



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
INSTITUTO DE FÍSICA
FÍSICA ESTADÍSTICA Y SISTEMAS COMPLEJOS**

EL PROCESO DE KRAMERS Y OTRAS EXTENSIONES EN LA ESFERA

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:
ADRIANO VALDÉS GÓMEZ

TUTOR PRINCIPAL
DR. FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ (IFUNAM)

MIEMBRO DEL COMITÉ TUTOR
DR. HERNÁN LARRALDE RIDAURA (ICFUNAM)

MIEMBRO DEL COMITÉ TUTOR
DR. DENIS BOYER (IFUNAM)

MÉXICO, CIUDAD DE MÉXICO, JUNIO, 2021

A Florencia e Italo

Índice general

Agradecimientos	xv
Resumen	xvii
Abstract	xix
Introducción	xxi
Estructura de la Tesis	xxvii
I Marco Teórico	1
1. Aproximación heurística al movimiento Browniano	3
1.1. Proceso continuo de Markov	5
1.2. Ecuación de Langevin	5
1.3. Ecuación de Fokker-Planck	9
1.4. Procesos temporalmente homogéneos	14
2. Termodinámica y mecánica estadística fuera de equilibrio	19
2.1. Termodinámica irreversible	20
2.1.1. Afinidades y flujos	21
2.1.2. Procesos markovianos en contextos físicos	23
2.1.3. Procesos lineales	24
2.2. Ecuación de Liouville	24
2.3. Ecuación de R. Zwanzig	28
2.4. Ecuación de H. Mori	31
2.5. De la ecuación de Kramers-Klein a la ecuación de Smoluchowski	37
2.6. Teorema Fluctuación-Disipación	40
2.6.1. Funciones de autocorrelación temporales e hipótesis de regresión de Onsager	41
2.6.2. Bosquejo de la demostración del teorema de fluctuación-disipación en el caso clásico	43
2.6.3. Teoría de respuesta en la aproximación lineal	44
2.6.4. Hipótesis de regresión de Onsager y el coeficiente de difusión	46

3. La ecuación de Fokker-Planck en variedades diferenciales	49
3.1. Transformación de los elementos de la ecuación de Fokker-Planck	49
3.2. Constricciones físicas y matemáticas en la ecuación de Fokker-Planck	51
3.3. La ecuación de Fokker-Planck covariante	54
4. Soluciones estacionarias de la ecuación de Fokker-Planck	63
4.1. Balance detallado y la existencia de soluciones estacionarias para la ecuación de Fokker-Planck	63
4.1.1. Ecuaciones de Movimiento	63
4.1.2. Definición de Balance detallado	65
4.1.3. Consecuencias del balance detallado	73
4.1.4. La función de densidad del estado estacionario y las condiciones de potencial	75
4.2. Fluctuaciones y estabilidad de los sistemas estacionarios fuera de equilibrio con balance detallado	77
4.2.1. Propiedades de los estados estacionarios	78
4.2.2. Aproximación al estado estacionario	79
4.2.3. La ecuación de Langevin	81
4.2.4. Ecuaciones fenomenológicas, relaciones de Onsager	81
4.2.5. Estabilidad de las soluciones a las ecuaciones fenomenológicas	82
II Métodos numéricos	83
5. Espectro de algoritmos	85
5.1. Algoritmo para la difusión libre	86
5.2. Algoritmo para la ecuación de Smoluchowski: Incorporación de un campo externo	90
5.3. Algoritmo para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck en \mathbb{S}^2	90
5.4. Obtención de las ecuaciones de Langevin y de Kramers usando el principio de D'Alembert	92
5.4.1. Fuerza disipativa	93
5.4.2. Ruido Blanco	94
5.4.3. Deducción de la Ecuación de Kramers en \mathbb{S}^2	95
5.5. Algoritmo para la ecuación de Kramers	96
III Resultados	99
6. Consolidados	101
6.1. Límite sobrearmortiguado	102
6.1.1. Difusión libre	102
6.1.2. Difusión en presencia de campos externos en el límite sobrearmortiguado; tres ejemplos representativos	106
6.1.3. Ecuación de Fokker-Planck covariante para el caso particular de \mathbb{S}^2 .	110

6.1.4. Estabilidad de los estados estacionarios	125
6.1.5. Método de Euler estocástico	125
6.1.6. Rotaciones equivalentes	128
6.2. Extensión a otros regímenes	130
6.2.1. Proceso de Ornstein-Uhlenbeck en \mathbb{S}^2	130
6.2.2. Proceso de Kramers constreñido a \mathbb{S}^2	133
6.2.3. Solución estacionaria a la ecuación de Kramers	136
7. Exploratorios	153
7.1. Problemas con frontera	153
7.1.1. Obstáculos con distribución uniforme: límite sobreamortiguado	155
7.2. Billar en \mathbb{S}^2	156
7.3. Problemas que dependen del tiempo en el límite sobreamortiguado	157
7.4. El proceso de Kramers: campo externo dependiente del espacio y del tiempo y presencia de obstáculos	160
7.5. Procesos No Markovianos	160
8. Conclusiones y perspectivas	169
IV Apéndices	173
A. Posibles parametrizaciones de \mathbb{S}^2	175
A.0.1. Coordenadas Esféricas	175
A.0.2. Proyección Estereográfica	180
A.0.3. Otra alternativa para parametrizar la esfera	181
B. Un teorema de Riemann	183
C. Algunos resultados en \mathbb{S}^2	185
C.1. Armónicos esféricos	186
C.2. El operador de Laplace-Beltrami	187
C.3. El teorema de Green-Beltrami	188
D. Derivadas funcionales	189
E. Eliminación de variables “rápidas”	191
F. Notación $o(f[x])$ y $O(f[x])$	193
G. Algunos elementos de geometría diferencial	195
H. Código en Python	199

Índice de figuras

2.1. Perfil típico de una función de respuesta o susceptibilidad generalizada χ después de un estímulo $f(t) = f_0 \delta(t - t_0)$, concentrado en un lapso de tiempo muy corto.	46
3.1. En esta figura presentamos los objetos geométricos covariantes que satisfacen una ecuación de continuidad. El cambio de la función escalar $g^{-1/2}P(\mathbf{x}, t \mathbf{x}_0, t_0)$ en la región $\Omega \in \mathbb{M}$ va acompañada de un flujo del vector F^α a través de la frontera $\partial\Omega$, que está parametrizada por $\phi(\mathbf{x}) = 0$ en una vecindad del punto $\mathbf{q} \in \mathbb{M}$, por lo que la uno forma que la caracteriza tiene componentes $n_\alpha := \phi_{,\alpha} \phi_{,\alpha} ^{-1}$. En este trabajo $\mathbb{M} \equiv \mathbb{S}^2$	60
4.1. Potenciales con mínimos no degenerados y degenerados con simetría rotacional en dos dimensiones.	79
5.1. $(\hat{\xi}_1, \hat{\xi}_2, \hat{\xi}_3)$ es una base ortonormal ($\langle \hat{\xi}_a, \hat{\xi}_b \rangle = \delta_{a,b}$) en \mathbf{E}^3 , y en donde pueden estar orientados arbitrariamente; no necesariamente como $(\hat{\xi}_2, \hat{\xi}_3)$ es una base para el espacio tangente $T_{\mathbf{r}_0}\mathbb{S}^2$ a la esfera unitaria \mathbb{S}^2 , en el punto $\mathbf{r}_0 \in \mathbb{S}^2$. En esta imagen \mathbf{r}_f es el vector de posición final después del desplazamiento sobre la geodésica γ	88
5.2. En esta figura mostramos la esencia del reescalamiento de $d\mathbf{r}$ en el que se usa la tangente de la magnitud original, y que esto hace que cuando proyectemos sobre la superficie de la esfera: la distancia sea la misma que si se hubiese rotado al sistema o lo que es equivalente, viajado a lo largo de una geodésica; este arco de círculo máximo.	89
5.3. En esta imagen mostramos una secuencia de actualizaciones del estado del sistema usando nuestro algoritmo. Del lado izquierdo tenemos tres planos tangentes a la esfera por donde pasa nuestra partícula browniana. Parte de \mathbf{r}_0 , con velocidad $\dot{\mathbf{r}}_0$ que vive en el plano tangente a la esfera; $T_{\mathbf{r}_0}\mathbb{S}^2$, se desplaza sobre la geodésica γ_0 , viajando una distancia $\Delta\theta_0$ y llegando al punto \mathbf{r}_1 y así sucesivamente.	91
6.1. En esta imagen presentamos la evolución temporal del histograma de la variable angular θ en azul claro contra la solución analítica 6.2 a la ecuación de Fokker-Planck (o Smoluchowski porque estamos en el régimen sobreamortiguado) en rojo. Para construir esta imagen hemos truncado la solución exacta que está dada por una serie infinita usando sólo los primeros 1000 términos y hemos usado un ensamble de 10,000 partículas para construir esta imagen.	103

6.2. En esta imagen mostramos el primer y segundo momento de la distribución de la coordenada angular de θ , así como la autocorrelación en la posición $\langle \mathbf{n}(t) \cdot \mathbf{n}(0) \rangle = \langle P(\cos \theta) \rangle$	104
6.3. El campo elegido cuyo potencial escalar en la esfera dos dimensional \mathbb{S}^2 , está dado por 6.13 $U(\theta) \propto \cos \theta$, es un campo muy común en física, ya que se puede generar, al menos en electromagnetismo, de manera sencilla. En esta imagen mostramos tres alternativas.	106
6.4. En esta figura mostramos la intensidad de los campos generados por los potenciales en 6.13, como función de las coordenadas angulares θ y ϕ	107
6.5. En la figura del lado izquierdo y en la de en medio presentamos dos instancias de la evolución del histograma de la variable θ ; la condición inicial (distribución uniforme en la esfera) y el estado estacionario que alcanza para el caso en el que la interacción externa está dada por $\lambda Y_1^0(\theta, \phi)$. Hemos graficado este potencial en rojo como función de la coordenada θ . En la figura del lado derecho, las regiones azuladas corresponden a regiones con una interacción repulsiva mientras que las rojas corresponden a regiones hacia las que el sistema se siente atraído.	116
6.6. En esta figura presentamos tres instancias de la evolución de un ensamble de partículas brownianas embebidas en la interacción generada por el potencial escalar $Y_1^0(\theta, \phi)$. El tiempo corre de izquierda a derecha. Para crear la imagen usamos un ensamble de sólo 1,000 partículas; sin embargo, para hacer el análisis estadístico usamos ensambles de 100,000 partículas. Las animaciones se encuentran en el material complementario de este trabajo.	116
6.7. En la figura del lado izquierdo y en la de en medio presentamos dos instancias de la evolución del histograma de la variable θ ; la condición inicial (distribución uniforme en la esfera) y el estado estacionario que alcanza para el caso en el que la interacción externa está dada por $\lambda Y_2^0(\theta, \phi)$. Hemos graficado este potencial en rojo como función de la coordenada θ . En la figura del lado derecho, las regiones azuladas corresponden a regiones con una interacción repulsiva mientras que las rojas corresponden a regiones hacia las que el sistema se siente atraído.	117
6.8. En esta figura presentamos tres instancias de la evolución de un ensamble de partículas brownianas embebidas en la interacción generada por el potencial escalar $\lambda Y_2^0(\theta, \phi)$. El tiempo corre de izquierda a derecha. Para crear la imagen usamos un ensamble de sólo 1,000 partículas; sin embargo, para hacer el análisis estadístico usamos ensambles de 100,000 partículas. Las animaciones se encuentran en el material complementario de este trabajo.	117
6.9. En la figura del lado izquierdo y en la de en medio presentamos: dos instancias de la evolución del histograma de la variable θ ; la condición inicial (distribución uniforme en la esfera) y el estado estacionario que alcanza para el caso en el que la interacción externa está dada por $\lambda Y_3^0(\theta, \phi)$. Hemos graficado este potencial en rojo como función de la coordenada θ . En la figura del lado derecho, las regiones azuladas corresponden a regiones con una interacción repulsiva mientras que las rojas corresponden a regiones hacia las que el sistema se siente atraído.	118

- 6.10. En esta figura presentamos tres instancias de la evolución de un ensamble de partículas brownianas embebidas en la interacción generada por el potencial escalar $\lambda Y_3^0(\theta, \phi)$. El tiempo corre de izquierda a derecha. Para crear la imagen usamos un ensamble de sólo 1,000 partículas; sin embargo, para hacer el análisis estadístico usamos ensambles de 100,000 partículas. Las animaciones se encuentran en el material complementario de este trabajo.

6.11. En esta figura, en la parte de arriba presentamos el histograma de la variable ϕ . Como debiese ser obvio fijándonos en el potencial; el cual no depende de la coordenada θ : tendremos, para todo tiempo, una distribución uniforme en ϕ . Ésta se ha indicado con una línea roja. La probabilidad es $U(\phi) = 1/2\pi \forall \phi$. Como el proceso no es estático habrá pequeñas fluctuaciones; son las diferencias del histograma normalizado con respecto este valor; esta línea. En la imagen de abajo, presentamos una vista desde arriba de los tres potenciales utilizados en las simulaciones. Todos ellos tienen simetría azimutal y por eso la distribución para todo tiempo es uniforme en ϕ . De la misma forma que en la figuras anteriores, las regiones azules corresponden a regiones repulsivas mientras que las rojas corresponden a regiones a las que se sentirá atraído el sistema o las partículas del ensamble.

6.12. En esta imagen presentamos el promedio o media de la variable θ como función del tiempo (izquierda) y la varianza (inset) de esta misma variable como función del tiempo. En la figura del lado derecho las autocorrelaciones en la posición para las diferentes interacciones en 6.17. La distribución inicial es la distribución uniforme en la esfera. Se presenta el comportamiento de los 3 potenciales.

6.13. Evolución hacia los estados de equilibrio para cada una de las interacciones. Para el tercer caso, el sistema queda atrapado en un estado meta estable, que depende de la distribución inicial de partículas; en este caso, la distribución uniforme. El tiempo que se tarda en alcanzar el verdadero estado estacionario, que se muestra en la imagen (d) es exponencialmente grande y depende de la altura de la barrera de potencial.

6.14. Estados estacionarios para diferentes λ (30 casos de 0, sin interacción en color rojo, a 10.35 con incrementos de 0.35), fijando D , para las tres interacciones consideradas en este trabajo.

6.15. Soluciones analíticas de la ecuación estacionaria de Fokker-Planck para los dos primeros potenciales $\lambda Y_1^0(\theta, \phi)$ y $\lambda Y_2^0(\theta, \phi)$, histograma en verde, graficados contra las soluciones analíticas 6.68 y 6.69. Como puede apreciarse, salvo pequeñas fluctuaciones: la coincidencia es excelente. Esto quiere decir que la geometría o restricción del problema fue tomada en cuenta adecuadamente.

6.16. De el lado izquierdo presentamos la solución analítica a la ecuación estacionaria de Fokker-Planck para el tercer potencial $\lambda Y_3^0(\theta, \phi)$, histograma en verde, contra las solución analítica en 6.70, cuando partimos de la distribución uniforme. Como puede apreciarse, salvo pequeñas fluctuaciones: la coincidencia es excelente. De el lado derecho presentamos el verdadero estado estacionario que se alcanzaría para tiempos suficientemente grandes. Sin embargo, el tiempo necesario para ello es exponencialmente grande.

6.17. En esta imagen mostramos los puntos de retorno que son necesarios considerar para poder obtener el estado estacionario asociado al estado meta estable en la Eq. (6.71) en el lado izquierdo. En el lado derecho es el punto de retorno aproximado que se debería usar para el potencial λY_2^0 si es que, en lugar de empezar con la distribución uniforme, empezáramos con todas las partículas inicialmente en $\theta = 0$	124
6.18. En esta imagen presentamos la evolución temporal del histograma de la variable angular θ en azul claro contra la solución analítica 6.2 a la ecuación de Fokker-Planck (o Smoluchowski porque estamos en el régimen sobreamortiguado) en rojo. Para construir esta imagen hemos truncado la solución exacta que está dada por una serie infinita usando sólo los primeros 1000 términos y hemos usado un ensamble de 10,000 partículas para construir esta imagen.	131
6.19. En esta imagen presentamos la evolución temporal del histograma de la variable angular θ en azul claro contra la solución analítica 6.2 a la ecuación de Fokker-Planck (o Smoluchowski porque estamos en el régimen sobreamortiguado) en rojo. Para construir esta imagen hemos truncado la solución exacta que está dada por una serie infinita usando sólo los primeros 1000 términos y hemos usado un ensamble de 10,000 partículas para construir esta imagen.	134
6.20. Histogramas del proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 10^{-3}$	135
6.21. Histogramas del proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 10^{-2}$	135
6.22. Histogramas del proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 10^{-1}$	136
6.23. Secuencia de tiempos para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 1$	137
6.24. Histogramas del proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 1$	138
6.25. Histogramas del proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 10^1$	138
6.26. En esta imagen presentamos la evolución temporal del histograma de la variable angular θ en azul claro contra la solución analítica 6.2 a la ecuación de Fokker-Planck (o Smoluchowski porque estamos en el régimen sobreamortiguado) en rojo. Para construir esta imagen hemos truncado la solución exacta que está dada por una serie infinita usando sólo los primeros 1000 términos y hemos usado un ensamble de 10,000 partículas para construir esta imagen.	139
6.27. Histogramas del proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 10^2$	140
6.28. Simulación cuando $\gamma \approx O(10^3)$, y se cumplen las condiciones del límite sobreamortiguado. El comportamiento de esta variable es el mismo que si hubiésemos usado la versión del algoritmo numérico para la ecuación de Smoluchowski con interacciones nulas.	140
6.29. Comparación de las funciones de autocorrelación de la posición, para 6 órdenes de magnitud diferente en la constante de fricción γ	141
6.30. Comparación de las funciones de autocorrelación de la velocidad, para 6 órdenes de magnitud diferente en la constante de fricción γ	141
6.31. Comparación de las funciones de autocorrelación de la posición ya la velocidad, para 7 órdenes de magnitud diferente en la constante de fricción γ . La imagen del lado derecho está en escala logarítmica.	142
6.32. Dinámica hacia los estados estacionarios para el proceso de Kramers, cuando los parámetros son tales que definen el límite sobreamortiguado.	142
6.33. Estados estacionarios para el proceso de Kramers, cuando los parámetros son tales que definen el límite sobreamortiguado.	146

6.34. Estadística de los primeros momentos y de las autocorrelaciones, para el proceso de Kramers, en el límite sobreamortiguado, para las tres interacciones consideradas en este trabajo.	146
6.35. En esta figura presentamos el péndulo esférico y el potencial efectivo Eq. (6.120), cuando la energía inicial es . Pusimos el cero de la energía en $z = 0$, razón por la cual hay energías negativas en la gráfica del potencial. P.R. denota los puntos de retorno para la energía inicial particular dada E_0 , los cuales están definidos por la intersección de la curva de potencial con la recta horizontal de la energía total inicial y definen la región donde es físicamente posible el movimiento.	148
6.36. En esta figura comparamos la solución obtenida usando el método de Euler para integrar las ecuaciones de Euler-Lagrange asociadas al péndulo esférico, en color azul, contra las soluciones obtenidas con nuestro método geométrico en color rojo. Pocos pasos después el método de Euler explota, mientras que el algoritmo geométrico no explota y permanece en la región permitida $[\theta_{\min}, \theta_{\max}]$, mucho más tiempo. El tamaño de paso que se utilizó en estas simulaciones fue $dt = \log 2 \times 10^{-3}$	149
6.37. En esta figura comparamos la solución obtenida usando el método de Euler para integrar las ecuaciones de Euler-Lagrange asociadas al péndulo esférico, en color azul, contra las soluciones obtenidas con nuestro método geométrico en color rojo y junto con las soluciones usando el método de Runge-Kutta de orden 4 en negro. Al principio, los tres métodos coinciden, después el método de Euler se degrada primero, posteriormente el método de Runge-Kutta de orden 4 también explota y se sale de la región físicamente permitida. mientras que el algoritmo geométrico no explota y permanece en la región permitida $[\theta_{\min}, \theta_{\max}]$, mucho más tiempo. El tamaño de paso que se utilizó en estas simulaciones fue $dt = \log 2 \times 10^{-3}$	149
6.38. En esta serie presentamos la evolución temporal de dos péndulos esféricos, uno simulado con el método de Euler (azul) y el otro con nuestro método geométrico (rojo). Para tiempos cortos la congruencia es bastante buena; empero, para tiempos largos (últimas 4 imágenes) el método de Euler aplicado a las ecuaciones de Euler-Lagrange Eq. (6.118) explota, mientras que el método geométrico se degrada pero nunca explota.	150
7.1. Secuencia de obstáculos (monotónica creciente); varios múltiplos de 50. Mostramos esta serie con la finalidad de apreciar cualitativamente cómo varían los tiempos de relajación, conforme se varía el número de obstáculos.	154
7.2. En esta gráfica presentamos la relación que hay entre el coeficiente de difusión efectivo D_{ef} , y la densidad superficial de obstáculos σ . Debido a que el comportamiento en (7.1.1) parece tipo exponencial, hemos hecho un ajuste lineal.	156
7.3. En esta imagen presentamos los elementos necesarios para construir el algoritmo que considera colisiones elásticas. Cuando parte del recorrido de una partícula del ensamble atraviesa o intercepta un obstáculo, este pedazo de geodésica tiene que ser re orientado a partir del punto de contacto, de tal manera que la nueva geodésica tenga un vector tangente que haga el mismo ángulo, con respecto la normal, que el ángulo de incidencia; esto es, reflejado con respecto a esta dirección normal a la frontera del obstáculo en el punto de contacto.	157

7.4.	En esta serie presentamos la evolución temporal de un campo armónico en el tiempo, con simetría azimutal $U(\theta, t) = U_0 \cos \omega t \cos 8\theta$, con $\omega = 0,5$	158
7.5.	En esta serie presentamos la evolución temporal de un campo armónico en el tiempo, con simetría azimutal $U(\theta, t) = \sin \omega t \sin 8\theta$	159
7.6.	Secuencia de tiempos para el proceso de Kramers cuando tenemos 8 obstáculos y un campo externo oscilante en el tiempo. Los parámetros utilizados en esta simulación fueron $dt = \log(2) \times 10^{-3}$, $T = 300$, $K_b/m = 9,3783$, $\gamma = 1000$ y $\lambda = 2\sqrt{2*D} \times 10^4$	161
7.7.	Continuación de la secuencia de tiempos para el proceso de Kramers cuando tenemos 8 obstáculos y un campo externo oscilante en el tiempo. Los parámetros utilizados en esta simulación fueron $dt = \log(2) \times 10^{-3}$, $T = 300$, $K_b/m = 9,3783$, $\gamma = 1000$ y $\lambda = 2\sqrt{2*D} \times 10^4$	162
7.8.	Histogramas para las coordenadas θ y ϕ del proceso de Kramers cuando hay un campo externo que depende del tiempo y hay 8 obstáculos o regiones prohibidas. Las imágenes de arriba (a) y (b) es para tiempos cortos, mientras que las de abajo (c) y (d) es la evolución completa. El tamaño del paso que se usó en estas simulaciones fue $dt = 10^{-2}$, la intensidad del campo $U_0 = 8000$, $K_bT/m^2 = 100$, y la velocidad inicial $\mathbf{v}_0 = 10\hat{\mathbf{x}}$	163
7.9.	Secuencia de tiempos para el proceso de Kramers cuando tenemos 8 obstáculos y un campo externo oscilante en el tiempo en el régimen subamortiguado.	164
7.10.	Secuencia de tiempos para el proceso de Kramers cuando tenemos 8 obstáculos y un campo externo oscilante en el tiempo en el régimen subamortiguado.	165
7.11.	Funciones de autocorrelación para la posición y la velocidad, en el procesos de Kramers con un campo externo que depende del tiempo, hay 8 obstáculos en el régimen subamortiguado.	166
7.12.	Las velocidades $\mathbf{v}_k = \dot{\mathbf{r}}_k$ viven en espacios vectoriales diferentes $\mathbb{T}_{\mathbf{r}_k}\mathbb{S}^2$, razón por la cual, en principio no pueden ser sumados o combinados. Al considerar <i>kernels de memoria</i> en la esfera dos dimensional \mathbb{S}^2 , es necesario tener esto en cuenta, aunque el algoritmo trabaje con elementos de \mathbb{R}^3 , en donde podríamos pensar que todas las velocidades pertenecen al mismo espacio vectorial.	167
A.1.	Proyección estereográfica entre los puntos de una esfera \mathbf{S}^n y \mathbf{E}^n . En el contexto particular de este trabajo n=2.	180
A.2.	En esta figura mostramos cómo son necesarias 6 cartas para cubrir la esfera \mathbb{S}^2 . Como las cartas están constituidas por una pareja (U_α, ϕ_α) de un abierto y un homeomorfismo; biyección con inversa continua: los cascarones de arriba y abajo dejan todo el meridiano sin cubrir, para poder cubrir éste usamos los dos cascarones de la izquierda y de la derecha, pero éstos dejan dos puntos de este meridiano, y necesitamos los dos cascarones de adelante y atrás para cubrir estos dos puntos. . .	182

Agradecimientos

Quiero expresar mi más sincero agradecimiento al Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez por todo su apoyo y guía a lo largo de todo este trabajo que realicé durante el doctorado. Agradecerle, en particular, toda la disposición que mantuvo para que pudiese concluir este proceso. Por supuesto, la forma que tomó al final el trabajo no hubiese sido posible sin las críticas y sugerencias de las siguientes personas: Dr. Denis Boyer, Dr. Hernán Larralde Ridaura, Dr. David P. Sanders, Dr. Pavel Castro, Dr. Guillermo Chacón y Dr. Rosalío Fernando Rodríguez. Les agradezco a todos ustedes por las críticas constructivas que me hicieron.

Yo no hubiese tenido la oportunidad de realizar este trabajo durante todo este tiempo sin el apoyo de mi familia. Les agradezco la paciencia que me tuvieron y todo el tiempo que esta actividad restó a nuestra convivencia. Agradecerle explícitamente a Florencia Fernández Barocio, la cual me apoyó incondicionalmente para abrirle los tiempos y los espacios necesarios en los que realicé este doctorado, así como su lectura del trabajo que ayudó a localizar innumerables errores ortográficos y de sintaxis. Por supuesto, todos aquellos que sobreviven son responsabilidad mía. También quiero agradecer a Tecelli Domínguez Martínez y a Bernardo Berruecos Frank por todo el apoyo para cuidar, en múltiples ocasiones, a mi hijo Italo mientras yo estaba realizando este trabajo.

Agradezco a María Luisa Araujo Galindo, Ing. Jazmín Acosta Reza, M. en I. Silvia Núñez Corona, María Isabel Mendoza Romero, al Dr. Reyes Esqueda y al nuevo coordinador Dr. Alberto Güijosa Hidalgo, porque todos ustedes me ayudaron a transitar y resolver mis múltiples necesidades relacionadas con mis estudios de maestría y doctorado.

Esta investigación fue realizada gracias a una beca de CONACyT y al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM IN110120. Agradezco al CONACyT y a la DGAPA-UNAM las becas recibidas.

Debiese ser obvio que, aunque soy el “protagonista” principal de este trabajo, éste no hubiese sido posible sin el apoyo, en *múltiples* ocasiones, por parte de mis padres Jesús Valdés Martínez y Mayra Adriana Gómez Alvarado; tíos, en particular Sara Esther Valdés Martínez y Roberto Arnulfo Cervantes Olivares; y múltiples amigos que, en general siempre han Enriquecido mi vida, y aunque quizá haya una asimetría en el cariño que nos tenemos: son demasiados para citarlos aquí, pero ellos saben perfectamente quiénes son. Sólo mencionaré explícitamente a Alejandro Pérez Romero porque pensó, cuando me titulé de la licenciatura, que no estaba en esa lista de grandes camaradas y por supuesto lo estaba y sigue estando.

Resumen

En este trabajo desarrollamos métodos numéricos con la finalidad de resolver la ecuación de Kramers cuando el movimiento está restringido a la superficie de la esfera. Los métodos actualizan las variables dinámicas (posiciones y velocidades), y generan un ensamblaje de posibles evoluciones o historias en el espacio fase, con las cuales se hace un análisis estadístico. Partimos de escenarios sencillos en los que se pueden validar los métodos numéricos; en particular, que los efectos de la curvatura se incorporan de manera consistente y de ahí generalizamos a escenarios cada vez más complicados.

Comenzamos en el límite sobreamortiguado resolviendo la ecuación de difusión en la esfera. Posteriormente, incorporamos un campo externo acoplado linealmente, lo que es equivalente a resolver la ecuación de Smoluchowski. En este caso validamos los efectos de la curvatura usando las soluciones analíticas que obtuvimos para los estados estacionarios (distribuciones de tipo Boltzmann-Gibbs), para tres campos externos comunes en física. De ahí, generalizamos los métodos para poder resolver el proceso de Ornstein-Uhlenbeck (donde la fuerza disipativa es lineal en la velocidad y el ruido es gaussiano). En este caso validamos que cuando la constante de fricción es cero, lo que se tiene en realidad es un sistema dinámico constreñido a la esfera, y por lo tanto el método debe integrar estas ecuaciones de movimiento. Posteriormente hicimos un análisis de cómo varían los histogramas, los dos primeros momentos de la posición de las variables angulares y las funciones de correlación de la posición y de la velocidad, en un rango de 7 órdenes de magnitud. Desde el régimen subamortiguado hasta el régimen sobreamortiguado, en el que se recupera el comportamiento descrito por la ecuación de difusión para las posiciones. Posteriormente, incorporamos un campo externo lo cual equivale a resolver la ecuación de Kramers. En este caso validamos los resultados cuando los campos externos son los mismo que usamos en la ecuación de Smoluchowski y cuando los valores de los parámetros definen el límite sobreamortiguado. En la última parte estudiamos el caso en el que el campo externo no sólo dependía de la posición de la partícula, sino que también dependía del tiempo. Por simplicidad, consideramos la dependencia temporal armónica en el tiempo. En la última parte, colocamos una serie de obstáculos para estudiar cuál es el efecto de restringir ciertas áreas de la esfera, analizando las distribuciones de las coordenadas angulares así como sus autocorrelaciones. Consideramos las colisiones con estos obstáculos como inelásticas, aunque también sugerimos las adaptaciones necesarias para considerar colisiones elásticas, lo que resulta como un “billar” en la esfera, así como las adaptaciones para considerar dinámicas no locales en el tiempo (fricciones definidas a través de *kernels* de memoria).

Abstract

In this work we designed a set of numerical algorithms to solve the stochastic dynamics of the Kramers process when this is restricted to the surface of a two dimensional sphere. The methods update the system's dynamical variables (position and velocities), and generate an ensemble of possible configurations in phase space from where it is extracted the statistics. We departed from simple scenarios where it is possible to validate the numerical methods, in particular to validate that the effects of curvature are taken into account consistently, and from there we generalized to more complicate scenarios.

We started in the over damped limit solving the diffusion equation. Then we added an external field coupled linearly and the problem defined is equivalent to solve the Smoluchowski equation. In this case we validated the effects of curvature using the analytical solutions we obtained to the stationary states (Boltzmann-Gibbs like distributions), for three different external fields ubiquitous in physics. From there, we generalized the numerical methods in order to solve the Ornstein-Uhlenbeck process (in which the dissipative force is linear in the velocity and the noise is gaussian). In this case we validated that when the friction constant is zero what we actually have is a dynamical system restricted to the surface of the sphere and therefore the numerical method has to integrate these differential equations. Then we analyzed how the histograms, the first two moments of the angular coordinates, as well as the autocorrelation functions of the position and the velocity change as we varied seven orders of magnitude the friction constant, from the under damped regime to the over damped regime in which we recovered the behavior of the diffusion equation. Then we moved to incorporate an external field in the dynamics, which is equivalent to solve the Kramers equation. In this case, we validated the results using the same interactions used for the Smoluchowski equation and when the external parameters were such that the over damped regime can be assumed. In the last part of this work, we studied an external interaction that depended not only on the particle's position but in time as well. The time dependence was assumed to be harmonic. Then we added some obstacles in order to study what was the effect in the over all dynamics, centering our attention on the histograms and the auto correlation functions. The collisions with the obstacles were taken into account as non elastic though we suggested how to adapt the methods in order to consider elastic ones, as well as dynamics non local in time (where the friction is some sort of a convolution with a memory kernel).

Introducción

Existe una gran variedad de sistemas cuyo estado dinámico puede ser descrito por uno o varios elementos del *haz tangente* a la esfera de dos dimensiones. Algunos ejemplos de estos sistemas son: un *péndulo esférico*, la orientación de un vector como el eje \hat{z} de un sistema de coordenadas fijo a un *cuerpo rígido* [59], la orientación del *momento angular intrínseco* (clásico o cuántico) de una molécula diatómica [97], la orientación del *momento magnético intrínseco* o *espín* de un átomo [138], la posición de una partícula Browniana difundiéndose en la superficie de una esfera [159], la orientación del vector velocidad de una *partícula activa* [21], etc. Más formalmente nos referimos a la *variedad diferencial* S^2 [6, 70], y por lo tanto la *dinámica* de todos estos sistemas está definida en el *haz tangente* $T\mathbb{S}^2$ a esta variedad [82]. En la física las variedades diferenciales tienen que ser introducidas para considerar las restricciones al movimiento. Éstas son el “sustrato geométrico” de todos estos escenarios. Por otro lado la dinámica puede ser *determinista* o *estocástica* independientemente de las restricciones; sin embargo, en ambos casos tienen que respetarlas. De hecho, los sistemas dinámicos pueden ser considerados como un caso particular de los procesos estocásticos (markovianos), en los que el ruido o factor aleatorio es despreciable. Por lo tanto, la dinámica de estos ejemplos puede describirse, bajo ciertas suposiciones adicionales que explicamos más adelante, con el mismo formalismo matemático, ya sea la *ecuación de Langevin* si se trata de la dinámica de las variables mecánicas [27], o de manera equivalente con la *ecuación de Fokker-Planck* si se trata de la dinámica de la función de densidad de probabilidad conjunta de este mismo conjunto de variables dinámicas [135]. Cuando la intensidad del *ruido estocástico* es despreciable esta misma descripción debe coincidir con otros formalismos como el *lagrangiano* o el *hamiltoniano*.

Si hay disipación, las velocidades serán eventualmente, en promedio, proporcionales a las fuerzas externas. Tal es el caso de la difusión de segundos mensajeros en los procesos moleculares asociados a la *quimiotaxis celular* [66, 126, 133]. En este caso las condiciones del límite de *alta fricción* o *sobreamortiguado* se dan de manera natural para las condiciones experimentales; esto es, para los valores de la temperatura del medio, la masa de la molécula y la constante de fricción del medio. En este caso los tiempos de relajación son extremadamente cortos (del orden de 10^{-15} s [24, 105]) comparados con los tiempos de laboratorio (del orden de las micras de segundo 10^{-6} s), y la distribución de las velocidades puede ser considerada como de *Maxwell-Boltzmann* [96]. El límite sobreamortiguado o de alta fricción es particularmente importante en el contexto de este trabajo porque es en el que existen y se pueden generar soluciones analíticas para algunos escenarios simples y comparar con los resultados numéricos. La dinámica en el *espacio fase* de posiciones y velocidades, en este límite deben reproducir los predichos por la *ecuación de Smoluchowski*, aunque en este último no

se incorpore la dinámica de las velocidades explícitamente. Esto es, las amplitudes de los cambios de velocidad son, *en promedio*, despreciables comparado con los efectos sistemáticos o relativos a fuerzas externas o de disipación. Esto no quiere decir que sus varianzas sean; en promedio, despreciables. Además, *en equilibrio*, éstas tienen que ser compatibles con el *teorema de equipartición de energía*, así como se debe cumplir la *relación de Stokes-Einstein* [55], lo que quiere decir que en equilibrio, las fluctuaciones en las posiciones, son proporcionales a las fluctuaciones en la velocidad, siendo la constante de fricción del fluido el factor de proporcionalidad.

En este trabajo proponemos un método geométrico para describir este tipo de dinámicas estocásticas constreñidas a la esfera de dos dimensiones, en donde existen esencialmente tres tipos de fuerzas: disipativa, que depende linealmente de la velocidad, una fuerza externa que en algunos casos se deriva de una función potencial escalar y un ruido estocástico *gaussiano*, que definimos con mayor precisión más adelante. Para las fuerzas externas usamos tres casos arquetípicos de fuerzas físicas: un campo externo homogéneo en \mathbb{R}^3 , que visto como función de las coordenadas esféricas depende de la coordenada θ y tiene dos puntos críticos, un mínimo y un máximo. El segundo es un campo con dos mínimos y un máximo local y el tercero es uno con dos mínimos asimétricos en el intervalo $[0, \pi]$, y uno es más profundo que el otro, que esencialmente es el problema que abordó Kramers originalmente. Además de ser representativos estos campos externos, tienen la ventaja de ser proporcionales a los primeros cuatro *armónicos esféricos*, los cuales constituyen una base para las funciones de cuadrado integrable en la esfera $L_2[\mathbb{S}^2]$, razón por la cual *cualquier* función medianamente bien comportada puede ser expandida como una *combinación lineal*; como una *serie* en las que los términos de orden superior contribuyen cada vez menos (de lo contrario la serie no convergería). Ésta es otra de las razones por las que centrar la atención a estos primeros campos externos es particularmente útil: otra interacción será, a tercer orden, una combinación lineal de precisamente estos 4 armónicos esféricos (de orden 0, 1, 2 y 3) y si cada uno de estos por separado está bien descrito, entonces la combinación lineal deberá ser consistente a este orden de aproximación.

A continuación hacemos un resumen muy breve de algunas de las investigaciones que se han realizado en relación al movimiento Browniano desde el punto de vista físico, matemático y computacional. El propósito es poner en contexto este trabajo.

La descripción cuantitativa del movimiento errático de partículas *coloidales* podría decirse que empezó; entre otras personas, con Albert Einstein [38]. Él se centró en la dinámica la posición de la partícula y obtuvo una ecuación para la función de densidad de probabilidad de esta variable. Ésta es una ecuación de tipo Fokker-Planck (*parcial parabólica*). Einstein conocía muy bien la solución y a partir de ésta pudo determinar el coeficiente de difusión a partir de la fórmula para el desplazamiento medio cuadrático y mediciones empíricas y sugerir un valor para el *número de Avogadro*. Poco tiempo después, Smoluchowski [154] publicó los resultados de un modelo cinético (colisión de esferas rígidas con muy diferentes masas), donde se centraba en la dinámica de la velocidad de la partícula Browniana. La ventaja de su modelo es que propone un modelo físico para las fluctuaciones; su debilidad es que se tenían que hacer muchas suposiciones y no era fácil generalizar el modelo a otros contextos. Langevin [98] propuso una ecuación diferencial (estocástica) para la velocidad de la partícula Browniana, la integró formalmente suponiendo que se podía y que la fuerza estocástica en su ecuación tenía ciertas propiedades estadísticas e imponiendo las condiciones que se tenían

que dar en equilibrio como el teorema de equipartición de energía. Posteriormente Ornstein, Uhlenbeck y Wang continuaron el estudio del movimiento Browniano y calcularon todos los momentos de la velocidad y la posición cuando el movimiento Browniano se da en una dimensión [151, 155]. Supusieron que el término de fricción era proporcional a la velocidad (tal y como ya lo había hecho Langevin), y que la fuerza estocástica tenía ciertas propiedades estadísticas. Generalmente a este proceso estocástico se lo denomina el *proceso de Ornstein-Uhlenbeck*, y así nos referiremos en este trabajo, aún cuando el movimiento esté confinado a otra variedad como la esfera unitaria de dos dimensiones. Subrahmanyam Chandrasekhar aplica el formalismo de los procesos estocásticos a la dinámica estelar y, alrededor de esta época (1940), hace un recuento de otras aplicaciones en física [24]. Posteriormente Kramers [91], dedujo una ecuación de tipo Fokker-Planck para la posición y la velocidad, cuando además del término de fricción y la fuerza estocástica contempladas en el proceso de Ornstein-Uhlenbeck, consideró un campo externo derivable de un potencial escalar. La utilizó para validar el uso del método de *transición de estado* para calcular la velocidad con la que se dan las reacciones químicas. Trabajó en los límites alta y baja fricción. En el primer caso, redujo su ecuación a la obtenida por Smoluchowski. En este trabajo vamos aludir a este tipo de proceso con una dinámica estocástica en el *espacio fase*, en donde hay una interacción externa derivable de un potencial escalar, como el *proceso de Kramers*. Lo haremos inclusive aún cuando la interacción externa dependa explícitamente del tiempo.

Extensiones del movimiento Browniano al dominio relativista pueden encontrarse en [37], mientras trabajos que se centran más en las aplicaciones en problemas físicos concretos son, por ejemplo de B. T. McClure [107], que estudia la difusión en una región esférica para la sección transversal de transferencia de momento para un electrón dentro de un gas. Radu P. Mondescu y M. Muthukumar en [110] consideran una cadena gaussiana para un polímero de longitud L como un objeto intrínseco en una superficie embebida en el espacio Euclíadiano. Calculan la función de distribución de probabilidad del vector de los extremos y la distancia promedio de la cadena del polímero.

En el contexto matemático la literatura es también inmensa y aquí sólo citamos algunas referencias relevantes que revisamos de manera somera. Las líneas sobre las que se desarrolló esta literatura son las de formalizar las definiciones y manipulaciones. Una de las figuras centrales en este contexto es, por supuesto, A. N. Kolmogorov. En particular, su trabajo “Zur Theorie der stetigen zufälligen Prozesse”¹ dio la pauta para muchísimos trabajos matemáticos que vinieron después, en particular de la escuela Rusa. Poco tiempo después, J. L. Doob [36] explica que Norbert Wiener [158, 157, 103] formalizó el concepto matemático relacionado con el movimiento Browniano que los físicos habían utilizado formalmente, pero sin demostrar su consistencia matemática y él mismo participó en esta dirección [35]. Una vez demostrada la existencia y unicidad de un movimiento Browniano, se formalizó la noción de ecuación diferencial estocástica y se popularizaron dos métodos alternativos para “integrarlas” o manipularlas de manera consistente. La primera fue propuesta por Kiyosi Itô [78] y la otra fue propuesta por R. L. Stratonovich [146]. Para una discusión muy buena acerca de la comparación entre estas dos aproximaciones puede revisarse el trabajo de N. G. van Kampen [84].

La extensión de este formalismo a otros ambientes más generales fue realizada; entre

¹En Inglés traducido como “On the theory of continuous random processes”

otras personas, por Kôsaku Yosida [161] (en particular, para el caso de la esfera en [160]), al igual que Paul Pierre Lévy [100], A. N. Kolmogorov en “Umkehrbarkeit der stetigen Naturgesetze”,² que puede encontrarse en [143]. Kiyosi Itô también llevó el cálculo estocástico a variedades diferenciales y usó su integral [77] para obtener la *unicidad* de las soluciones en estas variedades diferenciales (en una *carta* de un *atlas*). P. H. Roberts y H. D. Ursell [136] abordan el problema de la difusión en la esfera desde un punto de vista analítico, a través de caminatas aleatorias y generalizan sus resultados a variedades diferenciales. Obtiene n resultados acerca de la convergencia de las expansiones en series de las eigenfunciones y acerca del comportamiento asintótico de estas soluciones para tiempos largos. Una monografía que compila algunos de estos resultados es [39], así como [76] y [149] son trabajos más contemporáneos con un enfoque más desde el análisis matemático, que desde la geometría diferencial. Michel Emery tiene un libro de texto [40] en el que desarrolla ambas ramas de las matemáticas involucradas: la geometría diferencial y la teoría de la probabilidad (como una sub área de la teoría de la medida), para describir la dinámica estocástica restringida a variedades diferenciales. M. Schwartz y Y. Navot consideran la dinámica estocástica de sistemas constreñidos [142]. Demuestran que considerando los multiplicadores de Lagrange como locales en el tiempo, es posible obtener ecuaciones exactas, las cuales no necesitan de la introducción de coordenadas para la variedad a la cual el sistema está confinado, sino que están descritas en términos de las variables del espacio en el que están embebidas. El caso particular del movimiento Browniano restringido a una *variedad Riemanniana*, ha sido descrito por Pavel Castro en [20], con énfasis en superficies curvas en [19], y un estudio en términos de cantidades extrínsecas e intrínsecas a la superficie en [22].

Hoy podemos decir que los matemáticos consideran la ecuación de Langevin, como un caso particular de una *ecuación diferencial estocástica* [93, 2, 48, 41]. La otra cara de la descripción matemática para los procesos de Markov continuos es la relacionada a la ecuación en derivadas parciales de tipo parabólico que constituye la ecuación de Fokker-Planck (o Kramers). Un “clásico” de la literatura de este tipo de ecuaciones de tipo *parabólico* es [47] y una un poco más reciente es [11]. Existen otras referencias clásicas, como por ejemplo [31, 81] donde se abordan este tipo de ecuaciones, pero generalmente sólo se centran exclusivamente en la ecuación de calor o de difusión y no en la de Fokker-Planck. Lawrence C. Evans [42] dedica el capítulo séptimo a este tipo de ecuaciones, pero su enfoque es completamente teórico.

También existe una literatura amplia de trabajos matemáticos enfocados en el caso particular de la esfera. Por ejemplo, Philip Hartman y Geoffrey S. Watson estudiaron las funciones de distribución en la esfera [71]. Demuestran que la difusión en la esfera no tiene una *distribución de Fisher*; aunque está cerca en el caso del círculo y la esfera; entre otras cosas. Peter Matthews estudia el movimiento Browniano en esferas unitarias [104] y da cotas para el tiempo promedio que se tarda un proceso de *Markov fuerte* en visitar una colección finita de subconjuntos en la esfera. P. Constantin et al., estudian en [29, 30] las soluciones estacionarias de la ecuación de Smoluchowski para el caso particular de la esfera, mientras que Xue Ping Wang [156] las encuentra para la ecuación de Kramers para potenciales cuyos gradientes se anulan en el infinito. T. Calandre et al., analizan el territorio promedio recorrido por una partícula difundiéndose en la esfera [15]. En este trabajo proponen un algoritmo numérico

² “Reversibility of the continuous laws of nature”.

para simular la difusión cuando el movimiento está restringido a la esfera inspirado en el trabajo citado abajo de Carlsson.

Más recientemente, A. Ghosh et al. [52], abordan el problema de difusión en la esfera calculando el propagador (usando el método de punto silla) y a partir de este cálculo sugieren un método numérico de tipo Monte Carlo para simular el proceso de difusión.

Cuando el movimiento se restringe a la esfera, la ecuación de Fokker-Planck se transforma y la matriz o tensor de difusión (cuyo inversa define una métrica en la variedad), se transforma y ahora puede depender de las coordenadas. Matteo Polettini en [125, 124] propone la analogía con los escenarios en los que la temperatura depende de la posición, ya que ahora podría decirse que la difusión; el tensor, depende del *estado*.

Por otro lado, el contexto de los métodos numéricos para la integración de ecuaciones diferenciales estocásticas también se ha desarrollado considerablemente. Kloeden tiene un libro muy citado de los métodos numéricos para resolver ecuaciones diferenciales estocásticas [90]. Un artículo de revisión muy accesible es el de Desmond J. Higham [72].

En el caso particular de la esfera, Tobias Carlsson et al., proponen un algoritmo numérico para generar un movimiento Browniano en la esfera [17]. Esencialmente el método genera un caminante aleatorio entre dos cascarones esféricos, separados una distancia pequeña y proyectan sobre el cascarón exterior. Demuestran que al disminuir esta distancia, estas trayectorias tienen la misma estadística que la solución a la ecuación de difusión restringida a la esfera dos dimensional. A. Novikov et al., diseñan caminatas aleatorias para emular la *acción* del operador de Laplace-Beltrami sin reconstruir o evolucionar la función de densidad [119]. Un trabajo que se enfoca en los integradores de segundo orden para la ecuación de Langevin sujeta a restricciones holonómicas es [152]. Xuerong Mao inspirado por toda la variedad de métodos para simular ecuaciones diferenciales estocásticas [73], analiza en [101, 102], la convergencia de el *método de Euler-Maruyama truncado*. A este tipo de convergencia se le denomina *convergencia fuerte*.

Salvo casos muy especiales unidimensionales o con vectores de arrastre o matrices de difusión lineales en las variables y constantes respectivamente [155, 9, 68], no hay soluciones analíticas explícitas a la ecuación de Fokker-Planck, menos aún cuando el movimiento esté confinado a una variedad curva (excepto \mathbb{S}^1). Los *métodos asintóticos* para tiempos, o muy cortos, o muy largos no necesariamente describen cómo se da la sucesión de los estados de transición. Este trabajo es un esfuerzo por hacer una descripción cuantitativa de esta dinámica fuera de equilibrio.

No obstante se hayan especializado algunas de estas líneas de investigación al caso particular de la esfera: las distintas aproximaciones numéricas no se han validado para una muestra significativa de puntos de los estados fuera de equilibrio termodinámico. Esto es, a pesar de existir una gran variedad formas de generar un movimiento Browniano en la esfera dos dimensional, en ningún caso se ha validado que el método sea consistente con la solución analítica para la difusión libre para *todos* los tiempos. Se ha hecho para unos pocos tiempos y para la evolución de los primeros momentos (promedio y varianza), y para la autocorrelación en las posiciones, pero no para toda la distribución. En el caso de la esfera, la función de probabilidad no es una gaussiana en la coordenada θ e inclusive es asimétrica con respecto a esta misma coordenada, lo cual quiere decir que no necesariamente el promedio y la varianza son suficientes para describir o caracterizar cuantitativamente el movimiento. Éste el primer problema que nos decidimos a abordar: la reproducción de los resultados de las soluciones

analíticas de la ecuación de difusión en la superficie de la esfera. Posteriormente, generalizamos el método para considerar otras interacciones externas, así como acoplar la dinámica de la velocidad con la de la posición. En este caso, aunque debiese ser una condición de consistencia que los métodos numéricos para simular estos sistemas converjan a la descripción de las ecuaciones diferenciales en el límite de ruido muy débil, no conocemos trabajos que lo hayan hecho explícitamente. Esto es, esta generalización de generar la estadística para las variables dinámicas de posición y velocidad debe integrar las ecuaciones de movimiento cuando la constante de fricción tiende a cero, por ejemplo dar las soluciones a las ecuaciones de Euler-Lagrange. Esto, a mi parecer no es una “costumbre” en la literatura y es una de las pruebas a las que se sometió a nuestro método numérico en el caso particular de el *péndulo esférico*. En este caso la evolución de la función de distribución da una delta de Dirac multidimensional cuyo origen o centro es la solución a las ecuaciones de Euler-Lagrange. Por último, otra de las pruebas que debería pasar cualquiera de estos métodos es que para tiempos muy largos reproduzca la distribución de Boltzmann del equilibrio termodinámico.

