximan a ruido blanco porque tiene un espectro llano entre 10^{-2} Hz. y 10^5 Hz., lo que representa un tiempo de correlación $\tau \sim 10^{-6}$ seg., que en verdad es pequeño.

El análisis de (54) con la hipótesis de ruido blanco para $\zeta(t)$ conduce a la siguiente ecuación de Fokker-Planck para la densidad de probabilidad del proceso $q(t)$

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q} \left((\alpha - \gamma + D)q - \beta q^3 \right) P(q,t) + D \frac{\partial^2}{\partial q^2} q^2 P(q,t) \quad (55)$$

Dado que experimentalmente es más fácil observar el máximo de $P(q,t)$ en su estado estacionario (Kawakubo y otros, 1.978), aplicamos la ecuación de los extremos relativos (17) a (54) con $\tau = 0$ y obtenemos las soluciones

$$q_{w_1} = 0 \quad (56,a)$$

$$q_{w_{2,3}} = \pm \sqrt{\frac{\alpha - (\gamma + D)}{\beta}} \quad (56,b)$$

De estos resultados sacamos las siguientes consecuencias.

Se observa que para los valores críticos de α y D , tales que

$$\alpha = \gamma + D \quad (57)$$

existe una transición de fase, pues para valores $\alpha < (\gamma + D)$ el máximo está en $q_{\text{max}} = 0$ y no se observa salida de señal, y para $\alpha > (\gamma + D)$ el máximo es (56.b), manifestando una dependencia $\sim \alpha^{\frac{1}{2}}$ característica de muchas transiciones de fase. La condición (57) es distinta en el análisis determinista ($D=0$)

$$\alpha = \gamma$$

Así observamos que el ruido externo ocasiona nuevos efectos. Sorprendentemente también observamos que D contribuye al amortiguamiento γ . Todas estas observaciones se han comprobado experimentalmente en este trabajo de Kawakubo y otros (1.978) encontrándose que la representación de los puntos experimentales se ajusta bastante bien a (56) con alguna pequeña variación que luego intentaremos explicar; en cambio la condición (57) está totalmente confirmada experimentalmente.

Vamos ahora a analizar la ecuación (54) sin hacer la hipótesis de ruido blanco, a fin de investigar la influencia de dicho ruido y si la aproximación ruido blanco, hecha por los autores antes citados, es realista.

A partir de (6) y (54) podemos calcular la primera corrección, encontrando que

$$h(q) = q - 2\tau\beta q^3 \tag{58}$$

y así la aproximación de Fokker-Planck lleva a que la ecuación (5) es en este caso

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q} \left((\alpha - \gamma + D)q - \beta(1 + 2zD)q^3 \right) P(q,t) + D \frac{\partial^2}{\partial q^2} q^2 (1 - 2z\beta q^2) P(q,t) \quad (59)$$

Como antes, la ecuación de los extremos relativos del estado estacionario (17) aplicada a (54) es

$$(\alpha - (\gamma + D))q - \beta(1 - 6Dz)q^3 = 0 \quad (60)$$

que tiene como soluciones

$$q_1 = 0 \quad (61,a)$$

$$q_{2,3} = \pm \sqrt{\frac{\alpha - (\gamma + D)}{\beta(1 - 6Dz)}} \quad (61,b)$$

y así observamos que en primer orden en z se mantiene la condición crítica (57) pero que los máximos (para $\alpha > (\gamma + D)$) (61,b) son mayores que (56,b). Comparando valores absolutos de los máximos, obtenemos una relación entre ellos,

$$q_2 = (1 - 6Dz)^{-\frac{1}{2}} q_{2w_2} \quad (62)$$

Esta variación es pequeña y por lo tanto puede explicar las discrepancias observadas en (56,b). De todas formas confirmamos que la aproximación de ruido blanco es suficiente para explicar sus resultados. El efecto del ruido coloreado podemos observarlo desarrollando (61,b) y obteniendo la corrección de primer orden a q_2^2 ,

$$q_2^2 = \bar{q}_{2w_2}^2 (1 + 6zD) \quad (63)$$

que correspondería a un desplazamiento relativo para el cuadrado de la amplitud de la corriente oscilante de salida del orden de (San Miguel y Sancho, 1.980).

$$\frac{q^2 - q_{\text{ru}}^2}{q_{\text{ru}}^2} = 6\tau D \quad (64)$$

que experimentalmente se traduciría en una mayor intensidad de salida al aumentar el tiempo de correlación del ruido externo (Por ejemplo variando la frecuencia máxima de 10^5 Hz. a valores más pequeños). Este efecto es de sentido distinto al ocasionado por D. Dicho efecto no ha sido observado experimentalmente, o no ha sido aún publicado, pues dichos autores mantenían constantes las características del ruido externo en todas las experiencias.

Por lo tanto en este trabajo hacemos una predicción teórica no confirmada aún experimentalmente, que esperamos lo sea en un futuro (Sancho y San Miguel, 1.980).

A modo de resumen final:

Hemos visto pues como nuestra aproximación (5) al tratamiento del ruido coloreado en transiciones de fase de no equilibrio ha dado explicación a los hechos más relevantes (Apartados 2.2,a) y b)) ya conocidos debidos al ruido no blanco y además hacemos una predicción en este último apartado sobre un resultado aún no observado.

Por lo tanto, existen grandes esperanzas de que la mayoría de los resultados relevantes introducidos por el ruido no blanco puedan estar contenidos, en general, en la ecuación aproximada de Fokker-Planck que presentamos aquí.

3.- MOVIMIENTO BROWNIANO

En este capítulo estudiaremos un problema físico en el que de una manera natural aparecen las fuerzas estocásticas coloreadas.

Una cuestión propuesta hace ya mucho tiempo por Uhlenbeck y Orstein (1.930) es la de encontrar la ecuación exacta satisfecha por la distribución de probabilidad en espacio de posición de una partícula browniana que puede estar, en general, sometida a la influencia de un potencial o fuerza externa.

Una respuesta aproximada a esta pregunta fue dada por la ecuación de Smoluchowski (Chandasekhar, 1.943) válida para tiempos grandes y elevado coeficiente de fricción. El papel de estos dos límites no está aún completamente dilucidado. La respuesta exacta para el movimiento de una partícula libre browniana ha sido recientemente discutida por Mazo (1.978) y puede encontrarse una amplia historia de este problema en el artículo de Wilemski (1.976).

A parte de un interés intrínseco en casos específicos (Hess y Klein, (1.978); Schneider, Stoll y Morf (1.978); Risken y Wollmer (1.978)), este problema muestra un ejemplo físico, no demasiado complicado, que permite discutir importantes problemas como la eliminación adiabática de variables (Haken, 1.977) y las ecuaciones diferenciales estocásticas no markovianas. Consideramos pues importante su análisis.

En verdad, la eliminación de la variable momento es el ejemplo más simple que podemos pensar como eliminación adiabática y demostraremos que ello conduce a una ecuación de Langevin con ruido no blanco (el ruido de partida lo era) para la cual puede obtenerse una ecuación de Fokker-Planck. Todo ello también está relacionado con los términos no markovianos "irrelevantes" que aparecen en el Grupo de Renormalización Dinámico que se aplica en dinámica crítica (De Dominicis y Peliti, 1.978).

La ecuación de Fokker-Planck en el espacio físico completo es el punto general de partida de los formalismos que han sido propuestos para obtener correcciones sistemáticas a la ecuación de Smoluchowski (Brinkman (1.956); Stratonovich (1.963); Wilemski (1.976); Titulaer (1.978); Skinner y Wolynes (1.979); Chaturvedi y Shibata (1.979)).

Brinkman (1.956) derivó una ecuación conteniendo una derivada de segundo orden con respecto al tiempo, lo que ha sido discutido por Hemmer (1.961) demostrando que, en el caso de una partícula libre browniana, no conduce para pequeños tiempos a un resultado mejor que el obtenido a través de la ecuación de Smoluchowski.

Wilemski (1.976) obtuvo una primera corrección a la ecuación de Smoluchowski por medio de un desarrollo en potencias del inverso del coeficiente de fricción del momento. La ecuación corregida es una ecuación de Fokker-Planck en el espacio de posiciones en la cual es despreciado el régimen transitorio. Tal ecuación había sido obtenida mu-

cho antes por Stratonovich (1.963) sin una explícita referencia al problema del movimiento browniano. La paternidad de este resultado parece haber sido olvidada en la literatura reciente de este tópicó.

Esta ecuación de Smoluchowski corregida, ha sido recientemente reobtenida por Titulaer (1.978), Skinner y Wolynes (1.979), y Chaturvedi y Shibata (1.979). Para estos autores la contracción de la descripción del movimiento realizada implica alguna clase de proyección en el espacio de posiciones. El trabajo de Titulaer (1.978) está basado en el método de Chapman-Enskog, mientras que el trabajo de Chaturvedi y Shibata se fundamenta en un formalismo general de proyección. Estos desarrollos conducen a evaluar las correcciones a la ecuación de Smoluchowski para cualquier orden deseado en potencias inversas del coeficiente de fricción. Sin embargo, pensamos que los procedimientos matemáticos usados por los autores anteriormente citados oscurecen el proceso físico actual en espacio de posición y hacen, en general, difícil el estudio de problemas simples como el del oscilador armónico (Titulaer, 1.978).

El procedimiento que presentamos aquí no está basado en la ecuación de Fokker-Planck en espacio físico sino en la ecuación de Langevin en espacio de posición obtenida proyectando en este espacio la ecuación original de Langevin en espacio físico. De esta forma comenzamos desde el mismo inicio con un problema únicamente en espacio de posición.

La forma más primitiva de hacer esto es eliminando

adiabáticamente el momento mediante la igualación a cero de su derivada temporal (Haken, 1.977). Esto lleva justamente a la ecuación de Smoluchowski. Si hacemos esta eliminación exactamente (solamente permanece una condición inicial para el momento) la ecuación de Langevin resultante en espacio de posición define un proceso no markoviano. La no markovicidad está causada por la reducción del número de variables y está reflejada en la aparición de núcleos de memoria y ruido estocástico no blanco. Mientras la ecuación de Langevin permanezca lineal, es posible asociarla una ecuación de Fokker-Planck válida para cualquier tiempo.

Siguiendo este método resolveremos el problema del potencial armónico en el apartado 3.1, derivando una ecuación para la densidad de probabilidad exacta de un tiempo, en el espacio de posición, que es válida para cualquier valor de la constante de fricción. También incluiremos en este apartado el estudio de condiciones iniciales maxwellianas para el momento y el estudio de la partícula libre. Todo ello en una dimensión.

En el apartado 3.2, reproduciremos los resultados anteriores para problemas no lineales a base de la ecuación de Fokker-Planck aproximada deducida en el Capítulo 1. Esta imagen de un proceso no markoviano en espacio de posición, seguida en esta deducción, aparte de ser original, da un sentido físico más profundo al significado de tales ecuaciones del movimiento. Por otra parte, la ruptura de la existencia de la ecuación de Fokker-Planck para un

determinado orden de aproximación está muy claramente relacionada con el comportamiento de ruido no blanco de la fuerza estocástica.

También incluiremos la obtención de los términos transitorios que en este caso encierran especial dificultad debida a los núcleos de memoria que aparecen, así como el tratamiento para el caso de tres dimensiones, que es extensible a un número cualquiera.

En el apartado 3.3, estudiaremos el movimiento browniano en espacio fásico (dos dimensiones) pero con fuerza estocástica de ruido no blanco, que conducirá a la aparición de derivadas cruzadas $\frac{\partial^2}{\partial p \partial q}$ en la ecuación de Fokker-Planck ya obtenidas por Adelman (1.976) por el procedimiento de sustituir, comparar y añadir el término que faltaba. Además demostraremos que la aproximación de Fokker-Planck es válida hasta el orden τ^3 inclusive, lo que representa un resultado ciertamente relevante.

Finalmente en el apartado 3.4, acabaremos este capítulo con unos comentarios.

3.1.-RESULTADOS EXACTOS. OSCILADOR ARMONICO

En este apartado derivaremos la ecuación de Fokker-Planck, válida para cualquier tiempo y para todo valor de la constante de fricción, para la densidad de probabilidad en espacio de posición de una partícula browniana sometida a un potencial armónico. Hasta hace poco tiempo se había considerado (Titulaer, 1.978) el hecho de que es imposible derivar una tal ecuación válida para el régimen transitorio en el cual las condiciones iniciales todavía no hayan decaído.

La derivación que presentamos aquí demuestra la inexactitud de tal afirmación para este caso especial y también, como veremos, para el caso general con potencial no armónico (San Miguel y Sancho, 1.979b). Por medio de esta ecuación exacta serán considerados separadamente los casos sobreamortiguado, crítico e infraamortiguado y serán discutidas algunas diferencias entre el límite de tiempos grandes y el límite de elevada fricción.

Las implicaciones relativas a tomar condiciones iniciales maxwelianas también serán discutidas, así como el caso de partícula browniana libre.

3.1.a) Ecuación de Fokker-Planck

Las ecuaciones estocásticas del movimiento para la posición q y el momento p de una partícula browniana sometida a un potencial armónico $\phi(q) = \frac{1}{2}\omega^2 q^2$ son:

$$\dot{p}(t) = -\lambda p(t) - \omega^2 q(t) + \zeta(t) \quad (1)$$

$$\dot{q}(t) = p(t) \quad (2)$$

donde hemos tomado la masa como unidad y $\zeta(t)$ es la fuerza estocástica que tomaremos gaussiana, con media nula y función de correlación correspondiente al ruido blanco

$$\langle \zeta(t) \zeta(t') \rangle = 2D \delta(t-t') \quad (3)$$

De acuerdo con la relación de fluctuación disipación

$$D = \lambda k_B T \quad (4)$$

La contracción de la descripción desde el espacio fásico al espacio de posición es llevada a cabo mediante la solución formal de (1)

$$p(t) = -\omega^2 \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} q(t') dt' + \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} \zeta(t') dt' + p_0 e^{-\lambda t} \quad (5)$$

que sustituimos en (2)

$$\dot{q}(t) = -\omega^2 \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} q(t') dt' + \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} \zeta(t') dt' + p_0 e^{-\lambda t} \quad (6)$$

donde p_0 es el valor inicial del momento $p(0) = p_0$. Esta ecuación (6) puede reescribirse en la forma

$$\dot{q}(t) = - \int_0^t \beta(t-t') q(t') dt' + F(t) + \bar{\zeta}(t) \quad (7)$$

donde hemos introducido la siguiente notación

$$\beta(t-t') = \omega^2 e^{-\lambda(t-t')} \quad t > t' \quad (8)$$

$$\bar{\beta}(t) = \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} \beta(t') dt' \quad (9)$$

$$F(t) = \beta_0 e^{-\lambda t} = \frac{\beta_0}{\omega^2} \beta(t) \quad (10)$$

Debido a la proyección hecha en el espacio de posición, el carácter markoviano de las ecuaciones (1) y (2) ha desaparecido en la ecuación (7). Esto está reflejado en la aparición del núcleo de memoria $\beta(t-t')$ y también en la nueva fuerza estocástica $\bar{\beta}(t)$ que ya no es de ruido blanco.

La nueva fuerza estocástica $\bar{\beta}(t)$ es gaussiana, pues obedece una ecuación diferencial lineal con una fuerza estocástica $\beta(t)$ gaussiana,

$$\dot{\bar{\beta}}(t) = -\lambda \bar{\beta}(t) + \beta(t) \quad (11)$$

de media nula, y su función de correlación es ahora

$$\sigma(t, t') = \langle \bar{\beta}(t) \bar{\beta}(t') \rangle = k_B T \left\{ e^{-\lambda(t-t')} - e^{-\lambda(t+t')} \right\} = k_B T \left\{ \frac{\beta(t-t')}{\omega^2} - \frac{\beta(t)\beta(t')}{\omega^4} \right\} \quad (12)$$

para $t > t'$

Es interesante hacer notar que no existe entre

$\sigma(t, t')$ y $\beta(t-t')$ relación de fluctuación disipación. Esta relación solamente es recuperada en el límite de $t \rightarrow \infty$ y $t' \rightarrow \infty$ con $t-t'$ finito.

El primer paso en dirección de la obtención de la ecuación de Fokker-Planck para la densidad de probabilidad en el espacio de posición consiste en transformar (7) en otra ecuación de Langevin sin núcleo de memoria en ella. Esta transformación (Adelman (1.976), Fox (1.977b), Hänggi (1.978b)) sigue el procedimiento usado para las ecuaciones de Langevin del tipo de ecuación (7) pero para las cuales fue considerada la relación de fluctuación disipación (Adelman (1.976), Fox (1.977b)).