En el contexto del movimiento difusivo en membranas celulares hemos visto que la difusión no es como la difusión descrita por la ley de Fick [108], y se han propuestos modelos alternativos [109] en los que el cálculo fraccionario [120] es utilizado. No es sorprendente que haya diferencias con respecto a la tradicional ecuación de difusión, debido a que, por ejemplo, fosfolípidos como PIP2 se encuentran con muchos otras proteínas o moléculas en el camino [49]. Sin embargo, no es de mi conocimiento que se haya encontrado una relación entre la propiedad de los obstáculos (densidad, geometría, potenciales electromagnéticos, etc.), y el exponente fraccionario del operador de Laplace que “interpola” el desplazamiento cuadrático medio.

Estructura de la Tesis

La tesis está estructurada de la siguiente manera. La parte I consiste de 4 capítulos cortos. En el capítulo 1 damos un resumen de algunos resultados de la teoría de los procesos markovianos continuos. Este formalismo puede pensarse adecuado para una descripción mesoscópica del movimiento Browniano que parte de ciertos razonamientos heurísticos. En este capítulo introducimos la ecuación de Langevin y la ecuación de Fokker-Planck. En el caso de la ecuación de Langevin, usando el teorema del límite central, que puede considerarse como un caso particular del teorema de transformación de variables aleatorias, mientras que en el caso de la ecuación de Fokker-Planck usando la ecuación de Chapman-Kolmogorov.

Debido a que la ecuación de Fokker-Planck describe la evolución de sistemas fuera de equilibrio, en el capítulo 2, en la sección 2.1 damos una breve introducción a la termodinámica irreversible haciendo énfasis en las relaciones de Onsager. Posteriormente, exponemos algunas vetas para obtener las mismas ecuaciones (Langevin y Fokker-Planck), pero a partir de primeros principios; esto es, a partir de la ecuación de Liouville 2.2. Es un resumen de los trabajos de muchas personas, pero en los que Robert Zwanzig sección 2.3, y Hazime Mori sección 2.4, jugaron un papel importante. La técnica en ambos casos se basa en los operadores de proyección. A continuación, en la sección 2.5 explicamos cómo es posible obtener una ecuación para la dinámica en el espacio de configuración; esto es, cómo se puede pasar de la ecuación de Kramers a la ecuación de Smoluchowski. La técnica se base en el método de eliminación de variables o modos rápidos y algunos detalles los dejamos para los apéndices D y E. Con la finalidad de deducir la relación de Green-Kubo en la que el coeficiente de difusión se define a partir de las autocorrelaciones en las velocidades de la partícula Browniana, en la sección 2.6 damos una demostración somera del *teorema de fluctuación disipación* para el caso clásico. Después, en la sección 2.6.3 exponemos los conceptos más básicos de la teoría de respuesta en la aproximación lineal, para posteriormente usar la hipótesis de regresión de Onsager, para deducir esta relación de Green-Kubo.

En el capítulo 3, centramos nuestra atención en los cambios necesarios para adaptar la ecuación de Fokker-Planck a espacios curvos. En la sección 3.1, deducimos las leyes de transformación para los elementos de la ecuación de Fokker-Planck, el vector de arrastre, la matriz de difusión y la densidad de probabilidad. En la sección 3.2 explicamos la necesidad de extender las ecuaciones dinámicas a variedades diferenciables debido a las restricciones físicas o matemáticas y damos las condiciones necesarias para que existan cantidades conservadas en términos de los elementos de las ecuaciones de Fokker-Planck. En la sección 3.3 demostramos que existe una ecuación *covariante*; esto es, independiente de las coordenadas, que se reduce a la ecuación de Fokker-Planck. Algunos detalles algebraicos los dejamos para el apéndice G.

En el capítulo 4, abordamos el tema de las condiciones bajo las cuales existen soluciones al estado estacionario y los métodos necesarios para encontrarlas explícitamente. Está dividido en dos secciones. En la sección 4.1 nos centramos en lo que se conoce como las condiciones de *balance detallado* y la equivalencia con las *condiciones de potencial*, estas últimas utilizadas por R. Stratonovich para deducir las soluciones estacionarias a la ecuación de Fokker-Planck. En la sección 4.2 nos centramos en la aproximación a estos estados estacionarios, su estabilidad y cómo es que las relaciones de Onsager están implícitamente contenidas en la ecuación de Fokker-Planck o, equivalentemente, en las ecuaciones de Langevin. Estos resultados son los que se encuentran en los trabajos de Hermann Haken, Robert Graham, Rousland Stratonovich, Melville S. Green, Ilya Prigogine, entre otros.

La parte II, que ya forma parte de los resultados de esta tesis, está constituida por el capítulo 5, en el que se dedica una sección para cada versión de los diferentes de los métodos numéricos. Partimos de los casos más simples (difusión libre), a los casos más complicados (proceso de Kramers). Podríamos pensar a los métodos numéricos esencialmente como integradores de primer orden de ecuaciones diferenciales estocásticas adaptados para constreñir el movimiento a la esfera unitaria que está *embebida* en un espacio euclíadiano $\mathbb{S}^2 \subset \mathbb{E}^3$. En la sección 5.1 presentamos la versión diseñada para simular la difusión libre. En la sección 5.2 presentamos una versión diseñada para contemplar la presencia de campos externos en el límite sobreamortiguado; esto es, cuando el cambio en las velocidades de las partículas son proporcionales a las fuerzas y sólo es necesario considerar la dinámica en el espacio de configuración. En este caso, la ecuación de Fokker-Planck también se le conoce como la ecuación de Smoluchowski. La siguiente sección 5.3 contiene una versión de los métodos numéricos para simular el proceso de Ornstein-Uhlenbeck. En la sección 5.4 deducimos la forma explícita que asume la ecuación de Kramers en la esfera, para un potencial general que depende de θ y ϕ . El método para obtener esta ecuación consiste en primero obtener las ecuaciones estocásticas de Langevin, usando el principio de D'Alembert que funciona también en el caso de fuerzas que no necesariamente son derivadas de un potencial escalar, como en el caso de la fuerza disipativa o la fuerza estocástica o *ruido blanco*; todos estos elementos son esencialmente proyectados a los diferentes planos tangentes a la esfera donde se encuentran las partículas del ensamble. Una vez obtenidas estas ecuaciones estocásticas diferenciables, es posible leer directamente las componentes del vector de arrastre de la ecuación de Kramers, así como el tensor o matriz de difusión. A continuación, en la sección 5.5 adaptamos el método para simular el procesos de Ornstein-Uhlenbeck, de tal manera que se pueda considerar un campo externo, además de la fuerza disipativa y de la fuerza estocástica, el cual a su vez sirve para simular campos que dependen explícitamente del tiempo; esto es, para simular el *proceso de Kramers*.

La parte III contiene los resultados que se han ido generado. Está dividido en tres capítulos. En el capítulo 6 se presentan los que denominamos “consolidados”, los cuales han sido estudiados y analizados con mayor ahínco, que los presentados en el capítulo 7 denominados “exploratorios”. En la sección 6.1.1 abordamos el estudio de la difusión libre, los estados estacionarios cuando hay una interacción externa (no lineal) que depende de las coordenadas espaciales (de la variable angular θ), en el límite sobreamortiguado, y para los estados estacionarios usando el algoritmo para resolver la ecuación de Kramers-Klein también en el límite subamortiguado. Los campos usados en este proceso de calibración de los métodos numéricos estuvieron dados por los 3 primeros armónicos esféricos, no constantes, con simetría azimutal.

Existen varias razones para haber hecho esto. La primera es que los armónicos esféricos constituyen un sistema completo para funciones continuas diferenciables ³ sobre la esfera; éstas pueden ser expresadas como combinaciones lineales de estos armónicos esféricos. La segunda razón es porque los primeros armónicos esféricos tienen una geometría suficientemente sencilla como para entender el comportamiento del efecto que generarán en la dinámica antes de resolver el problema. Es fácil identificar los mínimos o máximos. La tercera es que el primer armónico esférico no constante, proporcional al coseno del ángulo θ , genera la interacción dada por un campo homogéneo paralelo al eje z de las coordenadas cartesianas, por ejemplo el que se genera en la región lejos de los bordes de un capacitor. En algunos experimentos, uno busca usar este campo como parámetro externo y deducir, en función de la dinámica de las partículas, inferir cargas efectivas.

Por último, en la último capítulo de esta sección presentamos nuestras conclusiones y damos un resumen de las posibles áreas donde pudiésemos aplicar nuestros métodos numéricos: contextos con obstáculos, campos que dependan del tiempo, transiciones de fase fuera de equilibrio en la esfera y partículas activas. Señalamos que incorporar ruidos no gaussianos o generalizar a procesos no markovianos; no locales en el tiempo, no es difícil usando como base lo que ya hemos construido.

³De hecho para funciones con una cantidad finita de discontinuidades si éstas están acotadas.

Parte I

Marco Teórico

Capítulo 1

Aproximación heurística al movimiento Browniano

En este capítulo vamos a desarrollar algunos conceptos matemáticos necesarios para describir procesos que presentan una evolución “errática” o aleatoriedad con ciertas características particulares. Tenemos como finalidad encontrar los ejes medulares en los que se pueda predecir; probabilísticamente hablando, el comportamiento de estos sistemas en el que algunos de sus componentes se asemejan a partículas con movimiento browniano. Debido a que el movimiento browniano juega un papel central en este trabajo vale la pena hablar un poco de los primeros intentos por describirlo y de las matemáticas que se han desarrollado para esto.

Como enunciábamos en la introducción, el movimiento browniano fue descrito independientemente por Albert Einstein [38], Smoluchowski [154] y Paul Langevin [98] iniciando el siglo XX, no obstante se aproximaron de diferente manera. Hoy podemos entender que Einstein, en lenguaje contemporáneo, acabó resolviendo esencialmente una ecuación de tipo Fokker-Planck para la función de densidad de probabilidad, que en este contexto describía la posición de la partícula browniana. La constante D en su aproximación representaba la varianza de esta variable aleatoria $\mathbf{X}(t)$, dividida entre dos veces este intervalo de tiempo $D := \sigma_X^2 / 2\delta t$. Esta ecuación de Fokker-Planck es una ecuación de tipo difusión $\partial_t P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) = D \nabla^2 P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)$, que sujeta a la condición inicial $P(\mathbf{x}, t = t_0 | \mathbf{x}_0, t_0) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$, tiene solución¹

$$P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) = \frac{1}{[4\pi D(t - t_0)]^{m/2}} e^{-|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|^2 / 4D(t - t_0)}. \quad (1.1)$$

Implícito en la ecuación anterior estaba que la varianza en la posición de la partícula era proporcional al tiempo transcurrido

$$\sigma_{X(t)}^2 = 2mD(t - t_0). \quad (1.2)$$

Este resultado coincidía con las observaciones empíricas, y es uno de los primeros resultados que soportan de manera directa la existencia de entes con dimensiones y propiedades de los

¹Aquí m es número de grados de libertad que tiene la partícula browniana y estamos suponiendo que el dominio no está acotado o que las fronteras de éste no tienen influencia sobre el movimiento.

átomos y moléculas.

Langevin en cambio, se concentró en la velocidad de la partícula browniana $\mathbf{V}(t)$ y planteó el problema “a la Newton” usando una ecuación (aquella que lleva su nombre), que relacionaba el cambio en la velocidad, la aceleración, con “fuerzas externas”

$$m \frac{d}{dt} V(t) = -\gamma V(t) + f \Gamma(t), \quad (1.3)$$

en donde $\Gamma(t)$ es el *ruido blanco* o fuerza estocástica y f era una constante que debía de determinarse empíricamente. Una versión “moderna” de este trabajo llega a la conclusión de que la varianza de la integral de este esta variable aleatoria $V(t)$, definida por $dX(t)/dt := V(t)$; esto es $X(t)$, evoluciona como [55]

$$\begin{aligned} \text{var}[X(t)] &= c\tau^2 \left[(t - t_0) - 2\tau(1 - \exp[-(t - t_0)/\tau]) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\tau}{2}(1 - \exp[-2(t - t_0)/\tau]) \right]; \end{aligned}$$

por lo que, para tiempos largos² $t - t_0 \gg O(1)$,

$$\lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \text{var}[X(t)] = c\tau^2(t - t_0). \quad (1.4)$$

La constante $c = f/m$ y $\tau = \gamma/m$. Sin embargo, no quedaba claro de manera inmediata, debido a que se usó como premisa, por qué la fuerza; resultado de la interacción con todas las moléculas del fluido, podía descomponerse precisamente de esa manera: un término disipativo que modela la viscosidad del fluido, y otro término asociado a la fuerza fluctuante $\Gamma(t)$, no correlacionada en el tiempo. Por otro lado, en el trabajo de Einstein se había evadido escrupulosamente la velocidad de la partícula browniana, por lo que su trabajo no arrojaba luz en esta dirección.

Es posible, utilizando el formalismo de los procesos de Markov, demostrar que estas dos aproximaciones son equivalentes cuando se satisfacen ciertas condiciones; además, se puede entender de manera más *orgánica*, por qué ambos llegaron a la misma conclusión de que la varianza en la posición de la partícula era proporcional al intervalo de tiempo “andado” .

En esta primera sección 1.1 definimos algunos conceptos del formalismo de los procesos de Markov o markovianos y deducimos algunos resultados *clásicos* “elementales”. En la siguiente sección 1.3, utilizamos las definiciones y los resultados de la primera, para deducir ecuaciones dinámicas para la función más importante asociada a los procesos markovianos continuos. Estas ecuaciones se denominan de Fokker-Planck, y para un escenario simple se pueden resolver de forma explícita, lo cuál hacemos en el siguiente capítulo.

²Para intervalos de tiempo muy cortos (comparados con τ), puede demostrarse que $\text{var}[X(t)] \propto (t - t_0)^3$, lo cual difiere considerablemente del resultado de Einstein ecuación (1.2).

1.1. Proceso continuo de Markov

Definición 1. Decimos que $\mathbf{X}(t)$ es un proceso estocástico real multivariado de dimensión m , si existe una función conjunta de densidad de probabilidad P tal que

$$P(\mathbf{x}, t) d^m \mathbf{x} = \text{Prob}\{X_i(t) \in [x_i, x_i + dx_i), i = 1, \dots, m\},$$

Donde $\mathbf{X}(t_j) = (X_1(t_j), \dots, X_m(t_j)) = (x_1, \dots, x_m)_j = \mathbf{x}(t_j) = \mathbf{x}_j$, y $t_0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_n$. Esto es, cada componente $X_i(t)$ de $\mathbf{X}(t)$ es una variable aleatoria real parametrizada por el conjunto de los números reales.

Como es costumbre, además suponemos que se cumple que la función de densidad nunca es negativa y que “sumada³” sobre todo el conjunto de valores da la unidad (condición de normalización)

$$0 \leq P^{(n)}(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_n, t_n; \dots; \mathbf{x}_1, t_1), \quad (1.5a)$$

$$\int_{\mathbb{R}^m} P^{(n)}(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_n, t_n; \dots; \mathbf{x}_1, t_1) d^m \mathbf{x} = 1. \quad (1.5b)$$

Deduciremos la ecuación multivariada de Langevin estándar y la ecuación multivariada de Fokker-Planck, ambas sirven para generar ecuaciones dinámicas para los momentos del proceso multivariado $\mathbf{X}(t)$, con los cuales en la mayoría se situaciones “ordinarias”, son suficientes para darse una idea de la evolución del proceso. Se puede pensar que los procesos de Markov son la primera extensión “natural” de los sistemas dinámicos, y aunque existe una ecuación de Langevin y una ecuación de Fokker-Planck asociadas al mismo procesos markoviano continuo, en el caso de más de una dimensión, la correspondencia no es uno a uno. Sobre esto comentaremos más adelante.

1.2. Ecuación de Langevin

Para poder deducir las ecuaciones que rigen la evolución de nuestro sistema de interés; las ecuaciones dinámicas⁴, será conveniente introducir cierta terminología estándar asociada a los procesos estocásticos.

Definición 2 (Proceso Markoviano continuo multivariado). Un proceso estocástico multivariado $\mathbf{X}(t) = (X_1(t), \dots, X_m(t))$ en el que

1. Los incrementos condicionados en *cada* componente $\Xi_i(dt; \mathbf{x}, t) \equiv X_i(t + dt) - X_i(t)$, dado que el proceso \mathbf{X} tomó el valor $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_m) \in \mathbb{R}^m$, en el tiempo t , *sólo* depende de dt , \mathbf{x} y t .
2. La dependencia de Ξ_i en sus argumentos es *suave*; esto es, las funciones de probabilidad que describen a esta variable aleatoria, tienen una dependencia continua diferenciable con respecto a estos parámetros.

³La notación $\int_{\mathbb{R}^m} f(\mathbf{x}) d^m \mathbf{x} \equiv \lim_{A \rightarrow \infty} \int_{Q_A} f(\mathbf{x}) d^m \mathbf{x}$, en donde $Q_A = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m : |x_i| \leq A/2 \text{ para } i = 1, 2, \dots, m\}$, y $d^m \mathbf{x} = dx_1 dx_2 \cdots dx_m$.

⁴Lo que sigue a continuación es material estándar y puede encontrarse por ejemplo en [56]. Una excelente monografía acerca de la ecuación de Langevin es [27]

3. Para todas las parejas posibles de valores de $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ y de $t \in \mathbb{R}$

$$\lim_{dt \rightarrow 0} \Xi_i(dt; \mathbf{x}, t) = 0,$$

4. Ξ_i tiene primer y segundo momento bien definidos (son finitos),

se denomina *proceso de Markov continuo multivariado*.

Podemos demostrar que la ley de evolución que rige a un fenómeno con estas características es la ecuación de Langevin *estándar*, y como esta ecuación será uno de los pilares para motivar nuestras simulaciones numéricas, lo enunciaremos formalmente como un teorema y lo demostraremos sin demasiado rigor matemático.

Teorema 1.2.1 (Langevin). Si X_i es la componente de un proceso multivariado que satisface las cuatro condiciones enunciadas arriba, entonces cada componente satisface la ecuación multivariada estándar de Langevin

$$X_i(t + dt) = X_i(t) + A_i[\mathbf{X}(t), t] dt + \sum_{j=1}^m b_{ij}[\mathbf{X}(t), t] N_j(t) (dt)^{1/2} \quad i = 1, \dots, m. \quad (1.6)$$

En donde $dt \in (0, \epsilon)$, $\epsilon > 0$, las m funciones $N_j(t)$ son funciones normales unitarias $N(0, 1)$, estadísticamente independientes y no correlacionadas en el tiempo; esto es, $\langle N_j(t) N_k(t') \rangle = \delta_{jk} \delta(t - t')$, y A_i y b_{ij} son funciones diferenciables de sus argumentos, para cada $i = 1, \dots, m$. Más aún, las funciones definidas a través del conjunto $\{b_{ij}\}_{i,j=1}^m$, de m^2 funciones

$$D_i[\mathbf{X}(t), t] \equiv \sum_{j=1}^m b_{ij}^2[\mathbf{X}(t), t]; \quad i = 1, \dots, m, \quad (1.7)$$

y

$$C_{ij}[\mathbf{X}(t), t] \equiv \sum_{k=1}^m b_{ik}[\mathbf{X}(t), t] b_{jk}[\mathbf{X}(t), t]; \quad i < j = 1, \dots, m, \quad (1.8)$$

satisfacen

$$0 \leq D_i[\mathbf{X}(t), t]; \quad i = 1, \dots, m, \quad (1.9)$$

y

$$C_{ij}^2[\mathbf{X}(t), t] \leq D_i[\mathbf{X}(t), t] \cdot D_j[\mathbf{X}(t), t]; \quad i < j = 1, \dots, m. \quad (1.10)$$

Demostración. Dividamos al intervalo de tiempo $[t, t+dt]$ en n subintervalos de igual longitud dt/n definidos por la partición

$$t_k = t + k \frac{dt}{n}, \quad k = 0, \dots, n. \quad (1.11)$$

Entonces, podemos escribir a los incrementos condicionados en cada componente como

$$\begin{aligned}
\Xi_i[dt; \mathbf{x}, t] &\equiv X_i(t + dt) - X_i(t) = X_i(t_n) - X_i(t_0) & (1.12) \\
&= \sum_{k=1}^n X_i(t_k) - X_i(t_{k-1}) \\
&= \sum_{k=1}^n X_i(t_{k-1} + dt/n) - X_i(t_{k-1}) \\
&= \sum_{k=1}^n \Xi_i[dt/n; \mathbf{x}_{k-1}, t_{k-1}], \\
\Xi_i[dt; \mathbf{x}, t] &= \sum_{k=1}^n \Xi_{ik}[dt/n; \mathbf{x}, t] + o(dt)
\end{aligned}$$

La última igualdad se denomina *condición de auto consistencia*. En esencia, expresa el hecho de que debiese ser lo mismo, estadísticamente y al menor orden en dt , aplicar la forma de actualización una vez de t a $t + dt$, que aplicarla n veces en los n subintervalos de forma iterativa con un “impulso” de tamaño dt/n . La última igualdad es consecuencia de que el proceso es continuo para todos los valores de (\mathbf{x}, t) , por lo que podemos aproximar, tanto como queramos, $\mathbf{X}(t_k) \approx \mathbf{X}(t) = \mathbf{x}$, si hacemos suficientemente pequeño el parámetro $dt \in [0, \epsilon]; 0 < \epsilon$. Entonces las Ξ_{ik} son n copias de la misma variable aleatoria, y estas n copias son estadísticamente independientes debido a que ocurren en diferentes intervalos de tiempo y el proceso, por definición, *no* tiene memoria.

La siguiente fase de la demostración consiste en invocar a la conclusión del teorema del límite central, para concluir que $\Xi_i[dt; \mathbf{x}, t]$ tiende, de manera asintótica, a una distribución normal. Subsecuentemente, sabemos que el primer momento de esta distribución normal es n veces el promedio que tienen las n copias $\Xi_{ik}[dt/n; \mathbf{x}, t]$, al igual que, por ser estadísticamente independiente, la varianza de esta distribución normal, es n veces la varianza de esta misma variable aleatoria, esto es

$$\langle \Xi_i[dt; \mathbf{x}, t] \rangle = \left\langle \sum_{k=1}^n \Xi_{ik}[dt/n; \mathbf{x}, t] \right\rangle = \sum_{k=1}^n \langle \Xi_{ik}[dt/n; \mathbf{x}, t] \rangle = n \cdot \langle \Xi_i[dt/n; \mathbf{x}, t] \rangle, \quad (1.13)$$

$$\text{Var}(\Xi_i[dt; \mathbf{x}, t]) = \text{Var}\left(\sum_{k=1}^n \Xi_{ik}[dt/n; \mathbf{x}, t]\right) = \sum_{k=1}^n \text{Var}(\Xi_{ik}[dt/n; \mathbf{x}, t]) = n \cdot \text{Var}(\Xi_i[dt/n; \mathbf{x}, t]). \quad (1.14)$$

Al ser Ξ_i diferenciable con respecto a sus parámetros, en particular con respecto a dt , esto sólo puede ocurrir si estas funciones dependen linealmente; esto es, si son proporcionales⁵ a

⁵El argumento tiene que ver con un resultado “elemental” de análisis matemático. Si se tiene que $f \in C^1(-\epsilon, \epsilon)$, esto es, si f es continua en una vecindad de 0 y $nf(x/n) = f(x)$ para todo $n \in \mathbb{N}$, se sigue que $f(x) = mx$, en donde m no depende de x . El argumento es el siguiente, si f es diferenciable en cero, entonces es continua en 0, si es continua en cero f está acotada en una vecindad del cero $|f(x)| < A$, para alguna constante positiva. Entonces $|f(x/n)| \leq A/n$ para todo $n \in \mathbb{N}$, lo cual implica que $f(0) = 0$. Si ahora derivamos la relación original $f'(x/n) = f'(x)$ para toda $n \in \mathbb{N}$. Lo cual quiere decir que la derivada asume

dt

$$\langle \Xi_i[dt; \mathbf{x}, t] \rangle \equiv A_i[\mathbf{x}, t] dt, \quad (1.15)$$

y

$$\text{Var}(\Xi_i[dt; \mathbf{x}, t]) \equiv D_i[\mathbf{x}, t] dt. \quad (1.16)$$

Para calcular las correlaciones entre los incrementos en diferentes componentes del proceso multivariado, necesitamos señalar que los incrementos que ocurren en diferentes intervalos de tiempo ($k \neq l$); Ξ_{ik} y Ξ_{jl} , son estadísticamente independientes. Si un par de sumas de variables aleatorias $X = \sum_k X_k$ y $Y = \sum_l Y_l$, en el que las variables son estadísticamente independientes si $k \neq l$, se cumple que

$$\begin{aligned} \text{Cov}(X, Y) &= \text{Cov}\left(\sum_k X_k, \sum_l Y_l\right) = \left\langle \sum_k X_k \cdot \sum_l Y_l \right\rangle - \left\langle \sum_k X_k \right\rangle \cdot \left\langle \sum_l Y_l \right\rangle \quad (1.17) \\ &= \sum_k \sum_l \langle X_k Y_l \rangle - \sum_k \sum_l \langle X_k \rangle \langle Y_l \rangle = \sum_k \sum_l [\langle X_k Y_l \rangle - \langle X_k \rangle \langle Y_l \rangle] \\ &= \sum_k \sum_l \text{Cov}(X_k, Y_l) \delta_{kl} = \sum_k \text{Cov}(X_k, Y_k). \end{aligned}$$

Lo cual implica en nuestro contexto

$$\begin{aligned} \text{Cov}(\Xi_i[dt; \mathbf{x}, t], \Xi_j[dt; \mathbf{x}, t]) &= \sum_{k=1}^n \text{Cov}(\Xi_{ik}[dt/n; \mathbf{x}, t], \Xi_{jk}[dt/n; \mathbf{x}, t]) \quad (1.18) \\ &= n \cdot \text{Cov}(\Xi_i[dt/n; \mathbf{x}, t], \Xi_j[dt/n; \mathbf{x}, t]), \end{aligned}$$

por lo que las covarianzas entre los incrementos condicionados (Ξ_i), de las componentes del proceso ($X_i(t)$), también son proporcionales a dt

$$\text{Cov}(\Xi_i[dt; \mathbf{x}, t], \Xi_j[dt; \mathbf{x}, t]) \equiv C_{ij}(\mathbf{x}, t) dt \quad i < j = 1, \dots, m. \quad (1.19)$$

Las funciones D_i (1.16) siendo una varianza, y C_{ij} (1.19) siendo una covarianza; además, tienen que satisfacer, debido al teorema del rango de la covarianza

$$0 \leq D_i(\mathbf{x}, t) \text{ para } i = 1, \dots, m, \quad (1.20)$$

y

$$C_{ij}^2(\mathbf{x}, t) \leq D_i(\mathbf{x}, t) \cdot D_j(\mathbf{x}, t) \text{ para } i < j = 1, \dots, m. \quad (1.21)$$

Lo único que falta es demostrar que estas $m(m+1)/2$ funciones D_i y C_{ij} pueden ser expresadas como en (1.7) y (1.8), sólo queda demostrar que; en efecto, las funciones b_{ij} satisfacen

$$\sum_{k=1}^m b_{ik} b_{jk} \cdot \sum_{l=1}^m b_{il} b_{jl} \leq \sum_{k=1}^m b_{ik}^2 \cdot \sum_{l=1}^m b_{jl}^2.$$

el mismo valor $f'(0)$ para todos los x en una vecindad del 0. Por lo tanto, la derivada es constante ahí y entonces $f(x) = f'(0)x + b$, pero como $f(0) = 0$, se sigue que $b = 0$. En nuestro contexto, f depende no tan solo de dt , también depende de \mathbf{x} y de t , por lo que la constante, sólo es constante con respecto a dt . Esto es $f(\mathbf{x}, t; dt) = m(\mathbf{x}, t) dt$

Pero esto se consigue de manera casi inmediata si se observa que

$$0 \leq \sum_{s=1}^m \sum_{r=1}^m [b_{is} b_{jr} - b_{js} b_{ir}]^2.$$

Esto en palabras implica que todas las funciones continuas diferenciables con respecto a \mathbf{x} y a t , que satisfagan las condiciones (1.9) y (1.10), pueden ser escritas como sumas de productos del conjunto $\{b_{ij}(\mathbf{x}, t)\}$. Entonces los incrementos condicionados tienen la forma analítica

$$\Xi_i[dt; \mathbf{x}, t] \equiv A_i[\mathbf{x}, t] dt + \sum_{j=1}^m b_{ij}[\mathbf{x}, t] N_j(t) dt^{1/2}. \quad (1.22)$$

Como \mathbf{x} es el valor que tomó el proceso $\mathbf{X}(t)$ al tiempo t se induce una dependencia funcional explícita en el propagador Ξ en el proceso $\mathbf{X}(t)$. Si usamos la definición de los incrementos condicionados o propagadores del proceso, llegamos a la ecuación estándar de Langevin, por lo que queda demostrado el teorema. \square

El conjunto $\{b_{ij}(\mathbf{x}, t)\}$ tiene m^2 funciones, y el conjunto de las funciones $D_i[\mathbf{x}, t]$ y $C_{ij}[\mathbf{x}, t]$ sólo tiene $m(m+1)/2$ funciones, existen $m(m-1)/2$ más funciones de las necesarias, por lo que este conjunto no es único, y habrá conjuntos diferentes de funciones $b_{ij}[\mathbf{x}, t]$ que generen los mismos incrementos condicionados para el proceso; generen estadísticamente la misma evolución, o, dicho en otras palabras, representen el mismo proceso continuo de Markov. Sin embargo, esto quiere decir que cuando $m > 1$ existen “diferentes” ecuaciones de Langevin asociadas al mismo proceso, por otro lado, para cada conjunto de funciones $A_k[\mathbf{x}, t]$, $D_k[\mathbf{x}, t]$ y $C_{ij}[\mathbf{x}, t]$, que satisfagan (1.9) y (1.10), sólo existe una ecuación de Fokker-Planck asociada al mismo proceso, por lo que la correspondencia entre ellas en más de una dimensión; a pesar de describir el mismo proceso, *no* es uno a uno.

La estructura de la ecuación de Langevin, escrita de esa forma estándar es una *receta de actualización* para las componentes del proceso $\mathbf{X}(t)$, por lo que se puede utilizar como algoritmo numérico para simular; computacionalmente, la evolución de un proceso con las características particulares definidas mediante sus funciones $A_k[\mathbf{x}, t]$, $D_k[\mathbf{x}, t]$ y $C_{ij}[\mathbf{x}, t]$.

1.3. Ecuación de Fokker-Planck

A la función $\Xi_i[dt; \mathbf{x}, t]$ en (2), el incremento condicionado en cada componente del proceso, se le suele denominar el *propagador* de la componente $X_i(t)$ [54]. Estos propagadores están descritos por una función conjunta de densidad de probabilidad

$$\prod [\xi | dt; \mathbf{x}, t] d^m \xi \equiv \text{Prob} \{ \Xi_i[dt; \mathbf{x}, t] \in [\xi_i, \xi_i + d\xi_i) \mid i = 1, \dots, m \}, \quad (1.23)$$

dado que $\mathbf{X}(t) = \mathbf{x}$. Todo el esfuerzo del formalismo de los procesos estocásticos se centra en la siguiente cuestión: si sabemos cuál es el estado o configuración de un sistema de interés, y cuál ha sido la historia de estos estados o configuraciones; esto es, su pasado: cuál es el espectro de posibles evoluciones que el sistema puede seguir, y con qué probabilidad se dará

cada una de ellas⁶. En este contexto nos gustaría saber cómo se va a comportar en el tiempo la función que relaciona las probabilidades de estar en cierta configuración en algún tiempo específico (\mathbf{x}, t) , dado que en un tiempo anterior se tenía una cierta configuración particular (\mathbf{x}_0, t_0) . Esta cuestión es un poco menos ambiciosa que caracterizar todas las maneras de llegar de una configuración a otra. Debiese estar claro que la propiedad de Markov simplifica enormemente la cantidad de funciones que necesitamos para describir al proceso. Para saber cómo es esta función, nos gustaría saber qué ecuación de evolución satisface

$$P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) = \text{Prob}\{\mathbf{X}(t) \in [\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x}] \text{ dado que } \mathbf{X}(t_0) = \mathbf{x}_0\}, \quad (1.24)$$

en donde

$$[\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x}] \equiv [x_1, x_1 + dx_1] \times [x_2, x_2 + dx_2] \times \cdots \times [x_m, x_m + dx_m].$$

Para responder esta pregunta, necesitamos desarrollar un poco más el formalismo de los procesos de Markov. Primero necesitamos señalar que existe una relación fundamental⁷ entre la función conjunta de densidad de probabilidad para el propagador $\prod(\xi | dt; \mathbf{x}, t)$, y la función conjunta de densidad de probabilidad condicionada para el proceso $\mathbf{X}(t)$; $P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)$, que dice

$$\prod(\xi | dt; \mathbf{x}_0, t_0) \equiv P(\mathbf{x} + \xi, t + dt | \mathbf{x}_0, t_0). \quad (1.25)$$

Además, una manera alternativa de definir a los procesos markovianos es decir que satisfacen la denominada propiedad de Markov. La independencia estadística de $\mathbf{X}(t)$ en su pasado, implica que la propiedad de Markov se enuncie a veces como

$$P^{(n)}(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_n, t_n; \dots; \mathbf{x}_1, t_1) = P^{(1)}(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_n, t_n) \equiv P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_n, t_n). \quad (1.26)$$

En palabras dice que la probabilidad de observar alguna configuración en particular, dado haber registrado toda una serie de observaciones; n observaciones, es igual a la probabilidad de sólo haberla observado en la anterior inmediata, independientemente de los valores que haya asumido en tiempos anteriores. Esto es, aún teniendo esta información del pasado, no podemos optimizar nuestras predicciones del sistema, más allá de lo que la información del presente provee. Por eso se dice que el sistema no tiene memoria; es *memoryless*. Esta propiedad es análoga a aquella de los *sistemas dinámicos* en los que la ley de evolución es *local*; sólo necesitamos conocer el estado del sistema alrededor de una *vecindad* del presente, para saber cómo evolucionará; la diferencia aquí es que estos sistemas no cumplen la propiedad *determinista* [3].

Usando la *ley de multiplicación* y la condición de normalización (1.5b), podemos calcular la probabilidad de que el proceso esté en una vecindad del estado (\mathbf{x}_3, t_3) , dado haber estado en el estado (\mathbf{x}_1, t_1) , como la *suma* o integral de pasar por todos los posibles estados intermedios en un tiempo t_2 , con $t_1 \leq t_2 \leq t_3$

$$P(\mathbf{x}_3, t_3 | \mathbf{x}_1, t_1) = \int_{\mathbb{R}^m} P^{(1)}(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_1, t_1) \cdot P^{(2)}(\mathbf{x}_3, t_3 | \mathbf{x}_2, t_2; \mathbf{x}_1, t_1) d^m \mathbf{x}_2. \quad (1.27)$$

⁶Para una discusión muy clara en relación al problema matemático general que se presenta en los procesos estocásticos veáse [57].

⁷Se sigue simplemente de la definición de ambas funciones, ya que si $\Xi_i[dt; \mathbf{x}, t] \in [\xi_i, \xi_i + d\xi_i]$, dado que $\mathbf{X}(t) = \mathbf{x}$, como tenemos $\Xi_i[dt; \mathbf{x}, t] \equiv X_i(t + dt) - X_i(t)$ (es su definición), se sigue que $X_i(t + dt) \in [x_i + \xi_i, x_i + \xi_i + d\xi_i]$.

Si además usamos la propiedad de Markov (1.26), se deduce la ecuación de Chapman-Kolmogorov

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}_3, t_3 | \mathbf{x}_1, t_1) &= \int_{\mathbb{R}^m} P^{(1)}(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_1, t_1) \cdot P^{(1)}(\mathbf{x}_3, t_3 | \mathbf{x}_2, t_2) d^m \mathbf{x}_2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^m} P(\mathbf{x}_3, t_3 | \mathbf{x}_2, t_2) \cdot P(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_1, t_1) d^m \mathbf{x}_2. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Esta ecuación puede ser reescrita de dos maneras de las cuales se pueden generar ecuaciones dinámicas para $P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)$. Ahora, para este fin tenemos dos opciones: variar las condiciones finales (\mathbf{x}, t) , manteniendo la condición inicial fija (\mathbf{x}_0, t_0) , o dejar fija la condición final y variar las condiciones iniciales. Para el primer caso, la ecuación especial multivariada de Chapman-Kolmogorov dice

$$P(\mathbf{x}, t + dt | \mathbf{x}_0, t_0) = \int_{\mathbb{R}^m} P(\mathbf{x}, t + dt | \mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, t) \cdot P(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, t | \mathbf{x}_0, t_0) d^m \boldsymbol{\xi}. \quad (1.29)$$

Para el segundo caso, la ecuación especial multivariada de Chapman-Kolmogorov dice

$$P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) = \int_{\mathbb{R}^m} P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi}, t_0 + dt_0) \cdot P(\mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi}, t_0 + dt_0 | \mathbf{x}_0, t_0) d^m \boldsymbol{\xi}. \quad (1.30)$$

Si definimos la función $f(\mathbf{x})$ de la siguiente manera

$$f(\mathbf{x}) \equiv P(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}, t + dt | \mathbf{x}, t) P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0), \quad (1.31)$$

el integrando en (1.29), es igual a esta función evaluada en $\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}$; esto es

$$f(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}) = P(\mathbf{x}, t + dt | \mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, t) \cdot P(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, t | \mathbf{x}_0, t_0).$$

Si suponemos que podemos expandir a esta función en su serie de Taylor alrededor de \mathbf{x} ; y además, que esta serie converge de manera uniforme

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}, t + dt | \mathbf{x}_0, t_0) &= \int_{\mathbb{R}^m} P(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}, t + dt | \mathbf{x}, t) P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) d^m \boldsymbol{\xi} + \\ &+ \int_{\mathbb{R}^m} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_m=0 \\ k_1 + \dots + k_m = n}}^n \frac{1}{k_1! \dots k_m!} \frac{\partial^{(n)}}{\partial^{k_1} x_1 \dots \partial^{k_m} x_m} [\cdot \\ &\cdot P(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}, t + dt | \mathbf{x}, t) P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)] (-\xi_1)^{k_1} \dots (-\xi_m)^{k_m} d^m \boldsymbol{\xi} \end{aligned}$$

Uno de los dos términos de la primera integral del lado derecho no depende de $\boldsymbol{\xi}$, así que, como una constante, lo podemos sacar de la integral, además debido a las condiciones de normalización; ecuación (1.5b), esa integral integra a uno; esto es

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}, t + dt | \mathbf{x}_0, t_0) &= P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \underbrace{\int_{\mathbb{R}^m} P(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}, t + dt | \mathbf{x}, t) d^m \boldsymbol{\xi}}_1 + \\ &+ \int_{\mathbb{R}^m} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_m=0 \\ k_1 + \dots + k_m = n}}^n \frac{1}{k_1! \dots k_m!} \frac{\partial^{(n)}}{\partial^{k_1} x_1 \dots \partial^{k_m} x_m} [\cdot \\ &\cdot P(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}, t + dt | \mathbf{x}, t) P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)] (-\xi_1)^{k_1} \dots (-\xi_m)^{k_m} d^m \boldsymbol{\xi}. \end{aligned}$$

Restando $P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)$ de ambos lados de la igualdad y dividiendo entre dt

$$\begin{aligned} \frac{P(\mathbf{x}, t + dt | \mathbf{x}_0, t_0) - P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)}{dt} &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_m=0 \\ k_1+\dots+k_m=n}}^n \frac{\partial^{(n)}}{\partial^{k_1} x_1 \dots \partial^{k_m} x_m} \left[\frac{1}{dt} \frac{1}{k_1! \dots k_m!} \right. \\ &\cdot \int_{\mathbf{R}^m} (-\xi_1)^{k_1} \dots (-\xi_m)^{k_m} P(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}, t + dt | \mathbf{x}, t) d^m \boldsymbol{\xi} \cdot \\ &\left. \cdot P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \right]. \end{aligned}$$

Ahora, si tomamos el límite cuando dt tiende a 0; suponiendo que existe, y definimos las funciones $B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}, t)$ como los límites de las integrales

$$B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}, t) \equiv \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{1}{dt} \frac{1}{k_1! \dots k_m!} \int_{\mathbf{R}^m} \xi_1^{k_1} \dots \xi_m^{k_m} P(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}, t + dt | \mathbf{x}, t) d^m \boldsymbol{\xi}, \quad (1.32)$$

podemos reescribir la última igualdad de las ecuaciones anteriores como

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_m=0 \\ k_1+\dots+k_m=n}}^n (-1)^n \frac{\partial^{(n)}}{\partial^{k_1} x_1 \dots \partial^{k_m} x_m} \left[B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}, t) P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \right] \quad (1.33)$$

Este conjunto infinito de ecuaciones parciales se denomina las *ecuaciones de Kramers y Moyal hacia adelante*⁸. A las funciones $B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}, t)$, se les suele denominar la *enésima función conjunta de los momentos del propagador*

$$\Xi[dt; \mathbf{x}, t] = (\Xi_1[dt; \mathbf{x}, t], \dots, \Xi_m[dt; \mathbf{x}, t]). \quad (1.34)$$

Como mencionamos antes, podemos encontrar ecuaciones dinámicas para la función condicionada $P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)$, pero ahora para la dinámica que tiene el límite inferior; manteniendo el superior fijo. Para ello definimos a $h(\mathbf{x}_0)$ como

$$h(\mathbf{x}_0) \equiv P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0 + dt_0) \quad (1.35)$$

Entonces, el primer factor del integrando en (1.30) es igual a $h(\mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi})$. Expandiendo en su serie de Taylor (haciendo las mismas suposiciones para esta serie que las que se hicieron para f) llegamos a la siguiente secuencia de expresiones

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) &= \int_{\mathbf{R}^m} P(\mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi}, t_0 + dt_0 | \mathbf{x}_0, t_0) P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0 + dt_0) d^m \boldsymbol{\xi} + \dots \\ &\cdot + \int_{\mathbf{R}^m} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_m=0 \\ k_1+\dots+k_m=n}}^n \frac{P(\mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi}, t_0 + dt_0 | \mathbf{x}_0, t_0)}{k_1! \dots k_m!} \frac{\partial^{(n)}}{\partial^{k_1} x_{0k_1} \dots \partial^{k_m} x_{0k_m}} [\\ &\cdot P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0 + dt_0)] \xi_1^{k_1} \dots \xi_m^{k_m} d^m \boldsymbol{\xi} \end{aligned} \quad (1.36)$$

⁸El nombre fue acuñado en Inglés *forward Kramers-Moyal equations*, y “hacia adelante” hace alusión a que la evolución temporal es hacia el futuro a partir de una cierta condición inicial.

La primera integral, integra a uno debido a la condición de normalización; ecuación (1.5b), en la función $P(\mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi}, t_0 + dt_0 | \mathbf{x}_0, t_0)$

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) &= P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0 + dt_0) \int_{\mathbb{R}^m} P(\mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi}, t_0 + dt_0 | \mathbf{x}_0, t_0) d^m \boldsymbol{\xi} + \cdot \\ &\quad \cdot + \int_{\mathbb{R}^m} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_m=0 \\ k_1 + \dots + k_m=n}} \frac{P(\mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi}, t_0 + dt_0 | \mathbf{x}_0, t_0)}{k_1! \dots k_m!} \frac{\partial^{(n)}}{\partial^{k_1} x_{0k_1} \dots \partial^{k_m} x_{0k_m}} [\\ &\quad \cdot P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0 + dt_0)] \xi_1^{k_1} \dots \xi_m^{k_m} d^m \boldsymbol{\xi}. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Restando de ambos lados $P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0 + dt_0)$, dividiendo entre dt_0 y tomando el límite cuando éste tiende a cero, llegamos a lo que se conoce como las *ecuaciones de Kramers y Moyal hacia atrás*

$$-\frac{\partial P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)}{\partial t_0} = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\substack{k_1, \dots, k_m=0 \\ k_1 + \dots + k_m=n}} B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}_0, t_0) \frac{\partial^{(n)}}{\partial^{k_1} x_{0k_1} \dots \partial^{k_m} x_{0k_m}} [P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0 + dt_0)], \quad (1.38)$$

en donde; análogamente al caso anterior, las funciones $B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}_0, t_0)$ están definidas por

$$B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}_0, t_0) \equiv \lim_{dt_0 \rightarrow 0} \frac{1}{dt_0} \frac{1}{k_1! \dots k_m!} \int_{\mathbb{R}^m} \xi_1^{k_1} \dots \xi_m^{k_m} P(\mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi}, t_0 + dt_0 | \mathbf{x}_0, t_0) d^m \boldsymbol{\xi}. \quad (1.39)$$

Ahora nos viene muy bien el esfuerzo de abstracción realizado en la sección anterior, puesto que podemos expresar “explícitamente” las funciones $B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}, t)$ y $B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}_0, t_0)$, para un proceso de Markov continuo multivariado. Esto se sigue directamente de la relación (1.25)

$$\begin{aligned} B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}, t) &= \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{1}{dt} \frac{1}{k_1! \dots k_m!} \int_{\mathbb{R}^m} \xi_1^{k_1} \dots \xi_m^{k_m} P(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}, t + dt | \mathbf{x}, t) d^m \boldsymbol{\xi} \\ &= \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{1}{dt} \frac{1}{k_1! \dots k_m!} \int_{\mathbb{R}^m} \xi_1^{k_1} \dots \xi_m^{k_m} \prod(\boldsymbol{\xi} | dt; \mathbf{x}, t) d^m \boldsymbol{\xi} \\ &= \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{1}{dt} \frac{1}{k_1! \dots k_m!} \langle \Xi_1^{k_1}[dt; \mathbf{x}, t] \dots \Xi_m^{k_m}[dt; \mathbf{x}, t] \rangle, \end{aligned} \quad (1.40)$$

$$\begin{aligned} B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}_0, t_0) &= \lim_{dt_0 \rightarrow 0} \frac{1}{dt_0} \frac{1}{k_1! \dots k_m!} \int_{\mathbb{R}^m} \xi_1^{k_1} \dots \xi_m^{k_m} P(\mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi}, t_0 + dt_0 | \mathbf{x}_0, t_0) d^m \boldsymbol{\xi} \\ &= \lim_{dt_0 \rightarrow 0} \frac{1}{dt_0} \frac{1}{k_1! \dots k_m!} \int_{\mathbb{R}^m} \xi_1^{k_1} \dots \xi_m^{k_m} \prod(\boldsymbol{\xi} | dt; \mathbf{x}_0, t_0) d^m \boldsymbol{\xi} \\ &= \lim_{dt_0 \rightarrow 0} \frac{1}{dt_0} \frac{1}{k_1! \dots k_m!} \langle \Xi_1^{k_1}[dt_0; \mathbf{x}_0, t_0] \dots \Xi_m^{k_m}[dt_0; \mathbf{x}_0, t_0] \rangle \end{aligned} \quad (1.41)$$

Analizando la ecuación de Langevin (1.22), podemos deducir que para cualesquieras funciones diferenciables, las integrales en las funciones $B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}, t)$, serán al menos del orden $O(dt^{3/2})$,

por lo que al ser divididas por dt y tomar el límite cuando éste tiende a cero se anularán, en resumen

$$B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} B_{0, \dots, j, \dots, 0}^{(1)}(\mathbf{x}, t) = A_j[\mathbf{x}, t], \\ B_{0, \dots, k, \dots, 0}^{(2)}(\mathbf{x}, t) = D_k(\mathbf{x}, t), \\ B_{0, \dots, 1, \dots, 1, 0}^{(2)}(\mathbf{x}, t) = C_{ij}[\mathbf{x}, t], \\ B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}, t) = 0 & 3 \leq n. \end{cases} \quad (1.42)$$

Análogamente

$$B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}_0, t_0) = \begin{cases} B_{0, \dots, j=1, \dots, 0}^{(1)}(\mathbf{x}_0, t_0) = A_j[\mathbf{x}_0, t_0], \\ B_{0, \dots, k=2, \dots, 0}^{(2)}(\mathbf{x}_0, t_0) = D_k(\mathbf{x}_0, t_0), \\ B_{0, \dots, i=1, \dots, j=1, \dots, 0}^2(\mathbf{x}_0, t_0) = C_{ij}[\mathbf{x}_0, t_0], \\ B_{k_1, \dots, k_m}^{(n)}(\mathbf{x}_0, t_0) = 0 & n \geq 3. \end{cases} \quad (1.43)$$

Naturalmente se tiene que cumplir que $k_1 + k_2 + \dots + k_m = n$. Entonces las ecuaciones de Kramers y Moyal hacia adelante se reducen a las *ecuaciones de Fokker-Planck hacia adelante*⁹

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0)}{\partial t} = & - \sum_{k=1}^m \frac{\partial}{\partial x_k} [A_k[\mathbf{x}, t]P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0)] + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^m \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} [D_k[\mathbf{x}, t]P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0)] + \\ & + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^m \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [C_{ij}[\mathbf{x}, t]P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0)], \end{aligned} \quad (1.44)$$

y las ecuaciones de Kramers-Moyal hacia atrás se reducen a las *ecuaciones de Fokker-Planck hacia atrás*

$$\begin{aligned} -\frac{\partial P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0)}{\partial t_0} = & \sum_{k=1}^m A_k[\mathbf{x}_0, t_0] \frac{\partial}{\partial x_{0k}} [P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0)] + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^m D_k[\mathbf{x}_0, t_0] \frac{\partial^2}{\partial x_{0k}^2} [P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0)] + \\ & + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^m C_{ij}[\mathbf{x}_0, t_0] \frac{\partial^2}{\partial x_{0i} \partial x_{0j}} [P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0)]. \end{aligned} \quad (1.45)$$

1.4. Procesos temporalmente homogéneos

Usando la ecuación de Chapman-Kolmogorov (1.28), y la relación fundamental entre $\Pi(\boldsymbol{\xi}|dt; \mathbf{x}, t)$ y $P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0)$, podemos deducir que P debe de satisfacer para cualquier Δt y

⁹En [50, cap.5] puede encontrarse una discusión más extensa al respecto de las ecuaciones de Fokker-Planck y de su deducción a partir de las ecuaciones de Kramers y Moyal, al igual que sus aplicaciones a las ciencias naturales.

cualquier valor de $\alpha \in (0, 1)$

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t | \mathbf{x}, t) &= \int_{\mathbb{R}^m} P(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}, t + \Delta t | \mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_1, t + \alpha \Delta t) P(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_1, t + \alpha \Delta t | \mathbf{x}, t) d^m \boldsymbol{\xi}_1 \\ &= \int_{\mathbb{R}^m} P(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_1 + \boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_1, t + \alpha \Delta t + (1 - \alpha) \Delta t | \mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_1, t + \alpha \Delta t) \cdot \\ &\quad \cdot P(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_1, t + \alpha \Delta t | \mathbf{x}, t) d^m \boldsymbol{\xi}_1. \end{aligned} \quad (1.46)$$

Ahora, si tomamos el límite cuando Δt tiende a cero, y usamos la dicha relación fundamental (1.25), llegamos a

$$\Pi(\boldsymbol{\xi} | dt; \mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^m} \Pi(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_1 | (1 - \alpha)dt; \mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_1, t + \alpha dt) \Pi(\boldsymbol{\xi}_1 | \alpha dt; \mathbf{x}, t) d^m \boldsymbol{\xi}_1. \quad (1.47)$$

A esta última expresión (1.47) se le denomina la *condición de Chapman-Kolmogorov* en la función de densidad del propagador. Podemos hacer aún más si reescribimos esta última expresión usando la delta de Dirac

$$\Pi(\boldsymbol{\xi} | dt; \mathbf{x}, t) = \int_{\mathbb{R}^m} \int_{\mathbb{R}^m} \Pi(\boldsymbol{\xi}_1 | \alpha dt; \mathbf{x}, t) \cdot \Pi(\boldsymbol{\xi}_2 | (1 - \alpha)dt; \mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}_1, t + \alpha dt) \delta(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}_1 - \boldsymbol{\xi}_2) d^m \boldsymbol{\xi}_2 d^m \boldsymbol{\xi}_1 \quad (1.48)$$

y miramos este resultado desde el punto de vista del teorema de transformación de variables aleatorias (RVT¹⁰); ya que, esto implica la siguiente relación entre las siguientes 3 variables aleatorias

$$\mathbf{\Xi}[dt; \mathbf{X}(t), t] = \mathbf{\Xi}[\alpha dt; \mathbf{X}(t), t] + \mathbf{\Xi}[(1 - \alpha)dt; \mathbf{X}(t) + \mathbf{\Xi}[\alpha dt; \mathbf{X}(t), t], t + \alpha dt]. \quad (1.49)$$

Esta relación dice que el cambio del proceso \mathbf{X} entre t y $t + dt$, es igual al cambio sufrido entre en el intervalo $[t, t + \alpha dt]$, más el subsecuente cambio sufrido en el intervalo $[t + \alpha dt, t + dt]$, partiendo de cierta configuración intermedia $\mathbf{X}(t) + \mathbf{\Xi}[\alpha dt; \mathbf{X}(t), t]$. Esta relación entre las variables aleatorias debe satisfacerse al menor orden en dt , para todo $\alpha \in (0, 1)$ y es una piedra angular en la estimación del tamaño del error cometido al aproximar dt en la ecuación de Langevin (1.6) por Δt finito.