Transformando por Laplace (7) llegamos a la ecuación

$$\hat{q}(z) = \hat{\chi}(z) \left[q(0) + \hat{F}(z) + \hat{\bar{z}}(z) \right] \quad (13)$$

luego antitransformando

$$q(t) = \chi(t) q(0) + \int_0^t \chi(t-s) F(s) ds + \int_0^t \chi(t-s) \bar{z}(s) ds \quad (14)$$

donde

$$\hat{\chi}(z) = \frac{1}{z + \hat{\beta}(z)} \quad (15)$$

siendo $\hat{\beta}(z)$ la transformada de Laplace de $\beta(t)$. La condición inicial $q(0)$ puede quitarse tomando la derivada temporal de la ecuación (14) y, entre la nueva ecuación y

(14) eliminar $q(0)$. Estos cálculos son standard (Fox, 1.977b) y nos llevan a la ecuación de Langevin deseada

$$\dot{q}(t) = -\bar{\beta}(t)q(t) + \chi(t) \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\chi(t-s)}{\chi(t)} F(s) ds + \chi(t) \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\chi(t-s)}{\chi(t)} \bar{z}(s) ds \quad (17)$$

donde

$$\bar{\beta}(t) = - \frac{\dot{\chi}(t)}{\chi(t)} = - \frac{d}{dt} \ln \chi(t) \quad (18)$$

La ecuación (17) es una ecuación de Langevin lineal con coeficientes dependientes del tiempo y estudiada en 1.1.a). Particularizando (1.19) y (1.20) a una dimensión, la correspondiente ecuación de Fokker-Planck para (17) es

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial q} \bar{\beta}(t) P(q,t) - \frac{\partial}{\partial q} \chi(t) \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\chi(t-s)}{\chi(t)} F(s) ds P(q,t) + \\ & + \frac{\partial^2}{\partial q^2} D(t) P(q,t) \end{aligned} \quad (19)$$

donde $D(t)$ de acuerdo con (II.E.5) será

$$D(t) = \int_0^t dz \gamma(t,z) e^{-\int_z^t \bar{\beta}(z') dz'} = \int_0^t dz \gamma(t,z) \frac{\chi(t)}{\chi(z)} \quad (20)$$

y $\gamma(t,z)$ corresponderá a la nueva fuerza estocástica que es el último término de (17)

$$\gamma(t, z) = \left\langle \chi(t) \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\chi(t-s)}{\chi(t)} \bar{\gamma}(s) ds \cdot \chi(z) \frac{d}{dz} \int_0^z \frac{\chi(z-s')}{\chi(z)} \bar{\gamma}(s') ds' \right\rangle \quad (21)$$

Vamos ahora a dar una expresión más explícita para la difusión $D(t)$. De las ecuaciones (12), (20) y (21) tenemos que

$$\begin{aligned} D(t) &= \int_0^t dz \left\{ \chi(t) \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\chi(t-s)}{\chi(t)} ds \cdot \chi(z) \frac{d}{dz} \int_0^z \frac{\chi(z-s')}{\chi(z)} ds' \sigma(s, s') \right\} \frac{\chi(t)}{\chi(z)} = \\ &= \chi^2(t) \int_0^t dz \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\chi(t-s)}{\chi(t)} ds \cdot \frac{d}{dz} \int_0^z \frac{\chi(z-s')}{\chi(z)} ds' \sigma(s, s') = \\ &= \chi^2(t) \left(\frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\chi(t-s)}{\chi(t)} ds \right) \int_0^t dz \frac{d}{dz} \int_0^z \frac{\chi(z-s')}{\chi(z)} ds' \sigma(s, s') = \\ &= \chi^2(t) \left(\frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\chi(t-s)}{\chi(t)} ds \right) \int_0^t \frac{\chi(t-s')}{\chi(t)} \sigma(s, s') ds' = \\ &= \frac{1}{2} \chi^2(t) \frac{d}{dt} \chi^{-2}(t) \left(\int_0^t ds \int_0^t ds' \chi(t-s) \chi(t-s') \sigma(s, s') \right) \quad (22, a) \end{aligned}$$

que escribimos como

$$D(t) = \frac{1}{2} \chi^2(t) \frac{d}{dt} \chi^{-2}(t) \left[A_1(t) + A_2(t) \right] \quad (22, b)$$

donde los dos sumandos provienen de las dos partes de $\sigma(s, s')$ al sustituir (12) en (22,a), siendo $A_1(t)$ y $A_2(t)$

$$A_1(t) = \int_0^t ds \int_0^t ds' \chi(t-s) \chi(t-s') \frac{k_B T}{\omega^2} \beta(s-s') \quad (23)$$

$$A_2(t) = - \int_0^t ds \int_0^t ds' \chi(t-s) \chi(t-s') \frac{k_B T}{\omega^4} \beta(s) \cdot \beta(s') \quad (24)$$

$A_1(t)$ es fácilmente evaluable haciendo los cambios

$$t-s = z \quad ; \quad t-s' = \sigma \quad (25)$$

$$A_1(t) = \frac{k_B T}{\omega^2} \int_0^t dz \int_0^t d\sigma \chi(z) \chi(\sigma) \beta(\sigma-z) \quad (26)$$

, si derivamos respecto de t obtenemos

$$\dot{A}_1(t) = \frac{2k_B T}{\omega^2} \chi(t) \int_0^t d\sigma \chi(\sigma) \beta(t-\sigma) \quad (27)$$

y a partir de aquí es fácil comprobar mediante transformación de Laplace y de (15) que

$$\dot{A}_1(t) = - \frac{2k_B T}{\omega^2} \chi(t) \dot{\chi}(t) \quad (28)$$

de integración inmediata,

$$A_1(t) = \frac{k_B T}{\omega^2} (1 - \chi^2(t)) \quad (29)$$

donde se ha tenido en cuenta que $\chi(0) = 1$.

En cuanto a $A_2(t)$ también podemos hallarla si la expresamos en la forma

$$A_2(t) = -\frac{k_B T}{\omega^4} \int_0^t \chi(t-s) \beta(s) ds \cdot \int_0^t \chi(t-s') \beta(s') ds' \quad (30)$$

y utilizando, igual que en (28), que

$$\int_0^t \chi(z) \beta(t-z) dz = \int_0^t \chi(t-z) \beta(z) dz = -\dot{\chi}(t) \quad (31)$$

llegamos a que

$$A_2(t) = -\frac{k_B T}{\omega^4} (\dot{\chi}(t))^2 \quad (32)$$

Sustituyendo (29) y (32) en (22) obtenemos que $D(t)$ es

$$\begin{aligned} D(t) &= \frac{\chi^2(t)}{2} \frac{d}{dt} \left\{ \chi^2(t) \frac{k_B T}{\omega^2} (1 - \chi^2(t)) - \frac{k_B T}{\omega^4} \left(\frac{\dot{\chi}(t)}{\chi(t)} \right)^2 \right\} = \\ &= \frac{\chi^2(t)}{2} \frac{d}{dt} \left\{ \frac{k_B T}{\omega^2} (\chi^2(t) - 1) - \frac{k_B T}{\omega^4} (\bar{\beta}(t))^2 \right\} = \\ &= \frac{k_B T}{\omega^2} \bar{\beta}(t) - \frac{k_B T}{2\omega^4} \chi^2(t) \frac{d}{dt} \bar{\beta}(t)^2 \end{aligned} \quad (33)$$

donde se ha usado la igualdad (18).

Siguiendo este camino puede darse una mejor expresión explícita para el segundo término en (17). Sustituyendo el valor $F(s)$ de (10) y usando (18) y (31), este término se reduce a

$$\chi(t) \frac{P_0}{\omega^2} \frac{d}{dt} \bar{\beta}(t) \quad (34)$$

Sustituyendo (33) y (34) en (19) la ecuación de Fokker-Planck buscada es (San Miguel y Sancho, 1.979b)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial q} \bar{\beta}(t) q P(q,t) - \frac{P_0}{\omega^2} \chi(t) \dot{\bar{\beta}}(t) \frac{\partial}{\partial q} P(q,t) + \\ & + \frac{k_B T}{\omega^2} \bar{\beta}(t) \frac{\partial^2}{\partial q^2} P(q,t) - \frac{k_B T}{2\omega^4} \chi^2(t) \left(\frac{d}{dt} \bar{\beta}(t) \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial q^2} P(q,t) \end{aligned} \quad (35)$$

que es la ecuación deseada, válida para cualquier tiempo y cualquier valor de los parámetros, y dada en función de $\chi(t)$ que tiene diferentes expresiones dependiendo del relativo valor que pueda adoptar el coeficiente de fricción γ respecto del potencial, siendo medido el último por su frecuencia ω . Aunque parezca sorprendente, por tratarse de un modelo tan clásico y conocido como el del oscilador armónico, esta ecuación no ha sido deducida hasta ahora (San Miguel y Sancho, 1.979b) e independientemente por Risken y otros (1.979) haciendo uso de un formalismo de Mecánica Cuántica. La razón de ello es debida a que los desarrollos anteriores como el de Titulaer (1.978) impli-

can que se pudiera sumar una serie infinita en la que los transitorios no se habian tenido en cuenta. El mérito de nuestra deducción radica en tratar desde el principio en espacio q con un proceso no markoviano y en el empleo de técnicas más potentes para tratar las fuerzas estocásticas coloreadas.

En lo que sigue serán analizados los tres casos posibles. Como en cada caso la ecuación (35) es lineal, aunque con coeficientes dependientes del tiempo, puede darse siempre su solución exacta en función de estos coeficientes.

3.1.b) Oscilador sobreamortiguado.

Estudiaremos ahora la forma particular de (35) para el caso que los parámetros γ y ω cumplan la desigualdad

$$\frac{\gamma}{2} > \omega \quad (36)$$

Esta es la situación usualmente considerada en la literatura (Titulaer, 1.978) porque es para la cual el límite de fricción grande se puede hacer. Para el rango de valores (36), la función $\chi(t)$ definida en (15) se convierte en

$$\chi(t) = e^{-\frac{\gamma t}{2}} \left\{ \omega \hat{a} t + \frac{\gamma}{2a} \text{sen} \hat{a} t \right\} \quad (37)$$

con

$$a^2 = \left(\frac{\gamma}{2} \right)^2 - \omega^2 \quad (38)$$

y por lo tanto de (18)

$$\bar{\beta}(t) = \frac{\omega^2 \operatorname{senhat}}{a \operatorname{coshat} + \frac{\lambda}{2} \operatorname{senhat}} \quad (39)$$

$$\frac{d\bar{\beta}(t)}{dt} = \left(\frac{\omega}{\chi(t)} \right)^2 e^{-\lambda t} = \frac{\omega^2}{\left(\operatorname{coshat} + \frac{\lambda}{2a} \operatorname{senhat} \right)^2} \quad (40)$$

Las ecuaciones (37) - (40) dan a la ecuación de Fokker-Planck (35) su forma exacta y explícita. Los resultados anteriormente ya conocidos en la literatura pueden obtenerse tomando los límites apropiados.

Si consideramos que

$$e^{at} \gg e^{-at} \quad (41)$$

las ecuaciones (37), (39) y (40) se convierten en

$$\chi(t) = \left(1 + \frac{\lambda}{2a} \right) e^{-\left(\frac{\lambda}{2} - a\right)t} \quad (42)$$

$$\bar{\beta}(t) = \frac{\lambda}{2} - a \quad (43)$$

$$\frac{d\bar{\beta}(t)}{dt} = \frac{\omega^2}{\left(1 + \frac{\lambda}{2a} \right)^2} e^{-2at} \quad (44)$$

y entonces la ecuación de Fokker-Planck (35) será

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = & \left(\frac{\lambda}{2} - a\right) \frac{\partial}{\partial q} q P(q,t) - \frac{2P_0}{1 + \frac{\lambda}{2a}} e^{-\left(\frac{\lambda}{2} + a\right)t} \frac{\partial}{\partial q} P(q,t) + \\ & + \frac{k_B T}{\omega^2} \left(\frac{\lambda}{2} - a\right) \left(1 - e^{-\lambda t}\right) \frac{\partial^2}{\partial q^2} P(q,t) \end{aligned} \quad (45)$$

Hemos de destacar que esta ecuación, que aún contiene el valor inicial P_0 está solamente restringida por la condición (41), que es satisfecha para ambos límites, tiempos grandes o elevada fricción, pero que es mucho menos restrictiva que la usual hipótesis (Chandrasekhar, 1.943)

$$\lambda t \gg 1 \quad (46)$$

La ecuación (45) contiene dos términos con exponenciales. Uno de ellos depende de la condición inicial y el otro no. Estas exponenciales pueden despreciarse mediante (46). Entonces (45) se convierte en

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = \left(\frac{\lambda}{2} - a\right) \frac{\partial}{\partial q} q P(q,t) + \frac{k_B T}{\omega^2} \left(\frac{\lambda}{2} - a\right) \frac{\partial^2}{\partial q^2} P(q,t) \quad (47)$$

que es el resultado de Titulaer (1.978).

La hipótesis (46) puede satisfacerse, bien considerando un valor fijo y finito para λ y hacer t grande (límite de tiempos grandes) o bien considerando un tiempo fijo finito y un elevado valor de la fricción λ (límite de ele-

vada fricción). En el último caso, la ecuación (47) es de alguna forma confusa pues contiene todos los órdenes en

λ^{-1} a través de $a(\lambda)$.

Por lo tanto la ecuación (47) ha de ser considerada como válida para tiempos largos en los cuales el régimen transitorio ya ha desaparecido.

En el límite de elevada fricción λ , ha de hacerse un desarrollo de (45) en función de λ^{-1} . El mismo resultado se obtendrá si se desarrolla (47). En primer orden en λ^{-1} se obtiene la ecuación de Smoluchowski (Chandrasekhar, 1.943)

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = \frac{\omega^2}{\lambda} \frac{\partial}{\partial q} q P(q,t) + \frac{k_B T}{\lambda} \frac{\partial^2}{\partial q^2} P(q,t) \quad (48)$$

y en segundo orden

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = \frac{\omega^2}{\lambda} \left(1 + \frac{\omega^2}{\lambda^2}\right) \frac{\partial}{\partial q} q P(q,t) + \frac{k_B T}{\lambda} \left(1 + \frac{\omega^2}{\lambda^2}\right) \frac{\partial^2}{\partial q^2} P(q,t) \quad (49)$$

que es la corrección dada, por primera vez, por Stratonovich (1.963).

3.1.c) Oscilador crítico

Este caso corresponde a unos valores de los parámetros tales que cumplen

$$\omega = \frac{\lambda}{2} \quad (50)$$

y por lo tanto la hipótesis (41) no puede hacerse ($\alpha = 0$ en este caso).

Para este valor de λ , $\chi(t)$ se convierte en

$$\chi(t) = e^{-\frac{\lambda t}{2}} \left(1 + \frac{\lambda t}{2}\right) \quad (51)$$

y por lo tanto

$$\bar{\beta}(t) = \frac{\left(\frac{\lambda}{2}\right)^2 t}{1 + \frac{\lambda t}{2}} \quad (52, a)$$

$$\frac{d\bar{\beta}(t)}{dt} = \frac{\left(\frac{\lambda}{2}\right)^2}{\left(1 + \frac{\lambda t}{2}\right)^2} \quad (52, b)$$

Y teniendo en cuenta estas ecuaciones, la ecuación de Fokker-Planck (35) será

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = & \frac{\left(\frac{\lambda}{2}\right)^2 t}{1 + \frac{\lambda t}{2}} \frac{\partial}{\partial q} q P(q,t) - \frac{P_0 e^{-\lambda t/2}}{1 + \frac{\lambda t}{2}} \frac{\partial}{\partial q} P(q,t) + \\ & + \frac{k_B T t}{1 + \frac{\lambda t}{2}} (1 - e^{-\lambda t}) \frac{\partial^2}{\partial q^2} P(q,t) \end{aligned} \quad (53)$$

que en el límite de tiempos grandes se puede escribir como

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = \frac{\lambda}{2} \frac{\partial}{\partial q} q P(q,t) + \frac{2k_B T}{\lambda} \frac{\partial^2}{\partial q^2} P(q,t) \quad (54)$$

Esta ecuación coincide con (47) para $a=0$. Esto está en concordancia con el hecho físico de que para cualquier valor de λ y ω su estado estacionario correspondiente, que es alcanzado en el límite de tiempos muy grandes, debe ser el mismo.

Por otra parte, en el caso del límite de elevada fricción (53) se transforma en

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = \frac{\lambda}{2} \frac{\partial}{\partial q} q P(q,t) \quad (55)$$

que también puede obtenerse a partir de (54) pero no como caso particular de la ecuación de Smoluchowski (48). Veamos que en este límite la difusión se vuelve despreciable. La imposibilidad de deducir (55) como caso particular del oscilador sobreamortiguado se debe a los valores críticos alcanzados por los parámetros ω y λ . De hecho el desarrollo sistemático en λ^{-1} de Titulaer (1.978) se hace divergente en este punto.

3.1.d) Oscilador infraamortiguado

Este caso está definido por la siguiente relación entre los parámetros

$$\frac{\lambda}{2} < \omega \quad (56)$$

Ahora $\chi(t)$ y sus resultados derivados son

$$\chi(t) = e^{-\frac{\gamma t}{2}} \left(\cos \omega t + \frac{\gamma}{2\omega} \sin \omega t \right) \quad (57)$$

$$\beta(t) = \frac{\omega^2 \sin \omega t}{\omega \cos \omega t + \frac{\gamma}{2} \sin \omega t} \quad (58)$$

$$\frac{d\bar{\beta}(t)}{dt} = \frac{\omega^2}{\left(\cos \omega t + \frac{\gamma}{2\omega} \sin \omega t \right)^2} \quad (59)$$

Sustituyendo estas ecuaciones en (35) tendremos la ecuación de Fokker-Planck para el oscilador infraamortiguado. No es posible escribir la ecuación de Fokker-Planck en el límite de tiempos largos pues tal límite no existe para $\bar{\beta}(t)$. Aún más, existe un conjunto de tiempos para los cuales $\bar{\beta}(t)$ diverge. Para estos tiempos el operador de Fokker-Planck no está definido. Este hecho está relacionado con la no existencia para todos los tiempos del inverso de la probabilidad condicional para un proceso general no markoviano (Hänggi, Thomas, Grabert y Talkner, 1.978). Sin embargo la correspondiente ecuación formal de Fokker-Planck tiene solución dependiente del tiempo cuyo límite de tiempos grandes existe y coincide, como debe ser, con la solución estacionaria de (48).

3.1.e) Distribución inicial maxweliana para el momento

En los desarrollos hechos en las diversas situaciones anteriores, el valor inicial del momento ha sido considerado como un parámetro fijo en la ecuación de evolución para $q(t)$ (ecuación 7). De esta forma, cualquier función de correlación o promedio estadístico calculado con la solución de la ecuación de Fokker-Planck (35) dependerá de p_0 . Si este parámetro no es fijo sino que tiene una distribución de probabilidad inicial, el resultado correcto de los promedios estadísticos con $P(q,t)$ se obtendrá haciendo el promedio sobre la distribución de p_0 .