Existe una generalización de la ecuación de Chapman-Kolmogorov (1.28), que nos será de utilidad para lo que desarrollaremos posteriormente. Simplemente es componer la misma premisa que se utilizó para deducirla. Esta dice lo siguiente

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}_n, t_n | \mathbf{x}_0, t_0) &= \int_{\mathbb{R}^m} \cdots \int_{\mathbb{R}^m} P(\mathbf{x}_n, t_n; \mathbf{x}_{n-1}, t_{n-1}; \dots; \mathbf{x}_1, t_1 | \mathbf{x}_0, t_0) d^m \mathbf{x}_{n-1} \cdots d^m \mathbf{x}_1 \\ &= \int_{\mathbb{R}^m} \cdots \int_{\mathbb{R}^m} \prod_{i=0}^{n-1} P(\mathbf{x}_{i+1}, t_{i+1} | \mathbf{x}_i, t_i) d^m \mathbf{x}_{n-1} \cdots d^m \mathbf{x}_1. \end{aligned} \quad (1.50)$$

¹⁰Este teorema dice que si el proceso $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^n$ está definido de manera canónica a través de una función de densidad de probabilidad $P(\mathbf{x}) d^n \mathbf{x}$, y el campo $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^m$ está definido por las relaciones $y_j = f_j(\mathbf{x})$, entonces la función de densidad de probabilidad conjunta para estas nuevas variables aleatorias está dada por $Q(\mathbf{y}) = \int_{\mathbb{R}^n} P(\mathbf{x}) \delta^{(n)}(\mathbf{y} - f(\mathbf{x})) d^n \mathbf{x}$. Nótese que este resultado contiene como caso particular el teorema del límite central, y es más general que los cambios de coordenadas en donde es indispensable que la transformación sea una biyección diferenciable en los dos sentidos.

La primera igualdad se sigue simplemente de la definición de funciones conjuntas de densidad, junto con la ley de multiplicación de probabilidades, o en otras palabras el método de condicionamiento total; y la segunda se sigue de aplicar iterativamente la propiedad de Markov (1.26).

A pesar de no ser evidente a partir de la relación (1.25), que un conocimiento de función de densidad del propagador Π , implica, en principio, que podemos conocer o computar P , a partir de la cual, todo lo que es prudente preguntarse acerca del proceso $\mathbf{X}(t)$, puede ser contestado. Para justificar esta aseveración, en la ecuación compuesta de Chapman-Kolmogorov (1.50), sea $t_n = t$ cualquier valor mayor a t_0 , y dividamos el intervalo $[t_0, t_n]$ en n pedazos de igual tamaño $(t - t_0)/n$, definidos por los puntos $P = \{t_0, t_1, t_2, \dots, t_{n-1}, t_n\}$. También necesitamos hacer el cambio de variable definido por

$$\boldsymbol{\xi}_i \equiv \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{i-1}; \quad i = 1, \dots, n-1. \quad (1.51)$$

No es difícil ver que el determinante del jacobiano de esta transformación es unitario

$$\left| \frac{\partial(\boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_{n-1})}{\partial(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1})} \right| = 1, \quad (1.52)$$

por lo que los respectivos elementos de volumen coinciden $d^m \boldsymbol{\xi}_1 \cdots d^m \boldsymbol{\xi}_{n-1} = d^m \mathbf{x}_1 \cdots d^m \mathbf{x}_{n-1}$. Además se cumple la siguiente relación entre las variables “nuevas” y las “viejas”

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_{i-1} + \boldsymbol{\xi}_i = [\mathbf{x}_{i-2} + \boldsymbol{\xi}_{i-1}] + \boldsymbol{\xi}_i = \cdots = \mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi}_1 + \cdots + \boldsymbol{\xi}_i. \quad (1.53)$$

Ahora, si renombramos $\mathbf{x}_n = \mathbf{x}$, y definimos $\boldsymbol{\xi}_n \equiv \mathbf{x} - \mathbf{x}_{n-1}$, estas modificaciones transforman a la ecuación compuesta de Chapman-Kolmogorov (1.50) en

$$P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) = \int_{\mathbb{R}^m} \cdots \int_{\mathbb{R}^m} \prod_{i=1}^n P(\mathbf{x}_{i-1} + \boldsymbol{\xi}_i, t_{i-1} + (t - t_0)/n | \mathbf{x}_{i-1}, t_{i-1}) d^m \boldsymbol{\xi}_1 \cdots d^m \boldsymbol{\xi}_{n-1} \quad (1.54)$$

Más aún, si suponemos que n es suficientemente grande para que podamos considerar a $(t - t_0)/n$ como un infinitésimo dt

$$P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) = \int_{\mathbb{R}^m} \cdots \int_{\mathbb{R}^m} \prod_{i=1}^n \Pi(\boldsymbol{\xi}_i | dt; \mathbf{x}_{i-1}, t_{i-1}) d^m \boldsymbol{\xi}_1 \cdots d^m \boldsymbol{\xi}_{n-1}, \quad (1.55)$$

en donde están tomando lugar todas las siguientes consideraciones y definiciones

$$t_i = t_{i-1} + (t - t_0)/n \quad (i = 1, \dots, n-1) \quad (1.56)$$

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_0 + \boldsymbol{\xi}_1 + \cdots + \boldsymbol{\xi}_i \quad (i = 1, \dots, n-1) \quad (1.57)$$

$$\boldsymbol{\xi}_n \equiv \mathbf{x} - \mathbf{x}_0 - \boldsymbol{\xi}_1 - \cdots - \boldsymbol{\xi}_{n-1}, \quad (1.58)$$

junto con que $dt \equiv (t - t_0)/n$ es infinitesimal. Este resultado (1.55), implica que si especificamos Π como una función de $\boldsymbol{\xi}$ para toda \mathbf{x}' , todo $t' \in [t_0, t]$, y todos los infinitesimales dt , entonces P queda determinada unívocamente para todo \mathbf{x} .

Ahora pasemos a ver qué podemos inferir de esta última relación cuando el proceso es temporalmente homogéneo. Decimos que un proceso markoviano continuo es *temporalmente homogéneo* si la función de densidad del propagador Π (y por lo tanto el propagador mismo Ξ) no depende explícitamente del tiempo. Esto no implica que $\mathbf{X}(t)$ y $P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0)$, no puedan depender explícitamente del tiempo¹¹. No es raro encontrarse algún fenómeno en la naturaleza que sea temporalmente homogéneo, y si esta homogeneidad no elimina por completo la dependencia explícita en el tiempo, sí simplifica las cosas; ya que, si Π no depende explícitamente del tiempo, la relación (1.55) se reduce a

$$P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0) = \int_{\mathbb{R}^m} \cdots \int_{\mathbb{R}^m} \prod_{i=1}^n \Pi(\boldsymbol{\xi}_i | dt; \mathbf{x}_{i-1}) d^m \boldsymbol{\xi}_1 \cdots d^m \boldsymbol{\xi}_{n-1}. \quad (1.59)$$

Esta ecuación, junto con las definiciones (1.56), sólo involucran al tiempo a través de la diferencia $t - t_0$, por lo que podemos concluir que cuando \mathbf{X} es temporalmente homogéneo, $P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0)$ tiene la propiedad

$$P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0) = P(\mathbf{x}, t - t_0|\mathbf{x}_0, 0), \quad (1.60)$$

y, como consecuencia, no es difícil ver que

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0) = -\frac{\partial}{\partial t_0} P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0). \quad (1.61)$$

Para ellos sólo basta tomar $s \equiv t - t_0$, tal que $P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0) = P(\mathbf{x}, s|\mathbf{x}_0, 0)$ y usar la regla de la cadena.

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0) = \frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{x}, s|\mathbf{x}_0, 0) = \frac{\partial}{\partial s} P(\mathbf{x}, s|\mathbf{x}_0, 0) \frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial s} P(\mathbf{x}, s|\mathbf{x}_0, 0), \quad (1.62)$$

y de forma similar,

$$\frac{\partial}{\partial t_0} P(\mathbf{x}, t|\mathbf{x}_0, t_0) = \frac{\partial}{\partial t_0} P(\mathbf{x}, s|\mathbf{x}_0, 0) = \frac{\partial}{\partial s} P(\mathbf{x}, s|\mathbf{x}_0, 0) \frac{\partial s}{\partial t_0} = -\frac{\partial}{\partial s} P(\mathbf{x}, s|\mathbf{x}_0, 0) \quad (1.63)$$

razón por la cual, si se cumple (1.60), se sigue (1.61).

subamortiguado

¹¹La situación es similar a la que se encuentra en mecánica clásica, en donde una fuerza que no depende explícitamente del tiempo ($m\ddot{\mathbf{x}} = F(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = m\mathbf{g}$), puede inducir una dependencia explícita en la posición ($\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}_0 + \mathbf{v}t + 1/2\mathbf{g}(t - t_0)^2$), o en la velocidad ($\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_0 + \mathbf{gt}$).

Capítulo 2

Termodinámica y mecánica estadística fuera de equilibrio

Debido a que este trabajo de investigación guarda una íntima relación teórica con la ecuación de Langevin (el algoritmo numérico es una versión discreta de esta ecuación), y con la ecuación de Fokker-Planck (con la cual validamos el algoritmo), en esta sección discutiremos de manera informal cómo pueden deducirse a partir de primeros principios¹. Decimos primeros principios porque el problema relacionado al movimiento Browniano que habría que resolver es en realidad el problema de $N+1$ cuerpos. Las ecuaciones de Langevin y de Fokker-Planck para las variables de la partícula de interés; la partícula browniana, no involucran de manera explícita la interacción de esta partícula con cada una de las partículas que constituyen el baño térmico, así que es natural preguntarse cómo podemos obtener estas ecuaciones a partir de las ecuaciones para las $N+1$ partículas haciendo ciertas aproximaciones o promediando de cierta manera el efecto del baño térmico.

No es para nada obvio por qué la fuerza en la ecuación de Langevin, para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck, se puede descomponer precisamente en dos términos, siendo que el origen de esos términos es el mismo: el baño térmico. Por qué precisamente esa forma analítica es lo que se intentará describir en esta sección.

Es obvio que lo que necesitamos es obtener una ecuación dinámica solo para el conjunto de variables asociadas a la partícula de interés; de la ecuación de Liouville obtendremos la ecuación de Fokker-Planck y de la ecuación para la evolución de una función de las variables dinámicas obtendremos la ecuación de Langevin.

Para extraer la información de las variables representativas se usará el método de los operadores de proyección. Nuestra finalidad no es ser totalmente rigurosos; solo pretendemos hacer parecer razonables la estructura de estas ecuaciones y la serie de argumentos que se utilizan para obtenerlas. Para los detalles más finos referimos a la bibliografía pertinente.

La existencia de soluciones estacionarias a la ecuación de Fokker-Planck, aún cuando las condiciones *no* sean las del equilibrio termodinámico, está relacionada con la reversibilidad microscópica, que a su vez tiene consecuencias a escala mesoscópica: el *balance detallado*. Lo

¹Como se describe en el capítulo I, también pueden ser deducidas usando ciertas suposiciones razonables para los sistemas macroscópicos; el teorema del límite central juega un papel protagónico. Sin embargo, no es tan fácil apreciar sus limitaciones o lo artificial que puede ser suponer una fuerza delta correlacionada en el tiempo.

cual, como veremos en el siguiente capítulo, es equivalente a las *condiciones de potencial*. Hermann Haken y Robert Graham demuestran en un par de trabajos [63, 61] que las condiciones de balance detallado, implican una serie de relaciones entre los términos de la matriz de difusión, que son equivalentes al teorema de reciprocidad de Lars Onsager [122, 123]. Para poder discutir en el siguiente capítulo esta equivalencia, es necesario hacer un breve resumen de algunos conceptos y resultados de la termodinámica irreversible. Éste es el propósito de esta primera parte de este capítulo. Una vez definido y enunciado estos conceptos pasaremos a discutir el génesis de las ecuaciones de Langevin y de Fokker-Planck.

2.1. Termodinámica irreversible

Los postulados de la termodinámica de equilibrio [16] son

- **Postulado I.** Existen estados especiales (denominados estados de equilibrio), que macroscópicamente están caracterizados completamente cuando se especifica su energía interna y un conjunto de parámetros extensivos X_1, X_2, \dots, X_t
- **Postulado II.** Existe una función denominada entropía, que es función de los parámetros extensivos, definida para todos los estados de equilibrio, que tiene la siguiente propiedad: los valores asumidos por los parámetros extensivos en ausencia de una restricción son aquellos que maximizan esta función sobre la *variedad* de estados de equilibrio constreñidos.
- **Postulado III.** La entropía de un sistema compuesto es *aditiva* sobre los subsistemas que lo constituyen, por lo que es una función homogénea de grado uno de los parámetros extensivos. La entropía es continua diferenciable y es una función monotónica creciente de la energía interna.
- **Postulado IV.** La entropía de cualquier sistema se anula en el estado en el cual $T \equiv \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{X_1, X_2, \dots} = 0$

Los postulados de la mecánica estadística de equilibrio son

- Para todo sistema macroscópico existe un número enorme² de micro estados accesibles $\Omega(E, \{X\})$, dada las restricciones a las que están sometidos los parámetros macroscópicos $\{X\}$. El sistema realiza transiciones entre estos estados microscópicos sin ninguna restricción; esto es, podemos observar o medir al sistema en cualquiera de ellos.

²Cualquier sistema puede ser descrito, en teoría, por un conjunto de f números cuánticos [130]. Asociado con cada uno de estos números cuánticos, existe una cierta contribución ϵ a la energía total E del sistema. Sea $\varphi(\epsilon)$ el número total de valores que uno de estos números cuánticos puede asumir cuando su energía es menor a ϵ . Entonces $\varphi \approx 1$ cuando $\epsilon = \epsilon_0$ el menor valor que pueda asumir. Excepto en casos excepcionales, $\varphi(\epsilon)$ deberá aumentar, en una aproximación burda, proporcional a la diferencia de energía $\varphi(\epsilon) \sim (\epsilon - \epsilon_0)^\alpha$, en donde $\alpha \approx 1$. La energía del todo el sistema que está por encima de su estado base es proporcional a la energía promedio por encima de la mínima, por grado de libertad $E - E_0 \sim f(\epsilon - \epsilon_0)$. Si $\Phi(E)$ es el número de estados accesibles al sistema cuando su energía es menor que E , entonces si $\Omega(E)$ denota el número total de estados accesibles al sistema cuando su energía está contenida entre E y $E + \delta E$, $\Omega(E) = \frac{d}{dE}\Phi(E)\delta E$. Por lo tanto, si $\Phi(E) \sim [\varphi(\epsilon)]^f$, entonces $\Omega(E) \sim (\epsilon - \epsilon_0)^{\alpha f - 1}$.

- Si el sistema no puede comunicarse con su entorno; está aislado, todos estos estados microscópicos accesibles tienen la misma probabilidad de ocurrencia. Espacio de probabilidad es equiprobable *a priori*.

La termodinámica irreversible es el estudio de la velocidad específica con que los sistemas tienden al equilibrio, una vez que se han aislado y se les deja a su suerte. En la mecánica estadística de no equilibrio, además de los dos postulados anteriores se le incluye un nuevo postulado en el que se asume que las leyes de la física permanecen invariantes bajo la transformación de inversión temporal; esto es, que si el tiempo t , es reemplazado en todas las relaciones por $-t$ y el campo magnético \mathbf{B} es reemplazado por $-\mathbf{B}$, las leyes de la física permanecen invariantes.

2.1.1. Afinidades y flujos

A pesar de que los estados de equilibrio resultan ser muy útiles, el interés suele estar enfocado más en los procesos que sobre estos estados que se alcanzan en el equilibrio. Es cierto que la termodinámica de equilibrio puede decir algo al respecto de estos procesos, como por ejemplo la posibilidad de que ocurran de forma espontánea, pero a esta escapa toda noción de la tasa o velocidad con la que ocurren los procesos. La *termodinámica irreversible* es la extensión de la termodinámica que hace referencia a estas velocidades de ocurrencia.

Necesitamos definir dos cantidades *fuerzas* que son las responsables de conducir los procesos y ciertas cantidades que caractericen la respuesta del sistema a estas fuerzas

Consideremos un sistema compuesto por dos partes y los parámetros extensivos relativos a cada una de las partes X_k y X'_k respectivamente. Si el sistema compuesto está cerrado del exterior; esto es, si se cumple la condición de *cerradura*

$$X_k + X'_k = X_k^\circ. \quad (2.1)$$

Si estos parámetros no están restringidos de modo alguno, sus valores en el equilibrio están determinados por la condición de máxima entropía asociada al sistema completo. Si definimos

$$\mathcal{F}_k = \left(\frac{\partial S^\circ}{\partial X_k} \right)_{X_k^\circ} = \left(\frac{\partial(S + S')}{\partial X_k} \right) = \frac{\partial S}{\partial X_k} - \frac{\partial S'}{\partial X'_k} = F_k - F'_k, \quad (2.2)$$

entonces, si $\mathcal{F}_k = 0$, el sistema está en equilibrio; sin embargo, si $\mathcal{F}_k \neq 0$, ocurrirá un procesos irreversible. La cantidad \mathcal{F}_k , que es la diferencia de los valores de los parámetros intensivos en la representación de la entropía, se comporta como una *fuerza generalizada* que conduce al proceso hacia su estado de equilibrio. A estas fuerzas generalizadas se les denomina *afinidades*. Por ejemplo, si $X_k = U$ la energía interna, entonces la afinidad es

$$\mathcal{F}_k = \frac{1}{T} - \frac{1}{T'}. \quad (2.3)$$

Caracterizamos la respuesta a una cierta fuerza aplicada como la velocidad a la que cambia un cierto parámetro extensivo X_k . El *flujo* entonces queda definido como

$$J_k \equiv \frac{dX_k}{dt}. \quad (2.4)$$

Por lo tanto, los flujos se anularán cuando las afinidades se anulen. Esta relación entre flujos y afinidades es la que caracteriza la velocidad con la que se dan los procesos irreversibles. Para identificar las afinidades en un sistema particular, es conveniente considerar la velocidad a la que se produce la entropía $S(X_0, X_1, \dots)$, si diferenciamos con respecto al tiempo

$$\frac{dS}{dt} = \sum_k \frac{\partial S}{\partial X_k} \frac{dX_k}{dt} = \sum_k \mathcal{F}_k J_k. \quad (2.5)$$

Esto es, la velocidad de producción de entropía está dada como la suma del producto de las afinidades \mathcal{F}_k con sus respectivos flujos asociados J_k . A su vez, esta relación es muy útil al momento de considerar medios continuos. Ya que por ejemplo, en una barra metálica en donde hay una distribución continua de temperaturas, no es inmediato como calcular la afinidad en 2.3; sin embargo, podremos calcular la velocidad con la que se produce entropía e inferir de ahí cuáles son las afinidades.

Ahora consideremos sistemas tridimensionales, a través de los cuales fluye materia y energía. En este caso, los flujos serán relativos no tan solo al parámetro extensivo si no también a la dirección de flujo de este parámetro; esto es, J_{kz} denotará el flujo en la dirección z del parámetro extensivo k . Teniendo el propósito de identificar las afinidades en estos sistemas, nos gustaría encontrar una relación análoga a 2.5, pero inmediatamente nos encontramos con la necesidad de definir a la entropía en un sistema fuera de equilibrio. Para ello, asociamos una *entropía local* S en el punto \mathbf{p} como $S(\mathbf{p}) = S(X_0(\mathbf{p}), X_1(\mathbf{p}), \dots)$, que por definición, la dependencia funcional entre S y los *parámetros extensivos locales*, es la misma que en equilibrio. Por lo tanto

$$dS = \sum_k F_k dX_k. \quad (2.6)$$

Si las cantidades están referidas por unidad de volumen esta relación sería

$$ds = \sum_k F_k dx_k. \quad (2.7)$$

Como aquí hemos dividido entre el volumen, esta suma tiene un sumando menos que la anterior. También asumimos que la dependencia entre los parámetros intensivos locales $F_k(\mathbf{p})$ y los parámetros extensivos locales $\{X_k(\mathbf{p})\}$, es la misma que en el equilibrio. La ecuación 2.6 sugiere una definición de *flujo de entropía*

$$\mathbf{J}_S = \sum_k F_k \mathbf{J}_k, \quad (2.8)$$

dada como la suma de los productos entre los parámetros intensivos locales y el flujo del parámetro extensivo local. El cambio total de entropía en un volumen infinitesimal tendrá dos orígenes: uno debido al aumento de entropía dentro del volumen y otro a la entropía que abandona este volumen. Así que si denotamos como $\partial s / \partial t$ al aumento de entropía por unidad de volumen y como \dot{s} a la velocidad con que se produce la entropía, tendremos

$$\dot{s} = \frac{\partial s}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_S. \quad (2.9)$$

Análogamente, si los parámetros extensivos se conservan (tal como la energía o el número de moles cuando no hay reacciones químicas), los parámetros extensivos satisfarán una ecuación de continuidad

$$0 = \frac{\partial x_k}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_k. \quad (2.10)$$

De 2.7, el aumento de entropía por unidad de volumen estará dado por

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \sum_k F_k \frac{\partial x_k}{\partial t}, \quad (2.11)$$

mientras que, de 2.8, la divergencia del flujo de entropía

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_S = \nabla \cdot \left(\sum_k F_k \mathbf{J}_k \right) = \sum_k \nabla F_k \cdot \mathbf{J}_k + \sum_k F_k \nabla \cdot \mathbf{J}_k, \quad (2.12)$$

por lo tanto

$$\dot{s} = \sum_k F_k \frac{\partial x_k}{\partial t} + \sum_k \nabla F_k \cdot \mathbf{J}_k + \sum_k F_k \nabla \cdot \mathbf{J}_k, \quad (2.13)$$

en donde se cancelan el primer y tercer términos. Por lo tanto, la producción de entropía en un volumen infinitesimal del espacio estará dada por

$$\dot{s} = \sum_k \nabla F_k \cdot \mathbf{J}_k. \quad (2.14)$$

Lo cual quiere decir que mientras las afinidades están definidas como las diferencias entre los parámetros en los sistemas discretos, en el caso de sistemas continuos estarán dadas por los gradientes de estos parámetros intensivos.

2.1.2. Procesos markovianos en contextos físicos

La dependencia entre los flujos y las afinidades usualmente sólo depende de la configuración actual del sistema; esto es, generalmente los flujos no dependen de los valores que asumieron las afinidades en el pasado; de la historia de estos valores, si no solamente de la configuración actual

$$J_k = J_k(\mathcal{F}_0, \mathcal{F}_1, \dots; F_0, F_1, \dots, F_j, \dots). \quad (2.15)$$

Es por esto que a estos sistemas físicos se les suele denominar markovianos o *puramente resistivos*. En este caso, si expandimos estos flujos en una serie de Taylor en potencias de las afinidades

$$J_k = \sum_j L_{jk} \mathcal{F}_j + \frac{1}{2!} \sum_{i,j} L_{ijk} \mathcal{F}_i \mathcal{F}_j + \dots, \quad (2.16)$$

en donde

$$L_{jk} = \left(\frac{\partial J_k}{\partial \mathcal{F}_j} \right)_0 \quad \text{y} \quad L_{ijk} = \left(\frac{\partial^2 J_k}{\partial \mathcal{F}_i \partial \mathcal{F}_j} \right)_0,$$

son los *coeficientes cinéticos* de primer y segundo orden respectivamente. Estos dependerán de los diferentes parámetros intensivos de los que dependa el sistema

$$L_{jk} = L_{jk}(F_0, F_1, \dots). \quad (2.17)$$

Dentro de estos parámetros intensivos, habrá algunos que sean simétricos ante la inversión temporal ($t \rightarrow -t$), y otros que cambien de signo, tal como el campo de inducción magnética. Denotémoslos a todos estos que cambian de signo con el elemento representativo \mathbf{B}

$$L_{jk} = L_{jk}(\mathbf{B}). \quad (2.18)$$

El teorema de reciprocidad de Lars Onsager dice que los coeficientes cinéticos L_{jk} tienen la siguiente característica

$$L_{jk} = L_{jk}(\mathbf{B}) = L_{jk} = L_{kj}(-\mathbf{B}). \quad (2.19)$$

2.1.3. Procesos lineales

Existen muchos escenarios físicos en donde las desviaciones con respecto a los estados de equilibrio son pequeñas en el siguiente sentido

$$J_k = \sum_j L_{jk} \mathcal{F}_j. \quad (2.20)$$

Esto es, los términos \mathcal{F}_j son pequeños tal que en la expansión de Taylor de J_k sólo es necesario conservar el primer término distinto de cero. El término constante de esta expansión es nulo ya que sabemos que cuando las afinidades se anulan, los flujos también se anulan.

Por ejemplo, sabemos que cuando hay un gradiente de temperatura, habrá un flujo de calor (ley de Fourier)

$$\mathbf{J}_0 = -\kappa \nabla T. \quad (2.21)$$

Podemos reescribir esta relación de la siguiente manera

$$\mathbf{J}_{0z} = -\kappa T^2 \nabla_z \left(\frac{1}{T} \right), \quad (2.22)$$

en donde podemos apreciar que el coeficiente cinético es κT^2 , la conductividad térmica veces el cuadrado de la temperatura abosoluta; esto, función del parámetro intensivo T , y el flujo en la dirección z está dado como el producto de este coeficiente cinético veces la afinidad.

2.2. Ecuación de Liouville

Ahora abordaremos el problema del movimiento Browniano como el problema de $N + 1$ cuerpos. Pensemos en un sistema de $N + 1$ partículas; una partícula browniana de masa M mucho mayor que todas las demás masas m que constituyen el baño térmico. Para simplificar la notación $(\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1}) := (x_1, y_1, z_1, x_2, \dots, z_{N+1}, p_{x,1}, p_{y,1}, \dots, p_{z,N+1})$ denota un punto en el *espacio fase* del sistema. Denotaremos como $d^{N+1}\mathbf{r} d^{N+1}\mathbf{p}$ a un elemento de volumen del espacio fase de $6(N + 1)$ dimensiones. La función de probabilidad para las posiciones

y momentos de las $N + 1$ partículas quedará denotada por $f_{N+1}(\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1}, t)$ de la cual podemos eliminar información de las variables que no nos interesan sumando (integrando) sobre estas variables

$$f_{N+1}^{(n+1)}(\mathbf{r}^{n+1}, \mathbf{p}^{n+1}, t) = \frac{N!}{(N-n)!} \int f_{N+1}(\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1}, t) d^{N-n} \mathbf{r} d^{N-n} \mathbf{p}, \quad (2.23)$$

(la integral se realiza sobre un conjunto de $N - n$ variables), cuyas normalizaciones están dadas por

$$\int f_{N+1}(\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1}, t) d^{N+1} \mathbf{r} d^{N+1} \mathbf{p} = 1, \quad (2.24)$$

y

$$\int f_{N+1}^{(n+1)}(\mathbf{r}^{n+1}, \mathbf{p}^{n+1}, t) d^{n+1} \mathbf{r} d^{n+1} \mathbf{p} = \frac{N!}{(N-n)!}, \quad (2.25)$$

respectivamente. Por ejemplo, la función de distribución para la posición y el momento de la partícula browniana en la que centraremos nuestra atención, se obtiene integrando sobre todas las partículas que constituyen el baño térmico

$$f_B(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0, t) = \int f_{N+1}(\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1}, t) d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p}. \quad (2.26)$$

Como aplicaremos operadores lineales a estas distribuciones, sería conveniente trabajar en un espacio vectorial del que sean elementos. Sin embargo la normalización y ser positivas no necesariamente se conserva bajo la aplicación de suma y multiplicación por escalares.

Las trayectorias de la evolución de un sistema mecánico en el espacio fase no se interseccinan. Esto es porque en general, si la evolución está definida a través de un campo vectorial (diferenciable) $\mathbf{F}(x)$, éste define un flujo o grupo de difeomorfismos de un parámetro $g^t(\cdot)$ del espacio fase en sí mismo. De teoremas bien establecidos en la teoría de ecuaciones diferenciables, se sigue la existencia y unicidad de las trayectorias y la dependencia suave con respecto a las condiciones iniciales $(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0)$, si se satisfacen ciertas condiciones. Al aplicar la ley de evolución a todo un conjunto de condiciones iniciales se obtiene, para el caso de que la evolución esté determinada por las leyes de Newton el siguiente conocido teorema [97, 59, 6, 65].

Teorema 2.2.1 (Teorema de Liouville). El flujo hamiltoniano es un flujo incompresible.

*Demuestra*ción. Supongamos que la evolución de un sistema se puede describir mediante una ecuación diferencial, o lo que es equivalente, está dada por un campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Entonces la evolución de algún punto del espacio fase (\mathbf{r}, \mathbf{p}) estará dada por la acción de un grupo de difeomorfismos³ $g^t(\cdot)$

$$g^t(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = g^0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) + \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p})t + O(t^2). \quad (2.27)$$

³Un difeomorfismo g^t de un parámetro, es una función entre dos conjuntos $g^t : A \rightarrow B$, tal que para cada valor del parámetro t , g^t es una biyección, y por lo tanto tiene inversa $[g^t]^{-1} : B \rightarrow A$, y en donde g^t como $[g^t]^{-1}$ son diferenciables.

Si consideramos la evolución de toda una región $D(0)$ del espacio fase, cuyo volumen $V(0)$ está dado por la integral

$$V(0) = \int_{D(0)} d^n \mathbf{r} d^n \mathbf{p}. \quad (2.28)$$

Su evolución en el tiempo estará dada cuando el difeomorfismo $g^t(\cdot)$ actúe sobre cada punto (\mathbf{r}, \mathbf{p}) de esta región del espacio fase

$$D(t) = g^t[D(0)]. \quad (2.29)$$

El movimiento de esta región puede estudiarse como si resultase de una transformación de coordenadas del espacio fase en sí mismo, por lo tanto

$$V(t) = \int_{D(0)} \det \frac{\partial g^t(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial (\mathbf{r}, \mathbf{p})} d^n \mathbf{r} d^n \mathbf{p}. \quad (2.30)$$

Como para cualquier matriz A se cumple

$$\det(E + At) = 1 + \text{Tr}(A)t + O(t^2), \quad (2.31)$$

y de la ecuación 2.27 podemos expresar al jacobiano de la transformación

$$\frac{\partial g^t(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial (\mathbf{r}, \mathbf{p})} = E + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial (\mathbf{r}, \mathbf{p})} t + O(t^2). \quad (2.32)$$

Combinando estos dos resultados

$$\det \left[\frac{\partial g^t(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial (\mathbf{r}, \mathbf{p})} \right] = 1 + \text{Tr} \left[\frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial (\mathbf{r}, \mathbf{p})} \right] t + O(t^2). \quad (2.33)$$

La traza de la matriz jacobiana del campo vectorial es la divergencia del campo vectorial

$$\text{Tr} \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial (\mathbf{r}, \mathbf{p})} = \text{div}(\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p})). \quad (2.34)$$

Por lo tanto podemos expresar al volumen de la región como función del tiempo de la siguiente manera

$$V(t) = \int_{D(0)} [1 + \text{div}(\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}))t] d^n \mathbf{r} d^n \mathbf{p} + O(t^2), \quad (2.35)$$

entonces la variación inicial ($t = 0$) en el tiempo de este volumen está dada por

$$\left. \frac{dV(t)}{dt} \right|_{t=0} = \int_{D(0)} \text{div}(\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p})) d^n \mathbf{r} d^n \mathbf{p}. \quad (2.36)$$

Ahora, si el campo que consideramos es un campo Hamiltoniano $\mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = (\partial_{\mathbf{p}} H, -\partial_{\mathbf{r}} H)$, o lo que es equivalente, si la evolución del sistema está regida por las leyes de Newton, es inmediato ver que esta variación es cero debido a que el campo vectorial hamiltoniano es de divergencia nula. \square

Para encontrar la ley de evolución de la función de distribución f_{N+1} asociada a nuestro sistema de $N + 1$ partículas, supongamos que el sistema está en el punto $(\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1})$ al tiempo t ; entonces, insoslayablemente estará en el punto $(\mathbf{r}^{N+1} + \delta\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1} + \delta\mathbf{p}^{N+1})$ al tiempo $t + \delta t$, en donde $\delta\mathbf{r}^{N+1}$ y $\delta\mathbf{p}^{N+1}$ no son incrementos arbitrarios, si no que están dados por las ecuaciones de Hamilton, el cual genera una evolución determinista; no aleatoria o estocástica. Por lo tanto, la probabilidad de estar en ambos puntos del espacio fase en los respectivos tiempos señalados: debe ser la misma

$$f_{N+1}(\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1}, t) = f_{N+1}(\mathbf{r}^{N+1} + \delta\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1} + \delta\mathbf{p}^{N+1}, t + \delta t). \quad (2.37)$$

La aleatoriedad surge porque no necesariamente sabemos con certeza si el sistema se encuentra ahí en un momento determinado, sólo sabemos que lo podemos observar con una cierta probabilidad en un elemento de volumen; esto es, surge debido a que no tenemos la información completa de las condiciones iniciales, lo cual ocurre casi siempre en los sistemas macroscópicos o sistemas con un número de variables o grados de libertad del orden del número de Avogadro. La aleatoriedad surge (y prevalece) debido a esta falta de información, la cual se puede incorporar o manejar con una función de distribución en las condiciones iniciales.

Expandiendo en una serie de Taylor el lado derecho alrededor del punto $(\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1}, t)$

$$\begin{aligned} & f_{N+1}(\mathbf{r}^{N+1} + \delta\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1} + \delta\mathbf{p}^{N+1}, t + \delta t) = \\ & f_{N+1}(\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1}, t) + \frac{\partial f_{N+1}}{\partial t} + \sum \delta\mathbf{p}_j \cdot \nabla_{\mathbf{p}_j} f_{N+1} + \sum \delta\mathbf{r}_j \cdot \nabla_{\mathbf{r}_j} f_{N+1} + o(\delta t). \end{aligned} \quad (2.38)$$

Si ahora tomamos en cuenta que los desplazamientos en \mathbf{r} y \mathbf{p} no son arbitrarios si no los que resultan de evolucionar en el tiempo de acuerdo a las leyes de Newton, esto es si

$$\delta\mathbf{r}_j = \dot{\mathbf{r}}_j \delta t + o(\delta t), \quad (2.39)$$

$$\delta\mathbf{p}_j = \dot{\mathbf{p}}_j \delta t + o(\delta t), \quad (2.40)$$

en donde $\dot{\mathbf{r}}_j$ y $\dot{\mathbf{p}}_j$ están determinados por las ecuaciones de Hamilton

$$\dot{\mathbf{r}}_j = \nabla_{\mathbf{p}_j} H, \quad (2.41)$$

$$\dot{\mathbf{p}}_j = -\nabla_{\mathbf{r}_j} H. \quad (2.42)$$

Sustituyendo el lado derecho de la relación 2.38 en la igualdad 2.37, usando las relaciones 2.39, cuando están definidas por 2.41, cancelando términos y tomando el límite cuando δt tiende a cero

$$\frac{\partial f_{N+1}}{\partial t} + \sum_{j=1}^{N+1} [\nabla_{\mathbf{p}_j} H \cdot \nabla_{\mathbf{r}_j} f_{N+1} - \nabla_{\mathbf{r}_j} H \cdot \nabla_{\mathbf{p}_j} f_{N+1}] = 0, \quad (2.43)$$

que es la *ecuación de Liouville*. Ésta puede ser reescrita usando los *corchetes de Poisson*, de la siguiente manera

$$\frac{\partial f_{N+1}}{\partial t} + \{f_{N+1}, H\}_{(\mathbf{r}, \mathbf{p})} = 0. \quad (2.44)$$

Para nuestros propósitos es conveniente expresar esta ecuación en términos de operadores y mejor aún si estos son auto-adjuntos. Esto se consigue escribiendo la relación anterior de la siguiente manera

$$i \frac{\partial f_{N+1}}{\partial t} = L_{N+1} f_{N+1}, \quad (2.45)$$

en donde L_{N+1} es el operador (auto-adjunto) de Liouville asociado a las $N + 1$ partículas y está dado por

$$L_{N+1} := -i \{H, \cdot\}_{(\mathbf{r}, \mathbf{p})}. \quad (2.46)$$

La *solución formal* de esta última ecuación está dada por [10, 127]

$$f_{N+1}(t) = e^{-iL_{N+1}t} f_{N+1}(0). \quad (2.47)$$

En donde

$$e^{-iL_{N+1}t} := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-it)^k}{k!} L_{N+1}^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \{H, \cdot\}_{(\mathbf{r}, \mathbf{p})}^k, \quad (2.48)$$

y

$$L_{N+1}^k := \underbrace{L_{N+1} \circ L_{N+1} \circ \cdots \circ L_{N+1}}_{k \text{ veces}}, \quad (2.49)$$

aplicado k veces.

2.3. Ecuación de R. Zwanzig

Para deducir las ecuaciones que rigen la evolución de una partícula de masa M , la cual es mucho mayor a la masa m del resto de las partículas, cuyas variables identificaremos con el subíndice 0, partiendo de primeros principios, necesitamos considerar la función hamiltoniana del sistema de $N + 1$ partículas, cuya interacción sólo depende de la separación entre ellas, el cual está dado por

$$H = \frac{\mathbf{p}_0^2}{2M} + \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{0 \leq i < j}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = H_0 + H_B. \quad (2.50)$$

Definamos a f y a g como las funciones que resultan de proyectar con \wp , un operador de proyección; por el momento, arbitrario, sobre la solución de la ecuación de Liouville f_{N+1} , definida en la relación 2.47

$$\wp f_{N+1} = f, \quad (2.51)$$

$$(1 - \wp) f_{N+1} = g. \quad (2.52)$$

Decimos que f es la parte *relevante* y g la parte *irrelevante* de f_{N+1} . Por supuesto que relevante o irrelevante dependerán del problema específico con el que se esté tratando. Usando el operador de proyección \wp , podemos obtener un par de ecuaciones diferenciales acopladas

para f y para g . Para ello, suponemos que conocemos f y resolvemos para g en términos de f y sustituimos esta solución en la ecuación para f produciendo una ecuación inhomogénea. Esto es, proyectamos la ecuación de Liouville 2.45, suponiendo que el operador de derivada temporal $\partial/\partial t$ conmuta con el de proyección φ , obtenemos

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \varphi f_{N+1}}{\partial t} &= \varphi L_{N+1} f_{N+1} = \varphi L_{N+1} (\varphi f_{N+1} + (1 - \varphi) f_{N+1}) \\ &= \varphi L_{N+1} (f + g), \\ i \frac{\partial (1 - \varphi) f_{N+1}}{\partial t} &= (1 - \varphi) L_{N+1} f_{N+1} = (1 - \varphi) L_{N+1} (\varphi f_{N+1} + (1 - \varphi) f_{N+1}) \\ &= (1 - \varphi) L_{N+1} (f + g), \end{aligned}$$

que en términos de f y g dicen

$$i \frac{\partial f}{\partial t} = \varphi L_{N+1} (f + g), \quad (2.53)$$

$$i \frac{\partial g}{\partial t} = (1 - \varphi) L_{N+1} (f + g). \quad (2.54)$$

Ahora resolvemos la ecuación para g suponiendo que conocemos f . Ésta es una ecuación lineal no homogénea que podemos resolver multiplicando por el factor integrante $\exp i(1 - \varphi)Lt$. Para simplificar un poco la notación usaremos $L \equiv L_{N+1}$ como equivalentes. Partimos de

$$\frac{\partial g}{\partial t} + i(1 - \varphi)Lg = -i(1 - \varphi)Lf, \quad (2.55)$$

entonces

$$e^{i(1-\varphi)Lt} \frac{\partial g}{\partial t} + e^{i(1-\varphi)Lt} i(1 - \varphi)Lg = -ie^{i(1-\varphi)Lt} (1 - \varphi)Lf. \quad (2.56)$$

Los dos primeros términos los podemos escribir como la derivada parcial de un producto

$$\frac{\partial}{\partial t} [e^{i(1-\varphi)Lt} g] = -ie^{i(1-\varphi)Lt} (1 - \varphi)Lf, \quad (2.57)$$

e integrando de 0 a t , y multiplicando por $\exp -i(1 - \varphi)Lt$ para poder despejar $g(t)$, obtenemos

$$g(t) = e^{-i(1-\varphi)Lt} g(0) - i \int_0^t e^{-i(1-\varphi)L(t-s)} (1 - \varphi)Lf(s) ds, \quad (2.58)$$

que también podemos escribir haciendo el cambio de variable $\xi = t - s$, como

$$g(t) = e^{-i(1-\varphi)Lt} g(0) + i \int_t^0 e^{-i(1-\varphi)L(\xi)} (1 - \varphi)Lf(t - \xi) d\xi. \quad (2.59)$$

Ahora, como ξ es una variable muda de integración, cambiando los límites de integración de 0 a t

$$g(t) = e^{-i(1-\varphi)Lt} g(0) + i \int_t^0 e^{-i(1-\varphi)L(s)} (1 - \varphi)Lf(t - s) ds. \quad (2.60)$$

Si sustituimos esta ecuación 2.60 en la primera ecuación de Eq. 2.53, obtenemos

$$i \frac{\partial f}{\partial t} = \wp L f - i \int_0^t \wp L e^{-i(1-\wp)Ls} (1 - \wp) L f(t-s) ds + \wp L e^{-i(1-\wp)Lt} g(0). \quad (2.61)$$

Ésta es la ecuación de Robert Zwanzig⁴ [163, 164, 165], la cual puede decirse que es una versión alternativa a la ecuación de Liouville; aún no hemos hecho ninguna aproximación. Si definimos al operador de proyección como

$$\wp \phi(\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1}) = f_N^{eq}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) \int \phi(\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1}) d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p},$$

en donde

$$f_N^{eq}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) := \frac{e^{-\beta H(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)}}{\int e^{-\beta H(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)} d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p}}, \quad (2.62)$$

es la función de densidad de distribución de equilibrio para el baño térmico, en presencia de la partícula browniana *fija*. No es difícil ver que $\wp f_{N+1}(\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1}) = f_N^{eq}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) f_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0)$. También, es fácil ver⁵ que el operador de Liouville iL_0 aplicado a una función escalar ϕ se anula

$$iL_0 \phi = 0. \quad (2.63)$$

La multiplicación por f_N^{eq} es por principalmente dos razones. La primera porque asume una independencia estadística entre el baño térmico y la partícula browniana; en la escala de tiempo de la partícula browniana se anulan las correlaciones que pudiese tener con la dinámica del baño térmico, y para garantizar que el resultado de proyectar una función definida en el espacio fase $(\mathbf{r}^{N+1}, \mathbf{p}^{N+1})$ se obtenga otra función definida con el mismo dominio. Podemos reducir la ecuación 2.61 a la ecuación de Fokker-Planck para la función de distribución $f_{N+1}^1(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0)$ para la posición y para el momento o velocidad de la partícula browniana [106, 99, 88], el cual será nuestro sistema de estudio

$$\wp \left(\frac{\mathbf{p}_0}{M} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_0} \right) (1 - \wp) = 0. \quad (2.64)$$

Esta identidad se demuestra calculando

$$\wp \frac{\mathbf{p}_0}{M} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_0} \phi = \frac{\mathbf{p}_0}{M} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_0} \phi - \frac{\mathbf{p}_0}{M} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_0} \ln f_N^{eq} \wp \phi, \quad (2.65)$$

⁴Podría no ser justo adjudicarle este nombre a esta ecuación, ya que muchas personas dedujeron ecuaciones equivalentes antes [112, 111, 75, 128, 129, 131, 132, 89]; sin embargo, Zwanzig [165] demostró la equivalencia entre las más importantes y probablemente por esta razón Robert Mazo la denominó así.

⁵Lo demostramos para el caso de una dimensión y el lector verá que la generalización para más dimensiones es inmediata

$$\begin{aligned} iL_0 \phi &= f_N^{eq} \int_{\mathbb{R}^2} \left\{ \frac{p}{m} \frac{\partial \phi}{\partial q} + F \frac{\partial \phi}{\partial p} \right\} dq dp = f_N^{eq} \int_{\mathbb{R}^2} \left\{ \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial \phi}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial \phi}{\partial p} \right\} dq dp = \\ &= f_N^{eq} \left\{ \int_{\mathbb{R}} \left[H \frac{\partial \phi}{\partial q} \right]_{\partial \Omega(p)} dq - \int_{\mathbb{R}^2} H \frac{\partial^2 \phi}{\partial p \partial q} dp dq - \int_{\mathbb{R}} \left[H \frac{\partial \phi}{\partial p} \right]_{\partial \Omega(q)} dp + \int_{\mathbb{R}^2} H \frac{\partial^2 \phi}{\partial p \partial q} dp dq \right\} = 0 \end{aligned}$$

y después tomando $\phi = (1 - \wp)\psi$ y usando la propiedad de todo operador de proyección $\wp(1 - \wp) = 0$ Podemos eliminar el término $g(0)$ si lo definimos como $g(0) = 0$, y como $g = f_{N+1} - f_N^{eq}f_{N+1}^{(1)}$ esto es equivalente a asumir que al tiempo $t = 0$, la partícula Browniana se encuentra en un baño térmico en equilibrio térmico y mecánico. Esta distribución no es una solución de la ecuación de Liouville y el equilibrio no prevalecerá ya que la partícula Browniana desplazará al baño térmico ligeramente fuera del equilibrio; sin embargo, el equilibrio se establecerá de nuevo después de un tiempo suficientemente largo. Entonces, usando 2.63 y 2.64 en 2.61 vemos que podemos escribir la ecuación de Zwanzig como

$$\frac{\partial f_{N+1}^{(1)}}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_0}{M} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_0} f_{N+1}^{(1)} = \nabla_{\mathbf{p}_0} \cdot \int_0^t \langle \mathbf{F}_0 e^{i(1-\wp)L(t-s)} \mathbf{F}_0 \rangle_b \left(\nabla_{\mathbf{p}_0} + \frac{\mathbf{p}_0}{MkT} \right) f_{N+1}^{(1)}(s) ds. \quad (2.66)$$

Por definición, $\mathbf{F}(t) = e^{i(1-\wp)Lt} \mathbf{F}_0$, y $\mathbf{F}_0 = (1 - \wp)iL\mathbf{p}_0$ por lo tanto podemos escribir el promedio $\langle \cdots \rangle_b$ de la siguiente manera

$$\langle \mathbf{F}_0 e^{i(1-\wp)L(t-s)} \mathbf{F}_0 \rangle_b = \langle \mathbf{F}(0) \mathbf{F}(t-s) \rangle_0. \quad (2.67)$$

Si la autocorrelación de la fuerza total sobre la partícula browniana decae suficientemente rápido; por ejemplo, exponencialmente rápido, la ecuación de Zwanzig se convierte en la ecuación de Fokker-Planck para las variables $(\mathbf{r}_0, \mathbf{p}_0)$

$$\frac{\partial f_{N+1}^{(1)}}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_0}{M} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_0} f_{N+1}^{(1)} = \nabla_{\mathbf{p}_0} \cdot \zeta \left(\nabla_{\mathbf{p}_0} + \frac{\mathbf{p}_0}{MkT} \right) f_{N+1}^{(1)}, \quad (2.68)$$

en donde definimos

$$\zeta = \frac{1}{MkT} \int_0^\infty \langle \mathbf{F}(t) \mathbf{F}(0) \rangle_0 dt, \quad (2.69)$$

como el coeficiente de fricción. Nótese, el coeficiente de fricción ahora está relacionado con cantidades moleculares, y aunque posiblemente sea extremadamente complicado calcularlo de manera explícita, ya no es un parámetro que se tenga que determinar de manera empírica.