Si el momento inicial p_0 es considerado desde el principio, como un parámetro estocástico, lo que físicamente es muy plausible, puede ser interesante encontrar la ecuación maestra asociada a (17) bajo estas circunstancias. La derivación de la ecuación de Fokker-Planck (19), hecha en el Apéndice (II.E), se ha de modificar incluyendo un promedio más sobre la distribución de probabilidad de p_0 . Esto puede ser en general muy laborioso. Sin embargo, si tomamos para p_0 una distribución de probabilidad maxweliana con media nula, el nuevo promedio se puede hacer también por medio del teorema de Novikov (p_0 es una variable estocástica gaussiana, y estadísticamente independiente de $z(t)$).

En la práctica, esto es equivalente a considerar en la ecuación (7) o en la (17) el término

$$F(t) + \bar{z}(t) = z'(t) \quad (60)$$

como una nueva fuerza estocástica gaussiana cuya función de correlación sobre las dos distribuciones mutuamente independientes, distribución funcional de $\zeta(t)$ y la distribución maxweliana de ρ_0 , es

$$\sigma'(t,t') = \langle \zeta'(t)\zeta'(t') \rangle_{\rho_0} = \left\langle \rho_0^2 \right\rangle_{\rho_0} - k_B T \left\{ e^{-\lambda(t+t')} + k_B T e^{-\lambda(t-t')} \right\} \quad (61)$$

Para una distribución maxweliana tal que

$$\langle \rho_0^2 \rangle_{\rho_0} = k_B T \quad (62)$$

que sustituimos en (61) y obtenemos la función de correlación

$$\sigma'(t,t') = k_B T e^{-\lambda(t-t')} \quad (63)$$

que coincide con la correspondiente a un proceso de Orstein y Uhlenbeck.

La ecuación de Fokker-Planck (19) se reduce a

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial q} \bar{\alpha}(t) q P(q,t) + \frac{\partial^2}{\partial q^2} D'(t) P(q,t) \quad (64)$$

donde $D'(t)$ está definido en función de $\gamma'(t,t')$ de la misma manera que $D(t)$ fue definida en función de $\gamma(t,t')$ en la ecuación (20). La cantidad $\gamma'(t,t')$ se define de igual forma que $\gamma(t,t')$ en la ecuación (21) pero reemplazando $\zeta(t)$ por $\zeta'(t)$ y promediando también sobre la distribución maxweliana de ρ_0 . Comparando (12) con (64) se

puede ver claramente que $D^*(t)$ viene dada por la misma expresión que (22) pero ahora con $A_2(t) = 0$. Así, la ecuación de Fokker-Planck para $P(q,t)$ bajo la hipótesis de distribución inicial maxweliana para el momento es

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial q} \bar{\beta}(t) q P(q,t) + \frac{k_B T}{\omega^2} \bar{\beta}(t) \frac{\partial^2}{\partial q^2} P(q,t) \quad (65)$$

La hipótesis de distribución inicial maxweliana en comparación con una distribución inicial arbitraria para el momento significa físicamente despreciar el régimen transitorio en el cual la distribución del momento alcanza un equilibrio térmico. Esta hipótesis deja de serlo cuando se intenta preparar experimentalmente la partícula.

Se ha de hacer notar también el hecho de que bajo esta hipótesis $\bar{\nu}(t,t')$ es reemplazada por $\bar{\sigma}'(t,t')$ de tal forma que la ecuación (7) satisface la relación de fluctuación disipación que ya fue mencionada anteriormente al deducirla mediante el límite de tiempos grandes.

Por otra parte, los términos que son despreciados después del régimen transitorio, como los términos exponenciales de (45), no aparecen en modo alguno bajo esta condición inicial especial.

Acabamos haciendo notar que la solución de (64) para cualquier valor posible de los parámetros y para todo tiem-

po, se puede obtener y explícitamente es

$$P(q,t) = \frac{1}{(2\pi A_1(t))^{1/2}} e^{-\frac{(q-q(0)\chi(t))^2}{2 A_1(t)}} \quad (66)$$

con $A_1(t)$ dado en (29), y para cada $\chi(t)$ correspondiente a cada uno de los tres casos del oscilador.

3.1.f) Movimiento Browniano de la partícula libre

El problema del movimiento browniano con potencial nulo puede tratarse fácilmente siguiendo los mismos caminos que en el apartado 3.1.a). La ecuación de Fokker-Planck en espacio de posición correspondiente a este problema es en verdad el límite de (35), (37) y (39) para $\omega^2 \rightarrow 0$.

Esta ecuación puede obtenerse por otros métodos (Mazo, 1.978; Fox, 1.979) y resulta ser

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q} p_0 e^{-\lambda t} P(q,t) + \frac{\partial^2}{\partial q^2} \frac{k_B T}{\lambda} (1 - 2e^{-\lambda t} + e^{-2\lambda t}) P(q,t) \quad (67)$$

También había sido remarcado por Wilemski (1.976) que las correcciones a la ecuación de Smoluchowski habían de ser en este caso de orden superior a λ^{-3} . De (67) podemos ver que tales correcciones son de orden $e^{-\lambda t}$ y que solamente existen para el régimen transitorio.

Si tomamos condiciones iniciales maxwellianas para p_0 ,

siguiendo entonces los mismos pasos que en el apartado 3.1.e), se obtiene que (67) se reduce a

$$\frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial q^2} \frac{k_B T}{\lambda} (1 - e^{-\lambda t}) P(q,t) \quad (68)$$

Esta ecuación claramente demuestra que la parte del régimen transitorio no puede ser eliminada con condiciones iniciales apropiadas para el momento.

3.2.- Resultados aproximados. Potencial Anarmónico

En este apartado obtendremos la ecuación de Fokker-Planck aproximada en espacio fásico para una partícula sometida a un potencial no armónico. La deducción será diferente de la hecha para el caso exacto (Apartado 3.1.a) y estará en la línea del capítulo 1, prescindiendo de los transitorios. A continuación en un apartado diferente estudiaremos los términos transitorios que presentarán una auténtica complejidad matemática al evaluarlos debida a la dificultad del tratamiento de los núcleos de memoria. Terminaremos con un apartado dedicado al movimiento browniano en varias dimensiones haciendo únicamente hincapié en algunos puntos de interés.

3.2.a) Correcciones a la ecuación de Smoluchowski

Las ecuaciones del movimiento para una partícula browniana en un potencial anarmónico $\phi(q)$ son:

$$\dot{q}(t) = p(t) \quad (69)$$

$$\dot{p}(t) = -\gamma p(t) - \phi'(q(t)) + \zeta(t) \quad (70)$$

donde $\phi'(q)$ indica la derivada de $\phi(q)$ respecto de q y $\zeta(t)$ es la fuerza estocástica definida en el apartado 3.1.a) (ecuaciones 3 y 4). En el mismo sentido que en el apartado 3.1.a), resolviendo finalmente (70) y sustituyendo en (69) obtenemos (ecuación 6)

$$\dot{q}(t) = e^{-\lambda t} p_0 - \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} \phi'(q(t')) dt' + \bar{\zeta}(t) \quad (71)$$

Debido a la no linealidad en q contenida en $\phi'(q)$, esta ecuación no puede ser reducida a una forma sin memoria. Así, buscaremos una ecuación maestra aproximada para la densidad de probabilidad en espacio q mediante un desarrollo en potencias de λ^{-1} . El punto importante que queremos resaltar, en este apartado, es cómo puede hacerse ésto comenzando por la ecuación de Langevin no markoviana (71), y cómo manejar consistentemente el ruido no blanco $\bar{\zeta}(t)$. En este sentido, la razón por la que la ecuación de Fokker-Planck no existe más allá de los términos de orden λ^{-3} (Titulaer, 1.978; Chaturvedi y Shibata, 1.979) aparecerá claramente como relacionada con el comportamiento de ruido no blanco de $\bar{\zeta}(t)$. En este problema del movimiento browniano la aproximación de primer orden en τ discutida en los capítulos 1 y 2, corresponde al orden λ^{-3} ya que el orden cero es proporcional a λ^{-1} debido todo ello a la forma especial de la correlación de la fuerza estocástica (4) que depende linealmente de λ .

El término conteniendo la condición inicial p_0 puede incluirse en la fuerza estocástica (Apartado 3.1.e) o bien despreciarse en esta aproximación pues es un término transitorio y prescindiremos, como ya hemos dicho, de ellos.

El segundo término en (71), correspondiente al núcleo de memoria, puede aproximarse por sucesivas integraciones

por partes y despreciando los términos transitorios (proporcionales a $e^{-\lambda t}$). Esto es equivalente al desarrollo formal

$$e^{-\lambda(t-t')} = 2\lambda^{-1}\delta(t-t') + 2\lambda^{-2}\frac{d}{dt'}\delta(t-t') + \dots, t > t' \quad (72)$$

que si sustituimos en (71) obtenemos

$$\dot{q}(t) = -\lambda^{-1}\phi'(q(t)) + \lambda^{-2}\phi''(q(t))\dot{q}(t) + \bar{z}(t) \quad (73)$$

y volviendo a sustituir $\dot{q}(t)$ en el lado derecho por la primera aproximación de $\dot{q}(t)$ de (73) obtenemos

$$\dot{q}(t) = -\lambda^{-1}\phi'(q(t))(1 + \lambda^{-2}\phi''(q(t))) + (1 + \lambda^{-2}\phi''(q(t)))\bar{z}(t) + O(\lambda^{-5}) \quad (74)$$

La fuerza estocástica $\bar{z}(t)$ no ha sido aún aproximada. Si la ecuación (72) se introduce en la definición de $\bar{z}(t)$ (9), aparecen funciones de difícil significado como $\dot{z}(t)$. Luego, la aproximación consistente de orden λ^{-3} ha de hacerse en su función de correlación $\sigma(t, t')$ (ecuaciones (12) o (63)) que aparecerá en la ecuación maestra asociada a (74). Tal ecuación no es más que (1.10) para este caso unidimensional y que resulta ser

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q, t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial q} \lambda^{-1} \phi'(q) (1 + \lambda^{-2} \phi''(q)) P(q, t) + \\ & + \frac{\partial}{\partial q} (1 + \lambda^{-2} \phi''(q)) \frac{\partial}{\partial q} \int_0^t dt' \sigma(t, t') \left\langle \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} \delta(q(t) - q) \right\rangle \end{aligned} \quad (75)$$

donde hemos usado (I.1.31)

$$P(q, t) = \langle \delta(q(t) - q) \rangle \quad (76)$$

La función de correlación $\sigma(t, t')$ puede ahora desarrollarse análogamente al desarrollo (72). El segundo término de $\sigma(t, t')$, igual a $-k_B T e^{-\lambda(t+t')}$ no contribuirá, cuando sea desarrollado, a la integral de (75) (o puede evitarse con condiciones iniciales maxwellianas para β , como ya se hizo anteriormente). Por lo tanto $\sigma(t, t')$ tendrá un desarrollo como (1.60)

$$\sigma(t, t') = 2k_B T \left\{ \lambda^{-1} \delta(t-t') + \lambda^{-2} \frac{d}{dt'} \delta(t-t') + \dots \right\}, \quad t > t' \quad (77)$$

Con este desarrollo la integral en t' de (75) será

$$\int_0^t dt' \sigma(t, t') \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} = k_B T \left\{ \lambda^{-1} \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} - \lambda^{-2} \frac{d}{dt'} \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} + O(\lambda^{-3}) \right\}_{t'=t} \quad (78)$$

La cantidad $\frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')}$ es la función respuesta de $q(t)$ a la fuerza $\bar{z}(t')$, que ya fue analizada en el Apéndice II.B por medio del formalismo operacional. De acuerdo con las fórmulas (II.B.2) y (II.B.5) aplicadas ahora a este caso unidimensional obtendremos para la función respuesta y su primera derivada temporal a tiempos iguales los resultados

$$\frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t)} = 1 + \lambda^{-2} \phi''(q(t)) \quad (79)$$

$$\lambda^{-2} \frac{d}{dt} \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t)} \Big|_{t=t} = \lambda^{-3} \phi'''(q(t)) + O(\lambda^{-5}) \quad (80)$$

y sustituyendo (79) y (80) en (78) obtenemos

$$\int_0^t dt' \sigma(t, t') \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} = \lambda^{-1} k_B T + O(\lambda^{-5}) \quad (81)$$

Y por lo tanto sustituyendo (81) en (75) llegamos a la ecuación de Fokker-Planck buscada con la primera corrección a la ecuación de Smoluchowski

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q,t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial q} \lambda^{-1} \phi'(q) (1 + \lambda^{-2} \phi''(q)) P(q,t) + \frac{\partial}{\partial q} (1 + \lambda^{-2} \phi''(q)) \frac{\partial}{\partial q} \lambda^{-1} k_B T P(q,t) = \\ &= \frac{1}{\lambda} \frac{\partial}{\partial q} \left(\phi'(q) + k_B T \frac{\partial}{\partial q} \right) P(q,t) + \frac{1}{\lambda^3} \frac{\partial}{\partial q} \phi''(q) \left(\phi'(q) + k_B T \frac{\partial}{\partial q} \right) P(q,t) \end{aligned} \quad (82)$$

Si quitamos los términos de orden λ^{-3} , (82) se convierte en la ya bien conocida ecuación de Smoluchowski (Chandrasekhar, 1.943). Esta corresponde al límite de ruido blanco para $\bar{z}(t)$, obtenida mediante el procedimiento de quedarse únicamente los primeros términos en los desarrollos (72) y (77). O de una manera más sencilla, mediante la eliminación adiabática del momento. En efecto si hacemos $\dot{p} = 0$ en (70) y sustituimos el $p(t)$ obtenido en (69) llegamos a una ecuación de Langevin cuya correspondiente ecuación de Fokker-Planck es la conocida ecuación de Smoluchowski.

Los términos de orden λ^{-3} dan la primera corrección a la ecuación de Smoluchowski coincidiendo con los resultados de Stratonovich (1.963), Wilemski (1.976), Titulaer (1.978), Skinner y Wolynes (1.979) y Chaturvedi y Shibata (1.979).

Hemos de destacar que (82) es sólo completamente significativa cuando se resuelve para el estado estacionario

o tiempos muy grandes, pues se han despreciado los términos transitorios en su derivación.

Para condiciones naturales de contorno la solución exacta de la ecuación de Fokker-Planck (82) para el estado estacionario es conocida y resulta ser

$$P_{st}(q) = N e^{-\frac{\phi(q)}{k_B T}} \quad (83)$$

Esta es también la solución estacionaria para la ecuación de Smoluchowski. El principal interés de (82) consiste en la posibilidad de estudiar estados estacionarios de no equilibrio en los cuales pueden ser impuestas condiciones de contorno no naturales.

La ecuación (82) representa la aproximación de Fokker-Planck al proceso no markoviano y no lineal definido en (71) que es válida para un tiempo de correlación λ^{-1} pequeño de la fuerza estocástica $\bar{z}(t)$.

Correcciones de orden superior pueden obtenerse sistemáticamente considerando órdenes mayores a (72) y (77). Sin embargo en el siguiente orden, λ^{-5} , de los considerados hasta ahora, la aproximación de Fokker-Planck se rompe. En este orden hemos de añadir a la ecuación (78) el término

$$k_B T \lambda^{-3} \left[\frac{d^2}{dt^2} \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t)} \right]_{t=t} \quad (84)$$

Esta cantidad está evaluada en el apéndice II.B. (ecuación II.B.7) y es de orden λ^{-5} . Contiene además un término

no en el que aparece $\bar{\zeta}(t)$ como factor multiplicativo, que cuando se sustituye en (75) aparece un factor del tipo $\langle \bar{\zeta}(t) \delta(q(t)-q) \rangle$. Este promedio puede hacerse aplicando el teorema de Novikov e introduce una nueva derivación de $P(q,t)$ respecto de q . Así pues, no existe ecuación de Fokker-Planck en esta aproximación pues aparecen derivadas de tercer orden. Sin embargo, es fácil de comprobar que en el caso especial de un potencial armónico el segundo término de (II.B.17) que tiene $\bar{\zeta}(t)$ es nulo, y así la aproximación de Fokker-Planck existe. Más aún, esto es cierto en cualquier orden en la aproximación. Así pues, se tiene una serie de potencias en λ^{-n} que cuando se suman aparece una ecuación de Fokker-Planck válida en cualquier orden en λ . Sumando esta serie se reobtiene la ecuación (47).

Una de las ventajas del procedimiento presentado aquí es que esta ecuación puede directamente obtenerse, como en se hizo en el apartado 3.1.a), sin pasar por el desarrollo en serie. Esto no se había hecho en los anteriores estudios de este problema (Titulaer, 1.978).

3.2.b) Términos transitorios para las correcciones a la ecuación de Smoluchowski.

El objetivo de este apartado consiste en aplicar el desarrollo general del Capítulo 1 a un proceso estocástico con memoria y ruido coloreado, conservando el efecto de la memoria, el cual es importante durante los estadios iniciales del movimiento. Se trata pues de encontrar los términos dependientes del tiempo que dan cuenta de los instantes iniciales.