2.4. Ecuación de H. Mori

Así como en mecánica cuántica podemos enfocar nuestra descripción en la evolución de los estados $|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hbar^{-1}Ht}|\Psi(0)\rangle$, que satisfacen la ecuación de Schrödinger $i\hbar\partial_t|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle$, y con estos calcular la función de distribución $|\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle|^2$ y usarla para calcular cantidades físicas u observables, también podemos pensar que la evolución la llevan los operadores $\hat{O}(t) = e^{i\hbar^{-1}Ht}\hat{O}e^{-i\hbar^{-1}Ht}$ y a su vez éstos satisfacerán $\frac{d\hat{O}(t)}{dt} = 1/i\hbar[\hat{O}, \hat{H}]$ (si \hat{H} no depende explícitamente del tiempo) [138].

Análogamente, en física estadística, podemos centrar nuestra atención, en lugar de en la función de distribución de nuestro sistema f_{N+1} de $N+1$ partículas, centrarla en una función de algún subconjunto de variables dinámicas, que por el momento denotaremos de manera general como \mathbf{A} y eventualmente la asociaremos con el momento de la partícula browniana \mathbf{p}_0 .

Como mencionamos, sea $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$ una función de las variables dinámicas que no depende explícitamente del tiempo; su dependencia en éste está inducida por la dependencia de las variables dinámicas.

Aunque el espacio de funciones de distribución⁶ no forma un espacio vectorial en sí mismo, ya que la suma de dos de estas funciones o el producto de un escalar por alguna de esta no resulta en una función que necesariamente sigue estando normalizada; esté en el espacio, podemos usar como ambiente $L^1(\Omega)$: el espacio vectorial de las funciones absolutamente integrables, dentro del cual, forman un subconjunto; no un *subespacio vectorial*, las funciones de distribución.

En este espacio podemos definir una *norma*⁷ de una función en este espacio como

$$\|\mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p})\|^2 := \int f_{N+1}^{eq} |\mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p})|^2 d^{N+1}\mathbf{r} d^{N+1}\mathbf{p} \quad (2.70)$$

y un *producto escalar*⁸ como

$$(\mathbf{A}, \mathbf{B}) := \int f_{N+1}^{eq} A^*(\mathbf{r}, \mathbf{p}) B(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d^{N+1}\mathbf{r} d^{N+1}\mathbf{p}, \quad (2.71)$$

en donde

$$f_{N+1}^{eq} = \frac{e^{-[\beta H_{N+1}(\mathbf{r}, \mathbf{p})]}}{Z_{N+1}}, \quad (2.72)$$

es la función de distribución de equilibrio dado el operador o función hamiltoniana H_{N+1} y Z_{N+1} es la función de partición del sistema de $N + 1$ partículas. Naturalmente, la norma es la inducida por este producto escalar. De la misma forma que encontramos en la sección 2.2 una ecuación de evolución para la función de distribución f_{N+1} podemos deducir que $\mathbf{A}(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$ satisface

$$\frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} = iL_{N+1}\mathbf{A}(t), \quad (2.73)$$

⁶Funciones normalizables a la unidad y para esto tienen que decaer suficientemente rápido

$$|f(x)| \leq \frac{C}{1 + |x|^{1+\epsilon}}$$

con $\epsilon > 0$, C es una constante positiva y en donde x es la posición o el momento de la partícula. Naturalmente, esta condición se puede extender a más dimensiones.

⁷Una *norma* [44] es una función $\|\cdot\| : V \rightarrow \mathbb{R}^+ \cup \{0\}$ de un espacio vectorial en los reales no negativos que satisface:

$$\begin{aligned} \|v\| = 0 &\iff v = 0 \\ \|\lambda v\| &= |\lambda| \|v\| \quad \forall v \in V \text{ y } \forall \lambda \in \mathbb{R} \\ \|v + w\| &\leq \|v\| + \|w\| \quad \forall v, w \in V \end{aligned}$$

⁸Definimos un producto escalar [144] en un espacio vectorial V sobre \mathbb{R} como una función que asocia a cualquier par X, Y elementos de V un número real que denotamos como (X, Y) , que debe ser simétrico $(X, Y) = (Y, X)$, lineal en ambas variables $(\alpha X + \beta Y, Z) = \alpha(X, Z) + \beta(Y, Z)$, y análogamente con la segunda entrada, y positivo definido $(X, X) \geq 0$. Con éste podemos definir una norma en V como $\|X\| = (X, X)^{1/2}$. Si en lugar de que el espacio vectorial V esté definido sobre los números reales \mathbb{R} está definido sobre los números complejos \mathbb{C} entonces el producto escalar (X, Y) es un número complejo y se denominan *hermitianos* ya que tienen que satisfacer $(X, Y) = \overline{(Y, X)}$.

y cuya solución formal está dada por

$$\mathbf{A}(t) := \mathbf{A}(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t)) = e^{iLt} \mathbf{A}(\mathbf{r}(0), \mathbf{p}(0)). \quad (2.74)$$

Sustituyendo en la ecuación anterior e insertando el operador de identidad usando los operadores de proyección⁹ $1 = (\wp + (1 - \wp))$

$$\frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} = iLe^{iLt} \mathbf{A}(0) = e^{iLt} iL\mathbf{A}(0) = e^{iLt} (\wp + (1 - \wp)) iL\mathbf{A}(0). \quad (2.75)$$

Si ahora usamos al operador de proyección particular

$$\wp(\mathbf{B}) := \frac{(\mathbf{A}(0), \mathbf{B})}{(\mathbf{A}(0), \mathbf{A}(0))} \mathbf{A}(0), \quad (2.76)$$

en el primer término de la ecuación 2.75

$$e^{iLt} i\wp L\mathbf{A}(0) = e^{iLt} \frac{(iL\mathbf{A}(0), \mathbf{A}(0))}{(\mathbf{A}(0), \mathbf{A}(0))} \mathbf{A}(0) = i\Omega \mathbf{A}(t). \quad (2.77)$$

Para el segundo término de la ecuación 2.75 necesitamos una identidad para los operadores C y D que dice¹⁰

$$e^{(C+D)s} = e^{Cs} + \int_0^s e^{C(s-\xi)} De^{(C+D)\xi} d\xi = e^{Cs} + \int_0^s e^{(C+D)s} De^{C(s-u)} du. \quad (2.78)$$

Ahora, usándola para el operador $\exp iLt$, tomando $C = i(1 - \wp)Lt$ y $D = i\wp Lt$ y haciendo un cambio de variable $\xi = t - u$, obtenemos la siguiente identidad

$$e^{iLt} = e^{i(1-\wp)Lt} + \int_0^t e^{iL(t-\xi)} i\wp Le^{i(1-\wp)L\xi} d\xi. \quad (2.79)$$

⁹La definición de operador de proyección del álgebra lineal dice [46]

Definición (Operador de Proyección). Sea V un espacio vectorial y W_1 y W_2 subespacios de V tal que $V = W_1 \bigoplus W_2$, en donde \bigoplus denota *suma directa* de conjuntos. Una función lineal $T : V \rightarrow V$ se denomina una *proyección* sobre W_1 a lo largo de W_2 si, para $x = x_1 + x_2$ con $x_1 \in W_1$ y $x_2 \in W_2$, se tiene $T(x) = x_1$.

Los operadores de proyección satisfacen de manera general $\wp^2 = \wp$, esto es, son idempotentes, por lo tanto se cumple $\wp(1 - \wp) = 0$. Para una aproximación enfocada a este contexto de proyectar sobre un conjunto de variables reducido véase [166].

¹⁰Para demostrar esta identidad escribimos $e^{(C+D)s} = A^{Cs} J(s)$ y diferenciamos con respecto a s

$$(C + D)e^{(C+D)s} = e^{Cs} \dot{J}(s) + Ce^{Cs} J(s).$$

Cancelando $Ce^{(C+D)s}$ con $Ce^{Cs} J(s)$ obtenemos $\dot{J}(s) = e^{-Cs} De^{(C+D)s}$. De la definición, $J(0) = 1$, así que si integramos esta ecuación

$$J(s) = 1 + \int_0^s e^{-C\xi} De^{(C+D)\xi} d\xi.$$

Por último, multiplicando por e^{Cs} y usando la definición de J , obtenemos la identidad 2.78. Si hubiésemos partido de $e^{(C+D)s} = K(s)e^{Cs}$, hubiésemos llegado a la identidad alternativa $e^{(C+D)s} = e^{As} + \int_0^s e^{(C+D)\xi} De^{C(s-\xi)} d\xi$.

Ahora si este operador actua por la izquierda en $(1 - \wp)iL\mathbf{A}(0)$ obtenemos

$$e^{iLt}(1 - \wp)iL\mathbf{A}(0) = e^{i(1-\wp)Lt} (1 - \wp)iL\mathbf{A}(0) + \int_0^t e^{iL(t-\xi)} i\wp L e^{i(1-\wp)L\xi} (1 - \wp)iL\mathbf{A}(0) d\xi. \quad (2.80)$$

Definimos la fuerza “estocástica” $\mathbf{F}(t)$ como

$$\mathbf{F}(t) := e^{i(1-\wp)Lt} (1 - \wp)iL\mathbf{A}(0), \quad (2.81)$$

la cual tiene la siguiente propiedad: $\mathbf{F}(t) = (1 - \wp)\mathbf{F}(t)$, debido a que $\wp(1 - \wp) = 0$ por ser operadores de proyección y porque $\mathbf{F}(t)$ está definida como una serie de potencias en $i(1 - \wp)L$, así que la identidad la deja igual y el otro sumando cancela toda la serie término por término. En términos de esta fuerza

$$e^{iLt}(1 - \wp)iL\mathbf{A}(0) = \mathbf{F}(t) + \int_0^t e^{iL(t-\xi)} i\wp L \mathbf{F}(\xi) d\xi. \quad (2.82)$$

$$\begin{aligned} i\wp L \mathbf{F}(\xi) &= \frac{(iL\mathbf{F}(\xi), \mathbf{A}(0))}{(\mathbf{A}(0), \mathbf{A}(0))} \mathbf{A}(0) = \frac{(iL(1 - \wp)\mathbf{F}(\xi), \mathbf{A}(0))}{(\mathbf{A}(0), \mathbf{A}(0))} \mathbf{A}(0) = \\ &= \frac{(\mathbf{F}(\xi), (1 - \wp)iL\mathbf{A}(0))}{(\mathbf{A}(0), \mathbf{A}(0))} \mathbf{A}(0) = \\ &= \frac{(\mathbf{F}(\xi), \mathbf{F}(0))}{(\mathbf{A}(0), \mathbf{A}(0))} \mathbf{A}(0) =: K(\xi) \mathbf{A}(0). \end{aligned} \quad (2.83)$$

En donde hemos usado el hecho de que $(1 - \wp)$ y iL son auto-adjuntos¹¹. Como $K(t)$ es un

¹¹Para ver que L es auto-adjunto o *hermitiano*, basta con demostrar que

$$(A, LB) = (B, LA)^*$$

En donde el producto escalar es el que está definido en 2.71.

Teorema. L es auto-adjunto.

Demostración. Lo demostramos para el caso de 1 dimensión; la generalización a más dimensiones es inmediata. Integrando por partes vemos, de la definición de L en 2.46, que

$$\begin{aligned} (A, LB) &= \int_{\mathbb{R}^2} \frac{e^{[-\beta H]}}{Z} A^* \left\{ i \left(\frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} \right) \right\} dq dp = i \left[\int_{\mathbb{R}} \left[A^* \frac{e^{[-\beta H]}}{Z} \frac{\partial H}{\partial p} B \right]_{-\infty}^{\infty} dq - \right. \\ &\quad \left. - \int_{\mathbb{R}^2} [B \frac{\partial}{\partial q} (A^* \frac{e^{[-\beta H]}}{Z} \frac{\partial H}{\partial p})] dp dq - \int_{\mathbb{R}} \left[A^* \frac{e^{[-\beta H]}}{Z} \frac{\partial H}{\partial q} B \right]_{-\infty}^{\infty} dq + \int_{\mathbb{R}^2} \left[B \frac{\partial}{\partial q} (A^* \frac{e^{[-\beta H]}}{Z} \frac{\partial H}{\partial q}) \right] dp dq \right] \\ &= i \int_{\mathbb{R}^2} \frac{e^{[-\beta H]}}{Z} B \left\{ A^* \beta \left(\frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} \right) + \left\{ \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial A^*}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial A^*}{\partial q} \right\} + A^* \left(\frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q} - \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p} \right) \right\} dq dp \\ &= \int_{\mathbb{R}^2} \frac{e^{[-\beta H]}}{Z} B L A^* dq dp = \left(\int_{\mathbb{R}^2} \frac{e^{[-\beta H]}}{Z} B^* L^* A dq dp \right)^* = (B, LA)^* = (LA, B) \end{aligned}$$

Donde hemos usado que los términos en la frontera se anulan y que el campo hamiltoniano es de divergencia nula. \square

operador escalar, conmuta con $e^{iL(t-\xi)}$

$$\frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} = i\Omega\mathbf{A}(t) + \mathbf{F}(t) + \int_0^t K(\xi) \mathbf{A}(t - \xi) d\xi. \quad (2.84)$$

Ésta es la ecuación de H. Mori [116, 114, 115] también conocida como *ecuación de Langevin generalizada*. Sólo hemos reescrito la ley de evolución para la variable dinámica \mathbf{A} usando la técnica de operadores de proyección φ . Es posible generalizar esta ecuación a más dimensiones, para cada componente se tendría

$$\frac{dA_i}{dt} = i \sum_k \Omega_{ik} A_k(t) + \int_0^t \sum_j K_{ij}(t-s) A_j(s) ds + F_i(t), \quad (2.85)$$

en donde

$$K_{ij}(s) = (F_i(s), F_j(0)) / (A_j(0), A_j(0)), \quad (2.86)$$

es una función escalar conocida como *kernel de memoria*. Esta ecuación de Langevin generalizada puede simplificarse cuando una de las masas M , en la que centramos nuestra atención, tiene una masa mucho mayor que todas las demás m , las cuales constituyen el baño térmico. En ese caso se puede simplificar a la ecuación de Langevin conocida para el momento de la partícula Browniana \mathbf{p}_0 . Para ello conviene separar el operador de Liouville de la siguiente manera

$$\begin{aligned} iL = iL_0 + iL_B &= \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right\} + \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_0} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_0} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_0} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_0} \\ &= \sum_{i=1}^N \{ \dot{\mathbf{r}}_i \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} - \dot{\mathbf{p}}_i \cdot \nabla_{\mathbf{p}_i} \} + \dot{\mathbf{r}}_0 \cdot \nabla_{\mathbf{r}_0} - \dot{\mathbf{p}}_0 \cdot \nabla_{\mathbf{p}_0} \\ &= \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\mathbf{p}_i}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} + \mathbf{F}_i \cdot \nabla_{\mathbf{p}_i} \right\} + \left\{ \frac{\mathbf{p}_0}{M} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_0} + \mathbf{F}_0 \cdot \nabla_{\mathbf{p}_0} \right\}. \end{aligned} \quad (2.87)$$

Para hacer comparables los términos individuales en la suma en 2.87 definamos¹²

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \lambda \mathbf{p}_0, \\ \mathbf{R} &= \mathbf{r}_0, \end{aligned} \quad (2.88)$$

con $\lambda^2 = m/M$. Por lo tanto, en términos de estas coordenadas, el hamiltoniano en 2.50

$$H = H(\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_k, \mathbf{R}, \mathbf{P}) = \lambda^{-2} \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \sum_{i=1}^N V(|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|) + \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{1 \leq i < j}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (2.89)$$

¹²Usando esta definición es claro que

$$\frac{\mathbf{p}_0^2}{2M} = \lambda^{-2} \frac{\mathbf{P}^2}{2M} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} \quad \text{y} \quad \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_0} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}} \cdot \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{p}_0} = \lambda \mathbf{1} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}}.$$

Entonces podemos escribir el operador de Liouville de la siguiente manera [106]

$$iL = iL_0 + iL_B = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\mathbf{p}_i}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_i} + \mathbf{F}_i \cdot \nabla_{\mathbf{p}_i} \right\} + \lambda \left\{ \frac{\mathbf{P}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} + \mathbf{F}_0 \cdot \nabla_{\mathbf{P}} \right\} \quad (2.90)$$

Usemos la ecuación de H. Mori 2.84 tomando como variable dinámica \mathbf{p}_0 olvidándonos por un momento del término que tiene Ω^{13}

$$\frac{d\mathbf{p}_0}{dt} = \mathbf{F}(t) + \int_0^t K(\xi) \mathbf{p}_0(t-\xi) d\xi. \quad (2.91)$$

De la expresión para la separación del operador de Liouville 2.90: se puede apreciar que iL_B es de orden $O(\lambda)$ en relación a iL_0 . Usando la identidad 2.78

$$e^{i(1-\varphi)Lt} = e^{iLt} + \int_0^{t-s_0} e^{i(1-\varphi)L(t-s_0)} (-i\varphi L) e^{iLs_0} ds_0. \quad (2.92)$$

Usándola de nuevo para el término del integrando $e^{i(1-\varphi)L(t-s_0)}$

$$e^{i(1-\varphi)L(t-s_0)} = e^{iL(t-s_0)} + \int_0^{t-s_0} e^{i(1-\varphi)L(t-s_0-s_1)} (-i\varphi L) e^{iLs_1} ds_1, \quad (2.93)$$

y combinando estas dos expresiones en una

$$e^{i(1-\varphi)Lt} = e^{iLt} + \int_0^t \left\{ e^{iL(t-s_0)} + \int_0^{t-s_0} e^{i(1-\varphi)L(t-s_0-s_1)} - i\varphi L e^{iLs_1} ds_1 \right\} \cdot (-i\varphi L) e^{iLs_0} ds_0,$$

agrupando las integrales

$$\begin{aligned} e^{i(1-\varphi)Lt} &= e^{iLt} - i \int_0^t e^{i(1-\varphi)L(t-s_0)} \varphi L e^{iLs_0} ds_0 + \\ &\quad + (-i)^2 \int_0^t \int_0^{t-s_0} e^{i(1-\varphi)L(t-s_0-s_1)} \varphi L e^{iLs_1} \varphi L e^{iLs_0} ds_1 ds_0. \end{aligned}$$

Como L commuta con e^{iLs_0}

$$\begin{aligned} e^{i(1-\varphi)Lt} \mathbf{F}_0 &= e^{iLt} \mathbf{F}_0 - i \int_0^t e^{i(1-\varphi)L(t-s_0)} \varphi e^{iLs_0} L \mathbf{F}_0 ds_0 + \\ &\quad + (-i)^2 \int_0^t \int_0^{t-s_0} e^{i(1-\varphi)L(t-s_0-s_1)} \varphi e^{iLs_1} \varphi e^{iLs_0} L^2 \mathbf{F}_0 ds_1 ds_0. \end{aligned} \quad (2.94)$$

Como además se cumple que

$$L \mathbf{p}_0(0) = L_B \mathbf{p}_0(0) = \mathbf{F}_0,$$

¹³Este es diferente de cero sólo para casos muy especiales donde no hay una simetría temporal bien definida, pero no para este caso.

ya que L_0 no tiene derivadas con respecto a \mathbf{p}_0 . Por lo tanto el primer término en 2.94 es de orden cero con respecto a los dos que siguen, el segundo es de primer orden con respecto a estos y el tercero es de orden dos con respecto a los otros dos. Entonces, a orden cero en λ podemos reemplazar iL en el exponente por iL_0 y una vez hecho esta sustitución podemos reemplazar $i(1 - \wp)L_0$ por iL_0 ya que $i(1 - \wp)_0\mathbf{F}_0$ es independiente de \mathbf{P} e igual a $iL_0\mathbf{F}_0$, como $\exp[i(1 - \wp)L_0t]$ está definida por la suma de potencias $[i(1 - \wp)L_0t]^n$ actuando sobre la función que esté a la derecha: la sustitución es admisible

$$\mathbf{F}(t) := e^{i(1-\wp)Lt}\mathbf{F}_0(0) \approx e^{i(1-\wp)L_0t}\mathbf{F}_0(0) \equiv e^{iL_0t}\mathbf{F}_0(0). \quad (2.95)$$

Ahora analicemos el kernel de memoria¹⁴

$$K(\xi) = \frac{(\mathbf{F}(\xi), \mathbf{F}(0))}{MkT}. \quad (2.96)$$

Para llegar a la ecuación de Langevin debería ocurrir que en lugar de tener una dependencia en la dinámica extendida en el tiempo, la autocorrelación de la fuerza estocástica debe ser de tipo delta correlacionada en el tiempo y de intensidad γ ; esto es, que podemos extender el límite de integración a infinito

$$\int_0^t K(t - \xi)\mathbf{p}_0(\xi) d\xi \approx \mathbf{p}_0(t) \int_0^t K(\xi) d\xi = -\gamma \mathbf{p}_0(t), \quad (2.97)$$

por lo que con estas suposiciones o aproximaciones llegamos a una ley de evolución dada por la ecuación de Langevin¹⁵

$$\frac{d\mathbf{p}_0}{dt} = -\gamma \mathbf{p}_0(t) + \mathbf{F}(t)$$

2.5. De la ecuación de Kramers-Klein a la ecuación de Smoluchowski

Existen ocasiones en las que nuestra atención estará en la dinámica de las posiciones de las partículas más que en la dinámica de sus velocidades. Cuando éste es el caso existen dos maneras de obtener una ecuación de tipo Fokker-Planck para la dinámica de las posiciones exclusivamente. Una de estas maneras es directa, pero adolece de argumentos sólidos que la justifiquen; sin embargo, llega a la ecuación correcta. La otra manera es mucho más larga y tediosa pero es más consistente y al orden más bajo de aproximación, coincide con la primera, justificando su uso extendido en la literatura. Para explicar cómo proceder partimos de la ecuación de Langevin (por simplicidad en una dimensión)

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= u, \\ M \frac{du}{dt} &= -\gamma u + A(x) + F(t), \end{aligned} \quad (2.98)$$

¹⁴El denominador está dado por $(\mathbf{p}_0(0), \mathbf{p}_0(0))$.

¹⁵El signo en la fuerza disipativa deber ser, si γ es positivo, naturalmente negativo. Ya que si no estuviese presente la fuerza estocástica; fluctuación, el sistema, pensado como un sistema dinámico idealizado, debería acabar en reposo.

que al expandir reteniendo sólo los primeros términos en Δt

$$x(t + \Delta t) = x(t) + u(t)\Delta t, \quad (2.99)$$

$$u(t + \Delta t) = u(t) - \frac{\gamma}{M}u(t)\Delta t + \frac{A(x(t))}{M}\Delta t + \frac{1}{M} \int_t^{t+\Delta t} F(\xi) d\xi, \quad (2.100)$$

podemos determinar las funciones de arrastre y difusión de la ecuación de Fokker-Planck directamente [56, 87]. La ecuación que describe la dinámica de las posiciones y las velocidades es usualmente conocida como la *ecuación de Kramers* [91] ya que él fue uno de los primeros en deducirla y utilizarla en el contexto de las reacciones químicas.

Al estar sólo interesados en describir las posiciones de las partículas brownianas y no sus velocidades: nos gustaría tener una manera sistemática de obtener una ecuación que sólo involucre las posiciones. Esta ecuación es la denominada ecuación de Smoluchowski. Para entender un poco acerca de su rango de aplicación comparemos los tiempos característicos en los que la distribución de las velocidades y la distribución de las posiciones se tardan en relajarse; esto es, los tiempos característicos para *termalizar* la velocidad y para *uniformizar* las posiciones. Podemos tomar como tiempo característico para termalizar las velocidades MD/kT y $2D/l^2$ el tiempo característico para volver uniforme la distribución de posiciones alrededor de una distancia promedio de l unidades. Al compararlos

$$\frac{t_Q}{t_U} = \frac{2MD}{kT} \frac{D}{l^2}, \quad (2.101)$$

vemos que inclusive para masas M pequeñas, este cociente es extraordinariamente pequeño

$$10^{-26} \leq O\left(\frac{t_Q}{t_U}\right) \leq 10^{-19}. \quad (2.102)$$

Si nos fijamos en la distribución marginal

$$n(x, t) = \int P(x, u, t) du. \quad (2.103)$$

Integrando en u la ecuación de Kramers vemos que ésta satisface

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0, \quad (2.104)$$

en donde

$$j(x, t) = \int u P(x, u, t) du. \quad (2.105)$$

Sin embargo, esto no es muy significativo ya que para conocer j debemos primero conocer P ¡que es justo lo que aún no conocemos! Si consideramos que la distribución es la distribución de Maxwell $P \approx n(x, t)\phi_M(u)$ en donde $\phi_M(u)$ es la distribución de Maxwell, pero esto significaría que $j \equiv 0$. Como menciona Rober Mazo en su monografía: “es precisamente la diferencia; empero, pequeña, de P de la distribución de Maxwell la que es responsable de volver uniforme la distribución en las posiciones”.

Para derivar la ecuación de Smoluchowski podemos suponer que el término inercial en 2.98 es “despreciable”

$$\begin{aligned} 0 &= -\gamma u + A(x) + F(t), \\ \dot{x} &= u, \end{aligned} \quad (2.106)$$

por lo que podemos resolver para \dot{x}

$$\dot{x} = \gamma^{-1}(A + F). \quad (2.107)$$

Con base en esta ecuación de Langevin existe una ecuación asociada de Fokker-Planck para la dinámica de variable x exclusivamente

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\gamma}{M} \frac{\partial A n}{\partial x} = \frac{K_B T \gamma}{M} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}. \quad (2.108)$$

Ésta es la *ecuación de Smoluchowski*. La derivación¹⁶ que se ha dado tiene conceptualmente varios problemas. Es cierto que la fuerza disipativa, balancea; *en promedio*, las fuerzas externas, la ecuación 2.106 está implicando otra cosa. Ésta dice que la fuerza disipativa sin promediar neutraliza la fuerza externa más la fuerza estocástica. Aún cuando el término inercial du/dt sea pequeño en promedio, no existe ninguna razón convincente de que siempre sea despreciable; más aún, esperaríamos que al menos fuese del orden de F , la fuerza estocástica, un término que mantenemos en el análisis. Debido a estas inconsistencias, es deseable buscar una manera alternativa de obtener una ecuación para la dinámica en el espacio de configuración; para las posiciones, el cual esbozamos a continuación.

La otra manera de obtener la ecuación de Smoluchowski está basada en la técnica de eliminación de variables o modos rápidos, de la cual damos una discusión somera en el apéndice E que es más satisfactoria y consiste en separar al operador de evolución de la siguiente manera

$$\frac{\partial p}{\partial \tau} = -\frac{1}{\gamma} \left(u \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{A}{M} \frac{\partial p}{\partial u} \right) + \frac{\partial}{\partial u} \left(u p + \frac{K_B T}{M} \frac{\partial p}{\partial u} \right), \quad (2.109)$$

de donde podemos identificar a los operadores descritos en el apéndice E¹⁷

$$L := - \left(u \frac{\partial}{\partial x} + \frac{A}{M} \frac{\partial}{\partial u} \right), \quad (2.110)$$

y

$$\Lambda := \frac{\partial}{\partial u} \left(u + \frac{K_B T}{M} \frac{\partial}{\partial u} \right). \quad (2.111)$$

¹⁶Para una derivación más formal desde el punto de vista matemático véase [140]

¹⁷Como en este apéndice se explica, cuando la ecuación se puede escribir como $\partial \psi / \partial t = (L + \Lambda) \psi$, en donde Λ sólo depende de las *variables rápidas* ξ (u), y L puede depender de ambos tipos de variables x *variables lentas* y ξ . Más aún, se asume que Λ satisface $\int \Lambda \phi(x, \xi, t) d\xi = 0$. Despues suponemos que podemos expandir a Λ en una serie de potencias en μ : $L = \mu L^1 + \mu^2 L^2 + \dots$, mientras que Λ es de orden μ^0 . Lo siguiente es asumir que después de un lapso de tiempo pequeño, $\psi(x, \xi, t)$ depende de t sólo como un funcional de $n(x, t) = \int \psi(x, \xi, t) d\xi$; esto es, $\psi[x, \xi, t] = \psi[x, \xi, n(\cdot, t)]$. Posteriormente, expandimos $\psi = \psi^{(0)} + \mu \psi^{(1)} + \mu^2 \psi^{(2)} + \dots$, sustituimos en la ecuación diferencial y agrupamos los términos del mismo orden en μ .

Entonces la distribución de equilibrio en las velocidades debe satisfacer

$$\frac{\partial}{\partial u} \left(u + \frac{K_B T}{M} \frac{\partial}{\partial u} \right) f = 0, \quad (2.112)$$

cuya solución está dada por

$$\bar{f} = \sqrt{\frac{M}{2\pi K_B T}} \exp \left[-\frac{Mu^2}{2K_B T} \right]. \quad (2.113)$$

La siguiente aproximación satisface la ecuación

$$\frac{\partial}{\partial u} \left(u \psi^{(1)} + \frac{K_B T}{M} \frac{\partial \psi^{(1)}}{\partial u} \right) = -\frac{K_B T}{M} \frac{d\bar{f}}{du} \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \frac{An}{K_B T} \right), \quad (2.114)$$

cuya solución está dada por

$$\psi^{(1)} = -\sqrt{\frac{M}{2\pi K_B T}} u \exp \left[-\frac{Mu^2}{2K_B T} \right] \left(\frac{\partial n}{\partial x} - \frac{An}{K_B T} \right). \quad (2.115)$$

Si sustituimos estas soluciones en E.18¹⁸ llegamos nuevamente a la ecuación de Smoluchowski.

2.6. Teorema Fluctuación-Disipación

En esta sección enunciaremos algunos resultados clásicos de la física estadística de sistemas fuera de equilibrio tomadas de [23]. La motivación es entender en qué contexto se dan nuestras simulaciones numéricas con énfasis en el acoplamiento de las interacciones externas. En general para estudiar el efecto que tienen los campos externos en el movimiento Browniano puede suponerse que la interacción ha estado presente desde hace mucho tiempo y que al tiempo $t = 0$ la interacción se apaga, o podemos suponer que la interacción inicialmente se encuentra apagada y al tiempo cero ésta se prende, éste último fue el que consideramos en algunas de nuestras simulaciones. En ambos casos, justo al tiempo cero la distribución inicial *no* es la distribución de equilibrio (en el caso en que las fuerzas externas no dependan explícitamente del tiempo), y el sistema se relajará a una nueva distribución de equilibrio. La velocidad y manera específica de realizar esta transición, depende de cómo se acople la interacción, esto caracterizará el tipo de respuesta que el sistema pueda manifestar. Nosotros consideramos el *régimen lineal*. Para entender acerca de este escenario, es necesario definir algunos conceptos como funciones de autocorrelación, algunos resultados como la hipótesis de regresión de Onsager, el *teorema de fluctuación disipación*, funciones de respuesta, etc. Las siguientes secciones los abordarán de manera somera.

Lo primero que necesitamos considerar es una función A arbitraria de las variables dinámicas o de algún subconjunto de estas

$$A(t) = A[\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N], \quad (2.117)$$

¹⁸A segundo orden en $\mu = \frac{1}{\gamma}$ la ecuación dice

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \mu \int L^{(1)} \psi^{(0)} d\xi + \mu^2 \int L^{(2)} \psi^{(0)} d\xi + \mu^2 \int L^{(1)} \psi^{(1)} d\xi. \quad (2.116)$$

la dependencia temporal de A está inducida por la dependencia temporal que tienen \mathbf{r}^N y \mathbf{p}^N . Para aliviar un poco la notación, tomemos $\mathbf{X} \equiv (\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)$, por lo tanto

$$\mathbf{X}_0 := \mathbf{X}(0) = (\mathbf{r}^N(0), \mathbf{p}^N(0)), \quad (2.118)$$

es alguna condición o configuración inicial en el espacio fase. Por lo tanto, como la evolución temporal está gobernada de manera *determinista* por las leyes de Newton, la evolución de esta función dependerá de esta condición inicial \mathbf{X}_0

$$A(t) = A(t; \mathbf{X}_0). \quad (2.119)$$

No medimos u observamos directamente a $A(t)$ si no observamos un promedio sobre las posibles configuraciones iniciales

$$\overline{A(t)} = \int F(\mathbf{X}_0) A(t; \mathbf{X}_0) d\mathbf{X}_0, \quad (2.120)$$

en donde $F(\mathbf{X}_0)$ es la función de probabilidad de las condiciones iniciales. Podemos definir a los estados estacionarios como aquellos estados donde todos los observables o funciones de las variables dinámicas que definen a nuestro sistema tengan promedios (y demás momentos) independientes del tiempo

$$\langle A(t) \rangle = \langle A \rangle. \quad (2.121)$$

2.6.1. Funciones de autocorrelación temporales e hipótesis de regresión de Onsager

Si dejamos a su suerte a cualquier sistema físico fuera de equilibrio y lo aislamos de su entorno, éste alcanzará el equilibrio termodinámico. Lars Onsager en 1930 postuló que el mecanismo que lleva al sistema al equilibrio si lo ponemos en una configuración de no equilibrio, es el mismo que el que lo regresa si este abandonó la configuración de equilibrio debido a una fluctuación espontánea.

Para poder hacer cuantitativas estas ideas es necesario hablar de las funciones de autocorrelación temporales. Definamos la desviación instantánea de la variable dinámica A con respecto al promedio en equilibrio; independiente del tiempo, como

$$\delta A(t) := A(t) - \langle A \rangle. \quad (2.122)$$

La dinámica de esta cantidad está regida por las leyes microscópicas, por lo tanto podemos indicar esta dependencia de cualquiera de las siguientes tres maneras

$$\delta A(t) = \delta A[\mathbf{X}(t)] = \delta A(t; \mathbf{X}_0). \quad (2.123)$$

Podemos obtener información acerca del sistema si en lugar de observar el comportamiento de $A(t)$ en el tiempo, medimos las correlaciones en el tiempo de la esta diferencia para diferentes tiempos; esto es, la correlación entre $\delta A(t)$ y $\delta A(0)$ a un tiempo fijo, como por ejemplo al tiempo cero

$$C(t) = \langle \delta A(t) \delta A(0) \rangle = \langle A(0) A(t) \rangle - \langle A \rangle^2. \quad (2.124)$$

Para sistemas clásicos

$$C(t) = \int f_N^{eq}(\mathbf{X}_0) \delta A(0) \delta A(t) d\mathbf{X}_0. \quad (2.125)$$

En equilibrio, por definición, no puede haber una dependencia global en el tiempo; esto es, aunque el valor de una variable dinámica de algún subsistema sí puede ser función del tiempo, las propiedades estadísticas de la misma no pueden depender del tiempo y para ellas no hay un momento especial en la configuración del subsistema, por lo tanto, las relaciones estadísticas para dos tiempos diferentes sólo pueden depender de la diferencia

$$C(t) = \langle \delta A(t') \delta A(t'') \rangle \quad t = t'' - t'. \quad (2.126)$$

Como caso especial en el que $t' = 0$

$$C(t) = \langle \delta A(0) \delta A(t) \rangle = \langle \delta A(-t) \delta A(0) \rangle = \langle \delta A(0) \delta A(-t) \rangle = C(-t). \quad (2.127)$$

Por otro lado, se cumple que cualquiera que sea el origen de referencia del tiempo

$$C(0) = \langle \delta A(0) \delta A(0) \rangle = \langle (\delta A)^2 \rangle. \quad (2.128)$$

Cantidad que caracteriza el tamaño de la fluctuación en equilibrio de la variable A . Sin embargo, para tiempos largos $t \rightarrow \infty$, $\delta A(t)$ dejará de estar correlacionada con $\delta A(0)$; si no, no estaríamos en una situación de equilibrio, por lo que

$$C(t) \rightarrow \langle \delta A(0) \rangle \langle \delta A(t) \rangle \text{ conforme } t \rightarrow \infty, \quad (2.129)$$

y como $\langle \delta A \rangle = 0$

$$C(t) \rightarrow 0 \text{ conforme } t \rightarrow \infty. \quad (2.130)$$

Esta anulación de las correlaciones conforme avanza el tiempo es la regresión del sistema al equilibrio a la que se hace alusión en la hipótesis de Lars Onsager. Para hacer cuantitativo el enunciado, supongamos que hemos preparado un sistema en un estado fuera de equilibrio y lo dejamos relajarse hasta que alcance el equilibrio, el enunciado de Onsager dice que, en el régimen lineal, esta relajación obedece

$$\frac{\overline{\delta A(t)}}{\overline{\delta A(0)}} = \frac{C(t)}{C(0)}, \quad (2.131)$$

en donde

$$\overline{\delta A(t)} = \overline{A(t)} - \langle A \rangle, \quad (2.132)$$

Esto quiere decir que para sistemas cerca del equilibrio no podemos distinguir entre fluctuaciones espontáneas y configuraciones fuera de equilibrio preparadas por agentes externos. Como no podemos distinguir su relajación también debe de coincidir.

2.6.2. Bosquejo de la demostración del teorema de fluctuación-disipación en el caso clásico

En esta sección esbozaremos una demostración del teorema de fluctuación y disipación para sistemas clásicos¹⁹. Para simplificar un poco la notación definamos la traza como la integral sobre todo el espacio fase

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \int \exp[-\beta H(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)] A(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} / \int \exp[-\beta H(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)] d^N \mathbf{r} d^N \mathbf{p} \\ &=: \text{Tr}(\exp[-\beta H] A) / \text{Tr}(\exp[-\beta H]).\end{aligned}\quad (2.133)$$

Supongamos que tenemos un sistema descrito por una función Hamiltoniana $H + \Delta H$ en donde

$$\Delta H = -fA. \quad (2.134)$$

es una perturbación, y en donde f es una constante. Además, supongamos que éste ya ha alcanzado el equilibrio termodinámico. Al tiempo $t = 0$ apagamos la perturbación por lo que el sistema ya no se encuentra en el equilibrio definido por la hamiltoniana H y se relajará a una nueva configuración de equilibrio. Sea

$$F(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) = \frac{e^{-\beta(H+\Delta H)}}{\text{Tr } e^{-\beta(H+\Delta H)}}, \quad (2.135)$$

la función de distribución de equilibrio cuando está presente la perturbación. El promedio de una función A de las variables dinámicas al tiempo cero, está dado por

$$\overline{A(0)} = \text{Tr}[\exp[-\beta(H + \Delta H)]A(0)] / \text{Tr}[\exp[-\beta(H + \Delta H)]]. \quad (2.136)$$

Conforme avanza el tiempo, esta variable dinámica evoluciona como

$$\overline{A(t)} = \text{Tr}[\exp[-\beta(H + \Delta H)]A(t)] / \text{Tr}[\exp[-\beta(H + \Delta H)]], \quad (2.137)$$

en donde $A(t)$ es el valor de A al tiempo t dado que la configuración inicial fue \mathbf{X}_0 . La Hamiltoniana que rige la evolución de $A(0)$ a $A(t)$ es H ; no es $H + \Delta H$, ya que al tiempo $t = 0$ apagamos la perturbación ΔH . Como estamos considerando que la perturbación es “pequeña” y ésta es la causa de la diferencia entre $A(t)$ y $\langle A \rangle$, podemos hacer una expansión en potencias de ΔH y agruparla de acuerdo a los distintos órdenes en ΔH

$$\overline{A(t)} = \text{Tr}[\exp[-\beta H(1 - \beta \Delta H + \dots)A(t)] / \text{Tr}[\exp[-\beta H(1 - \beta \Delta H + \dots)], \quad (2.138)$$

para después sólo retener los órdenes lineales en ΔH

$$\begin{aligned}\overline{A(t)} &= \frac{[\text{Tr}(e^{-\beta H} A(t)) - \beta \text{Tr}(e^{-\beta H} \Delta H A(t)) + O(\Delta H^2)]}{[\text{Tr}(e^{\beta H}) - \beta \text{Tr}(e^{\beta H} \Delta H) + O(\Delta H^2)]} \\ &= [\text{Tr}(e^{-\beta H} A(t)) - \beta \text{Tr}(e^{-\beta H} \Delta H A(t)) + O(\Delta H^2)] \frac{1}{\text{Tr}(e^{\beta H})} \sum_{k=0}^{\infty} [\beta \langle \Delta H \rangle - O(\Delta H^2)]^k \\ &= \langle A(t) \rangle - \beta \langle \Delta H A(t) \rangle + \beta \langle \Delta H \rangle \langle A(t) \rangle + O(\Delta H^2).\end{aligned}$$

¹⁹Hacemos énfasis en que esta demostración sólo es válida para el caso clásico. En el caso cuántico tendríamos que preocuparnos si comutan los operadores u observables.

En donde $\langle \Delta H \rangle = \text{Tr} [\exp [-\beta(H)] \Delta H] / \text{Tr} [\exp [-\beta(H)]]$, por lo tanto

$$\overline{\Delta A(t)} = \overline{A(t)} - \langle A \rangle = -\beta \{ \langle \Delta H A(t) \rangle - \langle \Delta H \rangle \langle A(t) \rangle \} + O(\Delta H^2). \quad (2.139)$$

Si la perturbación tiene la forma general $\Delta H = fA$ donde A no depende explícitamente del tiempo y el promedio lo tomamos sobre las condiciones iniciales, podemos tomar $A = A(0)$

$$\overline{\Delta A(t)} = -\beta f \langle \delta A(0) \delta A(t) \rangle + O(f^2), \quad (2.140)$$

que es justo la hipótesis de regresión de Lars Onsager 2.131.

También podemos considerar una suma de perturbaciones $\sum_k f_k A_k$, o con la siguiente estructura

$$\Delta H = \int \Phi(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2.141)$$

en donde ahora $f = -\Phi_{ext}(\mathbf{r})$ es un potencial externo que depende de las posiciones y $A = \rho(\mathbf{r})$ es una densidad, en ese caso

$$\overline{\Delta A_j(t)} = \beta \sum_i f_i \langle \delta A_i(0) \delta A_j(t) \rangle + O(f^2). \quad (2.142)$$

En este trabajo abordamos las interacciones como entes geométricos cuyo origen podía ser diferente. Esto es, bien podría tratarse de una interacción eléctrica y en ese caso estaríamos acoplando un campo eléctrico con una densidad de carga, o podría tratarse de un campo gravitacional y la densidad en ese caso sería una densidad de masa.

2.6.3. Teoría de respuesta en la aproximación lineal

El teorema de fluctuación-disipación relaciona la relajación de un sistema preparado fuera de equilibrio con la dinámica microscópica espontánea de un sistema en equilibrio. El resultado de la sección anterior sólo relaciona la desviación del promedio de una función de las variables dinámicas con las autocorrelaciones de las fluctuaciones. Supongamos que una perturbación $f(t)$ a nuestro sistema depende del tiempo y se acopla con una variable dinámica A . Decimos que un sistema tiene una *respuesta lineal* al aplicarle una perturbación si se cumple que

$$\overline{\Delta A(t; \lambda f)} = \lambda \overline{\Delta A(t; f)}. \quad (2.143)$$

Esto es, si el promedio de la desviación de una función de las variables dinámicas con respecto a su valor medio en equilibrio es proporcional a la intensidad de la perturbación f . La forma analítica más general que satisface esta condición está dada por

$$\overline{\Delta A(t; f)} = \int_{\mathbb{R}} \chi(t, t') f(t') dt'. \quad (2.144)$$

La función $\chi(t, t')$ se denomina *función respuesta* o *susceptibilidad generalizada*. La función de respuesta es una propiedad que tiene el sistema en equilibrio cuando no está presente f . Esta relación puede apreciarse mejor si vemos la relación que hay entre $\overline{\Delta A(t; f)}$ y $f(t')$

como el primer término en una expansión en series de Taylor. Sin embargo, como $\overline{\Delta A(t; f)}$ depende de la función $f(t)$, la expansión es de un *funcional* de $f(t)$ ²⁰

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \sum_i \left[\frac{\partial \overline{\Delta A(t)}}{\partial f(t_i)} \right]_0 f(t_i) \rightarrow \int_0^t \frac{\delta \overline{\Delta A(t)}}{\delta f(\xi)} f(\xi) d\xi. \quad (2.145)$$

Para entender mejor esta relación supongamos que f tiene la forma de una fuerza de impulsivo

$$f(t) = f_0 \delta(t - t_0). \quad (2.146)$$

Esto es, que actúa en un breve lapso alrededor de t_0 , en ese caso

$$\overline{\Delta A(t)} = f_0 \chi(t, t_0) + O(f_0^2). \quad (2.147)$$

De aquí podemos concluir que todas las demás respuestas pueden ser consideradas; en el régimen lineal, como combinaciones lineales de este tipo particular de respuesta. Además, como la función respuesta es una propiedad que tiene el sistema o ambiente en equilibrio

$$\chi(t, t') = \chi(t - t'), \quad (2.148)$$

ya que no puede haber un origen especial para el tiempo y, además, como el sistema no puede responder antes de que se le perturbe

$$\chi(t - t') = 0, \text{ para } t - t' \leq 0. \quad (2.149)$$

A esta propiedad que debe tener, basado en argumentos físicos, se le denomina por obvias razones *causalidad*. Intentaremos ahora dar una descripción de la función respuesta $\chi(t - t')$ en términos de la dinámica intrínseca del sistema. Esta función respuesta es independiente de $f(t)$, podemos elegir esta última de forma conveniente para hacer nuestro análisis. Sea

$$f(t) = f, \quad t < 0 \quad (2.150)$$

$$= 0, \quad t \geq 0. \quad (2.151)$$

Esto quiere decir que la preparación del sistema es aquella en la que éste se encuentra en equilibrio cuando la función hamiltoniana es $H - fA$, y en el tiempo $t = 0$, apagamos esta perturbación y el sistema se relajará al equilibrio definido por la hamiltoniana H . Éste fue justo el caso que consideramos en la sección anterior, en donde llegamos a la relación

$$\overline{\Delta A(t)} = \beta f \langle \delta A(0) \delta A(t) \rangle + O(f^2) \quad (2.152)$$

Ahora consideremos cuál es el resultado en términos de $\chi(t - t')$. Como $f(t')$ es nula para $t' > 0$, tenemos

$$\overline{\Delta A(t)} = f \int_{-\infty}^0 \chi(t - t') dt' \quad (2.153)$$

²⁰Podríamos ver a $f(t)$ como otra variable de la que depende $\overline{\Delta A(t; f)}$, para cada t diferente. En el apéndice D hacemos un resumen de sus principales definiciones y propiedades sin rigor matemático.

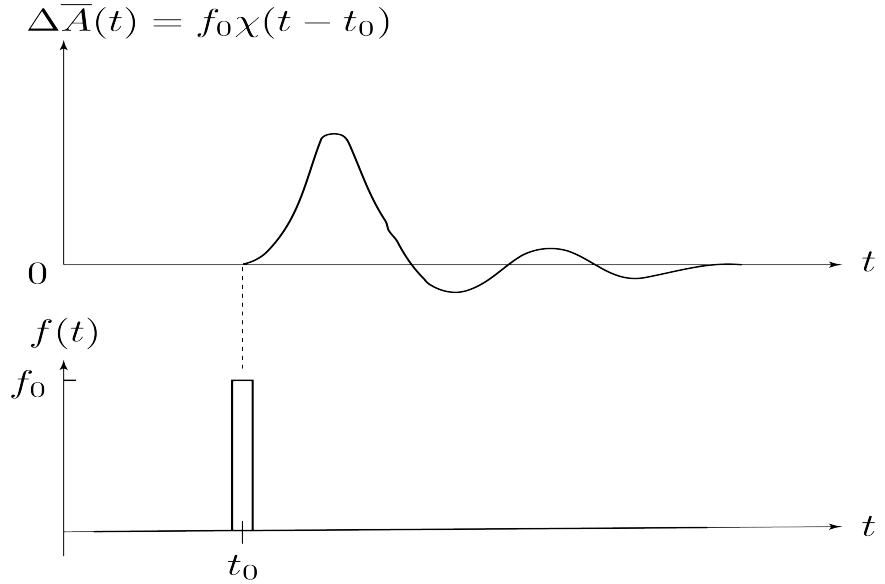


Figura 2.1: Perfil típico de una función de respuesta o susceptibilidad generalizada χ después de un estímulo $f(t) = f_0 \delta(t - t_0)$, concentrado en un lapso de tiempo muy corto.