Partimos de la ecuación (71), en la cual el término en P_0 está ya incluido en la fuerza estocástica y hemos supuesto para él una distribución maxweliana, tal como se hizo en 3.1.e). En estas circunstancias (71) se escribirá

$$\dot{q}(t) = - \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} \phi'(q(t')) dt' + \bar{z}(t) \quad (85)$$

Nuestra intención consiste ahora en evitar la memoria conservando sus efectos temporales en órdenes λ^{-1} y λ^{-3} . A tal fin desarrollaremos $\phi'(q(t'))$ en la forma

$$\phi'(q(t')) = \phi'(q(t)) - \phi''(q(t))(q(t) - q(t')) + \dots \quad (86)$$

y como los efectos de memoria sólo serán apreciables para $t-t'$ pequeño, integramos formalmente (85), obteniendo

$$q(t) - q(t') = - \int_{t'}^t ds \int_0^s e^{-\lambda(s-s')} \phi'(q(s')) ds' + \int_{t'}^t \bar{z}(s) ds \quad (87)$$

Sustituyendo (87) y (86) en (85) llegamos a la expresión

$$\begin{aligned} \dot{q}(t) = & -\phi'(q(t)) \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} dt' - \phi''(q(t)) \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} dt' \int_{t'}^t ds \int_0^s e^{-\lambda(s-s')} \phi'(q(s')) ds' + \\ & + \bar{z}(t) + \phi''(q(t)) \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} dt' \int_{t'}^t \bar{z}(s) ds \end{aligned} \quad (88)$$

Si desarrollamos ahora $\phi'(q(s)) = \phi'(q(t)) + \dots$ y despreciando los términos superiores que contribuirán en orden λ^{-5} , entonces se pueden hacer las integrales de los primeros sumandos y (88) se convierte en

$$\begin{aligned} \dot{q}(t) = & -\frac{A(t)}{\lambda} \phi'(q(t)) - \frac{B(t)}{\lambda^3} \phi'(q(t)) \phi''(q(t)) + \\ & + \bar{z}(t) + \phi''(q(t)) \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} dt' \int_{t'}^t \bar{z}(s) ds \end{aligned} \quad (89, a)$$

donde

$$A(t) = 1 - e^{-\lambda t} \quad ; \quad B(t) = 1 - 2\lambda t e^{-\lambda t} - e^{-2\lambda t} \quad (89, b)$$

Pasamos ahora a la obtención de la ecuación de la forma de Fokker-Planck correspondiente al proceso (85) en la aproximación (89) que contiene los términos proporcionales a λ^{-1} y λ^{-3} .

La ecuación Liouville asociada a (89) y promediada sobre la fuerza estocástica y las condiciones iniciales será

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q, t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{A(t)}{\lambda} \phi'(q) + \frac{B(t)}{\lambda^3} \phi'(q) \phi''(q) \right) P(q, t) - \\ - & \frac{\partial}{\partial q} \langle \bar{z}(t) \delta(q(t) - q) \rangle - \frac{\partial}{\partial q} \phi''(q) \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} dt' \int_{t'}^t \langle \bar{z}(s) \delta(q(t) - q) \rangle ds \end{aligned} \quad (90)$$

Y aplicando el teorema de Novikov (1.9) a ambos promedios obtenemos,

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{A(t)}{\lambda} \phi'(q) + \frac{B(t)}{\lambda^3} \phi'(q) \phi''(q) \right) P(q,t) + \\ & + \frac{\partial^2}{\partial q^2} \int_0^t \sigma'(t,t') \left\langle \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} \delta(q(t)-q) \right\rangle dt' + \frac{\partial}{\partial q} \phi''(q) \frac{\partial}{\partial q} \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} dt' \int_{t'}^t ds \int_0^s \sigma'(s,s') \left\langle \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(s')} \delta(q(t)-q) \right\rangle ds' \end{aligned} \quad (91)$$

Como en todos los casos vistos hasta ahora, el problema estriba en calcular la función respuesta. Demostraremos en el Apéndice II.F. que

$$\frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} = 1 + O(\lambda^{-4}) \quad (92)$$

y por lo tanto al sustituir (92) en (91) las integrales temporales se pueden calcular. Finalmente la ecuación (91) se convierte en

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{A(t)}{\lambda} \phi'(q) + \frac{B(t)}{\lambda^3} \phi'(q) \phi''(q) \right) P(q,t) + \\ & + \frac{\partial^2}{\partial q^2} \frac{A(t)}{\lambda} k_B T P(q,t) + \frac{\partial}{\partial q} \phi'(q) \frac{\partial}{\partial q} \phi''(q) \frac{B(t)}{\lambda^3} k_B T P(q,t) \end{aligned} \quad (93,a)$$

que también podemos escribir en la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(q,t)}{\partial t} = & \frac{A(t)}{\lambda} \frac{\partial}{\partial q} \left(\phi'(q) + k_B T \frac{\partial}{\partial q} \right) P(q,t) + \\ & + \frac{B(t)}{\lambda^3} \frac{\partial}{\partial q} \phi''(q) \left(\phi'(q) + k_B T \frac{\partial}{\partial q} \right) P(q,t) \end{aligned} \quad (93,b)$$

donde el primer sumando corresponde a la ecuación de Smoluchowski con transitorios y el segundo sumando a la primera corrección a dicha ecuación igualmente con transitorios. Es fácil observar que para $t \gg \lambda^{-1}$, $A(t) = B(t) = 1$ y recuperamos

el resultado conocido (82).

La ecuación (93) coincide con la de Chaturvedi y Shibata (1.979) obtenidas muy recientemente mediante el formalismo de los operadores de proyección.

Nuestro objetivo en esta deducción ha sido comprobar que nuestro formalismo operacional era capaz de atacar este problema arduo y no resuelto hasta estos días.

3.2.c) Varias dimensiones.

Una partícula browniana real se encontrará en un espacio de tres dimensiones y por lo tanto pudieran aparecer resultados no directamente estrapolables de los estudiados en una dimensión.

La principal dificultad para la pérdida de la forma de ecuación de Fokker-Planck en varias dimensiones es que la cantidad $K_{\alpha\beta\gamma}$ sea no nula. Vamos pues a estudiar esta cantidad en el caso del movimiento browniano.

Si todas las λ'_s son iguales, isotropía de la fricción, entonces $K_{\alpha\beta\gamma}$ no es nulo pero no da contribución en terceras derivadas, aunque sí añade términos extraños en la ecuación de Fokker-Planck (72). Vamos a demostrar que independientemente de que los λ'_s sean todos iguales $K_{\alpha\beta\gamma}$ es de orden superior en λ^3 por lo que cae fuera del orden de la aproximación.

Empecemos con las ecuaciones del movimiento para una

partícula browniana en tres dimensiones

$$\dot{q}_i(t) = p_i(t) \quad i=1,2,3 \quad (94)$$

$$\dot{p}_i(t) = -\lambda_i p_i(t) - \frac{\partial}{\partial q_i(t)} \phi(\vec{q}(t)) + \bar{z}_i(t) \quad (95)$$

La integración formal de (95) sustituida en (94) conduce a

$$\dot{q}_i(t) = - \int_0^t e^{-\lambda_i(t-t')} \frac{\partial}{\partial q_i(t')} \phi(\vec{q}(t')) dt' + \bar{z}_i(t) \quad (96)$$

donde se ha tratado el término en p_0 en la forma acostumbrada (3.1.e).

Sustituyendo (72), lo que implica prescindir de los transitorios, obtenemos una ecuación similar a (73)

$$\dot{q}_i(t) = -\frac{1}{\lambda_i} \frac{\partial}{\partial q_i(t)} \phi(\vec{q}(t)) + \frac{1}{\lambda_i^2} \frac{\partial^2}{\partial q_i(t) \partial q_j(t)} \phi(\vec{q}(t)) \dot{q}_j(t) + \bar{z}_i(t) \quad (97)$$

sustituyendo ahora

$$\dot{q}_j(t) = -\frac{1}{\lambda_j} \frac{\partial}{\partial q_j(t)} \phi(\vec{q}(t)) + \bar{z}_j(t) + \dots$$

obtenemos la ecuación equivalente a (74) en tres dimensiones

$$\begin{aligned} \dot{q}_i(t) = & -\frac{1}{\lambda_j} \frac{\partial}{\partial q_j(t)} \phi(\vec{q}(t)) \left\{ \delta_{ij} + \frac{1}{\lambda_i^2} \frac{\partial^2}{\partial q_i(t) \partial q_j(t)} \phi(\vec{q}(t)) \right\} + \\ & + \left\{ \delta_{ij} + \frac{1}{\lambda_i^2} \frac{\partial^2}{\partial q_i(t) \partial q_j(t)} \phi(\vec{q}(t)) \right\} \bar{z}_j(t) \end{aligned} \quad (98)$$

donde de acuerdo con la notación del capítulo 1 (1.1)

$$V_i(\vec{q}) = -\frac{1}{\lambda_j} \phi_{j \cdot}(\vec{q}) \left(\delta_{ij} + \frac{1}{\lambda_{ij}} \phi_{ij \cdot}(\vec{q}) \right) \quad (99)$$

$$g_{ij \cdot}(\vec{q}) = \delta_{ij} + \frac{1}{\lambda_{ij}} \phi_{ij \cdot}(\vec{q}) \quad (100)$$

con la notación simplificadora, que generalizaremos

$$\phi_{i \cdot}(\vec{q}) = \frac{\partial}{\partial q_i} \phi(\vec{q}) \quad (101)$$

A partir de (99) y (100) podemos obtener M_{ke} , $K_{k \rightarrow e}$ de sus expresiones (II.B.15 y 16), y así llegar a la ecuación de Fokker-Planck (1.64) para este problema (Apéndice II.E, ecuación 7)

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\phi_{ik}(\vec{q})}{\lambda_k} \left(\delta_{ik} + \frac{1}{\lambda_i^2} \phi_{ik \cdot}(\vec{q}) \right) P(\vec{q}, t) + \\ & + \frac{k_B T}{\lambda_k} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\delta_{ik} + \frac{1}{\lambda_i^2} \phi_{ik \cdot}(\vec{q}) \right) \frac{\partial}{\partial q_k} P(\vec{q}, t) \end{aligned} \quad (102)$$

que es la generalización de (82) a tres dimensiones y que no añade nada nuevo respecto a (82) dentro del orden λ^{-3} (producto de tres λ_i cualquiera) en el que estábamos interesados. Ciertamente estos resultados son válidos para cualquier dimensión y aplicables, por ejemplo, al tratamiento del movimiento browniano de osciladores no lineales acoplados (Trulinger y otros (1.978)) que se emplea en el estudio de solitones.

3.3.- Movimiento Browniano en espacio fásico con ruido no blanco.

Consideremos de nuevo las ecuaciones del movimiento de una partícula browniana (69) y (70) donde la fuerza estocástica para el momento no sea ruido blanco sino de color. En particular tomaremos como ruido un proceso de Orstein-Uhlenbeck (1.61). Estamos pues considerando un problema bidimensional al que podemos aplicar nuestra ecuación (1.65) y encontraremos las correcciones a la ecuación de Fokker-Planck hasta el orden τ^3 . Puesto que $g_{\mu\nu}$ es constante en este caso tendremos que $K_{\rho\gamma\mu} \equiv 0$, y tomando subíndice 1 para el momento y 2 para la posición tendremos que

$$V_1(p, q) = -\lambda p - \phi'(q) \quad (103)$$

$$V_2(p, q) = p \quad (104)$$

$$g_{\mu\nu}(p, q) = \delta_{\mu 1} \cdot \delta_{\nu 1} \quad (105)$$

de estas ecuaciones es fácil calcular $M_{\rho\alpha}$ usando (II.B.15) y así obtenemos que (1.65) para este caso es

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(p, q, t)}{\partial t} = & \left(\lambda \frac{\partial}{\partial p} p + \phi'(q) \frac{\partial}{\partial p} - p \frac{\partial}{\partial q} \right) P(p, q, t) + \\ & + D \frac{\partial^2}{\partial p^2} (1 - \lambda z) P(p, q, t) + D z \frac{\partial^2}{\partial p \partial q} P(p, q, t) \end{aligned} \quad (106)$$

Resultado que coincide con Van Kampen (1.976) y que fue obtenido por los métodos discutidos en el apartado 1.4.

Incluso en primer orden en z encontramos que aparece un término en derivadas cruzadas $\frac{\partial^2}{\partial p \partial q}$ (Adelman, 1.976) cuyo origen es únicamente debido a la fuerza estocástica de ruido no blanco. Adelman(1.976) encuentra que existe dicho término suponiendo una forma determinada para $P(p, q, t)$ y al buscar la ecuación diferencial que obedece, encuentra necesario incluir dicho término. Creemos que en nuestro estudio queda más claro cuál es su origen.

En este modelo (106) vamos a seguir tratando de obtener correcciones de orden superior que conserven la forma de Fokker-Planck. Los términos de orden z^2 y z^3 se obtienen sustituyendo el tercer y cuarto término del desarrollo (1.60) para la función de correlación de la fuerza estocástica, que en este caso es

$$\chi_{\nu\kappa}(t, t') = \frac{D}{z} e^{-\frac{|t-t'|}{z}} \cdot \delta_{\nu\kappa} \cdot \delta_{\kappa_1} \quad (107)$$

Explicitando el proceso de cálculo, tenemos en primer lugar que las funciones respuestas que contribuyen son

$$\frac{\delta p(t)}{\delta z(t')} = [\hat{p}(t'), p(t)] \quad , \quad t > t' \quad (108)$$

$$\frac{\delta q(t)}{\delta z(t')} = [\hat{p}(t'), q(t)] \quad , \quad t > t' \quad (109)$$

Las derivadas respecto de t' de (108) y (109) que aparecerán cuando (107) sea desarrollada de acuerdo con (1.60), son evaluadas fácilmente usando las ecuaciones del

movimiento operacionales (I.1.(6) y (8)), y puesto que

$$L(p, \hat{p}, q, \hat{q}, t) = -\lambda p \hat{p} - \phi'(q) \hat{p} + p \hat{q} + \mathcal{Z}(t) \hat{p} \quad (110)$$

obtenemos

$$\dot{\hat{p}}(t) = \lambda \hat{p}(t) - \hat{q}(t) \quad (111)$$

$$\dot{\hat{q}}(t) = \phi''(q(t)) \hat{p}(t) \quad (112)$$

y con estas dos últimas ecuaciones las derivadas primeras de (108) y (109) son

$$\left. \frac{d}{dt'} \frac{\delta p(t)}{\delta \mathcal{Z}(t')} \right|_{t'=t} = \lambda \quad (113)$$

$$\left. \frac{d}{dt'} \frac{\delta q(t)}{\delta \mathcal{Z}(t')} \right|_{t'=t} = -1 \quad (114)$$

con las cuales hemos obtenido (106).

Las derivadas superiores son también calculadas fácilmente

$$\left. \frac{d^2}{dt'^2} \frac{\delta p(t)}{\delta \mathcal{Z}(t')} \right|_{t'=t} = \lambda^2 - \phi''(q(t)) \quad (115)$$

$$\left. \frac{d^2}{dt'^2} \frac{\delta q(t)}{\delta \mathcal{Z}(t')} \right|_{t'=t} = \lambda \quad (116)$$

$$\left. \frac{d^3}{dt'^3} \frac{\delta p(t)}{\delta \mathcal{Z}(t')} \right|_{t'=t} = \lambda^3 - 2\lambda \phi''(q(t)) - \phi'''(q(t)) p(t) \quad (117)$$

$$\left. \frac{d^3}{dt'^3} \frac{\delta q(t)}{\delta \mathcal{Z}(t')} \right|_{t'=t} = -\lambda^2 + \phi''(q(t)) \quad (118)$$

y hasta ahora no aparece ninguna $\zeta(t)$, pero en la siguiente derivada el último término de (117) contribuirá con una $\zeta(t)$.

Los resultados (115) y (116) contribuyen en ζ^2 y (117) y (118) en ζ^3 . Teniendo en cuenta estas correcciones el resultado final es

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(p,q,t)}{\partial t} &= \left(\lambda \frac{\partial}{\partial p} p + \phi'(q) \frac{\partial}{\partial p} - p \frac{\partial}{\partial q} \right) P(p,q,t) + \\ &D \frac{\partial^2}{\partial p^2} \left(1 - \lambda z + z^2 (\lambda^2 - \phi''(q)) - z^3 (\lambda^3 - 2\lambda \phi''(q) - \phi'''(q) p) \right) P(p,q,t) + \\ &+ D \frac{\partial^2}{\partial p \partial q} \left(z - \lambda z^2 + z^3 (\lambda^2 - \phi''(q)) \right) P(p,q,t) \end{aligned} \quad (119)$$

En el siguiente orden ζ^4 aparece una cantidad como $\langle \zeta(t) \delta(p(t)-p) \delta(q(t)-q) \rangle$ en el desarrollo y por lo tanto rompe la forma de Fokker-Planck. Para un potencial armónico este término no aparece, por ser $\phi'''(q) = 0$, y se pueden incluir términos de orden superior. En este último caso el problema es lineal y los resultados del apartado 1.1.a) son aplicables. Van Kampen (1.976) no obtiene estas últimas correcciones que además no son de la forma $\alpha(\alpha\zeta)^n$. Este es un ejemplo más de la potencia de nuestra aproximación (1.65).

3.4.- Comentarios

En este capítulo 3 hemos presentado un nuevo procedimiento para calcular las correcciones a la ecuación de Smoluchowski basado en el tratamiento de las ecuaciones de Langevin no markovianas en espacio de posición. Este nos ha permitido resolver exactamente el problema del oscilar armónico en sus tres diferentes casos. No tenemos referencias de que este resultado haya sido publicado previamente. La solución exacta nos ha permitido separar la discusión de los tres casos del oscilador: sobreamortiguado, crítico e infraamortiguado. Los tratamientos anteriores fueron incapaces para atacar exacta y sistemáticamente estos dos últimos casos.

El papel específico de los límites de tiempos grandes y elevada fricción también han sido analizados en el contexto de los resultados exactos, así como también las implicaciones de tomar condiciones iniciales especiales.

Para el caso no lineal hemos reobtenido los resultados ya conocidos, pero nuestra imagen del proceso no markoviano en espacio q da un sentido físico más directo a los diferentes estadios de los cálculos. En particular, el desarrollo en potencias de λ^{-1} , puede reinterpretarse como un desarrollo en términos del tiempo de correlación de la fuerza estocástica de ruido no blanco. La ruptura de la aproximación de Fokker-Planck está claramente fundamentada.

La forma original de tratar los términos transitorios

en el caso no lineal, tiene su importancia, no por haber reobtenido unos resultados muy recientes , (Chaturvedi y Shibata, 1.979) sino por las perspectivas que abre para el tratamiento de procesos estocásticos con núcleos de memoria, campo completamente nuevo.

La extensión a varias dimensiones, si bien es original, ha demostrado que no añade nada nuevo a lo ya conocido en una dimensión.

Por último hemos abordado el problema del movimiento Browniano en espacio físico con fuerza estocástica no blanca, encontrando que nuestro tratamiento general permite obtener correcciones de orden τ^3 , dos órdenes más de lo normal, manteniéndose la forma de Fokker-Planck.

CONCLUSIONES Y RESULTADOS

CONCLUSIONES Y RESULTADOS

Esta tesis consiste esencialmente en la aplicación a problemas concretos de las técnicas más recientes de resolución de ecuaciones diferenciales estocásticas basadas en el formalismo operacional desarrollado por Garrido y San Miguel (1.978 a). Hemos considerado problemas de diversa naturaleza que pueden clasificarse en dos grandes grupos: Problemas de naturaleza markoviana (Parte I del trabajo) y no markoviana (Parte II).

En la primera parte hemos aplicado dichas técnicas a distintos problemas lo que nos ha permitido resolver algunos de ellos exactamente y contribuir fundamentalmente al desarrollo y comprensión de otros, siendo la idea principal de esta parte la introducción de la estocasticidad en los cálculos mediante una imagen de interacción.

En la segunda parte el resultado fundamental y a la vez el principal de esta tesis ha sido la obtención de una ecuación diferencial aproximada de la forma de Fokker-Planck para un proceso estocástico no markoviano que obedece una ecuación de Langevin con fuerzas estocásticas coloreadas. El punto principal en el desarrollo ha sido la obtención de la función respuesta no lineal y sus derivadas temporales mediante el uso del formalismo operacional lo que nos ha permitido presentar una demostración clara y potente en comparación con las conocidas hasta hoy en día e ilustrar las ventajas de este formalismo en el tratamiento de los procesos estocásticos.

Para comprobar la utilidad de dicha ecuación se ha aplicado a diversos problemas físicos obteniendo en cada uno de ellos resultados notables lo que nos conduce a pensar que dicha ecuación ha de tener un papel importante en el estudio de los procesos estocásticos no markovianos. Como prueba de esta afirmación presentaremos en el apartado sobre las Perspectivas una serie de problemas importantes a los que se puede aplicar dicha ecuación y en los que no dudamos se podrán obtener resultados interesantes.

Creemos haber conseguido, en ambas partes, un tratamiento elegante de algunos problemas que todavía estaban sin resolver y, haber contribuido a una mejor comprensión y desarrollo de esta parte de la Física Teórica.

A continuación enumeramos los resultados concretos más importantes de este trabajo.

Parte I:

En el capítulo 1 se resume el formalismo operacional de Garrido y San Miguel (1,978 a) ya conocido y además:

1.- Se presenta una obtención original de la ecuación de Fokker-Planck (I.1.36) para sistemas con fuerza estocástica multiplicativa.

El capítulo 2 se dedica a la obtención de resultados exactos mediante la aplicación de la Dinámica de Fokker-Planck, en particular.

2.- Se obtiene por primera vez la solución exacta de un sistema lineal con la mayor generalidad posible (valores

propios nulos y matriz de arrastre no diagonalizable) de n ecuaciones acopladas de Langevin, dando explícitamente la solución para el valor medio, la función de correlación y la función respuesta (I.2.32,33 y 34) (San Miguel y Sancho (1.979 a); Sancho y San Miguel (1.979 c)). A la vez se ponen de manifiesto las ambigüedades de la solución tradicional.

3.- Utilizando el resultado anterior se resuelve exactamente el problema de una partícula browniana, en espacio fásico, sumergida en un fluido sometido a esfuerzo cortante ("Shear flow") (San Miguel y Sancho, 1.979 a). De este problema sólo se conocía la solución para la posición (Van de Ven, 1.977). La solución presentada permite introducir condiciones iniciales arbitrarias y estudiar indistintamente el límite de tiempos grandes o elevado coeficiente de fricción.

4.- Se resuelve un modelo análogo al de Kubo (1.963) como una aplicación de formalismo a un problema no lineal (Sancho y San Miguel, 1.979 c).

5.- Se demuestra la equivalencia entre las teorías perturbativas para un sistema determinista y para un sistema estocástico, en el sentido de que existe una relación biunívoca entre sus respectivos diagramas y una relación simple entre sus propagadores libres (Garrido y Sancho, 1.978).

6.- Se demuestra (Garrido y Sancho, 1.978) que la formulación de San Miguel (1.978) de un teorema de Wick para

procesos estocásticos puede también obtenerse a partir de la formulación de Enz y Garrido (1.976).

El capítulo 3 se dedica a la Dinámica Crítica y al Grupo de Renormalización Dinámico, y en particular:

7.- Se relacionan las hipótesis del Grupo de Renormalización estático y dinámico acerca del punto crítico en el contexto de una descripción para la Dinámica Crítica basada en la ecuación de Fokker-Planck.

8.- Se formula la Dinámica Crítica como un caso particular de una Dinámica de Fokker-Planck.

9.- Se justifica y define una Hipótesis Adiabática (I.3.93) necesaria para formular la teoría perturbativa adecuada al Grupo de Renormalización Dinámico, discutiéndose sus implicaciones y su relación con las condiciones iniciales estacionarias.

10.- Se presenta una deducción explícita del Grupo de Renormalización estático a partir del Grupo de Renormalización Dinámico basándose en una formulación adecuada del Teorema de Fluctuación y Disipación (I,3,119).

11.- Se desarrolla una teoría diagramática perturbativa que aplicamos con detalle al estudio de los modelos A y B de Halperin y otros (1.974), clarificando los resultados conocidos y confirmando la aplicabilidad de la Dinámica de Fokker-Planck a este tipo de problemas.

Parte II:

En el capítulo 1, que es de fundamentación, se estudia un sistema de n ecuaciones diferenciales estocásticas de Langevin no markovianas, llegando a los resultados concretos siguientes:

12.- Se deduce por vez primera una ecuación para la densidad de Probabilidad $P(q,t)$ (II.1.10) en la que aparece la función respuesta no promediada, siendo esta ecuación el punto de partida de todos los desarrollos posteriores (San Miguel y Sancho, 1.979 c).

13.- Se obtiene la ecuación exacta (II.1.19) para la densidad de probabilidad de los sistemas lineales y los exactamente resolubles, donde se demuestra que la fuerza estocástica sólo contribuye como una renormalización del coeficiente de difusión (II.1.20).

14.- Se deduce la condición necesaria y suficiente para que un sistema de n ecuaciones estocásticas de Langevin no lineales sea exactamente resoluble (II.1.31).

15.- Se obtiene la ecuación (II.1.65), resultado fundamental de esta parte y las ecuaciones derivadas de ella (II.1.67,68 y 72) que nos dan la ecuación diferencial tipo Fokker-Planck para $P(\vec{q},t)$ correspondiente a un sistema de n ecuaciones estocásticas de Langevin no markovianas (San Miguel y Sancho, 1.979 c).

16.- Se confirma que la ecuación usualmente conocida

como de Fokker-Planck es el límite para fuerzas estocásticas de tiempo de correlación nulo y que coincide con la interpretación de Stratonovich (Sancho y San Miguel, 1.979 b).

17.- Se demuestra que incluso en primer orden en el tiempo de correlación (τ_μ) puede no existir una ecuación tipo Fokker-Planck (San Miguel y Sancho, 1.979 c).

18.- Se deduce la ecuación (II.1.74) para la densidad de Probabilidad que incluye los efectos transitorios.

19.- Se da una condición de validez (II.1.83) sobre nuestro desarrollo en potencias del tiempo de correlación que sirve también para confirmar la validez de la aproximación del ruido blanco. Esta condición, que es original, creemos que es más clara que la propuesta por Stratonovich (1.963), (Sancho y San Miguel, 1.979 a).

20.- Se reinterpreta el desarrollo de Van Kampen (1.974, 1.976) en el contexto del cálculo de la función respuesta en aproximación lineal.

En el capítulo 2, dedicado a la aplicación de los resultados anteriores al estudio de transiciones de fase de no equilibrio (Sancho y San Miguel, 1.979 a):

21.- Se deduce, en una dimensión, la ecuación de los extremos relativos de la densidad de probabilidad estacionaria donde se muestra la influencia del ruido coloreado (II.2.17) con relación al ruido blanco y al tratamiento

determinista, encontrando que pueden aparecer nuevos máximos ausentes en el análisis de ruido blanco y que el ruido aditivo coloreado puede cambiar el estado macroscópico respecto al análisis determinista.

22.- Se aplican las ecuaciones deducidas al estudio de transiciones de fase de no equilibrio en diversos modelos, principalmente al modelo de Verhulst (Kitahara y otros, 1.979) y a un modelo genético (Arnold y otros, 1.978) encontrando un acuerdo cualitativo muy apreciable con los resultados ya conocidos por otros métodos. Por ejemplo, se confirma la aparición de nuevas transiciones de no equilibrio y la variación del parámetro crítico debidos al efecto del ruido coloreado.

23.- Se reinterpreta físicamente los resultados de Arnold y otros (1.978) para un sistema con ruido coloreado de tiempo de correlación grande, mostrando que esos resultados equivalen a hacer una eliminación adiabática inversa.

24.- Se demuestra la validez de la aproximación de ruido blanco para el estudio e interpretación de los resultados experimentales obtenidos en el Oscilador Paramétrico (San Miguel y Sancho, 1.980) y a la vez se hacen predicciones observables sobre el comportamiento del mismo al variar el "color" del ruido (Sancho y San Miguel, 1.980).

En el capítulo 3, dedicado al Movimiento Browniano y en especial a las ecuaciones de Smoluchowski (San Miguel y Sancho, 1.979 b):

25.- Se muestra como la eliminación de variables produce ecuaciones no markovianas y deja de ser válido el teorema de Fluctuación y Disipación en la etapa inicial del movimiento.

26.- Se hace un tratamiento original para la obtención de la ecuación de Smoluchowski y sus correcciones, basado, no como el método habitual de partir de la densidad de probabilidad total $P(q,p,t)$, sino de una ecuación de Langevin no markoviana para la posición.

27.- Se deduce la ecuación de Fokker-Planck (II.3.35) exacta y válida para los tres casos del oscilador armónico. Se estudia detalladamente esta ecuación destacando la diferencia entre los límites de tiempo largos y elevado coeficiente de fricción, y el efecto de las condiciones iniciales. Además se amplían los resultados de Titulaer (1.978) al incluir los términos transitorios sin necesidad de sumar una serie.

28.- Se deduce la ecuación de Smoluchowski y sus correcciones para la densidad de Probabilidad (II.3.93) que incluye el efecto de los términos transitorios. Consideramos que es ésta una de las deducciones más complejas y prometedoras de este trabajo.

29.- Se deduce la ecuación de Smoluchowski y sus primeras correcciones (II.3.102), para la densidad de probabilidad, en varias dimensiones, que tiene importancia por sus aplicaciones al estudio de solitones y Dinámica molecular, entre otros problemas.

30.- Se obtiene la ecuación (II.3.119) para la densidad de Probabilidad $P(q,p,t)$ de una partícula browniana sometida a una fuerza estocástica coloreada y se encuentran, además de los términos ya conocidos (Van Kampen, 1.976), otros dos órdenes más en el desarrollo en \mathbf{z} , manteniéndose sin embargo, la forma de Fokker-Planck; y a la vez se pone de manifiesto que el origen de las derivadas cruzadas $\frac{\partial^2}{\partial p \partial q}$ es debido a la fuerza estocástica coloreada (San Miguel y Sancho, 1.979 c).

PERSPECTIVAS

Vamos a enumerar las futuras perspectivas de investigación, que creemos más interesantes, que abre el presente trabajo.

1.- El estudio analítico de los modelos de Locka-Volterra y Schlögl en dos dimensiones (Apartado II,1.1.b,iii)), que por ser modelos exactos permitirán un estudio más completo.

2.- El tratamiento de ecuaciones diferenciales estocásticas con núcleos de memoria de tiempo de correlación pequeño y fuerzas estocásticas coloreadas o no. Nos referimos a ecuaciones del siguiente tipo o variantes del mismo

$$\dot{q}(t) = \int_0^t \beta(t-t') \phi(q(t')) dt' + g(q(t)) \zeta(t)$$

Las técnicas desarrolladas en el apartado (II.3.2.b) abren esta posibilidad. Ecuaciones de este tipo aparecen en el estudio de Dinámica molecular de partículas coloidales en un fluido, sometidas a interacción mútua y con un tensor de disipación dependiente de las posiciones relativas de las partículas. La aplicación de las técnicas expuestas permiten deducir ecuaciones de Smoluchowski y sus sucesivas correcciones para partículas brownianas en interacción (Sistemas coloidales) (Hess y Klein (1.978); Titulaer(1.979)).

3.- El estudio de ecuaciones diferenciales estocásticas con ruido de tiempo de correlación grande. En este

caso se ha de buscar otro parámetro pequeño para el desarrollo (Apartado II.2.2.b).

4.- Repetición del estudio del Laser (Haken, 1.977 entre otros) pues en estas referencias se hacía la aproximación markoviana de ruido blanco en todos los pasos, que de no hacerse introduciría modificaciones interesantes en los resultados, tal como nos ha sugerido el Profesor Haken.

5.- El estudio de solitones mediante osciladores no lineales acoplados sometidos a movimiento browniano (Trullinger y otros, 1.978) y descritos por las ecuaciones

$$\dot{P}_i = \kappa(\theta_{i+1} + \theta_{i-1} - 2\theta_i) - mg\lambda \cos \theta_i + N_i - \lambda_i P_i + \zeta_i(t)$$

$$\dot{\theta}_i = \frac{P_i}{m\ell^2}$$

que corresponden a péndulos acoplados de longitud ℓ , momento angular P_i y momentos externos N_i . El objetivo es ahora hallar la ecuación de Smoluchowski para las variables angulares θ_i (Lee y Trullinger, 1.979), y para lo cual los desarrollos del apartado (II.3.2.c) serán útiles.

6.- El estudio de la distribución barométrica de partículas brownianas sin interacción mutua. Este problema, aún no resuelto, fue propuesto por Wang y Uhlenbeck (1.945) y, por el momento, sólo se conoce su solución estacionaria. La dificultad está en hallar $P(p,q,t)$ que obedezca la condición de contorno de que en $q = 0$ tenemos una barrera, el suelo, reflectora de las partículas. Creemos que la

eliminación exacta de $p(t)$, como se llevó a cabo en (II.3.1.a) contribuirá, sino a la solución completa de este problema, si al estudio de los instantes iniciales del movimiento de las partículas brownianas. Agradecemos al Profesor Van Kampen las sugerencias que nos ha dado para la solución de este problema.

7.- Finalmente, se pueden volver a estudiar todos los modelos que aparecen en las transiciones de fase de no equilibrio a fin de determinar el efecto del ruido coloreado y compararlo con los datos experimentales, y que podría explicar las pequeñas desviaciones observadas con relación al tratamiento con ruido blanco.

APENDICES

Apéndice, I.ATransformación de la función de Correlación y Respuesta

Empecemos por la función de Correlación definida

$$G_{\mu\nu}(t, t_1) = \langle \bar{T} \{ \psi_\mu(t) \psi_\nu(t_1) \} \rangle \quad (1)$$

donde tomaremos que la dependencia en t y t_1 a través de su diferencia

$$G_{\mu\nu}(t-t_1) = \langle \bar{T} \{ \psi_\mu(t) \psi_\nu(t_1) \} \rangle \quad (2)$$

aplicamos la transformada de Fourier y obtenemos

$$G_{\mu\nu}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega z} G_{\mu\nu}(z) dz = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega z} \langle \bar{T} \{ \psi_\mu(t) \psi_\nu(t_1) \} \rangle dz ; z = t - t_1 \quad (3)$$

Supongamos que estas ψ 's que aparecen corresponden a variables lentas, por lo que aplicamos ahora los cambios de escala (3.17) definidos en el apartado (3.1,a)

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_e(G_{\mu\nu}(\omega)) &= G'_{\mu'\nu'}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega' z'} \langle \bar{T} \{ \psi'_{\mu'}(t') \psi'_{\nu'}(t'_1) \} \rangle dz' = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega z} \langle \bar{T} \{ \psi_\mu(t) \psi_\nu(t_1) \} \rangle dz \cdot b^{-2-d+\gamma-z} = b^{-2-d+\gamma-z} \cdot G_{\mu\nu}(\omega) \end{aligned} \quad (4)$$

Luego hemos obtenido una relación entre ambas funciones de correlación

$$G'_{\mu\nu}(\omega') = b^{-2-d+\eta-z} G_{\mu\nu}(\omega) \quad (5)$$

pero dado que μ, ν no son completamente arbitrarios por estar relacionados por medio de deltas de Dirac, podemos escribir (5) en la siguiente forma que explicita los indices

$$G'(q', \omega') \delta(q'+q'_i) \delta_{ij} = b^{-2-d+\eta-z} G(q, \omega) \delta(q+q_i) \delta_{ij} \quad (6)$$

y como $q' = qb$ obtenemos que las deltas se relacionan en la forma

$$\delta(q'+q'_i) = \delta(bq+bq_i) = b^{-d} \delta(q+q_i) \quad (7)$$

por lo tanto (6) se convierte en

$$G'(q', \omega') = b^{-2+\eta-z} G(q, \omega) \quad (8)$$

Para la obtención de la misma expresión para la función respuesta, usaremos el teorema de Fluctuación-Disipación (Garrido- San Miguel, 1.978 a)

$$G_{\mu\nu}(\omega) = \frac{2}{\omega} \text{Im} K_{\mu\nu}(\omega) \quad (9)$$

,teorema que se cumplirá también para las variables primas

$$G'_{\mu\nu}(\omega') = \frac{2}{\omega'} \text{Im} K'_{\mu\nu}(\omega') \quad (10)$$

si sustituimos ahora (5) en (10) obtenemos

$$b^{-2-d+\eta-z} G_{\mu\nu}(\omega) = \frac{2}{\omega'} \text{Im} K'_{\mu\nu}(\omega') \quad (11)$$

y sustituyendo (9)

$$b^{-2-d+\eta-z} \frac{z}{\omega} \operatorname{Im} \chi_{\mu\nu}(\omega) = \frac{z}{\omega'} \operatorname{Im} \chi'_{\mu'\nu'}(\omega') \quad (12)$$

, si además tenemos en cuenta que la frecuencia de transformación

$$\omega' = b^z \omega \quad (13)$$

(12) se convierte en

$$b^{-2-d+\eta} \operatorname{Im} \chi_{\mu\nu}(\omega) = \operatorname{Im} \chi'_{\mu'\nu'}(\omega') \quad (14)$$

Y como el factor debido a la delta aparece aquí igual que en (6), el resultado final será

$$\chi'(q', \omega') = b^{-2+\eta} \chi(q, \omega) \quad (15)$$

.(8) y (15) son los resultados utilizados en la literatura.