Haciendo un cambio de variable de integración $\xi = t - t'$

$$\overline{\Delta A(t)} = f \int_t^\infty \chi(\xi) d\xi \quad (2.154)$$

Si comparamos este resultado con lo que obtuvimos en la sección anterior, con el teorema fluctuación-disipación, y notando que $\chi(t - t')$ es nula para $t < t'$, obtenemos

$$\chi(t) = \begin{cases} -\beta \frac{d}{dt} \langle \delta A(0) \delta A(t) \rangle & t > 0, \\ 0 & t < 0. \end{cases} \quad (2.155)$$

Esta expresión relaciona el comportamiento general de un sistema fuera de equilibrio en el régimen lineal, con las correlaciones de las fluctuaciones a tiempos diferentes, tal como ocurren el equilibrio.²¹

2.6.4. Hipótesis de regresión de Onsager y el coeficiente de difusión

En esta sección encontraremos una relación entre un parámetro macroscópico D , que caracteriza la difusión, y la dinámica microscópica. Para ello usaremos los resultados de las secciones anteriores, en particular, la hipótesis de regresión de Lars Onsager.

Sea $n(\mathbf{r}, t)$ la densidad de no equilibrio de partículas en la posición \mathbf{r} al tiempo t , esto es

$$n(\mathbf{r}, t) = \bar{\rho}(\mathbf{r}, t), \quad (2.156)$$

en donde $\rho(\mathbf{r}, t)$ es la densidad instantánea en la posición \mathbf{r} . Está claro que como la densidad está dada por el número de moléculas o partículas contenidas en un volumen dado ΔV , la

²¹Para ver un desarrollo más completo acerca de la teoría de respuesta ver el libro de R. Kubo et al. [94].

densidad instantánea puede ser escrita como

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{j=1}^N \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_j(t)]. \quad (2.157)$$

De la conservación de masa, se sigue que el cambio en la vecindad de un punto de la densidad se debe al flujo de partículas a través de la frontera de esta vecindad

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t), \quad (2.158)$$

en donde $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ es el promedio de no equilibrio del flujo de partículas. Fenomenológicamente, es natural suponer que el flujo es proporcional a la diferencia de concentración

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -D\nabla n(\mathbf{r}, t), \quad (2.159)$$

por lo que n satisface la ecuación de difusión

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D\nabla^2 n(\mathbf{r}, t). \quad (2.160)$$

Para encontrar una relación entre los parámetros macroscópicos que caracterizan este proceso con el mundo microscópico, usaremos la hipótesis de regresión para la función de autocorrelación de la densidad

$$C(\mathbf{r}, t) = \langle \delta\rho(\mathbf{r}, t) \delta\rho(\mathbf{0}, 0) \rangle. \quad (2.161)$$

La hipótesis de regresión de Lars Onsager 2.131 dice que la ecuación que satisface $C(\mathbf{r}, t)$ debe ser la misma que la que satisface $n(\mathbf{r}, t)$, por lo tanto

$$\frac{\partial C(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D\nabla^2 C(\mathbf{r}, t). \quad (2.162)$$

Si definimos a $P(\mathbf{r}, t|\mathbf{0}, 0)$ como la probabilidad condicional de que la partícula de soluto esté en la posición dada por el vector \mathbf{r} en el tiempo t , dado que estaba en el origen $\mathbf{0}$ al tiempo 0, es fácil ver que esta probabilidad es proporcional a $\langle \delta\rho(\mathbf{r}, t) \delta\rho(\mathbf{0}, 0) \rangle$

$$\frac{\partial P(\mathbf{r}, t|\mathbf{0}, 0)}{\partial t} = D\nabla^2 P(\mathbf{r}, t|\mathbf{0}, 0). \quad (2.163)$$

Ahora centremos nuestra atención en una partícula cuyo vector de posición denotamos como \mathbf{r}_1 y veamos la distancia promedio a la posición que tenía al tiempo cero, en donde bien podríamos poner nuestro sistema de coordenadas

$$\Delta\mathbf{R}^2(t) := \langle |\mathbf{r}_1(t) - \mathbf{r}_1(0)|^2 \rangle. \quad (2.164)$$

Naturalmente este promedio puede ser calculado si conocemos P

$$\Delta\mathbf{R}^2(t) = \int \mathbf{r}^2 P(\mathbf{r}, t|\mathbf{0}, 0) d\mathbf{r}. \quad (2.165)$$

La derivada temporal de esta distancia está dada por

$$\frac{d}{dt} \Delta \mathbf{R}^2(t) = \int \mathbf{r}^2 \frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{r}, t | \mathbf{0}, 0) d\mathbf{r} = \int \mathbf{r}^2 D \nabla^2 P(\mathbf{r}, t | \mathbf{0}, 0) d\mathbf{r} = 6D \int P(\mathbf{r}, t | \mathbf{0}, 0) d\mathbf{r}. \quad (2.166)$$

En la penúltima igualdad hemos integrado por partes dos veces y considerado que los términos en la frontera se anulan. Lo cual es natural porque si no la función P no podría ser normalizable. Por lo tanto

$$\Delta \mathbf{R}^2(t) = 6Dt. \quad (2.167)$$

Al mismo tiempo, si usamos el teorema fundamental del cálculo y la definición de la velocidad del vector de posición

$$\mathbf{r}_1(t) - \mathbf{r}_1(0) = \int_0^t \mathbf{v}(\xi) d\xi, \quad (2.168)$$

entonces también podemos expresar a $\Delta \mathbf{R}^2(t)$ en términos de la integral doble o iterada

$$\Delta \mathbf{R}^2(t) = \int_0^t \int_0^t \langle \mathbf{v}(\xi_1) \cdot \mathbf{v}(\xi_2) \rangle d\xi_1 d\xi_2 \quad (2.169)$$

por lo que al derivar con respecto al tiempo²²

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \Delta \mathbf{R}^2(t) &= \left\langle \mathbf{v}(t) \cdot \int_0^t \mathbf{v}(\xi_2) d\xi_2 + \int_0^t \mathbf{v}(\xi_1) d\xi_1 \cdot \mathbf{v}(t) \right\rangle = 2 \left\langle \mathbf{v}(t) \cdot \int_0^t \mathbf{v}(\xi) d\xi \right\rangle \\ &= 2 \langle \mathbf{v}(t) \cdot (\mathbf{r}_1(t) - \mathbf{r}_1(0)) \rangle = 2 \langle \mathbf{v}(0) \cdot [\mathbf{r}_1(0) - \mathbf{r}_1(-t)] \rangle = 2 \left\langle \mathbf{v}(0) \cdot \int_{-t}^0 \mathbf{v}(\xi) d\xi \right\rangle \\ &= 2 \int_{-t}^0 \langle \mathbf{v}(0) \cdot \mathbf{v}(\xi) \rangle d\xi. \end{aligned}$$

Además, los estados estacionarios son invariantes ante traslaciones temporales; esto es, se cumple $\langle A(t)B(t') \rangle = \langle A(t+t'')B(t'+t'') \rangle$, más aún, como $\langle A(t)B(t') \rangle = E(t-t') = E(t'-t)$, la última expresión la podemos escribir como

$$\frac{d}{dt} \Delta \mathbf{R}^2(t) = 2 \int_0^t \langle \mathbf{v}(0) \cdot \mathbf{v}(\xi) \rangle d\xi, \quad (2.170)$$

de donde se sigue, si usamos la ecuación 2.167

$$D = \frac{1}{3} \int_0^\infty \langle \mathbf{v}(0) \cdot \mathbf{v}(\xi) \rangle d\xi. \quad (2.171)$$

A esta última relación entre el coeficiente de transporte D y la función de autocorrelación se le conoce como la *fórmula de Green-Kubo*.

subamortiguado

²²Usamos la linealidad de la integral y el teorema fundamental del cálculo

Capítulo 3

La ecuación de Fokker-Planck en variedades diferenciales

Este capítulo está dividido en tres secciones. En la primera sección abordamos el problema de cómo se transforman los elementos de la ecuación de Fokker-Planck; estos son, el vector de arrastre, la matriz o tensor de difusión y la función de densidad de probabilidad. La idea es la misma que en [135], sólo que en una notación mucho más “económica” y “accesible”. En la segunda sección abordamos el problema de los contextos en los que de manera natural es necesario incorporar constricciones en las ecuaciones dinámicas. También damos las condiciones para que haya una función de las variables dinámicas, constante a lo largo de la evolución del sistema. Las condiciones para que esto ocurra se dan, por obvias razones, en términos de los elementos de la ecuación de Fokker-Planck. Esta sección está basada en el trabajo de N. G. van Kampen [86] mismo trabajo donde se dan las leyes de transformación de los elementos de la ecuación de Fokker-Planck sin demostrar. En la tercera sección construimos una versión covariante; construida a partir de elementos todos invariantes ante transformaciones de coordenadas, de la ecuación de Fokker-Planck que se reduce a esta en coordenadas cartesianas. En el siguiente capítulo estudiamos la posibilidad de encontrar soluciones a los estados de equilibrio.

3.1. Transformación de los elementos de la ecuación de Fokker-Planck

La ecuación de Fokker-Planck es¹

$$[P]_{,t} = -[A^k P]_{,k} + \frac{1}{2} [B^{kl} P]_{,kl}. \quad (3.1)$$

Si hacemos un cambio de coordenadas $x^i \rightarrow \eta^\alpha(x)$, la regla de la cadena nos dice que esta ecuación se transforma de la siguiente manera

$$[P]_{,t} = -[A^k P]_{,\alpha} \Lambda_k^\alpha + \frac{1}{2} \left\{ [B^{kl} P]_{,\alpha\beta} \Lambda_k^\alpha \Lambda_l^\beta + [B^{kl} P]_{,\alpha} \Lambda_{k,l}^\alpha \right\}, \quad (3.2)$$

¹En lo que sigue usaremos la notación estándar de geometría diferencial en el que las parciales se denotan por comas a la derecha de los términos que están diferenciándose $[\cdot]_{,i} \equiv \partial[\cdot]/\partial x^i$ y $[\cdot]_{,ij} \equiv \partial^2[\cdot]/\partial x^j \partial x^i$.

en donde todas las cantidades deben expresarse en la nuevas coordenadas. Sin embargo, esta ecuación no tiene la misma forma anterior y la pregunta natural, debido a que los teoremas acerca de la existencia y unicidad de las soluciones asociadas tienen como premisa la forma “canónica” 3.1, es si podemos volverla a escribir en la forma canónica. Para este propósito necesitamos algunos resultados elementales de álgebra lineal; en particular, que la matriz jacobiana Λ_k^α y su inversa Λ_β^k , satisfacen

$$\Lambda_k^\alpha \Lambda_\beta^k = \delta_\beta^\alpha, \quad (3.3)$$

razón por la cual si C_α^j es el cofactor asociado al término Λ_j^α , entonces éste está dado por

$$C_\alpha^j = J' \Lambda_j^\alpha. \quad (3.4)$$

Donde J' es el determinante Λ_β^k . Usando esta relación podemos expresar la derivada de J' con respecto a los elementos Λ_j^α , de la siguiente manera

$$J'_{,\Lambda_j^\alpha} = C_\alpha^j = J' \Lambda_\alpha^j. \quad (3.5)$$

Ahora veamos que las derivadas parciales del determinante del jacobiano pueden ser relacionadas con las derivadas de las componentes de la matriz jacobiana

$$-J^{-1} J_{,i} = -[\ln J]_{,i} = [\ln J']_{,i} = J'^{-1} J'_{,i} = J'^{-1} J'_{,\Lambda_j^\alpha} \Lambda_j^\alpha_{,i} = \Lambda_\alpha^j [\Lambda_j^\alpha]_{,i} = \Lambda_\alpha^j [\Lambda_i^\alpha]_{,j} = \Lambda_i^\alpha_{,\alpha}.$$

Entonces, podemos expresar las derivadas con respecto a las viejas coordenadas x^i , en función de las nuevas coordenadas x^α de la siguiente manera²

$$[\cdot]_{,i} = \Lambda_i^\alpha [\cdot]_{,\alpha} = [\Lambda_i^\alpha \cdot]_{,\alpha} - \Lambda_i^\alpha_{,\alpha} [\cdot] = [\Lambda_i^\alpha \cdot]_{,\alpha} + J^{-1} J_{,i} [\cdot]. \quad (3.6)$$

Como además siempre se cumple

$$[\cdot]_{,i} = J^{-1} [J \cdot]_{,i} - J^{-1} J_{,i} [\cdot], \quad (3.7)$$

usando la relación 3.6 obtenemos una expresión central

$$[\cdot]_{,i} = J^{-1} [\Lambda_i^\alpha J \cdot]_{,\alpha}. \quad (3.8)$$

Componiéndola dos veces

$$\begin{aligned} [\cdot]_{,ij} &= J^{-1} [\Lambda_i^\alpha J [J^{-1} [\Lambda_j^\beta J \cdot]_{,\beta}]_{,\alpha}] = J^{-1} [\Lambda_i^\alpha [\Lambda_j^\beta J \cdot]_{,\beta\alpha}]_{,\alpha} \\ &= J^{-1} \left\{ [\Lambda_i^\alpha]_{,\alpha} [\Lambda_j^\beta J \cdot]_{,\beta} + \Lambda_i^\alpha [\Lambda_j^\beta J \cdot]_{,\beta\alpha} \right\}. \end{aligned}$$

Al mismo tiempo se tiene

$$\begin{aligned} J^{-1} [\Lambda_i^\alpha \Lambda_j^\beta J]_{,\alpha\beta} - J^{-1} [[\Lambda_i^\alpha \cdot]_{,\beta} \Lambda_j^\beta J \cdot]_{,\alpha} &= J^{-1} [\Lambda_i^\alpha \Lambda_j^\beta J]_{,\alpha\beta} - J^{-1} [\Lambda_i^\alpha_{,\beta} J \cdot]_{,\alpha} \\ &= J^{-1} \left\{ [\Lambda_i^\alpha]_{,\alpha\beta} \Lambda_j^\beta J \cdot + [\Lambda_i^\alpha]_{,\beta} [\Lambda_j^\beta J \cdot]_{,\alpha} + [\Lambda_i^\alpha \cdot]_{,\alpha} [\Lambda_j^\beta J \cdot]_{,\beta} + \Lambda_i^\alpha [\Lambda_j^\beta J \cdot]_{,\alpha\beta} \right\} - \\ &\quad - J^{-1} \left\{ [\Lambda_i^\alpha]_{,\alpha\beta} \Lambda_j^\beta J \cdot + [\Lambda_i^\alpha \cdot]_{,\beta} [\Lambda_j^\beta J \cdot]_{,\alpha} \right\} \\ &= J^{-1} \left\{ [\Lambda_i^\alpha \cdot]_{,\alpha} [\Lambda_j^\beta J \cdot]_{,\beta} + \Lambda_i^\alpha [\Lambda_j^\beta J \cdot]_{,\alpha\beta} \right\}, \end{aligned}$$

²El punto en medio $[\cdot]$ representa que el operador actuaría sobre una función en ese punto de la ecuación.

en donde la última igualdad se sigue de la tercera, ya que los primeros dos términos se cancelan con los dos últimos. Por lo tanto

$$[\cdot]_{,ij} = J^{-1}[\Lambda_i^\alpha \Lambda_j^\beta J \cdot]_{,\alpha\beta} - J^{-1}[\Lambda_i^\alpha,_{,j} J \cdot]_\alpha \quad (3.9)$$

Usando 3.8 y 3.9 en la ecuación de Fokker-Planck 3.1

$$[P]_{,t} = -J^{-1}[\Lambda_i^\alpha A^i JP]_{,\alpha} + \frac{1}{2} J^{-1}[\Lambda_i^\alpha \Lambda_j^\beta B^{ij} JP]_{,\alpha\beta} - \frac{1}{2} J^{-1}[\Lambda_i^\alpha,_{,j} B^{ij} JP]_\alpha. \quad (3.10)$$

Lo cual nos permite, si agrupamos las derivadas de primer orden, escribir la ecuación de Fokker-Planck en las nuevas coordenadas como

$$[\bar{P}]_{,t} = -[A^\alpha \bar{P}]_{,\alpha} + \frac{1}{2}[B^{\alpha\beta} \bar{P}]_{,\alpha\beta}. \quad (3.11)$$

Lo cual implica la siguiente ley de transformación para los elementos de la ecuación de Fokker-Planck, en términos de los elementos descritos en las coordenadas originales x^i

$$\bar{P} = PJ = P(\eta^\alpha, t | \eta_0^\alpha, t_0) \det \Lambda_\alpha^i \quad (3.12a)$$

$$A^\alpha = \Lambda_i^\alpha A^i + \frac{1}{2} \Lambda_i^\alpha,_{,j} B^{ij} \quad (3.12b)$$

$$B^{\alpha\beta} = \Lambda_i^\alpha \Lambda_j^\beta B^{ij} \quad (3.12c)$$

Podemos observar que sólo la matriz de difusión B^{ij} se transforma como un tensor; el vector de arrastre A^k y la función de densidad de probabilidad P , no se transforman como tensores. En las siguientes dos secciones discutiremos acerca de cuándo sería deseable hacer una transformación de coordenadas, qué ventajas esto podría representar y en la siguiente sección acerca de la construcción de una ecuación que sí sea covariante, equivalente a la ecuación de Fokker-Planck.

3.2. Constricciones físicas y matemáticas en la ecuación de Fokker-Planck

En la sección anterior vimos cómo se transforman los elementos de la ecuación de Fokker-Planck. Concluimos que ésta no es una ecuación covariante porque tanto el vector de arrastre como la función de probabilidad no se transforman como tensores. En esta sección veremos las diferentes situaciones donde el problema físico nos sugiere usar otro tipo de coordenadas que no sean cartesianas. El uso adecuado de coordenadas generalizadas puede incorporar las constricciones al movimiento. En esta sección también encontramos las condiciones que se deben satisfacer para que existan cantidades conservadas. Estos resultados se encuentran en [86].

Las constricciones se deben a agentes físicos que obligan a nuestro sistema mecánico a permanecer en un subconjunto del espacio de configuración. Este subconjunto del espacio de configuración suele ser³ una *variedad diferencial*. Esta variedad captura el efecto geométrico de las constricciones. A su vez, las constricciones, naturalmente, modifican las ecuaciones

³Puede ocurrir que en algunos puntos, como en el vértice de una cono, perdamos la diferenciabilidad.

dinámicas y como esta variedad es de menor dimensión que el espacio de configuración: las coordenadas no son todas independientes y es conveniente usar *coordenadas generalizadas* que reflejen el número efectivo de grados de libertad que tiene nuestro sistema de interés y simplifiquen su descripción.

Al haber restricciones es necesario adecuar las ecuaciones de movimiento y una manera de hacerlo es primero plantear las ecuaciones en coordenadas cartesianas y después hacer un cambio de coordenadas el cual considere de manera automática estas restricciones [25]. También se puede buscar una descripción libre de coordenadas y después particularizar dependiendo del problema que se quiera resolver; lo cual hacemos en la siguiente sección.

La manera más “sencilla” de aproximarse a un problema en el que todo el movimiento está constreñido a moverse en la superficie de una esfera \mathbb{S}^2 es describir las posiciones usando las coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) ya que r está fija y por lo tanto sus derivadas se anulan. Estas coordenadas funcionan como “buenas coordenadas” para casi todos los puntos del espacio de configuración; todos excepto dos: el polo norte y el polo sur, saber qué tanto impacto tiene esto en la descripción debe analizarse centrándonos en la forma particular que toman las ecuaciones u operadores de evolución, los cuales tienen singularidades en estos dos puntos como se verá más adelante. Es por eso que a veces se buscan otras coordenadas o parametrizaciones de la esfera alternativas y algunas de estas posibilidades se discuten en el apéndice A.

Existen varios tipos de restricciones y la existencia de ecuaciones de Fokker-Planck *autónomas*⁴ dependerá del tipo de restricción y del número de dimensiones asociadas al problema.

Las restricciones holonómicas o *físicas*, pueden expresar a través de una relación matemática de la forma

$$h(\mathbf{r}) = 0, \quad (3.13)$$

que restringen el movimiento a una subvariedad del *espacio de configuración*. Otro caso se da cuando existe una cantidad conservada lo que N. G. van Kampen o P. A. Dirac denominan *restricción matemática*

$$\Phi(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) = c, \quad (3.14)$$

donde c es una constante y el movimiento queda confinado a una subvariedad del *espacio fase*. Este caso se puede presentar cuando el sistema no es conservativo; por ejemplo, cuando hay disipación, la relación entre las velocidades generalizadas \dot{q}_k y los momentos generalizados⁵ $p_k = \partial L / \partial \dot{q}_k$ no es invertible

$$\det [L]_{\dot{q}_k \dot{q}_l} = 0, \quad (3.15)$$

entonces existe una relación de la forma

$$\Phi([L]_{\dot{q}_k}, q_k) = 0, \quad (3.16)$$

⁴En este contexto autónomas no quiere decir que las ecuaciones no dependan del tiempo, como en el caso de los sistemas dinámicos, si no que sólo involucren las coordenadas de la subvariedad.

⁵En esta definición L es la Lagrangiana asociada al sistema.

que es análoga a 3.14 pero en donde la constante c tiene un valor definido. El *vector de arrastre* en la ecuación de Fokker-Planck no se transforma como un tensor; además, su estructura, cuando el ruido tiene su origen interno, y no resolvemos antes el problema de muchos cuerpos como lo hace Zwanzig; no puede ser mas que postulado con razonamientos heurísticos o habrá que hacer un análisis basado en una serie de correlaciones en la observaciones [12, 13].

La ecuación de Fokker-Planck en coordenadas cartesianas, en donde $P = P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)$ es la probabilidad condicional, puede ser escrita en términos de una *corriente de probabilidad*

$$[P]_{,t} = -[A^i P]_{,i} + \frac{1}{2}[B^{ij} P]_{,ij} = -[A^i P - \frac{1}{2}[B^{ij} P]_{,j}]_{,i} = -[J^i]_{,i}. \quad (3.17)$$

Esto es, definimos $J^i \equiv A^i P - 2^{-1}[B^{ij} P]_{,j}$. Esta ecuación debe ser complementada con una condición inicial

$$P(\mathbf{x}, t_0 | \mathbf{x}_0, t_0) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \quad (3.18)$$

y condiciones en la frontera que de manera general denotamos como $\partial\Omega$.

Una cantidad $\Phi(\mathbf{x})$ será una constante de movimiento o una cantidad conservada si todos sus momentos, no tan solo el primero, son constantes; esto es, si para toda función $f(\cdot)$ se cumple⁶

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega} f(\Phi) P dx = \int_{\Omega} f[\Phi(\mathbf{x})][P]_{,t} dx = \int_{\Omega} f[\Phi(\mathbf{x})] \left\{ -[A^i P]_{,i} + \frac{1}{2}[B^{ij} P]_{,ij} \right\} dx \\ &= \int_{\Omega} \left\{ A^i [\Phi]_{,i} f'(\Phi) + \frac{1}{2} B^{ij} ([\Phi]_{,ij} f'(\Phi) + [\Phi]_{,i} [\Phi]_{,j} f''(\Phi)) \right\} P dx \end{aligned} \quad (3.19)$$

Los coeficientes de f' y f'' deben de anularse por separado

$$B^{ij}[\Phi]_{,i} [\Phi]_{,j} = 0, \quad A^i[\Phi]_{,i} + \frac{1}{2}B^{ij}[\Phi]_{,ij} = 0. \quad (3.20)$$

Como B^{ij} es una forma cuadrática semipositiva definida, la primera igualdad

$$B^{ij}[\Phi]_{,j} = 0, \quad (3.21)$$

y por lo tanto, $[\Phi]_{,i}$ debe estar en el Kernel o espacio nulo de B^{ij} en cada punto \mathbf{x} . Si diferenciamos esta última expresión con respecto a x^i

$$[B^{ij}]_{,i} [\Phi]_{,j} + B^{ij}[\Phi]_{,ij} = 0, \quad (3.22)$$

⁶Para obtener la última igualdad en 3.19 tenemos que integrar por partes varias veces

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} f \left\{ -(A^\alpha P)_{,\alpha} + \frac{1}{2}(B^{\alpha\beta} P)_{,\alpha\beta} \right\} dx &= -A^\alpha P|_{\partial\Omega} + \int_{\Omega} f_{,\alpha} A^\alpha P dx + \frac{1}{2} f(B^{\alpha\beta} P)_{,\beta} \Big|_{\partial\Omega} - \\ &\quad - \frac{1}{2} f_{,\alpha} B^{\alpha\beta} P \Big|_{\partial\Omega} + \frac{1}{2} \int_{\Omega} B^{\alpha\beta} P f_{,\alpha\beta} dx \end{aligned}$$

Los términos en la frontera se anulan, al agrupar todos los términos en una sola integral y usar el hecho de que $P \geq 0$, se llega a 3.19.

podemos reescribir la segunda condición en 3.20 como

$$\left\{ A^i - \frac{1}{2} [B^{ij}]_{,j} \right\} [\Phi]_{,i} = 0. \quad (3.23)$$

De la definición de J^i en 3.17 podemos expresar la relación anterior también como

$$J^i [\Phi]_{,i} = 0, \quad (3.24)$$

e interpretar las ecuaciones 3.20 como que Φ debe ser conservada por los flujos convectivos y difusivos por separado⁷.

3.3. La ecuación de Fokker-Planck covariante

En esta sección construiremos la versión *covariante* de la ecuación de Fokker-Planck. Para ello, primero partiremos del hecho de que la ecuación de Fokker-Planck no tiene la misma forma en diferentes sistemas de coordenadas; no es covariante. Sin embargo, está demostrado en la literatura [148, 135, 62] que se puede construir, a partir de ciertos tensores, una ecuación covariante que se reduzca a la forma conocida en cualquier conjunto de coordenadas ortogonales. Para ello, necesitaremos algunas definiciones, resultados de geometría diferencial y los resultados de la sección anterior 3.1.

Como las segundas derivadas de la posición con respecto a los parámetros de estas curvas constreñidas a moverse en una variedad diferencial no se transforman como un tensor

$$\frac{d^2x^{\sigma'}}{du^2} = \Lambda_{\mu}^{\sigma'} \frac{d^2x^{\mu}}{du^2} + \Lambda_{\mu}^{\sigma'}{}_{,\nu} \frac{dx^{\mu}}{du} \frac{dx^{\nu}}{du}, \quad (3.25)$$

que es lo mismo a que no sean invariantes geométricos; que dependen de las coordenadas, podríamos pensar en construir un invariante a partir de uno que no es, de tal suerte que cancele la parte que le da otra regla de transformación, y que al mismo tiempo sea consistente cuando usemos coordenadas euclidianas; esto es, que cuando trabajemos en espacios planos dé la ley de movimiento libre de fuerzas, que las segundas derivadas con respecto al tiempo sean nulas $\frac{d^2x^{\sigma'}}{du^2} = 0$, lo que implica que le tenemos que exigir, motivando su definición, que en espacios planos las conexiones o símbolos de Christoffel sean todos nulos $\Gamma_{\beta\gamma}^{\alpha}(x) = 0$, en todo punto del espacio $x \in \mathbb{E}^n$ y que su ley de transformación sea

$$\Gamma_{\beta'\gamma'}^{\alpha'} = \Lambda_r^{\alpha'} \Lambda_{\beta'}^s \Lambda_{\gamma'}^t \Gamma_{st}^r - \Lambda_{\beta'}^{\mu} \Lambda_{\gamma'}^{\nu} \Lambda_{\mu}^{\alpha'}{}_{,\nu}. \quad (3.26)$$

De la definición es evidente que cancela el término de la ley de transformación para las segundas derivadas de las funciones posición, las aceleraciones parametrizadas; en general, por la longitud de arco, o por algún *parámetro afín*.

A continuación presentamos los resultados “mínimos” necesarios para poder entender cómo se construye la forma covariante de la ecuación de Fokker-Planck.

⁷Como señala van Kampen, los dos términos de \bar{J}^{α}

$$\bar{J}^{\alpha} := (\Lambda_i^{\alpha} J^i) \left| \det \frac{\partial \eta^{\alpha}}{\partial x^i} \right|^{-1}$$

no corresponden separadamente a los de J^i .

Analizando el hecho de que podemos representar en distintos sistemas de coordenadas los mismo elementos geométricos, llegamos a la conclusión que la derivada de un vector al variar alguna de las coordenadas no sólo implica derivar sus componentes con respecto a esta coordenada: es necesario tomar en cuenta los cambios de los vectores de la base. Definimos los símbolos de Christoffel como los coeficientes de la combinación lineal con los vectores de la base que dan este cambio

$$\frac{\partial \mathbf{e}_\alpha}{\partial x^\beta} =: \Gamma_{\alpha\beta}^\sigma \mathbf{e}_\sigma. \quad (3.27)$$

Esto es, los símbolos de Christoffel $\Gamma_{\alpha\beta}^\sigma$ describen cuantitativamente la proyección del cambio en el vector \mathbf{e}_α , cuando variamos la coordenada x^β en la dirección del vector \mathbf{e}_σ . Con esta definición podemos construir una noción de derivada que es independiente de los sistemas de coordenadas utilizados

$$\nabla_\beta \vec{V} := [V^\alpha,_\beta + V^\lambda \Gamma_{\lambda\beta}^\alpha] \mathbf{e}_\alpha, \quad (3.28)$$

y que puede extenderse a uno formas o funciones escalares. En este último caso, debe coincidir con la derivada parcial

$$\nabla_\beta \phi \equiv \phi,_\beta. \quad (3.29)$$

Si tomamos ϕ como la función escalar que resultada de contraer una *uno forma*⁸ \tilde{p} con un vector \vec{V} , esto es $\phi = \tilde{p}(\vec{V}) = p_\alpha V^\alpha$, junto con la propiedad de Leibniz de la derivada covariante podemos demostrar que la derivada covariante de una forma está dado por⁹

$$(\nabla_\beta \tilde{p})_\alpha \equiv p_{\alpha,\beta} - p_\lambda \Gamma_{\alpha\beta}^\lambda. \quad (3.30)$$

Sabemos que podemos construir un *isomorfismo*¹⁰ entre vectores y uno formas usando la *métrica*¹¹ $g(\cdot, \cdot)$. La uno forma que le corresponde al vector $\vec{V} = V^\alpha \mathbf{e}_\alpha$ está dada por

$$\tilde{V} = g(\cdot, \vec{V}), \quad (3.31)$$

⁸Una uno forma \tilde{p} es una función del espacio V en el campo $\tilde{p} : V \rightarrow F$ que es lineal. Al conjunto de todas estas uno formas definidas en V se le donomina el *espacio dual* de V y se le denota como V^* .

⁹Esta expresión está demostrada en el apéndice G. Aquí estamos usando vectores de la base inducida por las coordenadas y la base dual de estos vectores, definida por $dx^\alpha[\mathbf{e}_\beta] = \delta_\beta^\alpha$; esto es, toda uno forma \tilde{p} la podemos representar como $\tilde{p} = p_\alpha dx^\alpha$.

¹⁰Un isomorfismo $\psi : V \rightarrow W$ es una biyección entre dos espacios vectoriales que tanto ψ , como su inversa ψ^{-1} , son funciones lineales: $\psi(ax + y) = a\psi(x) + \psi(y)$ y también $\psi^{-1}(aw + z) = a\psi^{-1}(w) + \psi^{-1}(z)$, con w y z en W .

¹¹Una métrica $g : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ en un espacio vectorial X es una función g que satisface [26] para cualesquiera x, y y z en X :

$$\begin{aligned} g(x, y) &= 0 \iff x = y \\ g(x, y) &= g(y, x) \\ g(x, z) &\leq g(x, y) + g(y, z) \end{aligned}$$

Desde el punto de vista de tensores la métrica es un tensor de segundo orden covariante $g_{\alpha\beta} dx^\alpha \otimes dx^\beta$.

cuyas componentes en coordenadas arbitrarias $x^{\alpha'}$, que podrían ser curvilíneas o no, son

$$V_{\alpha'} = g_{\alpha'\sigma'} V^{\sigma'}. \quad (3.32)$$

En donde las primas denotan coordenadas arbitrarias. En coordenadas cartesianas, la métrica es euclíadiana

$$g_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) = \delta_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{E}^n, \quad (3.33)$$

por esta razón las componentes de la uno forma y el vector relacionado a través de la métrica coinciden

$$V_\alpha = \delta_{\alpha\beta} V^\beta = V^\alpha. \quad (3.34)$$

Por lo tanto, las derivadas con respecto a una coordenada x^β también coinciden

$$V_{\alpha,\beta} = V^\alpha_{,\beta}, \quad (3.35)$$

y como los vectores de la base en coordenadas euclidianas no cambia al movernos entre los puntos del espacio, los Christoffels definidos en 3.27 son nulos, por lo tanto las derivadas covariantes también coinciden

$$V_{\alpha;\beta} = V^\alpha_{;\beta} = \delta_{\alpha\sigma} V^\sigma_{;\beta}. \quad (3.36)$$

Siendo esta una ecuación tensorial debe ser igualmente válida en cualquier sistema de coordenadas, por lo tanto

$$V_{\alpha';\beta'} = g_{\alpha'\sigma'} V^{\sigma'}_{;\beta'}. \quad (3.37)$$

Pero si ahora tomamos la derivada covariante de la ecuación 3.32 con respecto $x^{\beta'}$

$$V_{\alpha';\beta'} = g_{\alpha'\sigma'} V^{\sigma'}_{;\beta'} + g_{\alpha'\sigma';\beta'} V^{\sigma'}, \quad (3.38)$$

comparando con la ecuación 3.37 esto implica que la derivada covariante de la métrica es nula¹²

$$g_{\alpha'\sigma';\beta'} = 0. \quad (3.39)$$

Este resultado lo podemos capitalizar para encontrar una expresión de los símbolos de Christoffel en función de derivadas de la métrica¹³

$$\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha \equiv \frac{g^{\alpha\sigma}}{2} [g_{\sigma\gamma,\beta} + g_{\beta\sigma,\gamma} - g_{\beta\gamma,\sigma}] \quad (3.40)$$

¹²Esta misma relación podría haberse deducido del hecho de que si las componentes de un tensor son nulas en algún sistema de coordenadas, entonces estas componentes serán nulas en cualquier otro sistema de coordenadas. Como las derivadas parciales de $\delta_{\alpha\sigma,\beta} = 0$ trivialmente.

¹³Para ello se necesita demostrar que los símbolos de Christoffel son simétricos en sus dos índices inferiores $\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha = \Gamma_{\gamma\beta}^\alpha$, lo cual se demuestra de la siguiente manera [141]: tómese un campo escalar ϕ , y considérese su segunda derivada covariante $\nabla\nabla\phi$, la primera es una uno forma con componente $\phi_{,\alpha}$ y la segunda en la derivada covariante de esta uno forma $\phi_{,\alpha ;\beta}$ que en coordenadas cartesianas es $\phi_{,\alpha\beta}$ que por el teorema de Schwartz esto es lo mismo que $\phi_{,\beta\alpha}$ y por lo tanto en coordenadas generales también se tiene que cumplir $\phi_{\alpha;\beta} = \phi_{\beta;\alpha}$, por lo tanto $\phi_{,\alpha ,\beta} - \phi_{,\lambda}\Gamma_{\alpha\beta}^\lambda = \phi_{,\beta ,\alpha} - \phi_{,\lambda}\Gamma_{\beta\alpha}^\lambda$, como nuevamente los primeros términos de ambos lados de la igualdad son iguales, y ϕ es arbitrario se sigue que $\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha$ es simétrico en sus dos índices inferiores. Para encontrar la expresión 3.40, sólo hay que sumar tres expresiones para la derivada covariante de la métrica: $g_{\alpha\beta,\mu}$, $g_{\alpha\mu,\beta}$ y $g_{\beta\mu,\alpha}$, usar la simetría de los símbolos de Christoffel y multiplicar por la inversa de la métrica $g^{\alpha\gamma}$.

Como mencionamos anteriormente, la forma covariante de la ecuación de Fokker-Planck tiene que estar construida usando invariantes geométricos; en sí misma, esta ecuación diferencial parcial parabólica no lo está, lo cual puede ser verificado haciendo un cambio de coordenadas de cartesianas a otras curvilíneas y ver que los elementos que la constituyen no se transforman de la forma “correcta” y, entonces, o deja de ser una ecuación parabólica en su forma *canónica*, o al recuperar la ecuación en esta forma admitimos que sus elementos no se transformen como tensores; como invariantes geométricos. Tampoco las nociones de derivación son invariantes en la ecuación de Fokker-Planck; de hecho, que contenga derivadas parciales y no covariantes es otra de las razones para que no tenga este carácter.

La forma covariante de la ecuación de Fokker-Planck [148] es

$$g^{-1/2}[P]_{,t} = -(F^\alpha)_{;\alpha}, \quad (3.41)$$

en donde el punto y coma denota, como es costumbre y aquí necesario, diferenciación covariante. En la ecuación anterior, el determinante de la métrica se denota por g y está dado en términos de la matriz inversa de difusión $g = \det B_{rs}$. El producto $g^{-1/2}P$ es una función escalar, esto es, un tensor de orden cero, el adecuado para reemplazar a P ya que éste no se transforma como tensor y $g^{-1/2}P$ sí. F^α en la ecuación covariante de Fokker-Planck está definido por

$$F^\alpha = D^\alpha g^{-1/2}P - \frac{1}{2}(B^{\alpha\beta}g^{-1/2}P)_{;\beta}, \quad (3.42)$$

y donde D^α está dado por

$$D^\alpha = A^\alpha + \frac{1}{2}\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha B^{\beta\gamma}, \quad (3.43)$$

donde A^α es el vector de arrastre en la ecuación de Fokker-Planck. Para demostrar que en efecto esta ecuación es covariante necesitamos una expresión para la derivada covariante de un tensor contravariante de segundo orden¹⁴

$$T^{\mu\nu}_{;\beta} = T^{\mu\nu}_{,\beta} + T^{\lambda\nu}\Gamma_{\lambda\beta}^\mu + T^{\mu\lambda}\Gamma_{\lambda\beta}^\nu. \quad (3.44)$$

De aquí obtenemos una expresión que necesitamos al contraer dos de sus índices y para poder demostrar necesitamos una expresión especial para la derivada del determinante con respecto alguna de las coordenadas.

La expresión para el determinante de una matriz $A \in M_{n \times n}(\mathbb{R})$ que involucra la delta de Kronecker generalizada¹⁵

$$\Delta = \frac{1}{n!} \delta_{k_1 \dots k_n}^{i_1 \dots i_n} A_{i_1}^{k_1} \dots A_{i_n}^{k_n}. \quad (3.45)$$

Recordando que $A^{-1}A = AA^{-1} = I$ implica en coordenadas

$$(A^{-1})_k^i (A)_j^k = \delta_j^i, \quad (3.46)$$

¹⁴Esta expresión está demostrada en el apéndice G.

¹⁵ $\delta_{k_1 \dots k_n}^{i_1 \dots i_n} := \epsilon^{i_1 \dots i_n} \epsilon_{k_1 \dots k_n}$ en donde $\epsilon^{i_1 \dots i_n}$ y $\epsilon_{k_1 \dots k_n}$ son densidades tensoriales totalmente antisimétricas de Levi-Civita.

por lo tanto si contraemos los índices libres i y j obtenemos la dimensión del espacio en el que estamos trabajando

$$(A^{-1})_k^i (A)_i^k = \delta_i^i = n. \quad (3.47)$$

Si reescribimos la expresión para el determinante 3.45 de la siguiente manera

$$n = A_{i_1}^{k_1} \left[\frac{1}{\Delta(n-1)!} \delta_{k_1 \dots k_n}^{i_1 \dots i_n} A_{i_2}^{k_2} \dots A_{i_n}^{k_n} \right], \quad (3.48)$$

y comparamos con 3.47 nos damos cuenta que lo que está entre paréntesis cuadrados en la ecuación arriba debe ser el elemento $(A^{-1})_{i_1}^{k_1}$ de la matriz inversa

$$(A^{-1})_{i_1}^{k_1} = \frac{1}{\Delta(n-1)!} \delta_{k_1 \dots k_n}^{i_1 \dots i_n} A_{i_2}^{k_2} \dots A_{i_n}^{k_n} = \frac{1}{\Delta} [\text{Cofactor de } A_{i_1}^{k_1} \text{ en } A]. \quad (3.49)$$

Con estos resultados estamos listos para expresar la derivada del determinante de una matriz A en términos de sus derivadas, de la inversa y del determinante

$$\Delta_{,\nu} = \frac{1}{n!} \sum_{s=1}^n A_{i_s}^{k_s}{}_{,\nu} \left[\delta_{k_1 \dots k_n}^{i_1 \dots i_n} \prod_{\substack{r=1 \\ r \neq s}}^n A_{i_r}^{k_r} \right] = \frac{1}{n} \sum_{s=1}^n A_{i_s}^{k_s}{}_{,\nu} [\Delta(A^{-1})_{k_s}^{i_s}] \quad (3.50)$$

$$= \frac{\Delta}{n} [(A^{-1})_{k_1}^{i_1} (A)_{i_1}^{k_1}{}_{,\nu} + \dots + (A^{-1})_{k_n}^{i_n} (A)_{i_n}^{k_n}{}_{,\nu}] = \Delta(A^{-1})_k^i A_i^k{}_{,\nu}. \quad (3.51)$$

En donde en la última igualdad se ha usado el hecho de que todos los índices están contraídos; son índices mudos, por lo que podemos renombrarlos como queramos y en realidad tenemos n sumandos idénticos. Usando este resultado en el determinante g de la métrica; esto es, $g := \det(B_{\mu\nu})$, en donde $(B)_{\mu\nu} = (B^{-1})^{\mu\nu}$, son matrices inversas la una de la otra, obtenemos la famosa relación de geometría diferencial

$$g_{,\nu} = g g^{\alpha\beta} g_{\beta\alpha,\nu}. \quad (3.52)$$

Nótese que $g^{-1} \equiv \det(B^{\alpha\beta})$. Ahora sí, podemos deducir la relación que necesitamos: la expresión para las componentes de la derivada covariante de un tensor de segundo orden que al contraer uno de sus índices libres con el de la derivada, se obtiene

$$T^{\mu\nu}{}_{;\nu} = g^{-1/2} [g^{1/2} T^{\mu\nu}]_{,\nu} + T^{\lambda\nu} \Gamma_{\lambda\nu}^\mu. \quad (3.53)$$

Si tomamos como tensor contravariante de segundo orden

$$T^{\mu\nu} = B^{\mu\nu} g^{-1/2} P, \quad (3.54)$$

y usamos el resultado 3.53 en el segundo término de la expresión para F^α llegamos a

$$\begin{aligned} F^\alpha &= D^\alpha g^{-1/2} P - \frac{1}{2} [B^{\alpha\beta} g^{-1/2} P]_{;\beta} = \\ &= A^\alpha g^{-1/2} P + \frac{1}{2} [B^{\beta\gamma} g^{-1/2} P] \Gamma_{\beta\gamma}^\alpha - \frac{1}{2} g^{-1/2} (B^{\alpha\beta} P)_{,\beta} - \frac{1}{2} [B^{\lambda\beta} g^{-1/2} P] \Gamma_{\lambda\beta}^\alpha, \end{aligned} \quad (3.55)$$

cancelándose el segundo con el cuarto término, por lo tanto

$$F^\alpha = g^{-1/2} [A^\alpha P - \frac{1}{2} (B^{\alpha\beta} P)_{,\beta}]. \quad (3.56)$$

Recordando que podemos escribir la divergencia de una vector como¹⁶

$$S^\alpha_{;\alpha} = g^{-1/2} (g^{1/2} S^\alpha)_{,\alpha} \quad (3.57)$$

y usándolo en la expresión $(F^\alpha)_{;\alpha}$, obtenemos

$$\begin{aligned} (F^\alpha)_{;\alpha} &= g^{-1/2} [g^{1/2} (g^{-1/2} [A^\alpha P - \frac{1}{2} (B^{\alpha\beta} P)_{,\beta}])]_{,\alpha} \\ &= g^{-1/2} [A^\alpha P - \frac{1}{2} (B^{\alpha\beta} P)_{,\beta}]_{,\alpha} \\ &= g^{-1/2} [(A^\alpha P)_{,\alpha} - \frac{1}{2} (B^{\alpha\beta} P)_{,\beta\alpha}] \\ &= -g^{-1/2} [P]_{,t}. \end{aligned}$$

La última igualdad se sigue de la anterior, si usamos los resultados en la sección 3.1. Sin embargo, si las coordenadas no son cartesianas, entonces no necesariamente $g^{-1/2} = 1$, y por lo tanto $(F^\alpha)_{;\alpha}$ no necesariamente es la divergencia de la corriente $A^\alpha P - 2^{-1}(B^{\alpha\beta} P)_{,\beta}$.

Después de revisar ciertas nociones de la conservación de la probabilidad, terminaremos de demostrar la covarianza de la ecuación 3.41, dando las leyes de transformación de $g^{-1/2} P$ y de F^α cuando hacemos una transformación de coordenadas. Si éstos se transformasen como una función escalar o tensor de orden cero y como un tensor de orden uno contravariante, entonces la ecuación 3.41 tomará la misma forma en todos los sistemas de coordenadas para nuestra variedad diferencial; esto es, será covariante. Podemos usar la ecuación covariante de Fokker-Planck para demostrar la ley de conservación de probabilidad en ambiente más generales y para ello sólo necesitamos integrar la ecuación 3.41 en un elemento de volumen generalizado cuyo elemento infinitésimo está dado por $d\Omega = \sqrt{g} d^n x$, ya que la ecuación implica que el cambio temporal en la función escalar $g^{-1/2} P$ está acompañado de un *flujo* de F^α a través de la frontera $\partial\Omega$ o hipersuperficie que encierre este volumen Ω

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} (g^{-1/2} P) g^{1/2} d^n x = - \int_{\Omega} (F^\alpha)_{;\alpha} g^{1/2} d^n x = - \int_{\partial\Omega} F^\alpha n_\alpha g^{1/2} d^{n-1} x. \quad (3.58)$$

En donde hemos usado el teorema de Gauss, haciendo uso nuevamente del resultado 3.57, si $\phi(\mathbf{x}) = 0$ es una parametrización de un pedazo de la superficie $\partial\Omega$, la uno forma normal a la superficie tiene componentes $n_\alpha := \phi_{,\alpha} |\nabla\phi|^{-1}$.

Ahora, para demostrar que la ecuación es covariante, falta demostrar dos cosas: F^α se transforma como tensor y $g^{-1/2} P$ también se transforma como un tensor. Empecemos por este último primero. Como $B^{\alpha\beta}$ pude ser utilizada como la inversa de la métrica definida en

¹⁶Sólo necesitamos considerar $\Gamma_{\beta\alpha}^\alpha = 2^{-1} g^{\alpha\sigma} (g_{\sigma\alpha,\beta} + g_{\beta\sigma,\alpha} - g_{\beta\alpha,\sigma}) = 2^{-1} g^{\alpha\sigma} g_{\sigma\alpha,\beta}$ y usando 3.52 se llega al resultado $\Gamma_{\beta\alpha}^\alpha = \frac{1}{2} g^{-1} g_{,\beta}$. Nótese que, de manera general, si A es simétrico ($A^{\alpha\beta} = A^{\beta\alpha}$), y B anti simétrico ($B_{\alpha\beta} = -B_{\beta\alpha}$), entonces $A^{\alpha\beta} B_{\alpha\beta} = -A^{\alpha\beta} B_{\beta\alpha} = -A^{\beta\alpha} B_{\beta\alpha}$, por lo tanto, $A^{\alpha\beta} B_{\alpha\beta} = 0$

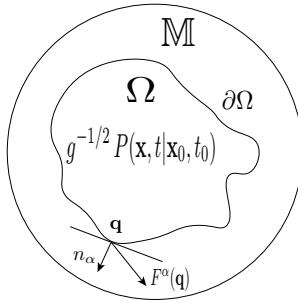


Figura 3.1: En esta figura presentamos los objetos geométricos covariantes que satisfacen una ecuación de continuidad. El cambio de la función escalar $g^{-1/2}P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)$ en la región $\Omega \in \mathbb{M}$ va acompañada de un flujo del vector F^α a través de la frontera $\partial\Omega$, que está parametrizada por $\phi(\mathbf{x}) = 0$ en una vecindad del punto $\mathbf{q} \in \mathbb{M}$, por lo que la uno forma que la caracteriza tiene componentes $n_\alpha := \phi_{,\alpha} |\phi_{,\alpha}|^{-1}$. En este trabajo $\mathbb{M} \equiv \mathbb{S}^2$.

nuestra variedad Riemanniana, que en nuestro caso en particular es \mathbb{S}^2 , sabemos que su ley de transformación es

$$B^{\alpha'\beta'} = \Lambda_\mu^{\alpha'} \Lambda_\nu^{\beta'} B^{\mu\nu}. \quad (3.59)$$

El determinante del producto de tres matrices es igual al producto de los determinantes de cada una de las matrices [46]

$$\det(ABC) = \det(A)\det(B)\det(C). \quad (3.60)$$

Si definimos $J := \det(\Lambda_\mu^{\alpha'})$ y usamos el hecho de que $\Lambda_\mu^{\alpha'} \Lambda_\beta^{\mu} = \delta_{\beta'}^{\alpha'}$, por lo tanto $J^{-1} := \det(\Lambda_{\alpha'}^{\mu})$, entonces

$$(g')^{-1} = \det(B^{\alpha'\beta'}) = J^2 \det(B^{\mu\nu}) = J^2 g^{-1}, \quad (3.61)$$

por lo tanto

$$(g')^{-1/2} = J(g)^{-1/2}. \quad (3.62)$$

De donde podemos ver que efectivamente $g^{-1/2}P$ es un escalar, ya que el elemento de volumen se transforma $d^n x^\alpha = |\det \Lambda_{\beta'}^\alpha| dx^{\beta'}$, la densidad de probabilidad se transforma como $P'(x(\eta)) = P(\eta) |\det \Lambda_{\eta'}^\alpha| = P(x^{\beta'}) J^{-1}$, por lo tanto

$$(g')^{-1/2} P' = J(g)^{-1/2} P' = J(g)^{-1/2} P J^{-1} = (g)^{-1/2} P. \quad (3.63)$$

Por último, demostremos que efectivamente F^α es un tensor. Éste está definido como la suma de dos términos dados en 3.42, y el segundo es la derivada covariante del producto de, como acabamos de demostrar, dos tensores, por lo que también es un tensor. Así que sólo tenemos que demostrar que el primero también lo es. Para ello, como $g^{-1/2}P$ sabemos que

es una función escalar, sólo tenemos que demostrar que D^α en 3.43 se transforma de manera correcta. Por otro lado A^α se transforma de acuerdo 3.12b

$$\bar{A}^{\alpha'} = A^\mu \Lambda_\mu^{\alpha'} + \frac{1}{2} B^{\mu\nu} \Lambda_{\mu,\nu}^{\alpha'}. \quad (3.64)$$

No se transforma como tensor; empero, a éste se le está sumando un término que tiene un Christoffel¹⁷ que compensa el término que hace que no se transforme como tensor 3.26

$$\begin{aligned} D^{\alpha'} &= A^{\alpha'} + \frac{1}{2} \Gamma_{\beta'\gamma'}^{\alpha'} B^{\beta'\gamma'} = \\ &= \Lambda_\mu^{\alpha'} A^\mu + \frac{1}{2} \Lambda_{\mu,\nu}^{\alpha'} B^{\mu\nu} + \frac{1}{2} \Lambda_r^{\alpha'} \Lambda_{\beta'}^s \Lambda_{\gamma'}^t \Gamma_{st}^r \Lambda_\mu^{\beta'} \Lambda_{\gamma'}^{\beta'} B^{\mu\nu} - \frac{1}{2} \Lambda_{\beta'}^{\mu} \Lambda_{\gamma'}^{\nu} \Lambda_{\mu,\nu}^{\alpha'} \Lambda_s^{\beta'} \Lambda_t^{\gamma'} B^{st} = \\ &= \Lambda_\mu^{\alpha'} A^\mu + \frac{1}{2} \Lambda_{\mu,\nu}^{\alpha'} B^{\mu\nu} + \frac{1}{2} \Lambda_r^{\alpha'} \delta_{\nu}^t \delta_{\mu}^s \Gamma_{st}^r B^{\mu\nu} - \frac{1}{2} \Lambda_{\mu,\nu}^{\alpha'} \delta_s^{\mu} \delta_t^{\nu} B^{st} = \\ &= \Lambda_\mu^{\alpha'} A^\mu + \frac{1}{2} \Lambda_{\mu,\nu}^{\alpha'} B^{\mu\nu} + \frac{1}{2} \Lambda_r^{\alpha'} \Gamma_{\mu\nu}^r B^{\mu\nu} - \frac{1}{2} \Lambda_{s,t}^{\alpha'} B^{st} = \\ &\qquad\qquad\qquad = \Lambda_\mu^{\alpha'} A^\mu + \frac{1}{2} \Lambda_r^{\alpha'} \Gamma_{\mu\nu}^r B^{\mu\nu} = \\ D^{\alpha'} &= \Lambda_\mu^{\alpha'} \left[A^\mu + \frac{1}{2} \Gamma_{st}^{\mu} B^{st} \right] = \Lambda_\mu^{\alpha'} D^\mu. \end{aligned}$$

Por lo tanto, hemos demostrado que F^α se transforma como un tensor y hemos terminado con la demostración de que la ecuación 3.41 es; efectivamente, una ecuación covariante, estos es, independiente de las coordenadas que se utilicen.

Todo esto quiere decir que bien pudimos haber empezado desde esta ecuación covariante y, al elegir las coordenadas más convenientes: generar las mismas ecuaciones dinámicas y haber tenido que resolver el mismo problema matemático; la misma ecuación 6.19. Elegir cuáles son estas coordenadas más convenientes no es inmediato; no es un problema trivial, ya que como sabemos muy bien \mathbb{S}^2 no puede ser cubierta por sólo un conjunto de coordenadas; con una sola *carta* de un *atlas*, son necesarias al menos dos, para garantizar que podemos hacer cálculo sobre ésta sin que se manifiesten sus *singularidades*. En el apéndice A analizamos con más detalle algunas estas posibilidades; sin embargo, la conclusión es que desde el punto de vista computacional: es mejor trabajar en \mathbb{R}^3 .

¹⁷La ley de transformación para los Christoffel también puede ser demostrada de manera explícita tomando en cuenta cómo se transforman las derivadas parciales y los vectores de la base $\frac{\partial \mathbf{e}_{\mu'}}{\partial x^{\nu'}} = \Lambda_{\nu'}^{\sigma} \frac{\partial}{\partial x^{\sigma}} (\Lambda_{\mu'}^{\beta} \mathbf{e}_{\beta}) = \Lambda_{\nu'}^{\sigma} \Lambda_{\mu',\sigma}^{\beta} \mathbf{e}_{\beta} + \Lambda_{\nu'}^{\sigma} \Lambda_{\mu'}^{\beta} \frac{\partial \mathbf{e}_{\beta}}{\partial x^{\sigma}} = \Lambda_{\nu'}^{\sigma} \Lambda_{\mu',\sigma}^{\beta} \mathbf{e}_{\beta} + \Lambda_{\nu'}^{\sigma} \Lambda_{\mu'}^{\beta} \Gamma_{\beta\sigma}^{\lambda} \mathbf{e}_{\lambda}$. Ahora, si escribimos $\mathbf{e}_{\beta} = \Lambda_{\beta}^{\alpha'} \mathbf{e}_{\alpha'}$ y renombramos el índice mudo β : podemos escribir la ecuación anterior como $\frac{\partial \mathbf{e}_{\mu'}}{\partial x^{\nu'}} = \Gamma_{\mu'\nu'}^{\alpha'} \mathbf{e}_{\alpha'} = \left\{ \Lambda_{\lambda}^{\alpha'} \Lambda_{\nu'}^{\sigma} \Lambda_{\mu',\sigma}^{\lambda} + \Lambda_{\lambda}^{\alpha'} \Lambda_{\mu'}^{\sigma} \Lambda_{\mu'}^{\beta} \Gamma_{\beta\sigma}^{\lambda} \right\} \mathbf{e}_{\alpha'}$, por lo tanto $\Gamma_{\mu'\nu'}^{\alpha'} = \Lambda_{\lambda}^{\alpha'} \Lambda_{\nu'}^{\sigma} \Lambda_{\mu',\sigma}^{\lambda} + \Lambda_{\lambda}^{\alpha'} \Lambda_{\mu'}^{\sigma} \Lambda_{\mu'}^{\beta} \Gamma_{\beta\sigma}^{\lambda}$ que es la misma ecuación en 3.26 que motivamos buscando una noción invariante de derivada.

Capítulo 4

Soluciones estacionarias de la ecuación de Fokker-Planck

4.1. Balance detallado y la existencia de soluciones estacionarias para la ecuación de Fokker-Planck

En esta sección concluimos la discusión acerca de los conceptos físicos y matemáticos necesarios para poner en contexto nuestro trabajo y para poder validar sus resultados o predicciones.

Lo que aquí vamos a resumir es la manera de encontrar una solución para el estado estacionario a la ecuación de Fokker-Planck. Las condiciones matemáticas para la existencia y unicidad de estas soluciones es algo que sólo vamos a referir al lector a la bibliografía [47] ya que no contribuyen de manera directa en esta tarea de encontrar una solución explícita para ninguno de los escenarios abordados en este trabajo. Lo que sí señalamos es que nuestros escenarios satisfacen todas las condiciones necesarias para que las conclusiones de esos teoremas garanticen la existencia y unicidad de las soluciones a los problemas tratados aquí, así que si nuestras soluciones empatan con las soluciones que podamos encontrar de manera explícita: éstas deben ser las buenas; no habría que buscar más y como dice Mónica Clapp, tampoco pudiese ocurrir que sólo le pegásemos a un “pedazo” de alguna solución.

La discusión la basamos principalmente en el trabajo de Hermann Haken y Robert Graham [63], no pretendemos que se nos adjudique este trabajo intelectual, ni que se crea que ellos son los únicos que han desarrollado estos temas; han habido más contribuciones por parte de otras personas como por ejemplo Roussland Stratonovich [147].

4.1.1. Ecuaciones de Movimiento

Cuando se utiliza una ecuación de tipo Fokker-Planck en la descripción de fenómenos físicos, está implícito que los elementos que constituyen el sistema físico de interés pueden separarse de acuerdo a sus respectivos tiempos de relajación o característicos en los que cambian. Si existe un conjunto, relativamente pequeño de *variables colectivas* $\{w\}$, cuyo tiempo característico está entre los tiempos moleculares o rápidos y el de la descripción: será posible emplear una ecuación de tipo Fokker-Planck; el conjunto de variables $\{w\}$ constituirá un proceso de Markov que obedecerá una ecuación estocástica de primer orden en el tiempo.

Si estas variables colectivas son macroscópicas, tal que sus fluctuaciones puedan considerarse continuas será posible considerar al proceso como un proceso difusivo generalizado, truncando las derivadas de orden mayor al segundo con respecto las $\{w\}$.

Las variables $\{w\}$ pueden ser clasificadas en función a su ley de transformación bajo inversión temporal. Éstas pueden ser divididas en dos grupos: aquellas que no cambian de signo al hacer una inversión temporal como $\{u\}$ y aquellas que sí lo hacen como $\{v\}$; esto es

$$\{w\} \equiv \{u; v\} \quad (4.1)$$

por lo que al hacer una inversión temporal

$$\{w\} \equiv \{u; v\} \rightarrow \{\tilde{w}\} \equiv \{u; -v\} \quad (4.2)$$

Como $\{w\}$ constituye un proceso de Markov continuo: la información completa del proceso está capturada en la probabilidad condicional $P(\{w\}, t | \{w_0\}, t_0)$, definida sólo para $t \geq t_0$, por lo que la densidad de probabilidad $W(\{w\}, t)$ está dada por

$$W(\{w\}, t) = \int P(\{w\}, t | \{w_0\}, t_0) W(\{w_0\}, t_0) d\{w_0\} \quad (4.3)$$

Si consideramos que el proceso es un *proceso estacionario* en este caso la probabilidad condicional depende sólo de la diferencia entre t_0 y t y no en el origen particular que se haya elegido para medir estos tiempos

$$P(\{w\}, t | \{w_0\}, t_0) = P(\{w\} | \{w_0\}, \tau) \quad (4.4)$$

En donde $\tau = t - t_0$, la ecuación de Fokker-Planck que satisfacen tanto P como W es

$$[P]_{,\tau} = -[A^i(\{w\})P]_{,i} + \frac{1}{2}[B^{ij}(\{w\})P]_{,ij} \quad (4.5)$$

La funciones de difusión B^{ij} siempre se pueden tomar de tal suerte que sean simétricas en sus dos índices

$$B^{ij} = B^{ji} \quad (4.6)$$

y para el caso que estamos considerando en este trabajo, además, positiva definida. Una propiedad de los sistemas disipativos es que se aproximan a un estado estacionario independiente de las condiciones iniciales

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} P(\{w\} | \{w_0\}, \tau) = W(\{w\}) \quad (4.7)$$

De esta ecuación y de la ecuación de Fokker-Planck 4.5 se sigue que $W(\{w\})$ satisface

$$-[A^i(\{w\})W(\{w\})]_{,i} + \frac{1}{2}[B^{ij}(\{w\})W(\{w\})]_{,ij} = 0 \quad (4.8)$$

Si queremos resolver estas ecuaciones debemos imponer condiciones a la frontera. Se acostumbra a imponer que P o W y sus respectivas derivadas se anulen en la frontera. La condición inicial para P está dada, naturalmente, por

$$P(\{w\} | \{w_0\}; 0) = \prod_i \delta(w_i - w_{0i}) \quad (4.9)$$

Podemos derivar otra relación para $[P]_\tau$ derivando 4.3 con respecto a τ

$$0 = \int [P(\{w\}|\{w_0\}; \tau)]_{,\tau} W(\{w_0\}, t - \tau) + P(\{w\}|\{w_0\}; \tau) [W(\{w_0\}, t - \tau)]_{,\tau} d\{w_0\} \quad (4.10)$$

Para la derivada de $W(\{w\}, t - \tau)$ insertamos la ecuación de Fokker-Planck escrita de la siguiente manera

$$[W(\{w_0\}, t - \tau)]_{,(t-\tau)} = L[\{w_0\}]W(\{w_0\}, t - \tau) \quad (4.11)$$

Ahora definamos a $L^+[\{w\}]$ como el operador auto adjunto de $L[\{w\}]$, definido como aquel que satisface la siguiente identidad¹

$$0 = \int [F_1(\{w\})L[\{w\}]F_2(\{w\}) - F_2(\{w\})L^+[\{w\}]F_1(\{w\})] d\{w\} \quad (4.12)$$

para funciones arbitrarias F_1 y F_2 y si tomamos en cuenta que $W(\{w_0\}, t - \tau)$ es una distribución arbitraria entonces P debe satisfacer también

$$[P]_{,\tau} = L^+[\{w_0\}]P \quad (4.13)$$

para las condiciones de contorno (*naturales*²). En esos casos obtenemos la forma explícita del operador $L^+[\{w\}]$

$$[P]_{,\tau} = A^{i_0}(\{w_0\})[P]_{,i_0} + \frac{1}{2}B^{i_0j_0}(\{w_0\})[P]_{i_0j_0} \quad (4.14)$$

Ésta es la ecuación denominada la ecuación de Fokker-Planck hacia atrás.

4.1.2. Definición de Balance detallado

En esta sección seguimos las mismas líneas de razonamiento que en [34] para explicar cuáles son las consecuencias de la reversibilidad microscópica, en las funciones de probabilidad de la descripción mesoscópica. Nos centraremos en los sistemas que pueden ser descritos

¹En este contexto, la relación que define a L^+ implica que

$$\int_{\Omega} L^+[\{w_0\}]PW(\{w_0\}, t - \tau) d\{w_0\} = \int_{\Omega} P[-(A^{\alpha_0}W)_{,\alpha_0} + 1/2(B^{\alpha_0\beta_0}W)_{,\alpha_0\beta_0}] d\{w_0\}$$

Si ahora integramos por partes una vez en el primer término y dos veces el segundo término del lado derecho

$$\int_{\Omega} P[-(A^{\alpha_0}W)_{,\alpha_0}] d\{w_0\} = -PA^{\alpha_0}W|_{\partial\Omega} + \int_{\Omega} A^{\alpha_0}W(P)_{,\alpha_0} d\{w_0\}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_{\Omega} P(B^{\alpha_0\beta_0}W)_{,\alpha_0\beta_0} d\{w_0\} &= \frac{1}{2} \left[P(B^{\alpha_0\beta_0}W)_{,\beta_0}|_{\partial\Omega} - \int_{\Omega} (B^{\alpha_0\beta_0}W)_{\beta_0}(P)_{,\alpha_0} d\{w_0\} \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[P(B^{\alpha_0\beta_0}W)_{,\beta_0}|_{\partial\Omega} - B^{\alpha_0\beta_0}W(P)_{,\alpha_0}|_{\partial\Omega} + \int_{\Omega} B^{\alpha_0\beta_0}W(P)_{,\alpha_0\beta_0} d\{w_0\} \right] \end{aligned}$$

²Aquellas en donde P y sus derivadas $(P)_{,\alpha_0}$ se anulan en la frontera $\partial\Omega$.

con la mecánica clásica³. En general estaremos interesados en funciones de probabilidad de cierto subconjunto de las variables dinámicas colectivas que denotaremos por α ; esto es, en funciones $f(\alpha', \alpha; \tau) d\alpha d\alpha'$ que representen la probabilidad conjunta de que el conjunto de variables α asuman valores acotados por el intervalo $[\alpha', \alpha' + \Delta\alpha']$, un tiempo τ después de haberse encontrado acotado este conjunto de valores en el intervalo $[\alpha, \alpha + \Delta\alpha]$. Para calcular esta probabilidad definamos la densidad de probabilidad condicionada $P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau) d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N$. Por definición es la probabilidad de encontrar al sistema en el intervalo $[\mathbf{r}'^N, \mathbf{r}'^N + \Delta\mathbf{r}'^N] \times [\mathbf{p}'^N, \mathbf{p}'^N + \Delta\mathbf{p}'^N]$, dado que inicialmente $\tau = 0$ tenía la configuración $(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)$.

obedecen las ecuación de movimiento

$$\mathbf{r}'^N - \mathbf{r}^N = \Delta\mathbf{r}^N(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau) \quad \text{con } \Delta\mathbf{r}^N(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; 0) = 0, \quad (4.15a)$$

$$\mathbf{p}'^N - \mathbf{p}^N = \Delta\mathbf{p}^N(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau) \quad \text{con } \Delta\mathbf{p}^N(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; 0) = 0. \quad (4.15b)$$

Se sigue de la definicón de P y de las ecuaciones 4.15

$$P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau) = \delta(\mathbf{r}'^N - \mathbf{r}^N - \Delta\mathbf{r}^N(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau)) \delta(\mathbf{p}'^N - \mathbf{p}^N - \Delta\mathbf{p}^N(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau)) \quad (4.16)$$

Lo cual implica que la probabilidad será cero excepto para transiciones que sean compatibles las leyes de la mecánica. Se sigue de 4.16 que la densidad de probabilidad satisface

$$\int_{\mathbb{R}^{6N}} P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau) d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N = 1. \quad (4.17)$$

Como el sistema está restringido a moverse en la región energética $(E, E + dE)$, podemos igualmente escribir esta integral sobre esta región

$$\int_{(E, E+dE)} P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau) d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N = 1, \quad (4.18)$$

ya que todas las trayectorias permanecen en esta región.

La función de densidad de probabilidad $\rho(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N; \tau)$ puede ser obtenida a partir de $\rho(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N; 0)$ y de $P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau)$ a través de la relación que satisfacen dadas sus respectivas definiciones

$$\rho(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N; \tau) = \int_{\mathbb{R}^{6N}} \rho(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N; 0) P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N \quad (4.19)$$

Para un estado estacionario micro canónico, se tiene

$$\rho(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N; \tau) = \rho(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N; 0) = \rho(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N). \quad (4.20)$$

³Existen resultados análogos para el caso de sistemas que obedecen la mecánica cuántica y fueron establecidos por N. G. van Kampen [83]

en donde $\rho(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)$ está dada por [96]

$$\rho(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) = \begin{cases} \rho_0 & \text{dentro de la región } (E, E + dE), \\ 0 & \text{en todas las demás partes del espacio fase.} \end{cases} \quad (4.21)$$

De las tres relaciones anteriores, 4.19, 4.20 y 4.21, se sigue de inmediato que

$$\int_{(E, E+dE)} P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N = 1, \quad (4.22)$$

para todas las parejas $(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N)$, para las cuales su energía se encuentra en $(E, E+dE)$. Como todas las trayectorias, de acuerdo a las leyes de la mecánica y al principio de conservación de energía, permanecen en esta región, podemos reescribir la relación anterior como una integral extendida a todo el espacio fase

$$\int_{\mathbb{R}^{6N}} P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N = 1 \quad (4.23)$$

Las ecuaciones de movimiento son invariantes bajo transformaciones de “inversión temporal”

$$\tau \rightarrow -\tau, \quad (4.24a)$$

$$\mathbf{r}^N \rightarrow \mathbf{r}^N, \quad (4.24b)$$

$$\mathbf{p}^N \rightarrow -\mathbf{p}^N. \quad (4.24c)$$

Lo cual implica que P debe tener una estructura o forma matemática que satisfaga

$$P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau) = P(\mathbf{r}'^N, -\mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, -\mathbf{p}^N; -\tau), \quad (4.25)$$

y como consecuencia del determinismo o causalidad de las ecuaciones de movimiento, la “probabilidad” de estar en $(\mathbf{r}'^N, -\mathbf{p}'^N)$ en un tiempo τ anterior, cuando inicialmente el sistema se encuentra en $(\mathbf{r}^N, -\mathbf{p}^N)$, es la misma que la “probabilidad” de estar $(\mathbf{r}^N, -\mathbf{p}^N)$ en un tiempo τ posterior cuando el sistema se encontraba en inicialmente en $(\mathbf{r}'^N, -\mathbf{p}'^N)$. Esto es

$$P(\mathbf{r}'^N, -\mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, -\mathbf{p}^N; -\tau) = P(\mathbf{r}^N, -\mathbf{p}^N | \mathbf{r}'^N, -\mathbf{p}'^N; -\tau). \quad (4.26)$$

Combinando con las ecuaciones 4.25 y 4.26 obtenemos

$$P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau) = P(\mathbf{r}^N, -\mathbf{p}^N | \mathbf{r}'^N, -\mathbf{p}'^N; \tau). \quad (4.27)$$

Esta relación quiere decir que si en algún momento invertimos los momentos de las partículas, éstas recorren la misma trayectoria pero en sentido contrario.

En el ensamble microcanónico, la probabilidad conjunta de encontrar al sistema, si inicialmente estaba en $[\mathbf{r}^N, \mathbf{r}^N + d\mathbf{r}^N] \times [\mathbf{p}^N, \mathbf{p}^N + d\mathbf{p}^N]$, en un intervalo de tiempo posterior τ en $[\mathbf{r}'^N, \mathbf{r}'^N + d\mathbf{r}'^N] \times [\mathbf{p}'^N, \mathbf{p}'^N + d\mathbf{p}'^N]$, es

$$P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau) \rho(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N. \quad (4.28)$$

Entonces, la probabilidad conjunta $f(\alpha', \alpha; \tau)$ en el ensamble microcanónico es

$$f(\alpha, \alpha'; \tau) d\alpha d\alpha' = \int_{(\alpha, \alpha+d\alpha)}^{} \int_{(\alpha', \alpha'+d\alpha')}^{} P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) \rho(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N. \quad (4.29)$$

Si usamos la expresión para la distribución del ensamble microcanónico

$$\begin{aligned} f(\alpha, \alpha'; \tau) d\alpha d\alpha' &= \rho_0 \int_{(E, E+dE)}^{} \int_{(\alpha, \alpha+d\alpha)}^{\alpha', \alpha'+d\alpha'} P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N \\ &= \rho_0 \int_{(E, E+dE)}^{} \int_{(\alpha, \alpha+d\alpha)}^{\alpha', \alpha'+d\alpha'} P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N. \end{aligned} \quad (4.30)$$

En donde hemos usado el hecho de que todas estas trayectorias permanecen dentro de la región $(E, E+dE)$. Es evidente de 4.29, que la función de densidad de probabilidad conjunta $f(\alpha, \alpha'; \tau) d\alpha d\alpha'$, es estacionaria. Ya que sólo depende de τ y no de un tiempo inicial específico t .

Usando 4.30 junto con las condiciones 4.18 y 4.22, y la forma de cómo obtener la función de densidad de una función de las variables dinámicas en el ensamble microcanónico⁴ 4.31 que podemos calcular las funciones de densidad de probabilidad marginal

$$f(\alpha) = \int f(\alpha', \alpha; \tau) d\alpha' \quad (4.33a)$$

$$f(\alpha') = \int f(\alpha', \alpha; \tau) d\alpha \quad (4.33b)$$

Ahora definamos la probabilidad condicional $P(\alpha'|\alpha; \tau)$ para el ensamble microcanónico

$$P(\alpha'|\alpha; \tau) d\alpha' = \frac{f(\alpha', \alpha; \tau) d\alpha' d\alpha}{f(\alpha) d\alpha}. \quad (4.34)$$

De donde se sigue usando 4.31, 4.32 y 4.30

$$\begin{aligned} P(\alpha'|\alpha; \tau) d\alpha' &= \frac{f(\alpha', \alpha; \tau) d\alpha' d\alpha'}{\rho_0 \Omega(\alpha)} \\ &= \frac{1}{\Omega(\alpha)} \int_{(E, E+dE)}^{} \int_{(\alpha, \alpha+d\alpha)}^{\alpha', \alpha'+d\alpha'} P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N \end{aligned} \quad (4.35)$$

⁴En el caso del ensamble microcanónico

$$f(\alpha) d\alpha = \int_{(E, E+dE)}^{\alpha, \alpha+d\alpha} \rho_0 d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N = \frac{1}{\Omega} \int_{(E, E+dE)}^{\alpha, \alpha+d\alpha} d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N = \frac{\Omega(\alpha)}{\Omega}. \quad (4.31)$$

Puesto que el hipervolumen en el espacio fase del cascarón de energía $(E, E+dE)$ está dado por

$$\rho_0^{-1} = \int_{(E, E+dE)} dr^N dp^N =: \Omega. \quad (4.32)$$

De esta relación también es evidente que $P(\alpha'|\alpha; \tau)$ también es estacionaria.

Ahora, para un estado *no* estacionario

$$f(\alpha', t; \alpha; t + \tau) d\alpha d\alpha' = \int_{(\alpha, \alpha+d\alpha)} \int_{(\alpha', \alpha'+d\alpha')} P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; \tau) \rho(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; t) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N. \quad (4.36)$$

Usando las condiciones de normalización 4.18 y 4.22, en lugar de 4.33a y 4.33b, obtenemos

$$f(\alpha, t) = \int f(\alpha', t; \alpha; t + \tau) d\alpha', \quad (4.37a)$$

$$f(\alpha', t + \tau) = \int f(\alpha', t; \alpha; t + \tau) d\alpha, \quad (4.37b)$$

en donde

$$f(\alpha, t) d\alpha = \int_{(\alpha, \alpha+d\alpha)} \rho(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; t) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N, \quad (4.38)$$

es la función de distribución del estado no estacionario. Análogamente a 4.34 podemos definir la densidad de probabilidad condicionada no estacionaria

$$P(\alpha, t | \alpha'; t + \tau) d\alpha' = \frac{f(\alpha, t; \alpha'; t + \tau) d\alpha d\alpha'}{f(\alpha, t) d\alpha} \quad (4.39)$$

La densidad de probabilidad conjunta 4.36 y la densidad de probabilidad condicionada 4.39 no son estacionarias ya que dependen en el tiempo inicial t .

La probabilidad condicional 4.39 se reducirá en un tiempo específico $t = t_0$ a la probabilidad 4.34, si $\rho(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; t)$ es uniforme al tiempo $t = t_0$ para los puntos del espacio fase para los cuales se satisface $\alpha \leq \alpha(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) \leq \alpha + d\alpha$ y para los cuales la energía satisface $E \leq E(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) \leq E + dE$. Se sigue de 4.36 y 4.38, que para este caso el lado derecho de 4.39 es independiente de $\rho(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N; t_0)$ y podemos reemplazar este término con la densidad de distribución microcanónica $\rho(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N)$, la cual también es uniforme en la región $\alpha \leq \alpha(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) \leq \alpha + d\alpha$. Por lo tanto

$$\frac{f(\alpha', t_0 + \tau; \alpha, t_0) d\alpha d\alpha'}{f(\alpha, t_0) d\alpha} = \frac{f(\alpha', \alpha; \tau) d\alpha d\alpha'}{f(\alpha) d\alpha}, \quad (4.40)$$

o usando 4.34 y 4.39

$$P(\alpha', t_0 | \alpha; t_0 + \tau) = P(\alpha' | \alpha; \tau). \quad (4.41)$$

Una relación entre cantidades de las cuales una una, $P(\alpha', t_0 | \alpha; t_0 + \tau)$, está relacionada con un ensamble de no equilibrio mientras que la otra, $P(\alpha' | \alpha; \tau)$, con uno de equilibrio, que será válida en $t = t_0$ pero no necesariamente para otros tiempos. Por ejemplo, esta relación será válida, si, por ejemplo, una medición revela que el sistema a un tiempo inicial $t = t_0$ está con sus valores acotados en $(\alpha_0, \alpha_0 + \alpha_0)$ y por lo tanto está representado, en el espacio fase de

acuerdo con el postulado⁵ de probabilidades iguales *a priori*, por un ensamble con densidad de probabilidad *uniforme* distinta de cero para aquellos puntos en el cascarón energético $(E, E + dE)$, tal que $\alpha_0 \leq \alpha_0(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) \leq \alpha_0 + d\alpha_0$ y cero en cualquier otro punto del espacio fase.

Es posible darle una interpretación geométrica a $P(\alpha'|\alpha; \tau) d\alpha'$ como el cociente de dos volúmenes en el espacio fase, así como en 4.31. Para ello, sea $(\alpha, \alpha + d\alpha)$ la región del espacio fase para la cual se cumple $\alpha \leq \alpha(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) \leq \alpha + d\alpha$ y sea su respectivo volumen $\Omega(\alpha)$. Sea $\Omega(\alpha'|\alpha; \tau)$ el volumen del espacio fase de la subregión $(\alpha, \alpha + d\alpha)$ de la cual sus puntos se mueven a la región $(\alpha', \alpha' + d\alpha')$ en un tiempo τ :

$$\Omega(\alpha', \alpha; \tau) = \int_{\substack{(\alpha, \alpha+d\alpha) \\ (E, E+dE)}} \int_{\substack{(\alpha', \alpha'+d\alpha') \\ (E, E+dE)}} P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N \quad (4.42)$$

En ese caso la ecuación 4.35 se transforma en

$$P(\alpha', \alpha; \tau) d\alpha' = \frac{\Omega(\alpha', \alpha; \tau)}{\Omega(\alpha)}. \quad (4.43)$$

Se sigue de 4.15, 4.16 y 4.33 - 4.35, que $P(\alpha'|\alpha; \tau)$ tiene las siguientes propiedades

$$P(\alpha', \alpha; \tau) \geq 0 \quad (4.44a)$$

$$P(\alpha', \alpha; 0) = \delta(\alpha - \alpha') \quad (4.44b)$$

$$\int P(\alpha', \alpha; \tau) d\alpha' = 1 \quad (4.44c)$$

$$\int f(\alpha) P(\alpha', \alpha; \tau) d\alpha = f(\alpha') \quad (4.44d)$$

Más aún, se cumple el siguiente resultado fundamental:

Teorema 4.1.1 (Balance Detallado). La función de probabilidad conjunta $P(\alpha, \alpha'; \tau)$ posee la siguiente propiedad

$$f(\alpha) P(\alpha'|\alpha; \tau) = f(\alpha') P(\alpha|\alpha'; \tau), \quad (4.45)$$

si las variables α son funciones pares $f(-\alpha) = f(\alpha)$ de las velocidades.

Demostración. Se sigue de 4.30 y 4.34 que

$$f(\alpha) P(\alpha'|\alpha; \tau) = \rho_0 \int_{\substack{(\alpha, \alpha+d\alpha) \\ (E, E+dE)}} \int_{\substack{(\alpha', \alpha'+d\alpha') \\ (E, E+dE)}} P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N. \quad (4.46)$$

Si además usamos la identidad 4.27 obtenemos

$$f(\alpha) P(\alpha'|\alpha; \tau) = \rho_0 \int_{\substack{(\alpha, \alpha+d\alpha) \\ (E, E+dE)}} \int_{\substack{(\alpha', \alpha'+d\alpha') \\ (E, E+dE)}} P(\mathbf{r}^N, -\mathbf{p}^N | \mathbf{r}'^N, -\mathbf{p}'^N) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N. \quad (4.47)$$

⁵Ver sección 2.1

Si ahora hacemos la transformación de variables $(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) \rightarrow (\mathbf{r}^N, -\mathbf{p}^N)$ y $(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N) \rightarrow (\mathbf{r}'^N, -\mathbf{p}'^N)$, la ecuación 4.47 en la siguiente expresión

$$f(\alpha)P(\alpha|\alpha';\tau) = \rho_0 \int_{(\tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}+d\tilde{\alpha})} \int_{(E, E+dE)} P(\mathbf{r}'^N, \mathbf{p}'^N | \mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N d\mathbf{r}'^N d\mathbf{p}'^N. \quad (4.48)$$

En donde $(\tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}+d\tilde{\alpha})$ es la región en la que se transforma $(\alpha, \alpha+d\alpha)$ bajo la operación $(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) \rightarrow (\mathbf{r}^N, -\mathbf{p}^N)$. Mientras que la región de energía $(E, E+dE)$ permanece invariable. El lado derecho de esta última relación es igual a $f(\tilde{\alpha}')P(\tilde{\alpha}'|\tilde{\alpha};\tau)d\tilde{\alpha}'d\tilde{\alpha}$, de donde se sigue la siguiente expresión

$$f(\alpha)P(\alpha|\alpha';\tau) d\alpha d\alpha' = f(\tilde{\alpha}')P(\tilde{\alpha}'|\tilde{\alpha};\tau) d\tilde{\alpha}' d\tilde{\alpha} \quad (4.49)$$

En ausencia de campos magnéticos, las variables tipo- α son funciones pares de los momentos

$$\alpha(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) = \alpha(\mathbf{r}^N, -\mathbf{p}^N) = \tilde{\alpha}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) \quad (4.50)$$

por lo tanto 4.49 se puede expresar como

$$f(\alpha)P(\alpha|\alpha';\tau) d\alpha d\alpha' = f(\alpha')P(\alpha'|\alpha;\tau) d\alpha' d\alpha \quad (4.51)$$

□

Corolario 4.1.1. Si también hay variables que sean funciones impares de las velocidades (o de los momentos), que denotamos con el grupo β , en ese caso

$$f(\alpha, \beta)P(\alpha, \beta|\alpha', \beta';\tau) = f(\alpha', \beta')P(\alpha', -\beta'|\alpha, -\beta;\tau) \quad (4.52)$$

Demostración. En ausencia de campos magnéticos, las variables tipo- β son funciones impares de los momentos

$$\beta(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) = -\beta(\mathbf{r}^N, -\mathbf{p}^N) = -\tilde{\beta}(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) \quad (4.53)$$

tal que el principio del balance detallado para variables combinadas tipo- α y tipo- β

$$f(\alpha, \beta)P(\alpha, \beta|\alpha', \beta';\tau) = f(\alpha', \beta')P(\alpha', -\beta'|\alpha, -\beta;\tau) \quad (4.54)$$

en donde se ha hecho uso de que en ausencia de campos magnéticos la función de distribución satisface $f(\alpha, \beta) = f(\alpha, -\beta)$. □

Corolario 4.1.2. En el caso de que haya un campo magnético \mathbf{B} presente

$$f(\alpha, \beta; \mathbf{B})P(\alpha, \beta|\alpha', \beta'; \mathbf{B}; \tau) = f(\alpha', \beta'; \mathbf{B})P(\alpha', -\beta'|\alpha, -\beta; -\mathbf{B}; \tau) \quad (4.55)$$

Demostración. Si hay campos magnéticos la inversión temporal, además de las transformaciones en 4.24, implica transformar el campo magnético $\mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{B}$, ya que para que las

partículas recorran en sentido inverso las trayectorias, es necesario hacer este cambio en la fuerza de Lorentz [80]

$$\mathbf{F} = q\mathbf{E} + q\mathbf{v} \times \mathbf{B}. \quad (4.56)$$

En ese caso tendríamos

$$f(\alpha, \beta; \mathbf{B})P(\alpha, \beta | \alpha', \beta'; \mathbf{B}; \tau) = f(\alpha', \beta'; \mathbf{B})P(\alpha', -\beta' | \alpha, -\beta; -\mathbf{B}; \tau) \quad (4.57)$$

En donde se ha usado el hecho de que la función de distribución satisface⁶ $f(\alpha, \beta, \mathbf{B}) = f(\alpha, -\beta, -\mathbf{B})$. \square

Ésta es la consecuencia en la descripción mesoscópica que se deriva de la *reversibilidad microscópica* (principio de balance detallado). Las relaciones 4.45, 4.55 y 4.55 son el sustrato para la deducción de las *relaciones de reciprocidad de Onsager*.

Como señalan en [63], mientras casi todas las ecuaciones dinámicas microscópicas son reversibles; no cambia su estructura bajo inversión temporal, si todas las cantidades son transformadas adecuadamente, todas las ecuaciones macroscópicas son irreversibles. Sin embargo, como acabamos de ver, esta reversibilidad microscópica tiene consecuencias en las fluctuaciones temporales de las variables macroscópicas, a estas consecuencias se les denomina balance detallado. En lo que sigue, para simplificar un poco la notación, denotemos por

$$\tau \rightarrow -\tau, \quad (4.58a)$$

$$\{w\} \rightarrow \{\tilde{w}\}, \quad (4.58b)$$

a la transformación de inversión temporal. El balance detallado, para la función de densidad de probabilidad W se expresa como

$$W_2(\{w\}, t_0 + \tau; \{w_0\}, t_0) = W_2(\{\tilde{w}_0\}, t_0 + \tau; \{\tilde{w}\}, t_0) \quad (4.59)$$

Esta ecuación puede ser reescrita usando la probabilidad condicional

$$P(\{w\} | \{w_0\}; \tau)W(\{w_0\}) = P(\{\tilde{w}_0\} | \{w\}; \tau)W(\{\tilde{w}\}) \quad (4.60)$$

Si integramos la ecuación 4.59 con respecto $\{w_0\}$ obtenemos una expresión alternativa a ésta

$$W(\{w\}) = W(\{\tilde{w}\}) \quad (4.61)$$

En la siguiente sección estudiaremos a detalle, cuáles son las condiciones de este balance detallado.

⁶Esta identidad se sigue de realizar una integral de volumen en el espacio fase tomando en cuenta el hecho de que las velocidades se invierten si tanto los momentos como los campos magnéticos se invierten y la energía del sistema es par tanto en los momentos y los campos magnéticos. En mecánica clásica, la función de distribución f es independiente de \mathbf{B} ya que las propiedades magnéticas no se pueden obtener de partículas clásicas puntuales [34].

4.1.3. Consecuencias del balance detallado

En esta sección analizaremos que cuales son las consecuencias del balance detallado (reversibilidad microscópica). Para ello, veamos qué debe ocurrir si se satisfacen las ecuaciones hacia adelante y hacia atrás de Fokker-Planck y usamos 4.60 para expresar $P(\{w\}|\{w_0\}; \tau)$ en función de $P(\tilde{w}_0|\{w\}; \tau)$, usando el hecho también de que W satisface la ecuación 4.8

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} + \left[A^i(\{w\}) - \frac{1}{W(\{w\})} \frac{\partial[B^{ij}(\{w\})W(\{w\})]}{\partial w^j} - \frac{1}{2} B^{ij}(\{w\}) \frac{\partial}{\partial w^j} \right] \frac{\partial}{\partial w^i} \right\} P(\{\tilde{w}_0\}|\{\tilde{w}\}; \tau) = 0 \quad (4.62)$$

Si hacemos la sustitución $\{w_0\} \rightarrow \{\tilde{w}\}$ y $\{w\} \rightarrow \{\tilde{w}_0\}$ en la ecuación de Fokker-Planck hacia atrás 4.14

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} - \left[\tilde{A}^i(\{w\}) + \frac{1}{2} \tilde{B}^{ij}(\{w\}) \frac{\partial}{\partial w^j} \right] \frac{\partial}{\partial w^i} \right\} P(\{\tilde{w}_0\}|\{\tilde{w}\}; \tau) = 0 \quad (4.63)$$

En donde se ha introducido la notación⁷

$$\tilde{A}^i(\{w\}) \equiv \epsilon^i A^i(\{\tilde{w}\}) \quad (4.64)$$

y

$$\tilde{B}^{ij}(\{w\}) \equiv \epsilon^i \epsilon^j B^{ij}(\{\tilde{w}\}) \quad (4.65)$$

Las ϵ 's están definidas como

$$\epsilon^i = \begin{cases} +1 & \text{si } \tilde{w}^i = w^i \\ -1 & \text{si } \tilde{w}^i = -w^i \end{cases} \quad (4.66)$$

Como las relaciones 4.62 y 4.63 se tienen que cumplir para todo tiempo τ podemos eliminar la derivada temporal y combinar estas dos expresiones

$$\left\{ \left(\frac{1}{W} \frac{\partial B^{ij} W}{\partial w^j} - A^i - \tilde{A}^i \right) + \frac{1}{2} (B^{ij} - \tilde{B}^{ij}) \frac{\partial}{\partial w^j} \right\} \frac{\partial}{\partial w^i} P(\{\tilde{w}_0\}|\{\tilde{w}\}; \tau) = 0 \quad (4.67)$$

Si multiplicamos por una función arbitraria $F(\{w\})$ y después integramos con respecto $\{w\}$ tomando $\tau = 0$, obtenemos⁸ que los términos que multiplican a F , a su derivada y a su

⁷En estas expresiones y las que siguen en donde aparecen ϵ^i no se implica suma; no están contraídos los índices.

⁸Integrando por partes y usando condiciones naturales en donde P y sus derivadas $P_{,\alpha}$ se anulan en $\partial\Omega$ obtenemos la siguiente identidad

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left\{ \left(W^{-1}(B^{\alpha\beta} W),_{\beta} - A^{\alpha} - \tilde{A}^{\alpha} \right)_{,\alpha} + \frac{1}{2} (B^{\alpha\beta} - \tilde{B}^{\alpha\beta}),_{\alpha\beta} \right\} F(\{w\}) P(\{\tilde{w}_0\}|\{w\}; \tau) d\{w\} + \\ + \int_{\Omega} \left\{ W^{-1}(B^{\alpha\beta} W),_{\beta} - A^{\alpha} - \tilde{A}^{\alpha} + (B^{\alpha\beta} - \tilde{B}^{\alpha\beta}),_{\beta} \right\} F(\{w\}),_{\alpha} P(\{\tilde{w}_0\}|\{w\}; \tau) d\{w\} + \\ + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left\{ (B^{\alpha\beta} - \tilde{B}^{\alpha\beta}),_{\alpha\beta} \right\} F(\{w\}),_{\alpha\beta} P(\{\tilde{w}_0\}|\{w\}; \tau) d\{w\} = 0 \end{aligned}$$

Como esta relación tiene que ser válida para todo τ y $P(\{\tilde{w}_0\}|\{w\}; 0) \equiv \prod \delta(\tilde{w}_0^i - w^i)$, de la última condición, se sigue 4.69, y por lo tanto, entonces se sigue 4.68. Vemos que la primera identidad no aporta ninguna condición adicional a estas dos.

segunda derivada se deben de anular independientemente, por lo tanto se debe cumplir

$$W^{-1}[B^{ij}W]_{,j} - A^i - \tilde{A}^i = 0 \quad (4.68)$$

y

$$B^{ij}(\{w\}) = \epsilon^i \epsilon^j B^{ij}(\{\tilde{w}\}) \quad (4.69)$$

Estas son las consecuencias de la simultánea validez de las ecuaciones de Fokker-Planck con el balance detallado. Como puede apreciarse, implican una serie de condiciones en la estructura de las funciones de arrastre y de difusión de la ecuación de Fokker-Planck, que permitirán demostrar que podemos expresar a W en función de un potencial termodinámico generalizado $\Phi(\{w\})$ si las conocemos a priori. Esto lo hacemos en la siguiente sección. Pero antes de ello, hagamos contacto con la termodinámica irreversible del capítulo anterior. Para ello, escribamos 4.69 explícitamente para variables u y v . Definamos el conjunto de nuevas matrices de difusión

$$\begin{pmatrix} B_{(uu)}^{\alpha\beta} & B_{(uv)}^{\alpha\beta} \\ B_{(vu)}^{\alpha\beta} & B_{(vv)}^{\alpha\beta} \end{pmatrix} = (B^{ik}), \quad (4.70)$$

que debido a las relaciones de simetría 4.6, estas nuevas matrices satisfacen

$$B_{(uu)}^{\alpha\beta} = B_{(uu)}^{\beta\alpha}; \quad B_{(uv)}^{\alpha\beta} = B_{(vu)}^{\beta\alpha}; \quad B_{(vv)}^{\alpha\beta} = B_{(vv)}^{\beta\alpha}. \quad (4.71)$$

Entonces, la relación 4.69 asumen la forma explícita

$$\begin{aligned} B_{(uu)}^{\alpha\beta}(\{u, v\}) &= B_{(uu)}^{\beta\alpha}(\{u, -v\}) \\ B_{(uv)}^{\alpha\beta}(\{u, v\}) &= -B_{(uv)}^{\beta\alpha}(\{u, -v\}) \\ B_{(vv)}^{\alpha\beta}(\{u, v\}) &= B_{(vv)}^{\beta\alpha}(\{u, -v\}) \end{aligned} \quad (4.72)$$

La similitud entre estas relaciones 4.71 y 4.72 y las relaciones de reciprocidad de Onsager es evidente, más aún si tomamos en cuenta que el origen el la reversibilidad microscópica. En la siguiente sección veremos que si suponemos condiciones adicionales en la naturaleza de las fluctuaciones los coeficientes B_{ik} se reducen a una matriz de coeficientes que aparecen en un conjunto de relaciones fenomenológicas lineales entre fuerzas generalizadas y flujos. En este caso 4.71 y 4.72 son las relaciones de reciprocidad de Onsager, extendidas sin embargo, a estados arbitrarios, no necesariamente de equilibrio, que lo único que tienen que tener en común con estos últimos, es que también satisfacen las condiciones de balance detallado.

Igualando a cero los coeficientes asociados a las primeras derivadas de F , obtenemos las siguientes condiciones

$$W^{-1}[B^{ik}W]_{,k} - A^i - \tilde{A}^i = 0 \quad (4.73)$$

Para poder escribir esta relación explícitamente en términos de las variables u y v , necesitamos definir los nuevos coeficientes de arrastre

$$\{A_u^\alpha, A_v^\alpha\} \equiv \{A^i\}. \quad (4.74)$$

Entonces la Eq. (4.73) es equivalente al siguiente conjunto de condiciones

$$\begin{aligned} A^\alpha(\{u, v\}) + A^\alpha(\{u, -v\}) &= W^{-1}(\{u, v\})([B_{uu}^{\alpha\beta}(\{u, v\})W(\{u, v\})]_{,u_\beta} + \\ &\quad + [B_{uv}^{\alpha\beta}(\{u, v\})W(\{u, v\})]_{,v_\beta})[A_v^\alpha(\{u, v\}) - A_v^\alpha(\{u, -v\})] \\ &= W^{-1}(\{u, v\})([B_{uv}^{\alpha\beta}(\{u, v\})W(\{u, v\})]_{,u_\beta} + \\ &\quad + [B_{vv}^{\alpha\beta}(\{u, v\})W(\{u, v\})]_{,v_\beta}). \end{aligned} \quad (4.75)$$

Podemos interpretar este conjunto de condiciones de dos maneras. En la primera, proveen una manera de calcular el vector de arrastre en la ecuación de Fokker-Planck si conocemos la distribución del estado estacionario y si conocemos la matriz de difusión.

En el segundo caso, si conocemos el vector de arrastre y la matriz de difusión, ya sea quizá porque hemos derivado explícitamente la ecuación de Fokker-Planck asociada a nuestro sistema de interés, podemos calcular el estado estacionario, que es lo que haremos en la siguiente sección.

4.1.4. La función de densidad del estado estacionario y las condiciones de potencial

Para calcular la función de densidad de probabilidad del estado estacionario, es necesario separar al vector de arrastre A^i en dos partes una *irreversible* K^i y otra *reversible* J^i , esto es

$$A^i \equiv K^i + J^i \quad (4.76)$$

en donde⁹

$$K^i := \frac{1}{2}[A^i(\{w\}) + \epsilon^i A^i(\{\tilde{w}\})] \equiv \frac{1}{2}[A^i(\{w\}) + \tilde{A}^i(\{w\})] \quad (4.77)$$

y el vector de arrastre reversible

$$J^i := \frac{1}{2}[A^i(\{w\}) - \epsilon^i A^i(\{\tilde{w}\})] \equiv \frac{1}{2}[A^i(\{w\}) - \tilde{A}^i(\{w\})] \quad (4.78)$$

Ahora sumando la misma ecuación 4.8 con $\{w\}$ reemplazadas por $\{\tilde{w}\}$

$$-[A^\alpha(\{w\})W(\{w\})]_{,\alpha} + \frac{1}{2}[B^{\alpha\beta}(\{w\})W(\{w\})]_{,\alpha\beta} = 0 \quad (4.79)$$

$$-[\tilde{A}^\alpha(\{w\})W(\{w\})]_{,\alpha} + \frac{1}{2}[\tilde{B}^{\alpha\beta}(\{w\})W(\{w\})]_{,\alpha\beta} = 0 \quad (4.80)$$

vemos que

$$-[(A^\alpha(\{w\}) + \tilde{A}^\alpha(\{w\}))W(\{w\})]_{,\alpha} + \frac{1}{2}[(B^{\alpha\beta}(\{w\}) + \tilde{B}^{\alpha\beta}(\{w\}))W(\{w\})]_{,\alpha\beta} = 0 \quad (4.81)$$

⁹Podemos permitir que A^α dependa de uno o varios parámetros externos λ , lo cual inducirá una dependencia en Φ , lo cual es muy conveniente para estudiar transiciones de fase ya que estos parámetros caracterizan la interacción con el entorno y si estos cambian, los extremos de Φ podrán cambiar. Claro que entonces si transformamos las variables $\{w\}$ también debemos transformar estos parámetros en las funciones A^α y $B^{\alpha\beta}$; esto es, $\lambda \rightarrow \tilde{\lambda}$.

usando la definición de K^α (4.77) y el resultado 4.69

$$-2[K^\alpha W(\{w\})]_{,\alpha} + [(B^{\alpha\beta}(\{w\})W(\{w\}))]_{,\alpha\beta} = 0 \quad (4.82)$$

Por último haciendo uso de la expresión para el balance detallado 4.61, $W(\{w\}) = W(\{\tilde{w}\})$, y multiplicando por 1/2 llegamos a la siguiente relación que nos permitirá encontrar la solución al estado estacionario

$$0 = -[K^\alpha W]_{,\alpha} + \frac{1}{2}[B^{\alpha\beta}W]_{,\alpha\beta} = -[K^\alpha W - \frac{1}{2}(B^{\alpha\beta}W)_{,\beta}]_{,\alpha} \quad (4.83)$$

Comparándola con la ecuación 4.68 escrita en la forma

$$-K^\alpha W + \frac{1}{2}[B^{\alpha\beta}W]_{,\beta} = 0, \quad (4.84)$$

vemos que 4.83 está contenida en esta ecuación y que se satisface de manera automática. Si tomamos

$$W(\{w\}, \lambda) = N \exp[-\Phi(\{w\}, \lambda)], \quad (4.85)$$

en donde N es una constante de normalización dada por $[\int e^{-\Phi} d\{w\}]^{-1}$, Φ juega el rol de un potencial termodinámico generalizado; y sustituimos en 4.84, obtenemos

$$K^\alpha N \exp[-\Phi(\{w\}, \lambda)] - \frac{1}{2}B^{\alpha\beta}_{,\beta} N \exp[-\Phi(\{w\}, \lambda)] = -\frac{1}{2}B^{\alpha\beta}\Phi_{,\beta} N \exp[-\Phi(\{w\}, \lambda)]$$

Si la matriz $B^{\alpha\beta}$ tiene inversa, la cual denotamos por $(B^{-1})_{\alpha\beta}$, entonces podemos resolver para $\Phi_{,\beta}$

$$\Phi_{,\alpha} = (B^{-1})_{\alpha\beta} [B^{\beta\gamma}_{,\gamma} - 2K^\beta] =: F_\alpha \quad (4.86)$$

Más aún, podremos resolver para Φ , reduciendo a cuadraturas, si se satisfacen las condiciones de integrabilidad

$$F_{\alpha,\delta} = [(B^{-1})_{\alpha\beta} B^{\beta\gamma}_{,\gamma} - 2(B^{-1})_{\alpha\beta} K^\beta]_{,\delta} = [(B^{-1})_{\delta\beta} B^{\beta\gamma}_{,\gamma} - 2(B^{-1})_{\delta\beta} K^\beta]_{,\alpha} = F_{\delta,\alpha} \quad (4.87)$$

esto es, podremos obtener Φ como una integral de trayectoria en el espacio fase de las variables $\{w\}$.