Apéndice, I.B.Hipótesis Adiabática

Vamos a desarrollar con más detalle los cálculos que intervienen en esta hipótesis, que es una suposición sobre la función de distribución en $t = -\infty$, y que consiste en suponer que en ese instante no ha aparecido la perturbación ocasionada por L_I , lo que explicitamos en la forma

$$\rho(\psi, -\infty) = \rho^0(\psi, -\infty) \quad (\text{I.B.1})$$

En primer lugar tenemos que la ecuación de Fokker-Planck para $\rho(\psi, t)$ es

$$\frac{\partial \rho(\psi, t)}{\partial t} = L^+ \rho(\psi, t) \quad (\text{I.B.2})$$

y su solución formal es

$$\rho(\psi, t) = V(t, t') \rho(\psi, t') \quad (\text{I.B.3})$$

donde $V(t, t')$ es el operador que nos da la evolución explícita en el tiempo. Si L^+ no tiene dependencia explícita en t , $V(t, t')$ resulta ser

$$V(t, t') = e^{L^+(t-t')} \quad (\text{I.B.4})$$

El operador de evolución dinámica $U(t, t')$ en la imagen operacional (San Miguel, 1.978) se define a través de

$$A(\psi(t), \tilde{\varphi}(t), t) = U(t, t') A(\psi(t'), \tilde{\varphi}(t'), t') U(t', t) \quad (\text{I.B.5})$$

e igual que antes se puede expresar en la forma

$$U(t,t') = e^{L(t-t')} \quad (\text{I.B.6})$$

Vemos pues que

$$V(t,t') = U^\dagger(t,t') \quad (\text{I.B.7})$$

La transformación entre la imagen libre operacional y la de Interacción viene dada por el operador $S(o,t)$ en la forma

$$A(\psi(t), \hat{\psi}(t), t) = S(o,t) A(\psi^o(t), \hat{\psi}^o(t), t) S(t,o) \quad (\text{I.B.8})$$

con una representación de $S(o,t)$ en la forma

$$S(o,t) = U(t,o) \cdot U_o(o,t) \quad (\text{I.B.9})$$

U_o es el operador U calculado con L_o .

Tomemos ahora (I.B.3) con $t = o$, $t' = -\infty$ y obtenemos

$$\rho(\psi, o) = (v(o, -\infty) \rho(\psi, -\infty)) \quad (\text{I.B.10})$$

donde sustituimos la hipótesis (I.B.1)

$$\rho(\psi, o) = (v(o, -\infty) \rho^o(\psi, -\infty)) \quad (\text{I.B.11})$$

Volviendo a usar (I.B.3) para el problema libre, (I.B.11) se puede expresar

$$\rho(\psi, 0) = (V(0, -\infty) V_0(-\infty, 0) \rho^0(\psi, 0)) \quad (\text{I.B.12})$$

y teniendo en cuenta (I.B.7)

$$\rho(\psi, 0) = (U^\dagger(0, -\infty) U_0^\dagger(-\infty, 0) \rho^0(\psi, 0)) \quad (\text{I.B.13})$$

y si ahora utilizamos (I.B.9)

$$\rho(\psi, 0) = (S^\dagger(-\infty, 0) \rho^0(\psi, 0)) \quad (\text{I.B.14})$$

donde S^\dagger se define igual que S pero con el operador adjunto de $L_{\mathbf{r}}$. Por medio de (I.B.14) reduciremos los promedios estadísticos con $\rho(\psi, 0)$ a promedios con $\rho^0(\psi, 0)$ y además extenderemos las integraciones temporales a $t = -\infty$.

Apéndice, I.C.Transformadas de Fourier de los Propagadores libres

En primer lugar vamos a calcular la transformada de Fourier del propagador R^0 y para tal fin tomaremos una representación integral para la función escalón $\theta(t, t')$ (Fetter y Walecka, 1.971)

$$\theta(t-t') = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega + i\eta} \quad \eta \rightarrow 0^+ \quad (\text{I.C.1})$$

Puede comprobarse que para $t > t'$, si integramos sobre el circuito del semiplano inferior, encerramos el polo y obtenemos $\theta(t-t') = 1$; y si $t < t'$ integraremos por el sobre el circuito del semiplano superior y obtendremos $\theta(t-t') = 0$.

De acuerdo con la definición de transformada (3.65) y sustituyendo (3.105)

$$R_{\mu\nu}^0(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{i\omega z} \theta(z) \delta_{\mu\nu} e^{ik_{\mu} z} \quad , \quad z = t-t' \quad (\text{I.C.2})$$

y sustituyendo (I.C.1)

$$\begin{aligned} R_{\mu\nu}^0(\omega) &= -\delta_{\mu\nu} \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega_1 z} e^{i\omega z} e^{ik_{\mu} z}}{\omega_1 + i\eta} = -\delta_{\mu\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi i (\omega_1 + i\eta)} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{iz(\omega - \omega_1 - ik_{\mu})} \\ &= -\delta_{\mu\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1 \cdot 2\pi \delta(\omega - \omega_1 - ik_{\mu})}{2\pi i (\omega_1 + i\eta)} = \frac{-\delta_{\mu\nu}}{i(\omega - ik_{\mu} + i\eta)} \Big|_{\eta \rightarrow 0^+} \quad (\text{I.C.3}) \end{aligned}$$

Para la transformada de Fourier de la función de correlación libre (3.106) necesitamos calcular la transformada de

$$\theta(t'-t) e^{\lambda_\nu(t'-t)} \quad (\text{I.C.4})$$

y repitiendo los cálculos obtenemos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz e^{i\omega z} \theta(z) e^{-\lambda_\nu z} = \frac{1}{-\lambda_\nu + i\omega} \quad (\text{I.C.5})$$

Así pues la transformada de (106) será

$$\begin{aligned} G_{\mu\nu}^{\circ}(\omega) &= \frac{\delta_{\mu-\nu}}{a(\mu)} \left\{ -\frac{1}{\lambda_\mu + i\omega} - \frac{1}{\lambda_\nu - i\omega} \right\} = \frac{-\delta_{\mu-\nu} (\lambda_\mu + \lambda_\nu)}{(\lambda_\mu + i\omega)(\lambda_\nu - i\omega)} = \\ &= \frac{-\delta_{\mu-\nu} 2\lambda_\mu}{\lambda_\mu^2 + \omega^2} \quad (\text{I.C.6}) \end{aligned}$$

donde hemos hecho uso de la delta y de (3.102)

Apéndice, I.D.Integrales de las frecuencias

Las integrales que se presentan son del tipo

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{(a^2+w^2)(b+iw)} \quad (\text{I.D.1})$$

que mediante el Teorema de Cauchy de variable compleja se calcularán tomando un contorno sobre el semiplano inferior

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{(a^2+w^2)(b+iw)} = -\frac{1}{2\pi} 2\pi i \sum \text{Re} = -i \sum \text{Re}$$

En el semiplano inferior hay un polo de primer orden en $w = -ia$, luego

$$\text{Re}(w=-ia) = \lim_{w \rightarrow -ia} \frac{w+ia}{(a^2+w^2)(b+iw)} = \lim_{w \rightarrow -ia} \frac{1}{(w-ia)(b+iw)} = \frac{1}{-2ia(b+a)} \quad (\text{I.D.2})$$

y así la integral (I.D.1) será

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{(a^2+w^2)(b+iw)} = \frac{1}{2a(b+a)} \quad (\text{I.D.3})$$

Para el caso $b = 0$, obtenemos el resultado conocido

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dw}{a^2+w^2} = \frac{1}{2a} \quad (\text{I.D.4})$$

Apéndice II.A

Desarrollo de la función de correlación $\gamma(t, t')$

Para mayor sencillez vamos a limitarnos al caso de una dimensión. El punto de partida es cómo calcular la integral del segundo término de (II.1.10)

$$\int_0^t dt' \gamma(t, t') \left\langle \frac{\delta q(t)}{\delta z(t')} \rho(q, t) \right\rangle \quad (\text{II.A.1})$$

En (I.1.30) pudo hacerse gracias a que $\gamma(t, t') = 2D \delta(t, t')$ y entonces era conocida la función respuesta no promediada a tiempos iguales. Pero en este caso $\gamma(t, t')$ no es una delta y por lo tanto hay que encontrar otro camino.

Puesto que mediante el formalismo operacional siempre será fácil obtener las derivadas temporales de $\frac{\delta q(t)}{\delta z(t')}$ a tiempos iguales, podríamos pensar en hacer un desarrollo de Taylor por la izquierda ($t' < t$), en el tiempo t , de la forma

$$\frac{\delta q(t)}{\delta z(t')} = \frac{\delta q(t)}{\delta z(t)} - \frac{d}{dt'} \frac{\delta q(t)}{\delta z(t')} \Big|_{t'=t} (t-t') + \frac{d^2}{dt'^2} \frac{\delta q(t)}{\delta z(t')} \Big|_{t'=t} \frac{(t-t')^2}{2!} + \dots \quad (\text{II.A.2})$$

y dado que $\gamma(t, t')$ ha de ser una función que decaiga fuertemente para $t-t'$ grande, entonces los términos del desarrollo anterior se hacen cada vez menos relevantes.

Sustituyendo (II.A.2) en (II.A.1) llegamos a que

$$(\text{II.A.1}) = \frac{\delta q(t)}{\delta z(t)} \Big|_{t'=t} \cdot \int_0^t dt' \gamma(t, t') \cdot \rho(q, t) - \frac{d}{dt'} \frac{\delta q(t)}{\delta z(t')} \Big|_{t'=t} \cdot \int_0^t (t-t') \gamma(t, t') dt' \rho(q, t) \dots (\text{II.A.3})$$

donde sucesivamente irán apareciendo las derivadas siguientes de $\frac{\delta q(t)}{\delta z(t')}$ en $t' = t$ y los momentos de la función $\gamma(t, t')$

Para el proceso de Ornstein y Uhlenbeck (II.1.62)

$$\gamma(t, t') = \frac{D}{z} e^{-\frac{(t-t')}{z}} \quad (\text{II.A.4})$$

Los coeficientes que aparecen en (II.A.3) serán,

$$\int_0^t dt' \gamma(t, t') = D(1 - e^{-\frac{t}{z}}) \quad (\text{II.A.5})$$

$$\int_0^t dt' (t-t') \gamma(t, t') = Dz \left(1 - \frac{t}{z} e^{-\frac{t}{z}} - e^{-\frac{t}{z}}\right) \quad (\text{II.A.6})$$

donde observamos unos términos transitorios que dependen del tiempo. Si tomamos que t sea del orden de varias veces z , entonces estos términos transitorios se pueden despreciar y así usando (II.A.5 y 6) en (II.A.3) obtenemos

$$(\text{II.A.1}) = D \frac{\delta q(t)}{\delta z(t)} \Big|_{t=t} P(q, t) - Dz \frac{d}{dt} \frac{\delta q(t)}{\delta z(t)} \Big|_{t=t} P(q, t) + \dots \quad (\text{II.A.7})$$

,lo que es equivalente a suponer que la función $\gamma(t, t')$ es desarrollable en una delta y sus derivadas, de la forma

$$\gamma(t, t') = zD \left\{ \delta(t-t') + z \frac{d}{dt'} \delta(t-t') + \dots \right\} \quad (\text{II.A.8})$$

donde se aprecia claramente que el orden cero no es más que la aproximación de ruido blanco.

Por lo tanto la interpretación de (II.A.8) es la anteriormente desarrollada (II.A.7) y que corresponde a prescindir de los términos transitorios. En el caso de tener una expresión diferente de (II.A.4) para $\gamma(t, t')$, el desarrollo (II.A.8) seguiría siendo válido pero los coeficientes serían los momentos de $\gamma(t, t')$.

El desarrollo (II.A.8) es verdaderamente atrayente y conduce a interpretar la función de correlación $\gamma(t, t')$ como una distribución, lo que ciertamente se le adapta mejor y permite un estudio más profundo de la misma mediante la Teoría de Distribuciones.

La deducción presentada aquí no es la única. Al mismo resultado se llega integrando por partes (II.A.1) y despreciando términos transitorios. Un desarrollo parecido, desde otro punto de vista, puede encontrarse en Wodkiewicz (1.979).

Es también fácil ver como aparece el desarrollo (II.A.8) en el contexto de la teoría de distribuciones. Supongamos que tenemos una función $f(x)$ desarrollable por Taylor y una distribución $\gamma(x)$ que tiene todos sus momentos, y que queremos calcular la siguiente integral

$$\int_D f(x) \gamma(x) dx \quad (\text{II.A.9})$$

donde D es el dominio de integración. En estas circunstancias $\gamma(x)$ admite el desarrollo siguiente

$$\gamma(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{n!} \delta^n(x) \quad (\text{II.A.10})$$

donde a_n es el momento de orden n de la distribución $\gamma(x)$.

La demostración es muy simple: basta sustituir el desarrollo de $f(x)$

$$f(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{b_m}{m!} x^m \quad ; \quad b_m = \left. f^{(m)}(x) \right|_{x=0} \quad (\text{II.A.11})$$

en (II.A.9), y comparar con lo que sucede en el caso que sustituyamos $\gamma(x)$ por el desarrollo (II.A.10). En ambos casos obtenemos una identidad si usamos la siguiente prescripción para las derivadas de la delta.

$$\int_D f(x) \delta^n(x) dx = (-1)^n \int_0 f^n(x) \delta(x) dx \quad (\text{II.A.12})$$

Apéndice II.B

Evaluación de las derivadas temporales de la función
Respuesta no promediada a tiempos iguales.

En el capítulo 1 de la Parte I llegamos a una expresión para la cantidad $\frac{\delta q_\rho(t)}{\delta z_\alpha(t')}$ (ecuación I.1.17) que era

$$\frac{\delta q_\rho(t)}{\delta z_\alpha(t')} = \theta(t-t') \left[q_{\rho\alpha}(\vec{q}(t')) \hat{q}_\rho(t'), q_\rho(t) \right] \quad (\text{II.B.1})$$

y en el límite $t' \rightarrow t^-$ obteníamos (I.1.34)

$$\frac{\delta q_\rho(t)}{\delta z_\alpha(t)} = q_{\rho\alpha}(\vec{q}(t)) \quad (\text{II.B.2})$$

Para evaluar la primera derivada de II.B.1 hemos de utilizar (I.1.41) y tomando $t > t'$ tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\delta q_\rho(t)}{\delta z_\alpha(t')} &= \left[\frac{d}{dt} q_{\rho\alpha}(\vec{q}(t')) \hat{q}_\rho(t'), q_\rho(t) \right] = \\ &= \left[\left[L(\vec{q}(t), \hat{\vec{q}}(t)), q_{\rho\alpha}(\vec{q}(t')) \hat{q}_\rho(t') \right], q_\rho(t) \right] = \\ &= \left[\left[(V_\sigma(\vec{q}(t)) + z_\delta(t) g_{\sigma\gamma}(\vec{q}(t))) \hat{q}_\sigma(t'), q_{\rho\alpha}(\vec{q}(t')) \hat{q}_\rho(t') \right], q_\rho(t) \right] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left[V_{\sigma}(\vec{q}(t)) \frac{\partial}{\partial q_{\rho}(t)} g_{\rho\alpha}(\vec{q}(t)) \hat{q}_{\rho}(t) - \frac{\partial V_{\sigma}(\vec{q}(t))}{\partial q_{\rho}(t)} g_{\rho\alpha}(\vec{q}(t)) \hat{q}_{\rho}(t), q_{\rho}(t) \right] + \\
&+ \zeta_{\gamma}(t) \left[g_{\sigma\gamma}(\vec{q}(t)) \frac{\partial g_{\rho\alpha}(\vec{q}(t))}{\partial q_{\sigma}(t)} \hat{q}_{\rho}(t) - \frac{\partial g_{\sigma\gamma}(\vec{q}(t))}{\partial q_{\rho}(t)} g_{\rho\alpha}(\vec{q}(t)) \hat{q}_{\rho}(t), q_{\rho}(t) \right] \quad (\text{II.B.3})
\end{aligned}$$

Como podemos observar el segundo término contiene la fuerza estocástica.

Particularizando ahora a $t' \rightarrow t^-$ tenemos

$$\left. \frac{d}{dt'} \frac{\delta q_{\rho}(t)}{\delta \zeta_{\alpha}(t')} \right|_{t'=t} = M_{\rho\alpha}(\vec{q}(t)) + K_{\beta\gamma\alpha}(\vec{q}(t)) \zeta_{\beta}(t) \quad (\text{II.B.4})$$

donde

$$M_{\rho\alpha} = V_{\rho} \frac{\partial}{\partial q_{\rho}} g_{\rho\alpha} - \frac{\partial V_{\rho}}{\partial q_{\rho}} g_{\rho\alpha} \quad (\text{II.B.5})$$

$$K_{\beta\gamma\alpha} = g_{\rho\gamma} \frac{\partial g_{\rho\alpha}}{\partial q_{\rho}} - \frac{\partial g_{\rho\gamma}}{\partial q_{\rho}} g_{\rho\alpha} \quad (\text{II.B.6})$$

donde podemos observar que $K_{\beta\gamma\alpha} = -K_{\beta\alpha\gamma}$

Dada la complejidad, debida a los índices, del cálculo de la segunda derivada respecto de t' , vamos simplemente a dar su resultado para una dimensión (San Miguel y Sancho, 1.979b), siendo el procedimiento de obtención el mismo

$$\begin{aligned}
\left. \frac{d^2}{dt'^2} \frac{\delta q(t)}{\delta \zeta(t')} \right|_{t'=t} &= V^2(q(t)) \left(v(q(t)) \left(\frac{g(q(t))}{V(q(t))} \right)' \right)' - \\
&- g^2(q(t)) \left(g(q(t)) \left(\frac{V(q(t))}{g(q(t))} \right)' \right)' \zeta(t) \quad (\text{II.B.7})
\end{aligned}$$

Apéndice II.CExplicitación de $M_{\beta\alpha}$ y $K_{\beta\gamma\alpha}$

Empecemos por demostrar las ecuaciones (66) con las únicas suposiciones de la existencia de $g_{\mu\nu}^{-1}$ y la condición de holonomía (34).

Tomamos $M_{\beta\alpha}$ de (II.B.15)

$$M_{\beta\alpha} = V_{\beta} \frac{\partial g_{\beta\alpha}}{\partial q_{\beta}} - \frac{\partial V_{\beta}}{\partial q_{\beta}} g_{\beta\alpha} \quad (\text{II.C.1})$$

y multiplicamos a ambos lados por la matriz identidad

$$\begin{aligned} M_{\beta\alpha} &= g_{\beta\sigma} \left(g_{\sigma\mu}^{-1} \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial q_{\beta}} g_{\nu\tau}^{-1} V_{\beta} - g_{\sigma\mu}^{-1} \frac{\partial V_{\beta}}{\partial q_{\beta}} g_{\beta\nu} g_{\nu\tau}^{-1} \right) g_{\tau\alpha} = \\ &= g_{\beta\sigma} \left(g_{\sigma\mu}^{-1} \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial q_{\beta}} g_{\nu\tau}^{-1} V_{\beta} - g_{\sigma\mu}^{-1} \frac{\partial V_{\beta}}{\partial q_{\beta}} \right) g_{\tau\alpha} \end{aligned} \quad (\text{II.C.2})$$

y dado que $\frac{\partial}{\partial q_{\beta}} (g_{\mu\sigma} g_{\sigma\tau}^{-1}) = 0$, y por las condiciones de holonomía llegamos a

$$g_{\sigma\mu}^{-1} \frac{\partial g_{\mu\nu}}{\partial q_{\beta}} g_{\nu\tau}^{-1} = - \frac{\partial g_{\sigma\tau}^{-1}}{\partial q_{\beta}} = - \frac{\partial g_{\sigma\beta}^{-1}}{\partial q_{\tau}}$$

que sustituimos en (II.C.2)

$$\begin{aligned} M_{\beta\alpha} &= -g_{\beta\sigma} \left(\frac{\partial g_{\sigma\beta}^{-1}}{\partial q_{\tau}} V_{\beta} + g_{\sigma\mu}^{-1} \frac{\partial V_{\beta}}{\partial q_{\beta}} \right) g_{\tau\alpha} = \\ &= -g_{\beta\sigma} \frac{\partial}{\partial q_{\beta}} \left(g_{\sigma\beta}^{-1} V_{\beta} \right) g_{\tau\alpha} = -g_{\beta\sigma} \frac{\partial}{\partial q_{\beta}} \left(g_{\sigma\tau}^{-1} V_{\beta} \right) g_{\tau\alpha} \end{aligned} \quad (\text{II.C.3})$$

donde hemos usado el hecho que los índices sumados se pueden cambiar e intercambiar. Primero $\mu \rightarrow \rho$ y luego $\rho \leftrightarrow \gamma$

El procedimiento es exactamente el mismo para demostrar $K_{\rho\gamma\alpha} = 0$.

Haciendo las mismas manipulaciones matemáticas que hasta (II.C.3) llegamos a expresar $K_{\rho\gamma\alpha}$ en la forma

$$K_{\rho\gamma\alpha} = g_{\beta\mu} \left(\frac{\partial}{\partial q_\rho} (g_{\mu\sigma}^{-1} g_{\sigma\gamma}) \right) g_{\rho\alpha} = g_{\beta\mu} \left(\frac{\partial}{\partial q_\rho} \delta_{\mu\gamma} \right) g_{\rho\alpha} = 0, \text{ (II.C.4)}$$

Apéndice II.DTérminos derivados de la derivada de orden tres

Partimos de (71) con $z_\mu = z$

$$A = D^2 z \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} g_{\mu\alpha} \frac{\partial}{\partial q_{\beta}} K_{\beta\gamma\alpha} \frac{\partial}{\partial q_{\gamma}} g_{\gamma\tau} P(\vec{q}, t) \quad (\text{II.D.1})$$

Empezamos conmutando $\frac{\partial}{\partial q_{\beta}}$ con $g_{\mu\alpha}$ entonces

$$A = A_1 + A_2 = \quad (\text{II.D.2})$$

$$= D^2 z \frac{\partial^2}{\partial q_{\mu} \partial q_{\beta}} g_{\mu\alpha} K_{\beta\gamma\alpha} \frac{\partial}{\partial q_{\gamma}} g_{\gamma\tau} P(\vec{q}, t) - D^2 z \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} \left(\frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_{\beta}} \right) K_{\beta\gamma\alpha} \frac{\partial}{\partial q_{\gamma}} g_{\gamma\tau} P(\vec{q}, t)$$

en el sumando correspondiente a A_1 conmutamos $\frac{\partial}{\partial q_{\alpha}}$ con $g_{\mu\alpha} K_{\beta\gamma\alpha}$ y obtenemos

$$A_1 = D^2 z \frac{\partial^3}{\partial q_{\mu} \partial q_{\beta} \partial q_{\alpha}} g_{\mu\alpha} K_{\beta\gamma\alpha} g_{\gamma\tau} P(\vec{q}, t) - D^2 z \frac{\partial^2}{\partial q_{\mu} \partial q_{\beta}} \left(\frac{\partial g_{\mu\alpha} K_{\beta\gamma\alpha}}{\partial q_{\alpha}} \right) g_{\gamma\tau} P(\vec{q}, t) \quad (\text{II.D.3})$$

Hemos de demostrar, pues, que el primer sumando de A_1 es nulo, y en particular la expresión $g_{\mu\alpha} K_{\beta\gamma\alpha} g_{\gamma\tau}$ es idénticamente nula. Para lo cual explicitaremos $K_{\beta\gamma\alpha}$ usando (II.B.16)

$$\begin{aligned} g_{\mu\alpha} K_{\beta\gamma\alpha} g_{\gamma\tau} &= g_{\mu\alpha} \left(g_{\beta\gamma} \frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_{\beta}} - \frac{\partial g_{\beta\gamma}}{\partial q_{\beta}} g_{\mu\alpha} \right) g_{\gamma\tau} = \\ &= g_{\beta\gamma} g_{\mu\alpha} g_{\gamma\tau} \frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_{\beta}} - \frac{\partial g_{\beta\gamma}}{\partial q_{\beta}} g_{\mu\alpha} g_{\gamma\tau} = \\ &= D_{\beta\alpha} g_{\mu\alpha} \frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_{\beta}} - \frac{\partial g_{\beta\gamma}}{\partial q_{\beta}} g_{\mu\alpha} D_{\beta\mu} \end{aligned} \quad (\text{II.D.4})$$

donde $D_{\rho\alpha} = g_{\rho\gamma} g_{\gamma\alpha}^T$ y es una matriz simétrica. Podemos apreciar que esta expresión es antisimétrica en los índices μ, ν que están contraídos con las derivaciones $\frac{\partial^2}{\partial q_\mu \partial q_\nu}$, por lo tanto suponiendo que se dan las condiciones de Schwartz el primer término de A_1 en (II.D.3) es idénticamente nulo, y (II.D.1) quedará

$$A = -D^2 z \frac{\partial^2}{\partial q_\mu \partial q_\nu} \left(\frac{\partial}{\partial q_\alpha} g_{\mu\alpha} k_{\beta\gamma} \right) g_{\beta\gamma} P(\vec{q}, t) - \quad (II.D.5)$$

$$- D^2 z \frac{\partial}{\partial q_\mu} \left(\frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_\beta} \right) k_{\beta\gamma} \frac{\partial}{\partial q_\alpha} g_{\beta\gamma} P(\vec{q}, t)$$

donde vamos a manipular el segundo sumando para reducirlo a una forma más standard en las ecuaciones de Fokker-Planck. Puesto que los índices β y α están sumados los intercambiamos, y a su vez adelantamos la derivación sobre $\frac{\partial}{\partial q_\beta}$ por lo que el segundo término de (II.D.5) quedará reducido a

$$-D^2 z \frac{\partial^2}{\partial q_\mu \partial q_\nu} \left(\frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_\alpha} \right) k_{\beta\gamma} g_{\beta\gamma} P(\vec{q}, t) + D^2 z \frac{\partial}{\partial q_\mu} \left(\frac{\partial}{\partial q_\beta} \left(\frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_\alpha} \right) k_{\beta\gamma} \right) g_{\beta\gamma} P(\vec{q}, t) \quad (II.D.6)$$

que junto con el primero de (II.D.5), A quedaría en la forma

$$A = D^2 z \frac{\partial}{\partial q_\mu} \left(\frac{\partial}{\partial q_\beta} \left(\frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_\alpha} \right) k_{\beta\gamma} \right) g_{\beta\gamma} P(\vec{q}, t) -$$

$$- D^2 z \frac{\partial^2}{\partial q_\mu \partial q_\nu} \left(\left(\frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_\alpha} \right) (k_{\beta\gamma} g_{\beta\gamma} + k_{\beta\gamma} g_{\beta\gamma}) + g_{\mu\alpha} \left(\frac{\partial k_{\beta\gamma}}{\partial q_\alpha} \right) g_{\beta\gamma} \right) P(\vec{q}, t) \quad (II.D.7)$$

que se puede poner en la forma

$$\begin{aligned}
A = D^2 z \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} \left(\frac{\partial}{\partial q_{\beta}} \left(\frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_{\alpha}} k_{\beta\gamma\alpha} \right) \right) q_{\beta\gamma} P(\vec{q}, t) - D^2 z \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} \left(\frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_{\beta}} \right) \left(\frac{\partial}{\partial q_{\alpha}} k_{\beta\gamma\alpha} \right) q_{\beta\gamma} P(\vec{q}, t) - \\
- D^2 z \frac{\partial}{\partial q_{\mu}} g_{\mu\alpha} \frac{\partial}{\partial q_{\beta}} \left(\frac{\partial}{\partial q_{\alpha}} k_{\beta\gamma\alpha} \right) q_{\beta\gamma} P(\vec{q}, t) - \\
- D^2 z \frac{\partial^2}{\partial q_{\mu} \partial q_{\beta}} \left(\left(\frac{\partial g_{\mu\alpha}}{\partial q_{\alpha}} \right) \left(k_{\beta\gamma\alpha} q_{\beta\gamma} + k_{\beta\gamma\alpha} q_{\beta\gamma} \right) \right) P(\vec{q}, t)
\end{aligned}$$

(II.D.8)

donde los dos primeros términos contribuyen al arrastre, el tercero corresponde a la difusión standard y el cuarto término es de nuevo tipo.

Apéndice II.E

Cálculo de M_{ke} y K_{kme} y de la ecuación de Fokker-Planck para el Movimiento Browniano en tres dimensiones.

De la definición de M_{ke} (II.B.15) sustituimos (3.99, 100 y 101)

$$\begin{aligned}
 M_{ke} &= V_m \frac{\partial}{\partial q_{tm}} g_{ke} - \frac{\partial V_k}{\partial q_{tm}} g_{me} = \\
 &= -\frac{1}{\lambda_n} \phi_n \left(\delta_{mn} + \frac{\phi_{mn}}{\lambda_m^2} \right) \frac{\partial}{\partial q_{tm}} \left(\delta_{ke} + \frac{\phi_{ke}}{\lambda_k^2} \right) + \frac{\partial}{\partial q_{tm}} \left(\frac{\phi_r}{\lambda_r} \left(\delta_{kr} + \frac{\phi_{kr}}{\lambda_k^2} \right) \right) \left(\delta_{me} + \frac{\phi_{me}}{\lambda_m^2} \right) = \\
 &= \frac{\phi_{ke}}{\lambda_k} + O(\lambda^{-3}) \tag{II.E.1}
 \end{aligned}$$

Pasamos ahora a calcular K_{kme} . En su expresión (II.B.16) sustituimos (3.99, 100 y 101)

$$\begin{aligned}
 K_{kme} &= g_{rm} \frac{\partial}{\partial q_{tr}} g_{ke} - \frac{\partial g_{km}}{\partial q_{tr}} g_{re} = \\
 &= \left(\delta_{rm} + \frac{\phi_{rm}}{\lambda_r^2} \right) \frac{\partial}{\partial q_{tr}} \left(\delta_{ke} + \frac{\phi_{ke}}{\lambda_k^2} \right) - \frac{\partial}{\partial q_{tr}} \left(\delta_{km} + \frac{\phi_{km}}{\lambda_k^2} \right) \cdot \left(\delta_{re} + \frac{\phi_{re}}{\lambda_r^2} \right) = \\
 &= \left(\delta_{rm} + \frac{\phi_{rm}}{\lambda_r^2} \right) \frac{\phi_{rke}}{\lambda_k^2} - \frac{\phi_{rkm}}{\lambda_k^2} \left(\delta_{re} + \frac{\phi_{re}}{\lambda_r^2} \right) = \\
 &= \frac{1}{\lambda_k^2} \left(\phi_{rme} - \phi_{rum} \right) + \frac{1}{\lambda_k \lambda_r^2} \left(\phi_{rm} \phi_{rke} - \phi_{re} \phi_{rum} \right) \tag{II.E.2}
 \end{aligned}$$

Por la condición de Schwartz el primer término es nulo luego $K_{kme} \sim \lambda^{-4}$ y no contribuye en los órdenes que buscamos.

De acuerdo con (3.77) la función de correlación será para este problema

$$\chi_{ij}(t, t') = 2k_B T \bar{\alpha}_{ij} \left\{ \frac{\delta(t-t')}{\lambda_i} + \frac{1}{\lambda_i^2} \frac{d}{dt'} \delta(t-t') + \dots \right\} \quad (\text{II.E.3})$$

y por lo tanto sustituyendo en (1.65) obtenemos la ecuación de Fokker-Planck

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial q_i} V_i(\vec{q}) P(\vec{q}, t) + \\ & + k_B T \frac{\partial}{\partial q_i} g_{ie}(\vec{q}) \frac{\partial}{\partial q_k} \left\{ \frac{g_{ke}(\vec{q})}{\lambda_e} - \frac{M_{ke}}{\lambda_e^2} \right\} P(\vec{q}, t) \end{aligned} \quad (\text{II.E.4})$$

donde no hemos incluido el término en K_{kme} por no contribuir al orden $O(\lambda^{-3})$.

Sustituyendo ahora las ecuaciones (3.99-100) y (II.E.1) llegamos a

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\phi_j(\vec{q})}{\lambda_j} \left(\delta_{ij} + \frac{\phi_{ij}(\vec{q})}{\lambda_i^2} \right) P(\vec{q}, t) + \\ & + k_B T \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\bar{\alpha}_{ie} + \frac{\phi_{ie}(\vec{q})}{\lambda_i^2} \right) \frac{\partial}{\partial q_k} \left\{ \frac{\delta_{ke}}{\lambda_e} + \frac{1}{\lambda_e \lambda_k} \left(\frac{1}{\lambda_k} - \frac{1}{\lambda_e} \right) \phi_{ke}(\vec{q}) \right\} P(\vec{q}, t) \end{aligned} \quad (\text{II.E.5})$$

que expresamos en la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\phi_i(\vec{q})}{\lambda_j} \left(\delta_{ij} + \frac{\phi_j(\vec{q})}{\lambda_i^2} \right) P(\vec{q}, t) + \frac{k_B T}{\lambda_k} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\delta_{ik} + \frac{\phi_{ik}(\vec{q})}{\lambda_i^2} \right) \frac{\partial}{\partial q_k} P(\vec{q}, t) + \\ & + k_B T \frac{\partial}{\partial q_i} \delta_{ie} \frac{\partial}{\partial q_k} \frac{1}{\lambda_k \lambda_e} \left(\frac{1}{\lambda_k} - \frac{1}{\lambda_e} \right) \phi_{ke}(\vec{q}) P(\vec{q}, t) + O(\lambda^{-5}) \end{aligned} \quad (\text{II.E.6})$$

y es fácil comprobar ahora que este último término es nulo. Luego finalmente obtenemos la ecuación de Fokker-Planck

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\phi_i(\vec{q})}{\lambda_j} \left(\delta_{ij} + \frac{\phi_j(\vec{q})}{\lambda_i^2} \right) P(\vec{q}, t) + \\ & + \frac{k_B T}{\lambda_k} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\delta_{ik} + \frac{\phi_{ik}(\vec{q})}{\lambda_i^2} \right) \frac{\partial}{\partial q_k} P(\vec{q}, t) \end{aligned} \quad (\text{II.E.7})$$

válida hasta orden λ^{-3} (producto de tres λ_i cualesquiera) inclusive. También podemos expresar lo anterior como

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\vec{q}, t)}{\partial t} = & \frac{1}{\lambda_i} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\phi_i(\vec{q}) + k_B T \frac{\partial}{\partial q_i} \right) P(\vec{q}, t) + \\ & + \frac{1}{\lambda_i \lambda_k^2} \frac{\partial}{\partial q_i} \phi_{ik}(\vec{q}) \left(\phi_k(\vec{q}) + k_B T \frac{\partial}{\partial q_k} \right) P(\vec{q}, t) \end{aligned} \quad (\text{II.E.8})$$

donde se aprecia en el segundo término la corrección a la ecuación de Smoluchowski.