Ahora si restamos la ecuación 4.8 haciendo una inversión temporal de ella misma sin hacer la inversión temporal, obtenemos

$$-[(A^\alpha(\{w\}) - \tilde{A}^\alpha(\{w\}))W(\{w\})]_{,\alpha} + \frac{1}{2}[(B^{\alpha\beta}(\{w\}) - \tilde{B}^{\alpha\beta}(\{w\}))W(\{w\})]_{,\alpha\beta} = 0$$

Lo que puede ser escrito de forma equivalente como

$$[J^\alpha(\{w\})W(\{w\})]_{,\alpha} = 0 \quad (4.88)$$

Por lo tanto, W corresponde a la solución estacionaria de una ecuación de Liouville construida con la parte reversible de las funciones de arrastre A^α [61]. Si insertamos 4.85 en esta última expresión, obtenemos

$$J^\alpha_{,\alpha} - J^\alpha \Phi_{,\alpha} = 0 \quad (4.89)$$

Las condiciones 4.69, 4.86 y 4.89 constituyen las *condiciones de potencial*¹⁰. En la última sección de [63] se demuestra que estas condiciones implican que se cumple el balance detallado, por lo tanto ambas son equivalentes.

4.2. Fluctuaciones y estabilidad de los sistemas estacionarios fuera de equilibrio con balance detallado

En esta sección analizaremos los resultados principales del trabajo [61]. El título de este capítulo y la estructura son las mismas que en ese trabajo. Los resultados de estabilidad están inspirados en un trabajo anterior [64] que influyó mucho en el desarrollo de la mecánica estadística de no equilibrio. Sin embargo, vale la pena mencionar que el trabajo de Green contempla la aproximación al equilibrio termodinámico y que los trabajos de Robert Graham y Hermann Haken extienden estos resultados a escenarios donde el estado estacionario no es un estado de equilibrio termodinámico. Lo único que comparten con los otros estados estacionarios de equilibrio es el balance detallado.

Recapitulando los resultados de la sección anterior. Tenemos la ecuación de Fokker-Planck (*forward*)

$$[W]_{,t} = -[A^\alpha W]_{,\alpha} + \frac{1}{2}[B^{\alpha\beta} W]_{,\alpha\beta} \quad (4.90)$$

El vector de arrastre irreversible¹¹

$$D^\alpha(\{w\}) = \frac{1}{2} [A^\alpha(\{w\}) + \epsilon^\alpha A^\alpha(\{\tilde{w}\})]. \quad (4.91)$$

¹⁰Si sólo existen variables $\{u\}$, y por lo tanto $\{w\} = \{\tilde{w}\}$: las condiciones de potencial se reducen a 4.86. Como 4.86 da Φ , y por ende W , en función del vector de arrastre irreversible K^α y la matriz de difusión $B^{\alpha\beta}$ y estas cantidades están asociadas a los procesos de fluctuación y disipación, la relación 4.88 de J^α con W es físicamente independiente; sin embargo, el balance detallado demanda que ambas influencias en W sean compatibles 4.89. Si la corriente J^α puede ser obtenida a partir de una hamiltoniana H

$J_u^\alpha = \frac{\partial H}{\partial v_\alpha}$ $J_v^\alpha = -\frac{\partial H}{\partial u^\alpha}$ entonces la divergencia es nula $\frac{\partial J^\alpha}{\partial w^\alpha} = \frac{\partial J_u^\alpha}{\partial u} + \frac{\partial J_v^\alpha}{\partial v} = 0$. Por lo tanto $J^\alpha \frac{\partial \Phi}{\partial w^\alpha} = 0$,

entonces los flujos reversibles fluyen sólo en superficies de Φ constante (ver imagen 4.1 de la sección 4.2.1 más adelante).

¹¹Recordemos que \tilde{w}^i se obtienen a partir de las w^i aplicándoles la inversión temporal $t \rightarrow -t$, y entonces las epsilons ϵ^i , están definidas como

$$\epsilon^i := \frac{w^i}{\tilde{w}^i} = \begin{cases} +1 & w^i = \tilde{w}^i \\ -1 & w^i = -\tilde{w}^i \end{cases}.$$

El vector de arrastre reversible

$$J^\alpha(\{w\}) = \frac{1}{2} [A^\alpha(\{w\}) - \epsilon^\alpha A^\alpha(\{\tilde{w}\})]. \quad (4.92)$$

Condiciones de potencial:

$$B^{\alpha\beta}(\{w\}) = \epsilon^\alpha \epsilon^\beta B^{\alpha\beta}(\{\tilde{w}\}), \quad (4.93a)$$

$$B^{\alpha\beta}(\{w\})[\Phi(\{w\})]_{,\beta} = [B^{\alpha\beta}(\{w\})]_{,\beta} - 2D^\alpha(\{w\}), \quad (4.93b)$$

$$[J^\alpha(\{w\})]_{,\alpha} - J^\alpha(\{w\})[\Phi(\{w\})]_{,\alpha} = 0. \quad (4.93c)$$

Estas condiciones de potencial junto con la estructura de la ecuación de Fokker-Planck, permiten escribir la solución al estado estacionario como

$$W(\{w\}) = N \exp - (\Phi(\{w\})). \quad (4.94)$$

4.2.1. Propiedades de los estados estacionarios

Si sustituimos la ecuación 4.94 en la ecuación 4.93c encontramos la relación entre el vector de arrastre reversible y la distribución del estado estacionario

$$[J^\alpha W]_{,\alpha} = 0. \quad (4.95)$$

Por otro lado Φ está dado en términos del vector de arrastre irreversible y de la matriz de difusión 4.93b. Estas cantidades están relacionadas con los procesos de fluctuación y disipación que son físicamente diferentes del movimiento sistemático que representa J^α

Ahora supongamos que los flujos reversibles son generados por un flujo Hamiltoniano. En ese caso, las ecuaciones de Hamilton dirían

$$J_{(u)}^\alpha = [H]_{,v_\alpha}; \quad J_{(v)}^\alpha = -[H]_{,u_\alpha}. \quad (4.96)$$

En ese caso la divergencia del vector de arrastre reversible sería nula

$$[J^\alpha]_{,\alpha} = J_{(u)}^\alpha, u_\alpha + J_{(v)}^\alpha, v_\alpha = 0, \quad (4.97)$$

y en esos casos podemos escribir la condición 4.93c como

$$J^\alpha [\Phi]_{,\alpha} = 0 \quad (4.98)$$

Lo cual implica que J^α sólo fluye en superficies equipotenciales $\Phi = c$, con c una constante, en el espacio de configuración de las variables $\{w\}$. La distribución más probable $\{w_{\max}\}$ se obtiene maximizando W , que es equivalente a encontrar donde Φ alcanza sus valores mínimos. Las condiciones matemáticas que determinan esto son

$$[\Phi(\{w\} = \{w_{\max}\})]_{,\alpha} = 0, \quad (4.99a)$$

$$[\Phi(\{w\} = \{w_{\max}\})]_{,\alpha\beta} w^\alpha w^\beta \geq 0. \quad (4.99b)$$

Cuando las fluctuaciones de las variables aleatorias $\{w\}$ sean “pequeñas”, la función de densidad de probabilidad del estado estacionario 4.94 estará muy concentrada alrededor de

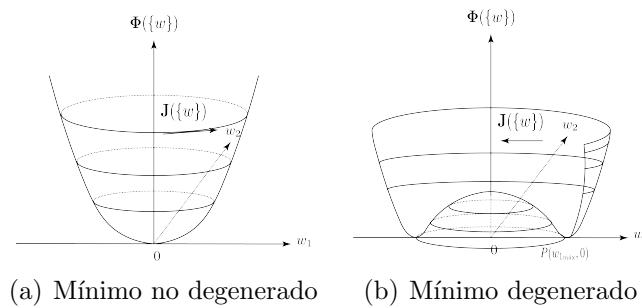


Figura 4.1: Potenciales con mínimos no degenerados y degenerados con simetría rotacional en dos dimensiones.

los lugares donde Φ asume sus valores mínimos. Las propiedades de estos mínimos están determinadas por las simetrías generales del sistema.

Los coeficientes A^α y $B^{\alpha\beta}$ de la ecuación de Fokker-Planck y, por lo tanto también Φ , pueden depender en un conjunto de parámetros externos $\{\lambda\}$ los cuales capturan las interacciones con el entorno. Cuando estos parámetros cambian, pueden cambiar los mínimos $\{w_{\max}\}$ de Φ . Mientras que las simetrías de $\{w_{\max}\}$ no cambian al variar los parámetros externos, el comportamiento del sistema será muy parecido; sin embargo, si esta simetría cambia para cierto valor crítico de los parámetros externos, entonces el comportamiento cambiará de manera cualitativa. Este cambio ha sido descrito en las transiciones de fase que sufren sistemas en equilibrio termodinámico. En ese caso Φ es un potencial termodinámico. Como Φ también describe los estados estacionarios fuera de equilibrio, se han aplicado las propiedades “estáticas” de las transiciones de estado a estos estados estacionarios. Esto incluye la teoría de Landau [96] que conduce a la noción de *parámetros de orden*.

4.2.2. Aproximación al estado estacionario

En esta sección investigaremos la convergencia de la solución a la ecuación de Fokker-Planck al estado estacionario cuando se cumplen las condiciones de potencial. Veremos que podemos definir una cantidad análoga la entropía de Gibbs, que tiene las propiedades de un funcional de Liapunov [67]. Empecemos por definir

$$\Phi(\{W(t)\}) := \int W(t) \ln \left(\frac{W(t)}{W} \right) d\{w\} + \Phi_\infty \quad (4.100)$$

Está claro que este funcional tiende a Φ_∞ conforme $t \rightarrow \infty$, ya que $W(t) \rightarrow W$. La definición garantiza que este funcional de $W(t)$ disminuye cuando esta distribución se approxima a la distribución estacionaria W . Esto se puede entender de la siguiente manera. Sumamos $W(t)[W/W(t) - 1]$ al integrando, lo cual no cambia el valor de la integral, ya que tanto $W(t)$ como W están normalizadas a la unidad y usemos¹² la desigualdad $x - \ln x - 1 \geq 0$ para

¹²Esta desigualdad se puede demostrar de la siguiente manera. Sabemos que $\lim_{x \rightarrow 0}[x - \ln x] = \infty$, al igual que $\lim_{x \rightarrow \infty}[x - \ln x] = \infty$, y que $f'(x) = 1 - 1/x = 0$, si y sólo si $x = 1$, por lo que $x = 1$ es el mínimo global de la función $f(x) = x - \ln x$, por lo tanto $f(1) \leq f(x)$ para todo x en el dominio de f , de donde se sigue que $1 \leq x - \ln x$.

demostrar que $\Phi(t) - \Phi_\infty > 0$

$$\begin{aligned}\Phi(\{W(t)\}) &= \int W(t) \ln \left(\frac{W(t)}{W} \right) d\{w\} + \Phi_\infty \\ &= \int \left[W(t) \ln \left(\frac{W(t)}{W} \right) + W(t) \left(\frac{W}{W(t)} - 1 \right) \right] d\{w\} + \Phi_\infty.\end{aligned}\quad (4.101)$$

Por lo tanto

$$\Phi(t) - \Phi_\infty = \int W(t) \left\{ \ln \left(\frac{W(t)}{W} \right) + \left(\frac{W}{W(t)} - 1 \right) \right\} d\{w\}, \quad (4.102)$$

De donde deducimos que $\Phi(t) - \Phi_\infty > 0$ para cualquier función de distribución de probabilidad $W(t) \neq W$. Lo segundo que hay que demostrar es el siguiente teorema:

Teorema 4.2.1. El funcional $\Phi(W(t)) - \Phi_\infty \geq 0$ es un funcional de Liapunov

$$\frac{d\Phi(\{W(t)\})}{dt} \leq 0 \quad (4.103)$$

Demostración. Derivando la definición 4.101, usando la ecuación de Fokker-Planck 4.90 para expresar la derivada $[W(t)]_t$ y usando las condiciones de potencial 4.93 llegamos a¹³

$$\frac{d\Phi(\{W(t)\})}{dt} = -\frac{1}{2} \int W(t)^{-1} W^2 B^{\alpha\beta}(\{w\}) \cdot [W^{-1} W(t)]_{,\alpha} [W^{-1} W(t)]_{,\beta} d\{w\} \quad (4.104)$$

Como $B^{\alpha\beta}$ es una forma cuadrática positiva y tanto $W(t)$ como W son positivas, podemos concluir que el lado derecho siempre es negativo. \square

¹³Derivando dentro de la integral en Eq. (4.101)

$$\frac{d\Phi(t)}{dt} = \int_{\mathbb{R}^d} [W(t)]_t \ln \left(\frac{W(t)}{W} \right) d\{w\} = - \int_{\mathbb{R}^d} \left[A^\alpha W(t) - \frac{1}{2} [B^{\alpha\beta} W(t)]_{,\beta} \right]_{,\alpha} \ln \left(\frac{W(t)}{W} \right) d\{w\}.$$

Integrando por partes

$$-\int_{\mathbb{R}^d} \left[A^\alpha W(t) - \frac{1}{2} [B^{\alpha\beta} W(t)]_{,\beta} \cdot \ln \left(\frac{W(t)}{W} \right) \right]_{,\alpha} d\{w\} + \int_{\mathbb{R}^d} \left[\ln \left(\frac{W(t)}{W} \right) \right]_{,\alpha} \left[A^\alpha W(t) - \frac{1}{2} [B^{\alpha\beta} W(t)]_{,\beta} \right] d\{w\}.$$

Usando el teorema de la divergencia en el primer término y tomando en cuenta que tanto $W(t)$, como A^α decaen suficientemente rápido, conforme $|w_k| \rightarrow \infty$, así como que $W(t) \rightarrow W$ conforme $t \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^d} \left[A^\alpha W(t) - \frac{1}{2} [B^{\alpha\beta} W(t)]_{,\beta} \cdot \ln \left(\frac{W(t)}{W} \right) \right]_{,\alpha} d\{w\} &= \int_{\mathbb{R}^{d-1}} \left[(A^\alpha W(t) - \frac{1}{2} [B^{\alpha\beta} W(t)]_{,\beta}) \ln \left(\frac{W(t)}{W} \right) \right] n_\alpha dw^\alpha \\ &= 0.\end{aligned}$$

Desarrollando el término $[B^\alpha W(t)]_{,\beta}$ y usando las condiciones 4.93b para expresar

$$[B^{\alpha\beta}]_{,\beta} = 2D^\alpha + B^{\alpha\beta}[\Phi]_{,\beta},$$

junto con el hecho de que $[\Phi]_{,\beta} = -[W]_{,\beta}/W$

$$\frac{d\Phi(t)}{dt} = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{W}{W(t)} \left[\frac{W(t)}{W} \right]_{,\alpha} \left\{ A^\alpha W(t) - \frac{1}{2} \left[2D^\alpha + B^{\alpha\beta} \left[-\frac{[W]_{,\beta}}{W} \right] \right] W(t) - \frac{1}{2} B^{\alpha\beta} [W(t)]_{,\beta} \right\} d\{w\}.$$

Escribiendo $[W(t)]_{,\beta} = [WW(t)/W]_{,\beta}$, desarrollando el producto y cancelando términos se llega a la Eq. (4.104).

4.2.3. La ecuación de Langevin

Los métodos de aproximación utilizados para obtener la ecuación de Langevin a partir de la de Fokker-Planck y viceversa están descritos en [147] y la equivalencia entre estas descripciones bajo unas condiciones muy particulares se trató en el capítulo 1 de este trabajo. En el contexto de esta discusión

$$\dot{w}^\alpha = D^\alpha + J^\alpha - \frac{1}{2} b^{\alpha\beta},_\lambda b_\beta^\lambda + b_\lambda^\alpha \xi^\lambda(t) \quad (4.105)$$

De las definiciones 1.7

$$b_\lambda^\alpha(\{w\}) b_\lambda^\beta(\{w\}) = B^{\alpha\beta}(\{w\}) \quad (4.106)$$

$$\langle \xi^\alpha(t) \rangle = 0 \quad (4.107a)$$

$$\langle \xi^\alpha(t + \tau) \xi^\beta(t) \rangle = \delta^{\alpha\beta} \delta(\tau) \quad (4.107b)$$

En donde $\delta^{\alpha\beta}$ es la delta de Kronecker y $\delta(\tau)$ es una delta de Dirac.

Usando la condiciones de potencial o de balance detallado 4.93b

$$\dot{w}^\alpha = J^\alpha - \frac{1}{2} B^{\alpha\beta} [\Phi],_\beta + b_\lambda^\alpha \xi^\lambda(t) \quad (4.108)$$

Si suponemos que¹⁴

$$b^{\alpha\beta} = b^{\beta\alpha} \quad (4.109)$$

junto con 4.106, determinan completamente $B^{\alpha\beta}$

4.2.4. Ecuaciones fenomenológicas, relaciones de Onsager

Si omitimos las fluctuaciones en las ecuaciones de Langevin 4.105 obtenemos un conjunto de ecuaciones fenomenológicas, que describen la dinámica del sistema si se desprecian las fluctuaciones

$$\dot{w}^\alpha - J^\alpha = - \frac{1}{2} B^{\alpha\beta} [\Phi],_\beta \quad (4.110)$$

Estas ecuaciones 4.110 son una relación entre los flujos irreversibles $\dot{w}^\alpha - J^\alpha$ y las fuerzas disipativas $[\Phi],_\beta$. Esto es una consecuencia de la forma general de la ecuación de Fokker-Planck y el principio de balance detallado. Nótese que estas ecuaciones no fueron obtenidas como si estuviésemos ligeramente fuera de equilibrio como en 2.1. Lo único que hemos supuesto es que se cumple el balance detallado.

¹⁴Lo cual siempre es posible al ser ξ^λ ruidos blancos estadísticamente independientes para diferentes λ .

4.2.5. Estabilidad de las soluciones a las ecuaciones fenomenológicas

En la sección 4.2.1 vimos que podíamos definir un potencial termodinámico generalizado si en lugar de usar $W(\{w\})$ en su definición, utilizábamos la solución a la ecuación de Fokker-Planck $W(t)$ que depende del tiempo; esto es, $\Phi(t) := \Phi(W(t))$ y vimos que este potencial satisface las propiedades de un *funcional de Liapunov* [69] para la ecuación de Fokker-Planck. En esta sección introduciremos

$$\Phi(t) = \Phi(\{w(t)\}), \quad (4.111)$$

en donde $w(t)$ satisface la ecuación de Langevin 4.110. Demostraremos que $\Phi(t)$ juega el papel de una función de Liapunov para esta ecuación de Langevin si esta ecuación tiene soluciones que sean estables en el sentido discutido en la sección 4.2.1. Si tomamos la derivada temporal de esta función $\Phi(t)$ obtenemos

$$\frac{d\Phi}{dt} = [\Phi]_{,\alpha} \dot{w}^\alpha = -\frac{1}{2} B^{\alpha\beta} [\Phi]_{,\alpha} [\Phi]_{,\beta} + J^\alpha [\Phi]_{,\alpha}. \quad (4.112)$$

Usando las condiciones de potencial 4.98 y que $B^{\alpha\beta}$ es una forma cuadrada positiva definida obtenemos

$$\frac{d\Phi}{dt} = -\frac{1}{2} B^{\alpha\beta} [\Phi]_{,\alpha} [\Phi]_{,\beta} \leq 0. \quad (4.113)$$

Por lo tanto la derivada temporal es negativa, a menos de que $[\Phi]_{,\alpha} = 0$. Si el o los mínimos en 4.99 no están degenerados o son discontinuamente degenerados, la función $\Phi(t) - \Phi_{\min} = 0$ en el mínimo y positiva en una vecindad del mínimo. También en este caso ocurre que $\frac{d}{dt}[\Phi(t) - \Phi_{\min}] = 0$ en el mínimo y negativa en una vecindad del mínimo. Por lo tanto, $\Phi(t) - \Phi_{\min}$ es una función de Liapunov para la ecuación 4.110 y el mínimo es asintóticamente estable en el sentido de Liapunov. Ha sido sugerido en [74] usar esta propiedad para definir una *entropía generalizada* para sistemas fuera de equilibrio, sin embargo no se pudo dar de manera única en ese trabajo ya que no se buscó la relación de esta entropía y las fluctuaciones.

Si el o los mínimos en 4.99 están continuamente degenerados un solo estado Φ en el que alcanza un mínimo no es estable lo cual conduce a un movimiento de frecuencia nula en la superficie de valores degenerados en el espacio de configuración de las variables $\{w\}$. Sin embargo, la propiedad del mínimo para Φ junto con el signo de la derivada $\frac{d}{dt}\Phi(t) \leq 0$ aún garantiza la estabilidad de este movimiento con respecto a las fluctuaciones alrededor de esta superficie.

Es en este sentido que el potencial Φ contiene información de las fluctuaciones del sistema en el estado estacionario y de la estabilidad del mismo. En [58] se presenta un trabajo en el que la producción de exceso de entropía en los estados estacionarios tiene propiedades similares a $\Phi(t)$; sin embargo, la manera de abordar ahí el tema es linearizar las desviaciones con respecto a los estados de equilibrio, razón por la cual no se puede usar esa teoría para describir las transiciones donde se rompe la simetría muy alejados de los estados de equilibrio, lo cual sí se puede hacer con la teoría de Robert Graham y Hermann Haken que acabamos de presentar en los últimos dos capítulos. Vale la pena señalar que esta ganancia en generalidad tiene un costo ya que esta teoría es válida sólo si se satisfacen las condiciones de balance detallado, lo cual no es supuesto en el trabajo de Glansdorff y Prigogine.

Parte II

Métodos numéricos

Capítulo 5

Espectro de algoritmos

En este apartado construimos los métodos numéricos. Estos usarán la información del *espacio físico*, el cual es euclíadiano \mathbb{E}^3 . El lector podrá preguntarse por qué no usar las coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) en donde se simplifican las cosas ya que r es constante y la dinámica no contendrá derivadas con respecto a esta variable. Sin embargo, al observar las estructuras de las ecuaciones de Langevin 5.30 y de Fokker-Planck (o Kramers-Klein) 5.36 se puede observar que los polos son *singularidades* y se vuelve delicada su aplicación indiscriminada como operadores de evolución alrededor de estos puntos.

En el apéndice A hacemos un análisis somero acerca de otras posibilidades de parametrizar la esfera que no involucren rotar explícitamente al sistema cuando se está cerca de los polos, como por ejemplo, el uso de la proyección estereográfica A.0.2, con la cual son necesarias sólo dos cartas; dos conjuntos de “coordenadas” locales, o la parametrización dada en la sección A.0.3, en la cual es la más fácil ver cómo pasar entre las cartas (los *difeomorfismos* necesarios). Sin embargo, en este caso se necesitan 6 cartas en total para cubrir la superficie de la esfera y además, en estos dos últimos casos lo que se tiene al final es una parametrización (no una función inyectiva), de un abierto de \mathbb{R}^2 en un subconjunto de \mathbb{E}^3 ; la esfera, y aunque los operadores de evolución después de utilizar la regla de la cadena dependerán de sólo dos parámetros (u_j, v_j) , con $j = 1, 2, \dots, m$, donde m es el número de cartas del atlas, seguiremos teniendo que almacenar, para poder visualizar las posiciones, la información de 3 coordenadas espaciales y de 3 coordenadas para los vectores de velocidad, para cada una de las partículas en el ensamblaje. Además, de que esto habrá que usarlo para movernos entre las cartas; esto es, todas estas aproximaciones consideran a la esfera dos dimensional como un subconjunto de \mathbb{E}^3 y esa información tiene que ser guardada en memoria durante las simulaciones.

Como existe una manera de reducir las rotaciones necesarias para mover a las partículas tomando “prestado” el ambiente \mathbb{E}^3 donde está embebida la superficie de la esfera \mathbb{S}^2 y renormalizar las distancias para que los desplazamientos en ambos espacios sean equivalentes: hemos tomado este camino para soslayar la necesidad de utilizar las rotaciones; calcular varias funciones trigonométricas. En esto profundizamos más en las siguientes secciones.

5.1. Algoritmo para la difusión libre

Habiéndonos empesinado en describir al sistema en \mathbb{E}^3 ; una vez analizado las diferentes posibilidades en coordenadas, es necesario desarrollar un algoritmo para actualizar al sistema. El sistema se considera una partícula “Browniana” y podemos generar la historia de una partícula hasta un tiempo $[0, T]$ n veces, o equivalentemente considerar un ensamble de n partículas y observar su evolución hasta este mismo tiempo T .

La estructura del algoritmo se sustenta en ideas geométricas. Las fuerzas satisfacen un principio de superposición independientemente de si son estocásticas o deterministas (microscópicamente tienen el mismo origen), se superponen con aquellas que constriñen el movimiento, por lo que en cada punto de aplicación la fuerza resultante opera en el plano tangente a la esfera. Esta es la esencia del principio de D'Alembert-Lagrange; la fuerza en la dirección normal a la superficie a la que está constreñido el movimiento se debe anular.

Si pensamos que la esfera vive inmersa en \mathbb{E}^3 : cada plano tangente es diferente en cada punto y éste será un subconjunto de \mathbb{E}^3 . Sin embargo, para poder actualizar las posiciones habrá que generar este plano para cada posición de cada una de las partículas en el ensamble. Esto es, si tenemos n partículas que actualizar en cada paso: habrá que generar n planos tangentes en cada paso o tiempo. Vale la pena señalar que en un espacio plano no es necesario encontrar los vectores de la base en cada punto del espacio porque estos no cambian su orientación. En el caso de la esfera todos estos vectores bases para los espacios tangentes a la misma: son diferentes en cada punto.

Otra de las motivaciones geométricas para dar forma al algoritmo numérico es que si el radio de la esfera lo hacemos suficientemente grande debemos reproducir el comportamiento de la difusión en dos dimensiones en espacios planos en donde no hay frontera o ésta no tiene influencia sobre el comportamiento local; está muy alejada. Veríamos las mismas características porque la superficie de la esfera no la podríamos distinguir de la de un plano.

Las características que consideramos para el ruido estocástico son análogas a las que tiene cuando el espacio es plano y, de hecho, no es difícil ver que si lo que hacemos es considerarlo como isotrópico en \mathbb{E}^3 y lo proyectamos a la superficie de una esfera, éste es isotrópico en los planos tangentes a la esfera aunque esto no sea evidente representándolo en coordenadas. Las características esencialmente son: delta correlacionado; la correlación entre dos fuerzas de este tipo para dos tiempos diferentes t_1 y t_2 es $KT\gamma^{-1}\delta(t_2 - t_1)$, e *isotrópico*; la probabilidad de medir una dirección para la velocidad de la partícula es la misma en todas las direcciones; por supuesto, esto no quiere decir que la magnitud de los desplazamientos tienen todos de la misma probabilidad.

Por supuesto estas suposiciones tienen que ser justificadas ya sea a través de un modelo microscópico, o a través de la reproducción de observaciones empíricas en ciertos sistemas de interés, pero en este último caso sólo sería válido para los sistemas físicos para los que se registraron las observaciones; no sabríamos cómo generalizarlo a otros sistemas que tuvieran cierta similitud; adaptarlo en función de esas diferencias.

Ahora damos un razonamiento heurístico para deducir la forma del algoritmo numérico. En el equilibrio termodinámico todos los posibles estados bajo las restricciones que definen el problema tienen la misma probabilidad de ocurrir; su distribución es *uniforme*. Así que en ausencia de campos externos: todas las posiciones accesibles al sistema son igualmente ocupadas en el tiempo y esto quiere decir que no hay una posición temporal especial y que

las funciones de probabilidad no dependen explícitamente del tiempo y la probabilidad de encontrar al sistema en alguna región en particular es proporcional simplemente a la extensión o tamaño de esta región. Como no existe una región especial hacia la cuál evolucionar si nos fijamos en la función de probabilidad para las direcciones del vector velocidad ésta tiene que ser uniforme en todas las direcciones; para el caso de dos dimensiones un ángulo Ψ es suficiente. Porque si no lo fuera, aparecería una región especial o diferente y en consecuencia un patrón espacial aparecería en el tiempo. La única manera de garantizar que esto no ocurra es que esta probabilidad sea uniforme en todas las direcciones. La otra parte del razonamiento tiene que ver con la magnitud de esos desplazamientos: éstos deberían, debido a la interacción de muchísimas partículas con la partícula browniana, ser estadísticamente independientes en cierta escala de tiempo macroscópica y por los mismo, al ser válidas las aproximaciones del teorema del límite central tener una distribución gaussiana. Estos dos componentes junto con una analogía geométrica de reescalamiento constituyen la esencia del algoritmo.

El concepto de variedad diferenciable o suave (como en el caso particular de la esfera), implica que localmente vale el teorema de Pitágoras¹

$$g_{rs}(\mathbf{r}_0) = \delta_{rs}(\mathbf{r}_0) + O(|\Delta\mathbf{r}|^2) \quad (5.1)$$

siendo las diferencias de segundo orden, entonces deberíamos poder llevar la estructura de la función de probabilidad a los espacios tangentes teniendo diferencias también de segundo orden

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|^{\frac{1}{2}} =: s - s_0 = \frac{1}{\sqrt{4D\pi(t-t_0)}} e^{-([s-s_0]^2/4D(t-t_0))} + O(|s-s_0|^2) \quad (5.2)$$

En lo que queremos hacer énfasis es en que la receta de actualización no dependerá de manera explícita de la curvatura o alguna función derivada del tensor de Riemann². Nótese que la varianza está dada por $4D(t-t_0)$ igual que en el caso de difusión en un espacio de dos dimensiones plano. Esta amplitud s junto con el vector unitario con distribución uniforme en todas las direcciones en *cada* plano tangente a la variedad; en nuestro caso, la esfera

$$\hat{\mathbf{r}} = \cos \Psi \hat{\xi}_2 + \sin \Psi \hat{\xi}_3 \quad (5.3)$$

en donde Ψ es una variable aleatoria con distribución uniforme en el intervalo $[0, 2\pi]$

$$\Psi = U[0, 2\pi] = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} & \text{si } \Psi \in [0, 2\pi] \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (5.4)$$

es la esencia del algoritmo numérico para la difusión libre. Dadas las características de Ψ podríamos haber tomado a $\hat{\xi}_2$ y a $\hat{\xi}_3$ como \mathbf{e}_θ y \mathbf{e}_ϕ .

¹Para una demostración no demasiado rigurosa de este resultado ver el apéndice B.

²En relatividad general, está prohibido el acoplamiento con la curvatura, en el siguiente sentido: la manera de extender la leyes de la física, válidas en un espacio que localmente es Minkowski, es que las derivadas parciales en relatividad especial se convierten en derivadas covariantes en relatividad general. Éste es el contenido del principio de equivalencia de Einstein.

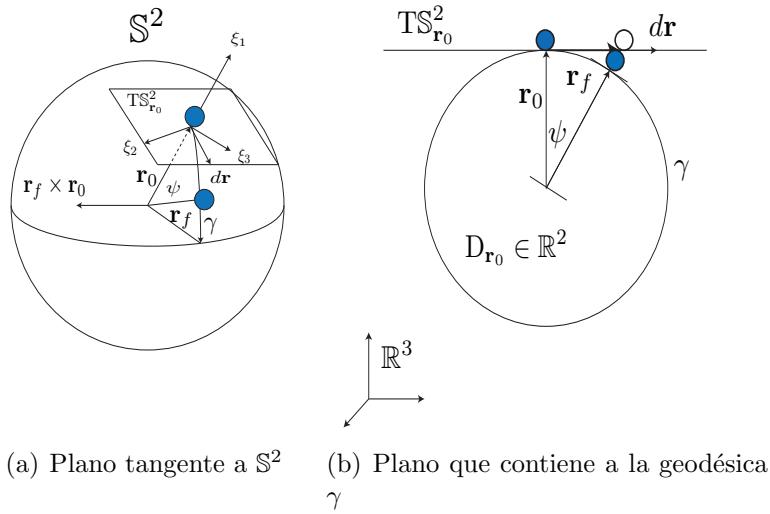


Figura 5.1: $(\hat{\xi}_1, \hat{\xi}_2, \hat{\xi}_3)$ es una base ortonormal ($\langle \hat{\xi}_a, \hat{\xi}_b \rangle = \delta_{a,b}$) en \mathbf{E}^3 , y en donde pueden estar orientados arbitrariamente; no necesariamente como $(\hat{\xi}_2, \hat{\xi}_3)$ es una base para el espacio tangente $T_{r_0}\mathbb{S}^2$ a la esfera unitaria \mathbb{S}^2 , en el punto $r_0 \in \mathbb{S}^2$. En esta imagen r_f es el vector de posición final después del desplazamiento sobre la geodésica γ .

Después de obtener esta forma explícita es natural preguntarse si es posible aplicar este mismo método a otras variedades diferenciales. Es decir, si existe, para toda variedad diferencial, un reescalamiento del desplazamiento, de tal suerte que a la hora de proyectarlo del plano tangente a la variedad, el desplazamiento sea equivalente al que hubiese tenido lugar si éste hubiese ocurrido sobre una geodésica. Un ejemplo de visualizar lo dicho sería mover un péndulo rígido como si la peonza se separara de la barilla moviéndolo en la dirección tangente a la trayectoria de uno rígido que pasase por el mismo lugar y con la misma velocidad, pero para el primero reajustar su velocidad; desplazarlo con otra velocidad y proyectarlo, rompiendo la continuidad, sobre la variedad en un instante de tal manera que llegue al mismo lugar que la peonza que permaneció en la trayectoria física.

Demostración heurística de la estructura del operador de difusión

Si quisiésemos que los desplazamientos sobre el plano tangente a la esfera en un punto de partida sean iguales a los desplazamientos sobre geodésicas los cuales pueden ser generados, no es difícil ver que tenemos que reescalar éstos usando una tangente en su magnitud.

Esto es, si d es la distancia recorrida sobre el plano tangente a la esfera en el punto de partida, que al mismo tiempo puede ser considerado como un subconjunto de \mathbb{R}^3 , sea igual a la distancia s recorrida sobre la geodésica sobre la superficie de la esfera; esto es, $d \equiv s$. Usando la definición de radián, para un arco de círculo máximo de manera general de radio r , tenemos $s = r\theta$, por lo tanto $\theta_D = d/r = \tan \theta_T$, entonces $d'/r = \tan \theta_D$. Describiendo las velocidades como elementos de \mathbf{R}^3 en la base $\{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}$, pero usando las coordenadas esféricas para describir las componentes podemos obtener una expresión para la velocidad

$$\dot{\mathbf{r}} = \dot{r}\hat{\mathbf{r}} + r\dot{\theta}\hat{\theta} + r\sin\theta\dot{\phi}\hat{\phi}$$

pero ahora escrita en la base $\{\hat{r}, \hat{\theta}, \hat{\phi}\}$. En el límite sobre amortiguado, en donde los cambios

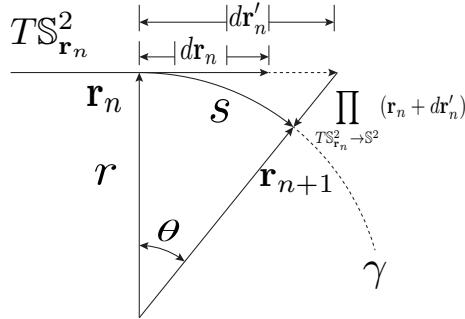


Figura 5.2: En esta figura mostramos la esencia del reescalamiento de $d\mathbf{r}$ en el que se usa la tangente de la magnitud original, y que esto hace que cuando proyectemos sobre la superficie de la esfera: la distancia sea la misma que si se hubiese rotado al sistema o lo que es equivalente, viajado a lo largo de una geodésica; este arco de círculo máximo.

de las velocidades, no de las aceleraciones son proporcionales a las fuerzas; en este caso estocásticas exclusivamente, proyectamos esta fuerza en la base $\{\mathbf{r}, \theta, \phi\}$, usando el principio de D'Alembert

$$\begin{aligned}\dot{\theta} &= [2D]^{1/2} r^{-1} \Gamma_\theta(t) \\ \theta(t + \Delta t) &= [2D]^{1/2} r^{-1} N_\theta[0, 1](\Delta t)^{1/2} = r^{-1} N_\theta[0, 2D\Delta t] \\ \dot{\phi} &= [2D]^{1/2} (r \sin \theta)^{-1} \Gamma_\phi(t) \\ \phi(t + \Delta t) &= [2D]^{1/2} (r \sin \theta)^{-1} N_\phi[0, 1](\Delta t)^{1/2} \\ &= (r \sin \theta)^{-1} N_\phi[0, 2D\Delta t]\end{aligned}$$

por lo tanto

$$\begin{aligned}\mathbf{r}(t + \Delta t) &= \mathbf{r}(t) + r[r^{-1} N_\theta[0, 2D\Delta t]] \hat{\theta} + \\ &\quad + r \sin \theta [(r \sin \theta)^{-1} N_\phi[0, 2D\Delta t]] \hat{\phi} \\ &= \mathbf{r}(t) + N_\theta[0, 2D\Delta t] \hat{\theta} + N_\phi[0, 2D\Delta t] \hat{\phi}\end{aligned}$$

Estas fuerzas constituyen el ruido gaussiano manifestándose en la superficie de una esfera. Esto al mismo tiempo es como una versión discreta de la ecuación de Langevin para el proceso de Wiener.

$$\Delta \mathbf{r} = \tan[s] \cdot [\cos \Psi \hat{\xi}_2 + \sin \Psi \hat{\xi}_3] \quad (5.5)$$

Donde como mencionamos antes r denota el radio de la esfera, pero como en este caso $r = 1$, podemos omitirlo de las expresiones subsecuentes, por lo tanto

$$\begin{aligned}\mathbf{r}(t + \Delta t) &= \prod_{S^2} (\mathbf{r}(t) + \\ &\quad + \left\{ \tan[s] (\cos[\Psi] \hat{\theta}(\mathbf{r}(t)) + \sin[\Psi] \hat{\phi}(\mathbf{r}(t))) \right\})\end{aligned} \quad (5.6)$$

En esta última relación s es la variable aleatoria normal con media nula y varianza $4D\Delta t$ $s = N(0, 4D\Delta t)$ que a su vez depende del intervalo de tiempo o paso para actualizar al sistema en nuestras simulaciones. En esta ecuación

$$\prod_{\mathbb{S}^2}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}\langle\mathbf{x}, \mathbf{x}\rangle^{-1/2} = \hat{\mathbf{x}}$$

es el operador de proyección $T_{\mathbf{x}}\mathbb{S}^2 \subset \mathbb{R}^3$ sobre \mathbb{S}^2 .

Para saber cómo el operador de difusión en la esfera se puede aproximar, de tal suerte que las soluciones sean las de los espacios planos, véase [136, 150].

5.2. Algoritmo para la ecuación de Smoluchowski: Incorporación de un campo externo

En esta sección generalizamos el algoritmo numérico de la sección anterior al caso en el que se considera un campo externo \mathbf{F} que puede ser o no derivable de una función escalar

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(t + \Delta t) = & \prod_{T_{\mathbf{r}}\mathbb{S}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2} [\mathbf{r}(t) + \\ & \tan \left\{ \left| \left| s \left(\cos [\Psi] \hat{\theta}(t) + \sin [\Psi] \hat{\phi}(t) \right) + \frac{\Delta t}{\gamma} \left(\langle \mathbf{F}, \hat{\theta}(t) \rangle \hat{\theta}(t) + \langle \mathbf{F}, \hat{\phi}(t) \rangle \hat{\phi}(t) \right) \right| \right\} \hat{\mathbf{u}} \right] \end{aligned} \quad (5.7)$$

en esta relación \mathbf{u} está definido por

$$\mathbf{u}(t) = \left\{ s \cos [\Psi] + \frac{\Delta t}{\gamma} \langle \mathbf{F}, \hat{\theta}(t) \rangle \right\} \hat{\theta}(t) + \left\{ \frac{s}{R} \sin [\Psi] + \frac{\Delta t}{\gamma} \langle \mathbf{F}, \hat{\phi}(t) \rangle \right\} \hat{\phi}(t) \quad (5.8)$$

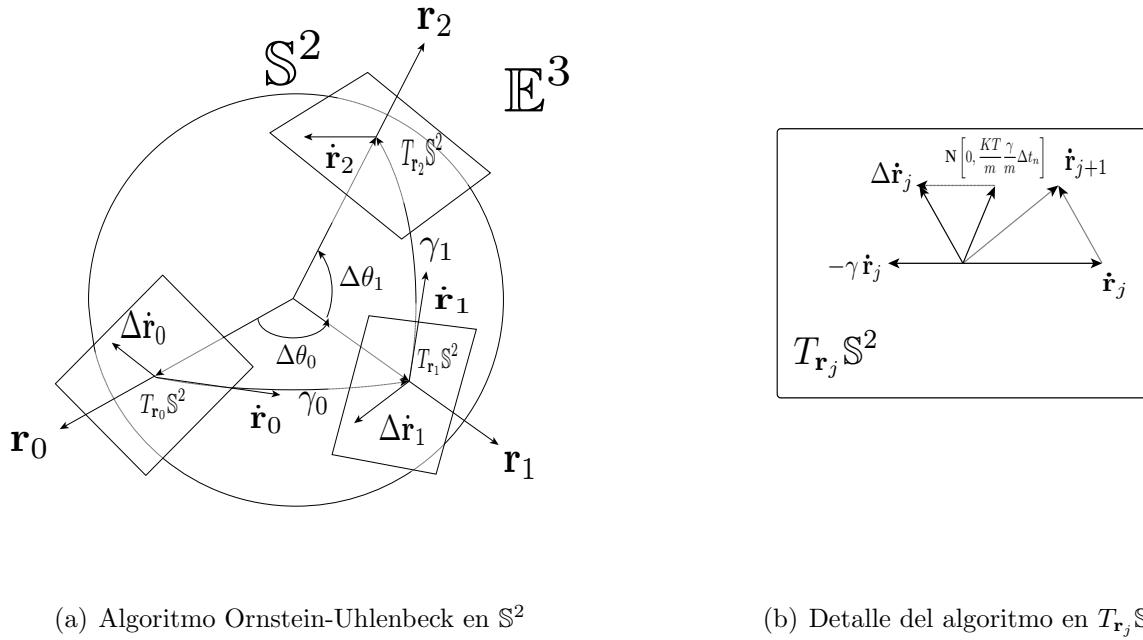
y $\hat{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{u}(t)/\|\mathbf{u}(t)\|$. También se tiene que $F_0 \equiv \|\mathbf{F}\| = \sqrt{\langle \mathbf{F}, \hat{\theta} \rangle^2 + \langle \mathbf{F}, \hat{\phi} \rangle^2}$ norma inducida por el producto escalar usual en \mathbb{R}^3 $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = a^1 b_1 + a^2 b_2 + a^3 b_3$ y hemos abreviado $\hat{\theta}(t) \equiv \hat{\theta}(\mathbf{r}(t))$ y $\hat{\phi}(t) \equiv \hat{\phi}(\mathbf{r}(t))$. Ahora es inmediato generar una versión discreta de esta última expresión: sólo tenemos que definir una partición del intervalo a simular $t_n = t_0 + n \cdot \Delta t$

$$\mathbf{r}_{n+1} = \prod_{T_{\mathbf{r}}\mathbb{S}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2} [\mathbf{r}_n + \tan \{ \|\mathbf{u}(t_n)\| \} \hat{\mathbf{u}}(t_n)] \quad (5.9)$$

5.3. Algoritmo para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck en \mathbb{S}^2

En este apartado generalizamos el algoritmo de la sección anterior para todos los regímenes de la constante de fricción, en la aproximación lineal; no tan sólo para el régimen sobre amortiguado. Como el lector podrá apreciar, esto no implica ninguno ente escenario geométrico “nuevo”. Ya se ha resuelto el problema de trabajar en los planos tangentes a la esfera en cada punto, así como las actualizaciones necesarias para los desplazamientos, los cuales son segmentos de geodésicas, y todo esto seguirá funcionando también en este caso. Lo único nuevo es que necesitamos actualizar la velocidad de las partículas antes de actualizar, en el siguiente paso, las posiciones. Esto implica guardar esta información de las velocidades en

memoria a lo largo de las simulaciones para cada una de las partículas, así como realizar ciertos pasos en la actualización de las velocidades y aunque esto obviamente consumirá más tiempo de computo, no es necesario trabajar en un espacio diferente al que se necesita para el caso sobre amortiguado. Naturalmente, si nos encontramos en este último, sería muy poco eficiente incorporar la dinámica de las velocidades en la descripción. Empezando en un pun-


 (a) Algoritmo Ornstein-Uhlenbeck en \mathbb{S}^2

 (b) Detalle del algoritmo en $T_{r_j}\mathbb{S}^2$

Figura 5.3: En esta imagen mostramos una secuencia de actualizaciones del estado del sistema usando nuestro algoritmo. Del lado izquierdo tenemos tres planos tangentes a la esfera por donde pasa nuestra partícula browniana. Parte de \mathbf{r}_0 , con velocidad $\dot{\mathbf{r}}_0$ que vive en el plano tangente a la esfera; $T_{\mathbf{r}_0}\mathbb{S}^2$, se desplaza sobre la geodésica γ_0 , viajando una distancia $\Delta\theta_0$ y llegando al punto \mathbf{r}_1 y así sucesivamente.

to sobre la esfera que denotaremos por \mathbf{r}_0 y con una velocidad inicial denotada por $\dot{\mathbf{r}}_0$, nos moveremos a un nuevo punto denotado por \mathbf{r}_1 y nuestra nueva velocidad será $\dot{\mathbf{r}}_1$ definidas a través de las relaciones

$$\dot{\mathbf{r}}_{n+1} = \text{Rot}((\dot{\mathbf{r}}_n + \Delta\dot{\mathbf{r}}_n), |\dot{\mathbf{r}}_n| \Delta t, \hat{\mathbf{n}}_n) \in T_{\mathbf{r}_{n+1}}\mathbb{S}^2 \quad (5.10)$$

en donde

$$\Delta\dot{\mathbf{r}}_n = -\gamma \dot{\mathbf{r}}_n + \mathbf{N}[0, 2KT\gamma m^{-2} \Delta t] \in T_{\mathbf{r}_n}\mathbb{S}^2 \quad (5.11)$$

en donde hemos abreviado

$$\mathbf{N}[0, 2KT\gamma m^{-2} \Delta t] = |N[0, 2KT\gamma m^{-2} \Delta t]| [\cos[\Psi] \hat{\theta}(\mathbf{r}(t_n)) + \sin[\Psi] \hat{\phi}(\mathbf{r}(t_n))] \quad (5.12)$$

esto es, necesitamos, como en el caso sobrearmortiguado donde la velocidad es proporcional al campo externo y al ruido estocástico, generar dos números pseudoaleatorios $v = |N[0, 2KT\gamma m^{-2}\Delta t]|$ y $\Psi = U[0, 2\pi]$, y en donde

$$\hat{\mathbf{n}}_n = \frac{\dot{\mathbf{r}}_n \times \mathbf{r}_n}{|\dot{\mathbf{r}}_n \times \mathbf{r}_n|} \in \mathbb{E}^3 \quad (5.13)$$

$$\mathbf{r}_{n+1} = \prod_{T_{\mathbf{r}}\mathbb{S}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2} [\mathbf{r}_n + \tan \{||\dot{\mathbf{r}}(t_n)\Delta t||\} \dot{\mathbf{r}}(t_n) ||\dot{\mathbf{r}}(t_n)||^{-1}] \in \mathbb{S}^2 \quad (5.14)$$

5.4. Obtención de las ecuaciones de Langevin y de Kramers usando el principio de D'Alembert

En esta sección deduciremos la ecuación de Kramers para procesos difusivos en los que hay un campo externo que puede depender de las coordenadas y del tiempo y además donde el movimiento está restringido a la superficie de una esfera.

La manera de obtener esta ecuación es primero obtener la ecuación de Langevin y de ahí inferir la estructura que toma el vector de arrastre en la ecuación de Kramers para las coordenadas generalizadas particulares del problema. Para que este método sea válido: tenemos que suponer que las reglas del cálculo; en particular, la regla de la cadena, son válidas, lo cual quiere decir que estamos usando la ecuación de Kramers del cálculo estocástico de Stratonovich; no el de Ito.

Primero, para considerar la restricción al movimiento, pensamos en obtener ecuaciones diferenciales de segundo orden; las ecuaciones de Euler-Lagrange, para lo cual usamos el principio de D'Alembert [4, 6] ya que éste no depende de la naturaleza de las fuerzas, no necesitan ser derivables de un potencial escalar. Posteriormente, incorporamos el ruido gaussiano usando las mismas técnicas geométricas y por último, deducimos de ahí cuáles son las funciones de arrastre y de difusión en estas coordenadas generalizadas.