Apéndice II.F

Cálculo de la función respuesta $\frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t)}$ con términos transitorios.

La dificultad que se nos presenta ahora es que el desarrollo (1.73) no es aplicable pues no tiene en cuenta que hay memoria.

En primer lugar empezaremos por las siguientes identidades

$$\frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t)} - \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t)} - \left(\frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t)} - \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} \right) = \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t)} - \int_{t'}^t \frac{d}{ds} \left(\frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(s)} \right) ds \quad (\text{II.F.1})$$

Hagamos, dentro de la integral, la siguiente sustitución

$$q(t) = q(s) + O(\kappa^{-2}) \quad (\text{II.F.2})$$

donde lo que se desprecia es de orden κ^{-5} en el cómputo final.

En resumen (II.F.1) se puede escribir en la forma

$$\frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} = \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t)} \Big|_{t'=t} - \int_{t'}^t \frac{d}{ds} \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(s)} \Big|_{t=s} ds + O(\kappa^{-4}) \quad (\text{II.F.3})$$

Aparece ahora una nueva dificultad: cómo obtener $\frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} \Big|_{t'=t}$ y su derivada temporal sino tenemos definida la $g(q(t), t)$ de este problema. Vamos pues a definirla a través de la ecuación de Liouville promediada (3.91) cuyo término difusivo es

$$\frac{\partial^2}{\partial q^2} \int_0^t \sigma'(t,t') \left\langle \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} \delta(q(t)-q) \right\rangle dt' +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial q} \phi''(q) \frac{\partial}{\partial q} \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} dt' \int_{t'}^s \sigma'(s,s') \left\langle \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(s')} \delta(q(t)-q) \right\rangle ds' \quad (\text{II.F.4})$$

y en cuyo segundo término, haciendo un desarrollo similar a (II.F.1), sustituimos $\frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(s')} = \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} + O(\lambda^{-2})$ y obtenemos que éste se puede escribir en la forma

$$\frac{\partial}{\partial q} \phi''(q) \frac{\partial}{\partial q} \int_0^t \sigma'(t,t') dt' \int_{t'}^s e^{-\lambda(s-s')} ds' \left\langle \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} \delta(q(t)-q) \right\rangle =$$

$$= \frac{\partial}{\partial q} \phi''(q) \frac{\partial}{\partial q} \int_0^t \sigma'(t,t') dt' \frac{C(t,t')}{\lambda^2} \left\langle \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} \delta(q(t)-q) \right\rangle \quad (\text{II.F.5})$$

Donde

$$C(t,t') = \lambda^2 \int_{t'}^t ds \int_0^s e^{-\lambda(s-s')} ds' \quad (\text{II.F.6})$$

Sustituyendo (II.F.5) en (II.F.4) obtenemos la siguiente expresión para el término difusivo

$$\frac{\partial^2}{\partial q^2} \int_0^t \sigma'(t,t') \left\langle \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} \delta(q(t)-q) \right\rangle +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial q} \phi''(q) \frac{\partial}{\partial q} \int_0^t \sigma'(t,t') dt' \frac{C(t,t')}{\lambda^2} \left\langle \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} \delta(q(t)-q) \right\rangle \quad (\text{II.F.7})$$

a través del cual podemos definir $g(q(t), t)$ en la forma

$$g(q(t), t, t') = 1 + \phi''(q(t)) \frac{C(t, t')}{\lambda^2} \quad (\text{II.F.8})$$



Teniendo en cuenta ahora que $V(q(t), t)$, de acuerdo con (3.89,a), es

$$V(q(t), t) = -\frac{A(t)}{\lambda} \phi'(q(t)) - \frac{B(t)}{\lambda^3} \phi'(q(t)) \cdot \phi''(q(t)) \quad (\text{II.F.9})$$

podemos calcular $M(q(t), t)$ a partir de (II.B.5) y obtener que

$$M(q(t), t) = \frac{A(t) \phi''(q(t))}{\lambda} + O(\lambda^{-3}) \quad (\text{II.F.10})$$

Por lo tanto la derivada de la función respuesta que aparecen en (II.F.3) es

$$\left. \frac{d}{ds} \frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(s)} \right|_{t=s} = \frac{A(s) \phi''(q(s))}{\lambda} + O(\lambda^{-3}) \quad (\text{II.F.11})$$

Y ahora haciendo uso de (II.F.8 y 11) obtenemos que (II.F.3) se escribe como

$$\frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} = 1 + \phi''(q(t)) \int_{t'}^t \frac{A(s)}{\lambda} ds - \int_{t'}^t \frac{A(s)}{\lambda} \phi''(q(s)) ds + O(\lambda^{-4})$$

donde sustituimos $\phi''(q(s)) = \phi''(q(t)) + O(\lambda^{-2})$ para finalmente obtener que

$$\frac{\delta q(t)}{\delta \bar{z}(t')} = 1 + O(\lambda^{-4}) \quad (\text{II.F.12})$$

tal como pretendíamos.

Referencias

- A.S. Adelman (1.976), J.Chem. Phys. 64, 124
- L. Arnold (1.974), "Stochastic Differential Equations", John Wiley and Sons, New York (1.974)
- L. Arnold, W. Hoethemke and R. Lefever (1.978), Z. Phys, B29, 367
- N.T.J. Bailey (1.964), "The elements of Stochastic Processes", J. Wiley and Sons, Inc.
- M. Barber (1.977), Phy. Rep. 29C , 1
- R. Bausch, H.H. Jansen y M. Wagner (1.976), Z. Phy. B24 , 113
- G. Becus (1.979), Bull. Math. Bio. 41 , 91
- H.C. Brinkman (1.956), Physica. 22 , 29
- S. Chandrasekhar (1.943), Rev. Mod. Phys. 15 , 1
- S. Chaturvedi and F. Shibata (1.979), Z. Physik 35 , 297
- C. De Dominicis, E. Brezin y J. Zinn-Justin (1.975), Phy. Rev. B12 ,(1.945)
- C. De Dominicis y L. Peliti (1.978), Phys. Rev. B18 , 353
- F. de Pascuale y P. Tombesi, (1.979), Phys. Let. 72A , 7
- V. Deker y F. Haake (1.975), Phy. Rev. A11, 2043
- C. P. Enz (1.977), Physica 89A , 1
- C.P. Enz y L. Garrido (1.976), Phys. Rev. A14, 1258
- W. Feller (1.952), Ann. of Math. 55, 468
- R.A. Ferrell, N. Menyhárd, H. Schmidt, F. Schwabl y P. Szépfalusy (1.967), Phys. Rev. Lett. 18, 891
- A. L. Fetter y J. D. Walecka (1.971), "Quantum Theory of Many-Particle Systems" ed. Mc Graw-Hill
- M.E. Fisher (1.974), Rev. Mod. Phys. 46, 597
- R.F. Fox, (1.977a), J. Math. Phys. 18, 2331
- R.F. Fox (1.977b) J. Stat. Phys. 16, 259
- R.F. Fox (1.979), Phys. Rep. 48C, 181
- L. Garrido (1.980), Physica 100A, 140

- L. Garrido, D. Lurié y M. San Miguel (1.979), J. Stat. Phy.
21 , 313
- L. Garrido y J.M. Sancho (1.978), Phys. Lett. 68A, 299
- L. Garrido y M. San Miguel (1.977), Phys. Lett. 62A, 467
- L. Garrido y M. San Miguel. (1.978a), Proy. Theor. Phys. 59, 40,55
- L. Garrido y M. San Miguel (1.978), in "Stochastic Processes
in nonequilibrium Systems". Lecture Notes in
Physics, 84, pp. 287 (Springer Verlag , 1.978).
- I.I. Gihman y A.V. Skorohod (1.979), "Stochastic differential
equations", Springer Verlag (1.979).
- N.S. Goel y N. Richter-Dyn (1.974), "Stochastic Models in
Biology" , Academic Press .
- J. Gomatan (1.974) Bull. Math. Biol. 36, 347
- H. Grabert (1.977), Z. Physik. B27, 95
- R. Graham (1.973), Springer tracts in modern physics, vol. 66
- R. Graham, (1.977), Z. Phys. B26, 397
- M.S. Green (1.952), J. Chem. Phys. 20, 1281
- J.D. Gunton, P. Sahni y M. San Miguel (1.980), "Phase transitions
and Critical Phenomena", ed. Domb and Green, Vol.8
- H. Haken (1.975), Rev. Mod. Phys. 47, 67
- H. Haken (1.977), "Synergetics, An Introduction", Ed. Springer
Verlag.
- B.I. Halperin, P.C. Hohenberg y S.K. Ma (1.972), Phy. Rev.
Lett. 29, 1548
- B.I. Halperin, P.C. Hohenberg y S.K. Ma (1.974), Phy. Rev. B11,139
- B.I. Halperin, P.C. Hohenberg y S.K. Ma (1.976), Phy. Rev. B13,
4119
- B.I. Halperin, P.C. Hohenberg y E.R. Siggia (1.976), Phy. Rev.
B13, 1299
- P. Hänggi (1.978a), Z. Physik B31, 407

- P. Hänggi (1.978b), Z. Phys. B30, 85
- P. Hänggi, H. Thomas, H. Grabert and P. Talkner (1.978),
J. Stat. Phys. 18, 155
- P.C. Hemmer (1.961), Physica, 27, 79
- W. Hess y R. Klein, (1.978), Physica 94A, 71
- P.C. Hohenberg y B.I. Halperin (1.977), Rev. Mod. Phys. 49, 435
- M. Hongler (1.979), Abstracts of "International Conference on
Dynamical Critical Phenomena", pag. 74
- W. Horsthemke (1.978), Tesis doctoral. Universidad libre de
Bruselas.
- W. Horsthemke, M. Malek Mansour (1.976), Z. Phys. B24, 307
- H.K. Jansen (1.976), Z. Phys. B23, 377
- S. Kabashima y T. Kawakubo (1.979), Phys. Lett. 70A, 375
- S. Kabashima, S. Kogure, T. Kawakubo y T. Okada (1.979),
J. Apl. Phy.
- L. P. Kadanoff (1.976), "Phase Transitions and Critical Phenomena", ed. Domb and Green, Vol. 5a
- T. Kawakubo, S. Kabashima y Y. Tsuchiya (1.978), Sup. of
Prof. Theor. Phy. 64, 150
- K. Kawasaki y J. D. Gunton (1.973) Phys. Rev. A8, 2048
- K. Kawasaki y J. Gunton (1.976), Phy. Rev. B13, 4658
- K. Kitahara, W. Horsthemke y R. Lefever (1.979) Phys. Lett.
70A, 377
- H. A. Kramers (1.940), Physica, 7, 284
- R. Kubo (1.963), J. Math. Phys. 4, 174
- Y. Kuramoto (1.974), Prog. Theor. Phys. 51, 1712
- J. S. Languer, M. Bar-on y H. D. Miller (1.975), Phy. Rev. A11,
1417
- K. L. Lee y S. E. Trullinger (1.979), Preprint de la Universidad
de California del Sur (Los Angeles)

- R. Lefever y W. Horsthemke (1.979), Bull. Math. Biol. 41, 469
- D. Lurie (1.968), "Particles and Fields" Ed. Wiley and Sons
- J. Marro, J. Lebowitz y M. Kalos (1.979), Phys. Rev. Lett. 43, 282
- P. C. Martin, E. D. Siggia y H. A. Rose (1.973), Phys. Rev. A8, 423
- R. D. Mattuck (1.967), "A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem" Ed. Mc Graw-Hill.
- R. M. Mazo (1.978) en "Stochastic Processes in Nonequilibrium Systems". Lecture Notes in Physics, 84, p. 54 (L. Garrido, P. Seglar and P. J. Shepherd ed.) Springer Verlag.
- H. Mori (1.965), Prog. Theor. Phys. 33, 423
- J. E. Moyal (1.949) J. Roy. Stat. Soc. B11, 150
- K.S.J. Nordholm y R. Zwanzig (1.975) J. Stat. Phys. 13, 347
- E. A. Novikov, Soviet Phys. JETP 20, 1290 (1.965)
- R. Phytian (1.975) J. Phys. A8, 1423
- H. Risken y H. D. Vollmer (1.978), Z. Phys. B33, 297
- H. Risken y H. D. Vollmer (1.979), Z. Physick B35, 177
- H. Risken, R. Kühne, P. Reineker y H. D. Vollmer (1.979) TH13. Physics Conf. Münster. Spring (1.979) (No publicado)
- D. Ryter, (1.978) Z. Phys. B30, 219
- J. M. Sancho y M. San Miguel (1.979a) Publicado en Z. Phy. 36B, 357 (1.980)
- J. M. Sancho y M. San Miguel (1.979b) II Congreso de Ecuaciones Diferenciales y Aplicaciones (Barcelona, Mayo 1979)
- J. M. Sancho y M. San Miguel (1.979c) Publicado en Prog. Theor. Phys. 63 nº 1 (Enero 1.980)
- J. M. Sancho y M. San Miguel (1.980) "Colored noise effect in Parametric Oscillator" (Preprint de la Universidad de Barcelona, UBTF-3-80)

- M. San Miguel (1.978), Tesis doctoral (Universidad de Barcelona)
- M. San Miguel (1.979), Z. Physik, B33, 307 (1.979)
- M. San Miguel y J.M. Sancho (1.979a), Physica, 99A, 357
- M. San Miguel y J.M. Sancho (1.979b) J. Stat. Phys. 22, 605 (1980)
- M. San Miguel y J.M. Sancho (1.979c), Preprint de la Universidad de Barcelona, UBTF-2-1.980. Aceptada su publicación en Physics Letters A, (1.980)
- M. San Miguel y J.M. Sancho (1.980), "Noise with Finite Correlation Time and Langevin Equations". Contribución en el "Workshop in Instabilities, bifurcations and fluctuations in chemical Systems" Texas.(USA) (Marzo 1.980)
- E. Santos (1.978), "Stochastic Processes in Nonequilibrium Systems", Lecture Notes in Physics, 84 (Eds. L. Garrido, P. Seglar y P.J. Shepherd). Springer Verlag.
- T. Schneider, E.P. Stoll y R. Morf, (1.978) Phys. Rev. B18, 1417
- J.L. Skinner y P.G. Wolynes (1.979), Physica 96A, 561
- R.L. Stratonovich (1.963), "Topics on the Theory of Random Noise" vol. 1. Ed. Gordon and Breachs.
- M. Suzuki (1.973), Prog. Theor. Phys. 50, 1767
- U.M. Titulaer (1.978), Physica 91A
- U.M. Titulaer (1.979), Preprint del Institut für Theoretische Physik A R.W.T.H. Aachen
- K. Tomita, T. Ohta y H. Tomita (1.974), Prog. Theor. Phys. 52, 1744
- S.E. Trullinger, M.D. Miller, R.A. Guyer, A.R. Bishop, F. Palmer, y J.A. Krumhansl (1.978). Phy. Rev. Lett. 40, 206
- C.E. Uhlenbeck y L.S. Orstein (1.930), Phys. Rev. 36, 823
- T.G.M. Van de Ven (1.977), J. Colloid Interface Sci. 62, 352
- N.C. Van Kampen, in Fundamental Problems in Statistical Mechanics III, Ed. E. Cohen. (North Holland, 1.975)

- N.G. Van Kampen (1.976), *Phy. Rev.* 24C, 171 (1.976)
- H.G. Van Kampen (1.978), "Stochastic Processes in Nonequilibrium Systems". *Lecture Notes in Physics*, 84. Springer Verlag, (Ed. L.Garrido, P.Seglar y P.J.Shepherd).
- M.Ch. Wang y G.E. Uhlenbeck (1.945), *Rev. Mod. Phys.* 17, 323
- F.J. Wegner (1.976), *Lecture Notes in Physics*. Springer Verlag Vol. 54.
- G. Wilemski, (1.976), *J. Stat. Phys.* 14, 153
- K. G. Wilson (1.971), *Phy. Rev.* B4, 3174
- K.G. Wilson y J. Kogut (1.974), *Phy. Rep.* Vol. 12, 75
- K. Wodkiewicz (1.979), *J. Math Phys.* 20, 45 (1.979)
- H. Yahata (1.974), *Prog. Theor. Phys.* 52, 871
- T. Yamada, T. Ohta y K. Kawasaki (1.977), *J. Stat. Phys.* 16, 281