Teorema 5.4.1. Teorema de D'Alembert

$$\left\langle m\ddot{\mathbf{x}} + \frac{\partial U}{\partial \mathbf{x}}, \boldsymbol{\xi} \right\rangle = 0 \quad (5.15)$$

para todos los desplazamientos virtuales $\boldsymbol{\xi}$ que ocurren en $T_q M$ para toda $q \in M$. El producto escalar es el producto escalar natural en \mathbb{E}^3 ; el trabajo de la fuerza de constricción a lo largo de cualquier desplazamiento virtual es cero.

$$R = m\ddot{\mathbf{x}} + \frac{\partial U}{\partial \mathbf{x}} \quad (5.16)$$

es la fuerza de constricción, que naturalmente dada de esta manera sólo podrá ser calculada una vez resuelto el problema; una vez que se conozca $\mathbf{x}(t)$ como función del tiempo t . El

movimiento $\mathbf{x} : \mathbb{R} \rightarrow M$ que satisface este principio de D'Alembert también hace que el funcional

$$\Phi = \int_{t_0}^{t_1} \left\{ m \frac{\dot{\mathbf{x}}^2}{2} - U(\mathbf{x}) \right\} dt \quad (5.17)$$

tome valores extremos. Esto es, $\delta_M \Phi = 0$ para curvas próximas a \mathbf{x} . Nuestra aproximación “heurística” consiste en analizar cuáles son las fuerzas que actúan sobre las partículas brownianas, considerarlas como entes que viven en \mathbb{E}^3 y proyectarlas a los planos tangentes a la variedad (en este caso a la esfera), en el punto donde se encuentra la partícula. Las bases convenientes para estos planos tangentes $T_{\mathbf{x}(t)}\mathbb{S}^2$, son las que están constituidas por los vectores generados por las coordenadas esféricas, pero estos vectores, en este trabajo serán descritas con la base canónica de $\mathbb{E}_{\mathbf{x}(t)}^3$; esto es, $\{\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}}\}_{\mathbf{x}(t)}$. Con este procedimiento obtendremos un conjunto de ecuaciones diferenciales; en general acopladas, de segundo orden. Falta incorporar los términos no mecánicos: el ruido gaussiano y el término de disipación $\approx -\gamma \dot{\mathbf{x}} + o(|\dot{\mathbf{x}}|^3)$. Asumimos que el ruido blanco es isotrópico en $\mathbb{E}_{\mathbf{x}(t)}^3$ para cada $\mathbf{x}(t)$ sobre \mathbb{S}^2 . Estas dos fuerzas también serán proyectadas sobre la superficie de la esfera.

5.4.1. Fuerza disipativa

Consideremos que el entorno también introduce (en promedio) otro tipo de interacción que se captura en el concepto de una fuerza viscosa (disipativa) que depende de la velocidad

$$\mathbf{F}_\gamma = -\gamma(\dot{x}\hat{\mathbf{x}} + \dot{y}\hat{\mathbf{y}} + \dot{z}\hat{\mathbf{z}}). \quad (5.18)$$

Como la velocidad en coordenadas esféricas, está dada por³

$$\dot{x} = r \cos \theta \sin \phi \dot{\theta} - r \sin \theta \sin \phi \dot{\phi} \quad (5.19)$$

$$\dot{y} = r \cos \theta \sin \phi \dot{\theta} + r \sin \theta \cos \theta \dot{\phi} \quad (5.20)$$

$$\dot{z} = -r \sin \theta \dot{\theta}, \quad (5.21)$$

se sigue que la fuerza generalizada asociada a la coordenada θ está dada por

$$\begin{aligned} Q_{\gamma_\theta} \equiv \left\langle \mathbf{F}_\gamma, \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} \right\rangle &= -\gamma r^2 \left[(\cos^2 \theta \{\cos^2 \phi + \sin^2 \phi\}) \dot{\theta} - (\sin \theta \cos \theta \sin \phi \cos \phi) \dot{\phi} + \right. \\ &\quad \left. + (\sin \theta \cos \theta \sin \phi \cos \phi) \dot{\phi} + \sin^2 \theta \dot{\theta} \right], \end{aligned}$$

por lo tanto

$$Q_{\gamma_\theta} = -\gamma r^2 \dot{\theta}. \quad (5.22)$$

Para la fuerza generalizada asociada a la coordenada generalizada ϕ

$$\begin{aligned} Q_{\gamma_\phi} \equiv \left\langle \mathbf{F}_\gamma, \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} \right\rangle &= -\gamma r^2 \left[-(\sin \theta \cos \theta \sin \phi \cos \phi) \dot{\theta} + \sin^2 \theta \sin^2 \phi \dot{\phi} \right. \\ &\quad \left. + (\sin \theta \cos \theta \sin \phi \cos \phi) \dot{\theta} + \sin^2 \theta \cos^2 \phi \dot{\phi} \right], \end{aligned}$$

por lo tanto

$$Q_{\gamma_\phi} = -\gamma r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}. \quad (5.23)$$

³El movimiento está restringido a la superficie de la esfera, por esta razón todas las términos que involucran un producto con \dot{r} son nulos y no los hemos puesto.

5.4.2. Ruido Blanco

El ruido blanco en 3 dimensiones puede ser considerado como un ruido blanco en cada dimensión

$$\boldsymbol{\Gamma} = N[0, 2KT\gamma/m^2] \hat{\mathbf{x}} + N[0, 2KT\gamma/m^2] \hat{\mathbf{y}} + N[0, 2KT\gamma/m^2] \hat{\mathbf{z}}. \quad (5.24)$$

Entonces tenemos que llevar esta información al espacio de configuración con las recetas enunciadas allá arriba, esto es

$$\begin{aligned} Q_{\Gamma_\theta} &\equiv \left\langle \boldsymbol{\Gamma}, \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} \right\rangle = r \cos \theta \cos \phi N[0, 2KT\gamma/m^2] + r \cos \theta \sin \phi N[0, 2KT\gamma/m^2] - \\ &\quad - r \sin \theta N[0, 2KT\gamma/m^2] \\ &= N[0, (r^2 \cos^2 \theta \cos^2 \phi) 2KT\gamma/m^2] + N[0, (r^2 \cos^2 \theta \sin^2 \phi) 2KT\gamma/m^2] + \\ &\quad + N[0, (r^2 \sin^2 \theta) 2KT\gamma/m^2] \\ &= N[0, \{\cos^2 \theta(\sin^2 \phi + \cos^2 \phi) + \sin^2 \theta\} 2r^2 KT\gamma/m^2], \end{aligned}$$

por lo tanto

$$Q_{\Gamma_\theta} = N[0, 2r^2 KT\gamma/m^2] = (2r^2 KT\gamma/m^2)^{1/2} N[0, 1]. \quad (5.25)$$

De la misma forma

$$\begin{aligned} Q_{\Gamma_\phi} &\equiv \left\langle \boldsymbol{\Gamma}, \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} \right\rangle = -r \sin \theta \sin \phi N[0, 2KT\gamma/m^2] + r \sin \theta \cos \phi N[0, 2KT\gamma/m^2] \\ &= N[0, r^2 \sin^2 \theta (\sin^2 \phi + \cos^2 \phi) 2KT\gamma/m^2] \\ Q_{\Gamma_\phi} &= N[0, \sin^2 \theta 2r^2 KT\gamma/m^2] = \sin \theta (2r^2 KT\gamma/m^2)^{1/2} N[0, 1]. \end{aligned} \quad (5.26)$$

De los resultados de las dos secciones anteriores sabemos que la ecuación multivariada de Langevin para el movimiento browniano en \mathbb{S}^2 en coordenadas locales (θ, ϕ) toma la forma

$$\ddot{\Theta} = \sin \Theta \cos \Theta \dot{\Phi}^2 - \frac{\gamma}{m} \dot{\Theta} + [2KT\gamma/r^2 m^2]^{\frac{1}{2}} \Gamma_{\dot{\Theta}}, \quad (5.27)$$

para la coordenada Θ , y

$$\ddot{\Phi} = -2 \cot \Theta \dot{\Theta} \dot{\Phi} - \frac{\gamma}{m} \dot{\Phi} + [2KT\gamma/r^2 m^2]^{\frac{1}{2}} \sin^{-1} \Theta \Gamma_{\dot{\Phi}}, \quad (5.28)$$

para la coordenada Φ . Podríamos ahora reescribir estas ecuaciones diferenciales de segundo orden como cuatro ecuaciones de primer orden

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \Theta \\ \Phi \\ \dot{\Theta} \\ \dot{\Phi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dot{\Theta} \\ \dot{\Phi} \\ -\frac{\gamma}{m} \dot{\Theta} + \sin \Theta \cos \Theta \dot{\Phi}^2 + [\frac{2KT\gamma}{r^2 m^2}]^{\frac{1}{2}} \Gamma_{\dot{\Theta}} \\ -\frac{\gamma}{m} \dot{\Phi} - 2 \cot \Theta \dot{\Theta} \dot{\Phi} + [\frac{2KT\gamma}{r^2 m^2}]^{\frac{1}{2}} \sin^{-1} \Theta \Gamma_{\dot{\Phi}} \end{bmatrix} \quad (5.29)$$

Ésta es la ecuación diferencial estocástica equivalente a la ecuación para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando el movimiento está constreñido a la superficie de una esfera.

Como puede apreciarse es no lineal y las ecuaciones por grado de libertad están acopladas, razón por la cual no podemos integrarlas. Si existiese alguna otra interacción externa, independientemente si fuese derivable de un potencial, es inmediato ver qué forma tomarían estas ecuaciones dinámicas después de ver cómo se obtuvo ésta

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \Theta \\ \Phi \\ \dot{\Theta} \\ \dot{\Phi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dot{\Theta} \\ \dot{\Phi} \\ -\frac{\gamma}{m} \dot{\Theta} + \sin \Theta \cos \Theta \dot{\Phi}^2 + F^\theta[\theta, \phi, t] + [\frac{2KT\gamma}{r^2 m^2}]^{\frac{1}{2}} \Gamma_{\dot{\Theta}} \\ -\frac{\gamma}{m} \dot{\Phi} - 2 \cot \Theta \dot{\Theta} \dot{\Phi} + F^\phi[\theta, \phi, t] + [\frac{2KT\gamma}{r^2 m^2}]^{\frac{1}{2}} \sin^{-1} \Theta \Gamma_{\dot{\Phi}} \end{bmatrix} \quad (5.30)$$

En donde $F^\theta[\theta, \phi, t]$ y $F^\phi[\theta, \phi, t]$ son las componentes de la fuerza externa en estas coordenadas generalizadas divididas entre la masa m .

5.4.3. Deducción de la Ecuación de Kramers en \mathbb{S}^2

En esta sección deduciremos la forma específica que toma la ecuación de Kramers para el caso de una partícula browniana difundiéndose en la superficie de una esfera (que pudiese representar la parte interna de una membrana celular bidimensional) con fricción (campo disipativo) y un campo externo usando los resultados de las secciones anteriores.

Lo primero que hay que hacer es aumentar el número de dimensiones Sea $\zeta(t)$ un proceso en definido por

$$\zeta(t) = [\theta(t), \phi(t), \dot{\theta}(t), \dot{\phi}(t)] \in T\mathbb{S}^2. \quad (5.31)$$

De la sección anterior podemos inferir una de las posibles estructuras para la matriz de difusión

$$\mathbf{B}[\zeta, t] = [\mathbf{B}]_{ij} =: b_{ij}[\zeta, t] = \begin{bmatrix} b_{\theta\theta}[\zeta, t] & b_{\theta\phi}[\zeta, t] & b_{\theta\dot{\theta}}[\zeta, t] & b_{\theta\dot{\phi}}[\zeta, t] \\ b_{\phi\theta}[\zeta, t] & b_{\phi\phi}[\zeta, t] & b_{\phi\dot{\theta}}[\zeta, t] & b_{\phi\dot{\phi}}[\zeta, t] \\ b_{\dot{\theta}\theta}[\zeta, t] & b_{\dot{\theta}\phi}[\zeta, t] & b_{\dot{\theta}\dot{\theta}}[\zeta, t] & b_{\dot{\theta}\dot{\phi}}[\zeta, t] \\ b_{\dot{\phi}\theta}[\zeta, t] & b_{\dot{\phi}\phi}[\zeta, t] & b_{\dot{\phi}\dot{\theta}}[\zeta, t] & b_{\dot{\phi}\dot{\phi}}[\zeta, t] \end{bmatrix}. \quad (5.32)$$

A través de esta matriz podemos construir $D_k[\zeta, t] = \sum_{s=1}^4 b_{ks}^2[\zeta, t]$, y las covarianzas $C_{ij}[\zeta, t] = \sum_{s=1}^4 b_{is}[\zeta, t] b_{js}[\zeta, t]$. En nuestro caso particular, de las ecuaciones de Euler-Lagrange (5.27) y (5.28) podemos escribir

$$\mathbf{B}[\zeta, t] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & [2KT\gamma/r^2 m^2] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & [2KT\gamma/r^2 m^2] \sin^{-2} \theta \end{bmatrix} \quad (5.33)$$

Podemos hacer lo mismo para inferir qué forma toman los campos externos, tenemos de la definición

$$\mathbf{A}[\zeta, t] = [\mathbf{A}[\zeta, t]]_k = \begin{bmatrix} A_\theta[\zeta, t] \\ A_\phi[\zeta, t] \\ A_{\dot{\theta}}[\zeta, t] \\ A_{\dot{\phi}}[\zeta, t] \end{bmatrix} \quad (5.34)$$

que en nuestro caso particular depende de las coordenadas $\theta, \phi, \dot{\theta}$ y $\dot{\phi}$

$$\mathbf{A}[\zeta, t] = \begin{bmatrix} A_\theta[\zeta, t] \\ A_\phi[\zeta, t] \\ A_{\dot{\theta}}[\zeta, t] \\ A_{\dot{\phi}}[\zeta, t] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dot{\theta} \\ \dot{\phi} \\ \sin \theta \cos \theta \dot{\phi}^2 - \frac{\gamma}{m} \dot{\theta} + F^\theta[\zeta, t] \\ -2 \cot \theta \dot{\theta} \dot{\phi} - \frac{\gamma}{m} \dot{\phi} + F^\phi[\zeta, t] \end{bmatrix} \quad (5.35)$$

Vale la pena señalar que las coordenadas generalizadas son independientes de las velocidades generalizadas. Entonces la ecuación de Kramers para nuestro problema en cuestión toma la siguiente forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\zeta, t | \zeta_0, t_0)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial \theta} [\dot{\theta} P(\zeta, t | \zeta_0, t_0)] - \frac{\partial}{\partial \phi} [\dot{\phi} P(\zeta, t | \zeta_0, t_0)] \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \dot{\theta}} \left[(\sin \theta \cos \theta \dot{\phi}^2 - \frac{\gamma}{m} \dot{\theta} + F^\theta[\zeta, t]) P(\zeta, t | \zeta_0, t_0) \right] - \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial \dot{\phi}} \left[(-2 \cot \theta \dot{\theta} \dot{\phi} - \frac{\gamma}{m} \dot{\phi} + F^\phi[\zeta, t]) P(\zeta, t | \zeta_0, t_0) \right] + \\ &\quad + \frac{KT\gamma}{r^2 m^2} \frac{\partial^2}{\partial \dot{\theta}^2} [P(\zeta, t | \zeta_0, t_0)] + \frac{KT\gamma}{r^2 m^2} \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \dot{\phi}^2} [P(\zeta, t | \zeta_0, t_0)] \end{aligned} \quad (5.36)$$

Ésta es la ecuación (dependiente de F^α) que se tiene que resolver para poder predecir (probabilísticamente hablando), el comportamiento de nuestro sistema de interés. Nuestra propuesta es resolverlo con el siguiente algoritmo para un ensamble de sistemas equivalentes. Lo cual terminamos de construir en la siguiente sección.

5.5. Algoritmo para la ecuación de Kramers

Los pasos para actualizar el sistema en el espacio fase; en el espacio de posiciones y velocidades está dada por

$$\dot{\mathbf{r}}_{n+1} = \text{Rot}((\dot{\mathbf{r}}_n + \Delta \dot{\mathbf{r}}_n), |\dot{\mathbf{r}}_n| \Delta t, \hat{\mathbf{n}}_n) \in T_{\mathbf{r}_{n+1}} \mathbb{S}^2 \quad (5.37)$$

en donde nuevamente, el cambio en la velocidad está dado por

$$\Delta \dot{\mathbf{r}}_n = \mathbf{F}[\mathbf{r}_n, \dot{\mathbf{r}}_n, t_n; \lambda] + \mathbf{N}[0, 2KT\gamma m^{-2} \Delta t] \in T_{\mathbf{r}_n} \mathbb{S}^2 \quad (5.38)$$

y hemos abreviado

$$\mathbf{N}[0, 2KT\gamma m^{-2} \Delta t] = |N[0, 2KT\gamma m^{-2} \Delta t]| [\cos [\Psi] \hat{\theta}(\mathbf{r}(t_n)) + \sin [\Psi] \hat{\phi}(\mathbf{r}(t_n))] \quad (5.39)$$

esto es, necesitamos, como en el caso sobreamortiguado donde la velocidad es proporcional al campo externo y al ruido estocástico, generar dos números pseudoaleatorios $v = |N[0, 2KT\gamma m^{-2} \Delta t]|$ y $\Psi = U[0, 2\pi]$, y en donde

$$\hat{\mathbf{n}}_n = \frac{\dot{\mathbf{r}}_n \times \mathbf{r}_n}{|\dot{\mathbf{r}}_n \times \mathbf{r}_n|} \in \mathbb{E}^3 \quad (5.40)$$

Sólo que en este caso: $\mathbf{F}[\mathbf{r}_n, \dot{\mathbf{r}}_n, t_n; \lambda]$ es totalmente arbitrario; no necesariamente es $-\gamma \dot{\mathbf{r}}_n$, sino que puede, además, incluir cualquier otro tipo de interacción y depender de una serie de parámetros de control $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)$. Adelante damos unos ejemplos en particular. La “receta” para actualizar las partículas es la misma que para el caso del proceso de Ornstein-Uhlenbeck:

$$\mathbf{r}_{n+1} = \prod_{T_{\mathbf{r}} \mathbb{S}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2} [\mathbf{r}_n + \tan \{||\dot{\mathbf{r}}(t_n)\Delta t||\} \dot{\mathbf{r}}(t_n) ||\dot{\mathbf{r}}(t_n)||^{-1}] \in \mathbb{S}^2 \quad (5.41)$$

Parte III

Resultados

Capítulo 6

Consolidados

En este capítulo presentamos y analizamos los resultados obtenidos con nuestros métodos numéricos. Al considerar el radio de la esfera unitario: muchas expresiones se liberan de este término. Sin embargo, se pierde de vista cómo es la dependencia de los operadores diferenciales, o las ecuaciones, con el tamaño del radio r , que a veces permite reconocer, bajo ciertas expansiones y truncamientos, que los resultados coinciden, salvo diferencias de segundo orden, con las formas y expresiones para espacios planos en dos dimensiones.

El capítulo está dividido principalmente en dos secciones. En la primera sección abordamos el límite sobreamortiguado comenzamos con la difusión libre y después incorporamos una interacción externa. Posteriormente analizamos el régimen subamortiguado empezando con el proceso de Ornstein-Uhlenbeck y lo estudiamos para diferentes valores de la constante de fricción, en un rango de 7 órdenes de magnitud, hasta que se recupera el comportamiento del régimen sobreamortiguado. Verificamos que cuando la constante de fricción es idénticamente nula: las trayectorias son geodésicas (círculos de radio máximo en la esfera). Cuando la fricción es alta, incorporamos las mismas interacciones que analizamos previamente y comprobamos que el comportamiento es el mismo, como deber ser, aunque la dinámica se esté dando en el espacio fase (incluyendo la velocidad), el único problema en realidad es la eficiencia y que en la dinámica de las velocidades no hay detalles importantes ya que estas se relajan a distribuciones de Maxwell, en cada uno de los planos tangentes, casi inmediatamente. Por último, consideramos el problema del *péndulo esférico* en el límite en el que la fricción es despreciable y por lo tanto no están presentes las fuerzas disipativas y las estocásticas. Comparamos los resultados con aquellos que resultan de integrar numéricamente las ecuaciones de Euler-Lagrange, primero con el método de Euler, el cual es de primer orden, y posteriormente con el método de Runge-Kutta de cuarto orden.

La esfera en sí no tiene frontera o *contorno*, así que matemáticamente las siguientes simulaciones son las soluciones numéricas de ciertos problemas en derivadas parciales (parabólicas), con valores iniciales. Eventualmente, consideraremos obstáculos en nuestras simulaciones. Estos se incorporarán definiendo diferentes regiones o contornos; definidos por los obstáculos, y los problemas matemáticos serán problemas de contorno con condiciones iniciales preestablecidas. Lo cual abordamos parcialmente en el próximo capítulo.

6.1. Límite sobreamortiguado

6.1.1. Difusión libre

En esta primera parte comparamos los resultados de nuestras simulaciones numéricas contra dos resultados analíticos del mismo escenario que es la difusión libre restringida a la superficie de una esfera.

La ecuación 3.17 toma la forma explícita para el caso de coordenadas esféricas al hacer un cambio de variables

$$\frac{\partial P(\boldsymbol{\eta}, t | \boldsymbol{\eta}_0, t_0)}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{2D}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} [P(\boldsymbol{\eta}, t | \boldsymbol{\eta}_0, t_0)] \right] \right\} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \left[\frac{2D}{r^2 \sin^2 \theta} P(\boldsymbol{\eta}, t | \boldsymbol{\eta}_0, t_0) \right]$$

Ésta puede ser llevada de nuevo a una ecuación de tipo Fokker-Planck, pero por ahora nos concentraremos en su solución analítica, la cual es bien conocida

$$\begin{aligned} P(\theta_2, \phi_2, t_2 | \theta_1, \phi_1, t_1) &= \sum_{n=0}^{\infty} Y_n^0(\theta_2, \phi_2) Y_n^{0*}(\theta_1, \phi_1) \exp \left[-\frac{n(n+1) D (t_2 - t_1)}{r^2} \right] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\cos \theta_2) P_n(\cos \theta_1) \exp \left[-\frac{n(n+1) D (t_2 - t_1)}{r^2} \right] \end{aligned} \quad (6.1)$$

En la segunda igualdad usamos el teorema de suma para armónicos esféricos.¹ Si en particular $\theta_1 = 0$ and $t_1 = 0$; esto es, si $P(\theta, t | 0, 0) = \delta(\theta)$, entonces en ese caso

$$P(\theta, t | 0, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi r^2} P_n(\cos \theta) \exp \left[-\frac{n(n+1) D t}{r^2} \right] \quad (6.2)$$

Esta solución contiene toda la información necesaria acerca de la evolución de nuestro sistema de interés. Pero además, con ella podemos calcular una cantidad representativa en la física estadística de no equilibrio: la autocorrelación del vector de posición de la partícula browniana

$$\langle \mathbf{n}(t) \cdot \mathbf{n}(0) \rangle = \langle \cos \theta(t) | 0, 0 \rangle = \langle P_1(\theta(t)) | 0, 0 \rangle = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \cos \theta P(\theta, t | 0, 0) r^2 \sin \theta d\theta d\phi$$

Podemos calcular de forma *cerrada* la expresión anterior para la autocorrelación del vector de posición de la partícula browniana usando la ortogonalidad de los polinomios de Legendre

$$\int_0^\pi P_n(\cos \theta) P_m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2n+1} \delta_{n,m}, \quad (6.3)$$

¹El teorema acerca de la suma de armónicos esféricos; en este contexto, implica $P_n(\cos \theta_1) P_n(\cos \theta_2) = \frac{2n+1}{4\pi r^2} P_n(\cos \gamma)$, donde γ es el ángulo entre los vectores con coordenadas angulares (θ_1, ϕ_1) y (θ_2, ϕ_2) respectivamente; sin embargo, si $\theta_1 \equiv 0$ entonces $\theta_2 = \gamma$, entonces podemos tomar a γ como el ángulo θ que hace el vector $\mathbf{n}(t)$ con el eje z o equivalentemente con $\hat{\mathbf{z}}$. Presentamos el enunciado general de este teorema en el apéndice C.

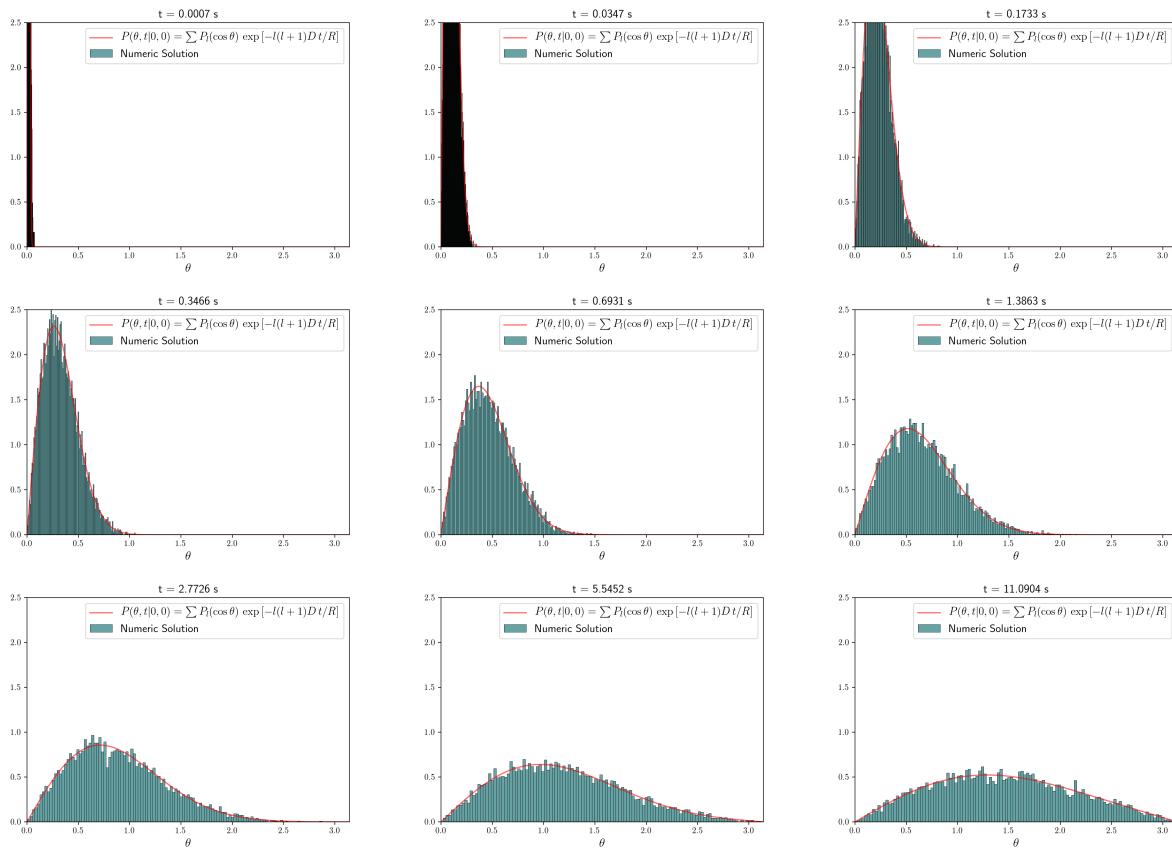


Figura 6.1: En esta imagen presentamos la evolución temporal del histograma de la variable angular θ en azul claro contra la solución analítica 6.2 a la ecuación de Fokker-Planck (o Smoluchowski porque estamos en el régimen sobreamortiguado) en rojo. Para construir esta imagen hemos truncado la solución exacta que está dada por una serie infinita usando sólo los primeros 1000 términos y hemos usado un ensamble de 10,000 partículas para construir esta imagen.

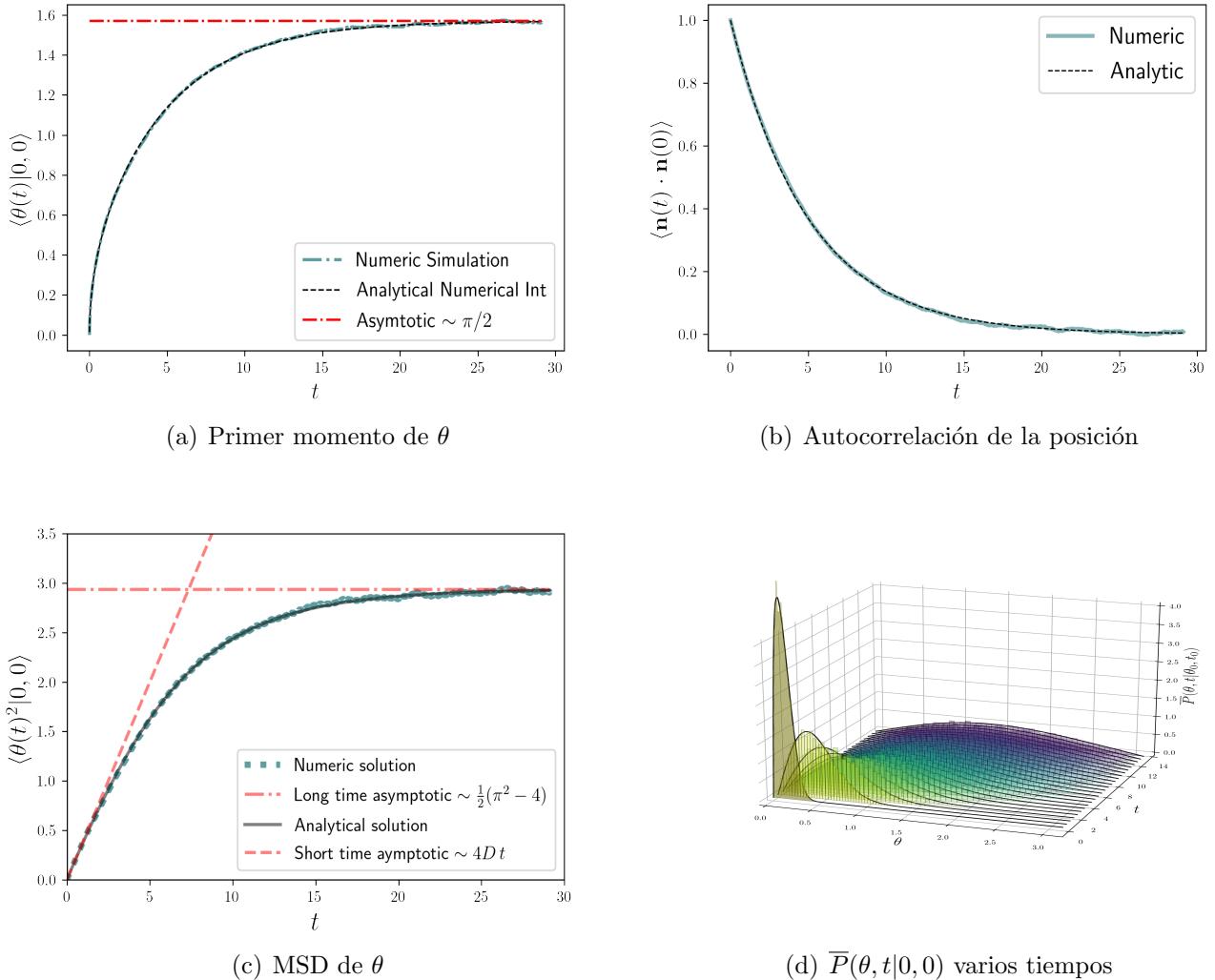


Figura 6.2: En esta imagen mostramos el primer y segundo momento de la distribución de la coordenada angular de θ , así como la autocorrelación en la posición $\langle \mathbf{n}(t) \cdot \mathbf{n}(0) \rangle = \langle P(\cos \theta) \rangle$.

El cálculo es “directo” y dice

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{n}(t) \cdot \mathbf{n}(0) \rangle &= \int_{\mathbb{S}^2} \cos \theta \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} P_n(\cos \theta) e^{-n(n+1)Dt/r^2} \right] d\Omega \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} e^{-n(n+1)Dt/r^2} \int_0^\pi P_1(\cos \theta) P_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} e^{-n(n+1)Dt/r^2} \frac{2}{2n+1} \delta_{n,1} \\
 &= e^{-2Dt/r^2}
 \end{aligned}$$

En donde, en la segunda igualdad, se ha usado que la serie converge uniformemente², por lo que es posible el intercambio de la suma con la integral. Por lo tanto, la forma cerrada para la autocorrelación del vector $\mathbf{n}(t)$ está dada por

$$\langle \mathbf{n}(t) \cdot \mathbf{n}(0) \rangle = \exp [-2Dt/r^2]. \quad (6.4)$$

Ahora tenemos a nuestra disposición dos expresiones analíticas para evaluar el método numérico para la difusión libre, lo cual presentamos en la serie de histogramas en la figura 6.1 y para la autocorrelación del vector de posición de la partícula browniana en la figura 6.1.1.

Una tercera manera de evaluar el código puede ser comparándolo contra la siguientes expansiones para tiempos cortos de el desplazamiento (angular) medio cuadrático que pueden encontrarse en [22]

$$\frac{\langle \theta^2 \rangle}{r^2} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) g_{\theta^2}(l) e^{-D_0 l(l+1)t/r^2}. \quad (6.5)$$

Como los polinomios de Legendre pueden escribirse como combinaciones lineales de cosenos de diferentes frecuencias

$$P_l(\cos \theta) = (-1)^l \sum_{k=0}^l \binom{-1/2}{l} \binom{-1/2}{l-k} \cos [(l-2k)\theta], \quad (6.6)$$

realizando la integral “elemental”, vemos que para $s = r\theta$, $g_s(l)$ es cero para valores pares de l , mientras que para valores impares de l , asume la forma

$$g_s(2p+1) = \frac{\pi}{2} \binom{-1/2}{p} \binom{-1/2}{p+1} - \pi \sum_{k=0}^{2p+1} \frac{\binom{-1/2}{k} \binom{-1/2}{2p+1-k}}{(2(p-k)+1)^2 - 1}, \quad (6.7)$$

donde la suma no toma los valores $k = p$ y $k = p + 1$. Para $s^2 = r^2\theta^2$ no es difícil ver que la identidad

$$g_{s^2}(2p+1) = \pi g_s(2p+1), \quad (6.8)$$

²Esto se ve fácilmente si acotamos la serie y usamos el teorema M de Weierstrass.

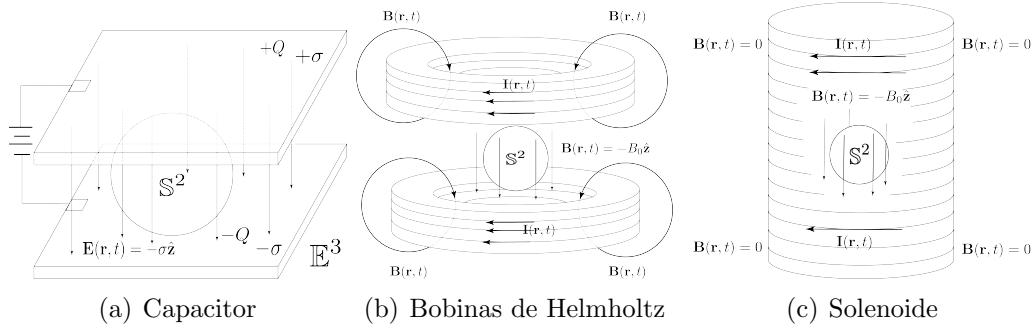


Figura 6.3: El campo elegido cuyo potencial escalar en la esfera dos dimensional \mathbb{S}^2 , está dado por 6.13 $U(\theta) \propto \cos \theta$, es un campo muy común en física, ya que se puede generar, al menos en electromagnetismo, de manera sencilla. En esta imagen mostramos tres alternativas.

es válida para valores impares de l . Sin embargo, para valores pares de l , encontramos

$$g_{\theta^2}(2p) = \sum_{k=0}^{2p} \binom{-1/2}{k} \binom{-1/2}{2p+1-k} H(2(p-k)), \quad (6.9)$$

donde

$$H(z) := \frac{12z^2 + 4 - \pi^2(z^2 - 1)^2}{(z^2 - 1)^3}. \quad (6.10)$$

Para el límite a tiempos cortos

$$\langle s^2(t) \rangle = 4D_0t - \frac{2}{3}r_g(D_0t)^2 - \frac{2}{45}r_g^2(D_0t)^3 - \dots, \quad (6.11)$$

mientras que

$$\frac{\langle \theta^2 \rangle}{r^2} = \frac{\pi^2 - 4}{2} \left(1 - \frac{3\pi^2}{4\pi^2 - 16} e^{-2D_0t/r^2} + \dots \right), \quad (6.12)$$

para el límite a tiempos largos

6.1.2. Difusión en presencia de campos externos en el límite sobreamortiguado; tres ejemplos representativos

En esta sección vamos a considerar que los procesos difusivos de están dando en un ambiente en donde hay un campo externo que influye sobre cada una de las partículas en el ensamble. Los campos externos son los generados por los potenciales siguientes

$$U_\lambda(\theta) = \begin{cases} \lambda Y_1^0(\theta, \phi) = \lambda \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ -\lambda Y_2^0(\theta, \phi) = \lambda \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(-\frac{3}{2} \cos^2 \theta + \frac{1}{2} \right) \\ -\lambda Y_3^0(\theta, \phi) = \lambda \sqrt{\frac{7}{4\pi}} \left(-\frac{5}{2} \cos^3 \theta - \frac{3}{2} \cos \theta \right) \end{cases}$$

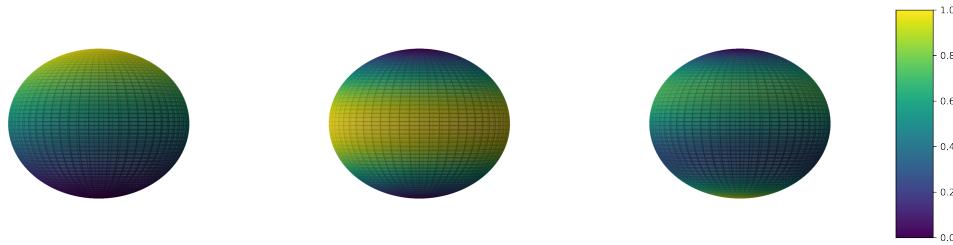


Figura 6.4: En esta figura mostramos la intensidad de los campos generados por los potenciales en 6.13, como función de las coordenadas angulares θ y ϕ .

y las fuerzas que generan están dados naturalmente por

$$B_{\theta s} A_{\lambda}^s(\theta) = \begin{cases} -\partial_{\theta}[\lambda Y_1^0(\theta, \phi)] &= \lambda \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \\ -\partial_{\theta}[-\lambda Y_2^0(\theta, \phi)] &= -\frac{3\lambda}{2} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} 2 \sin \theta \cos \theta \\ -\partial_{\theta}[-\lambda Y_3^0(\theta, \phi)] &= \frac{\lambda}{2} \sqrt{\frac{7}{4\pi}} (3 \sin \theta - 15 \cos^2 \theta) \end{cases}$$

En estas relaciones, λ es un parámetro que nos ayuda a ajustar la intensidad de la interacción externa, y el cual nos ayudará a ver cómo influye esta intensidad en el comportamiento cualitativo de los fenómenos difusivos en presencia de campos externos débiles o intensos y con base en qué se puede hacer esta clasificación.

Para empezar elegimos un valor que permitiese ver los dos fenómenos; esto es, en los que la difusión tiende a desordenar o lo que es equivalente, distribuir uniformemente en el espacio a las partículas, mientras que el campo externo tiende a ordenarlas o restringirlas en zonas particulares del espacio (en donde naturalmente el potencial tiene sus valores mínimos).

Como puede apreciarse, estos campos no son lineales y una manera geométrica de entender su efecto en las partículas que se difunden en la esfera es graficar la intensidad de estos en función de las variables θ y ϕ

En esta sección vamos a derivar explícitamente la ecuación de Fokker-Planck para el caso en el que el movimiento está constreñido a la superficie de la esfera y cuando hay un campo externo bi estable; esto es, con dos mínimos, que no depende de la coordenada ϕ (no lineal) acoplado a la posición de la partícula browniana.

El potencial que elegimos es un ejemplo representativo en varios aspectos: estas simulaciones fueron motivadas en contextos de biología molecular; intentan describir la difusión de fosfolípidos (en particular del fosfatidil inositol bi fosfato PIP2), que se difunden en la parte interna de la membrana celular, y como el ambiente en el que estas partículas se difunden puede presentar diferentes regiones atractivas debido a interacciones electrostáticas o químicas, decidimos incorporar en los métodos numéricos una manera de contemplar la presencia de campos externos.

Motivamos la discusión usando un potencial con la siguiente estructura matemática

$$U(x, y, z) = \lambda \left[1 - \frac{2z^2}{x^2 + y^2 + z^2} \right]. \quad (6.13)$$

Por lo tanto, el campo, gradiente de esta función escalar, tiene coordenadas cartesianas y esféricas

$$A^x[\mathbf{x}, t] = -\frac{\partial}{\partial x} U(x, y, z) = -\lambda \frac{4xz^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^2} = -\lambda \frac{4 \sin \theta \cos^2 \theta \cos \phi}{r} \quad (6.14)$$

$$A^y[\mathbf{x}, t] = -\frac{\partial}{\partial y} U(x, y, z) = -\lambda \frac{4yz^2}{(x^2 + y^2 + z^2)^2} = -\lambda \frac{4 \sin \theta \cos^2 \theta \sin \phi}{r} \quad (6.15)$$

$$A^z[\mathbf{x}, t] = -\frac{\partial}{\partial z} U(x, y, z) = \lambda \frac{4z(x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2 + z^2)^2} = \lambda \frac{4 \sin^2 \theta \cos \theta}{r} \quad (6.16)$$

Es obvio que en coordenadas esféricas su expresión analítica es mucho más sencilla ya que sólo depende de una sola coordenada en lugar de tres

$$U(r, \theta, \phi) = -\lambda \cos 2\theta \quad (6.17)$$

Sin embargo, damos también sus componentes cartesianas para ver cómo un cambio de coordenadas cambia la estructura de la ecuación de Fokker-Planck y cómo podemos encontrar su solución.

Derivación explícita de la ecuación de Fokker-Planck para movimiento constreñido a la superficie \mathbb{S}^2 y $U(\theta) = \lambda' Y_2^0(\theta, \phi)$

Como $r = 1$ es constante: el problema se simplifica si en lugar de usar coordenadas cartesianas en 3.17 usamos coordenadas esféricas. Sin embargo, como se verá adelante, esto al mismo tiempo introduce una serie de complicaciones ya que las coordenadas no son globales; no pueden abarcar la totalidad de nuestra variedad diferencial. Para simplificar un poco la notación, definimos $\boldsymbol{\eta} = (\theta, \phi)$. Si usamos la regla de la cadena para transformar la ecuación de Fokker-Planck, obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P &= - \sum_{k=1}^3 \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} \{A^k[\boldsymbol{\eta}, t]P\} \frac{\partial \theta}{\partial x^k} + \frac{\partial}{\partial \phi} \{A^k[\boldsymbol{\eta}, t]P\} \frac{\partial \phi}{\partial x^k} \right\} + \\ &\quad \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 \left[\sum_r \sum_s \frac{\partial^2}{\partial \eta^r \eta^s} \{B^{kl}[\boldsymbol{\eta}, t]P\} \left(\frac{\partial \eta^s}{\partial x^k} \right) \left(\frac{\partial \eta^r}{\partial x^l} \right) + \sum_s \frac{\partial}{\partial \eta^s} \{B^{kl}[\boldsymbol{\eta}, t]P\} \frac{\partial^2 \eta^s}{\partial (x^k)^2} \right]. \end{aligned} \quad (6.18)$$

En donde $B^{kl}[\boldsymbol{\eta}, t] = 2D\delta^{kl}$. La última suma se reduce, naturalmente, al laplaciano en coordenadas esféricas operando sobre $B^{kl}P$. Si ahora usamos la definición de $A^k[x(\eta), t]$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}P &= -\frac{4\lambda}{r^2}\left\{\frac{\partial}{\partial\theta}\left[-\sin\theta\cos^2\theta\cos\phi P\right]\cos\theta\cos\phi+\frac{\partial}{\partial\theta}\left[-\sin\theta\cos^2\theta\sin\phi P\right]\cos\theta\sin\phi+\right.\\ &\quad +\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin^2\theta\cos\theta P\right](-\sin\theta)+\\ &\quad \left.+\frac{\partial}{\partial\phi}\left[\sin\theta\cos^2\theta\cos\phi P\right]\left(-\frac{\sin\phi}{\sin\theta}\right)+\frac{\partial}{\partial\phi}\left[\sin\theta\cos^2\theta\sin\phi P\right]\left(\frac{\cos\phi}{\sin\theta}\right)\right\}+\\ &\quad +\frac{D}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}[P]\right]+\frac{D}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}[P].\end{aligned}$$

Los términos que tienen derivadas en ϕ se reducen a $-\cos^2\theta P(\boldsymbol{\eta}, t|\boldsymbol{\eta}_0, t_0)$, así que esta última ecuación se simplifica

$$\frac{\partial}{\partial t}P = -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[-2\lambda\sin(2\theta)P\right]+\frac{4\lambda}{r^2}\cos^2\theta P+\frac{D}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}[P]\right]+\frac{D}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}[P].$$

Podemos escribir el término $-2\lambda\sin 2\theta$ como $-\frac{\partial}{\partial\theta}[-\lambda\cos 2\theta]$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}P &= -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[-\frac{\partial}{\partial\theta}[-\lambda\cos(2\theta)]P\right]+\frac{4\lambda}{r^2}\cos^2\theta P+\\ &\quad +\frac{D}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}[P]\right]+\frac{D}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}[P].\end{aligned}$$

De aquí resulta obvio cómo hay que obtener las demás ecuaciones de Fokker-Planck cuando el potencial sólo depende la coordenada θ y es independiente del tiempo. A continuación damos la estructura general que tendría para futuras referencias. Ésta está dada por

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}P(\boldsymbol{\eta}, t|\boldsymbol{\eta}_0, t_0) &= -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[-\frac{\partial}{\partial\theta}[U_\lambda(\theta)]P(\boldsymbol{\eta}, t|\boldsymbol{\eta}_0, t_0)\right]+\frac{4\lambda}{r^2}\cos^2\theta P(\boldsymbol{\eta}, t|\boldsymbol{\eta}_0, t_0)\\ &\quad +\frac{D}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}[P(\boldsymbol{\eta}, t|\boldsymbol{\eta}_0, t_0)]\right]+\frac{D}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}[P(\boldsymbol{\eta}, t|\boldsymbol{\eta}_0, t_0)].\end{aligned}$$

El potencial particular que se usó para motivar la derivación está dado por

$$U_\lambda(\theta) \equiv -\lambda\cos(2\theta).$$

Entonces, la fuerza está dada por

$$A_\theta^\lambda[\theta, \phi, t] \equiv -\frac{\partial}{\partial\theta}[-\lambda\cos 2\theta] = -2\lambda\sin 2\theta. \quad (6.19)$$

Entonces, en términos de la fuerza, la ecuación de Fokker-Planck dice

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}P(\boldsymbol{\eta}, t|\boldsymbol{\eta}_0, t_0) &= -\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[A_\theta^\lambda[\theta]P(\boldsymbol{\eta}, t|\boldsymbol{\eta}_0, t_0)\right]+\frac{4\lambda}{r^2}\cos^2\theta P(\boldsymbol{\eta}, t|\boldsymbol{\eta}_0, t_0)\\ &\quad +\frac{D}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}[P(\boldsymbol{\eta}, t|\boldsymbol{\eta}_0, t_0)]\right]+\frac{D}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}[P(\boldsymbol{\eta}, t|\boldsymbol{\eta}_0, t_0)].\end{aligned}$$

Ahora pongamos nuestros resultados en contexto. En la literatura matemática, es común que se agrupen los últimos dos términos y se identifiquen con el operador de Laplace-Beltrami o un múltiplo de éste dividido entre la coordenada radial r , que como en este caso está fija y vale uno, se tendría $\Delta f := 1/\sqrt{|g|}\partial_i(\sqrt{|g|}g^{ij}\partial_j f)$. La otra aproximación, consiste en intentar recuperar la ecuación de Fokker-Planck pero en la que las funciones de arrastre y de difusión sean otras. Para mostrar explícitamente esto: multipliquemos la ecuación anterior por $r^2 \sin \theta$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} r^2 \sin \theta P(\boldsymbol{\eta}, t | \boldsymbol{\eta}_0, t_0) &= -\frac{r^2 \sin \theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[A_\theta^\lambda[\theta] P(\boldsymbol{\eta}, t | \boldsymbol{\eta}_0, t_0) \right] + \frac{4\lambda}{r^2} \sin \theta \cos^2 \theta P(\boldsymbol{\eta}, t | \boldsymbol{\eta}_0, t_0) \\ &\quad + \frac{r^2 \sin \theta D}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} [P(\boldsymbol{\eta}, t | \boldsymbol{\eta}_0, t_0)] \right] \\ &\quad + \frac{D}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} [r^2 \sin \theta P(\boldsymbol{\eta}, t | \boldsymbol{\eta}_0, t_0)]. \end{aligned} \quad (6.20)$$

En el régimen sobreamortiguado, el operador de Smoluchowski en que la fuerza externa sólo depende de θ , cuando el movimiento está constreñido a la superficie de una esfera \mathbb{S}^2 tiene la forma general

$$S_\lambda[\cdot] \equiv \frac{\partial}{\partial t} [\cdot] + \frac{\partial}{\partial \theta} \left[(A_\theta^\lambda[\theta] + \frac{D}{r^2} \cot \theta) \cdot \right] - \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \left[\frac{D}{r^2} \cdot \right] - \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \left[\frac{D}{r^2 \sin^2 \theta} \cdot \right]. \quad (6.21)$$

En donde λ es la intensidad del campo externo. El kernel o espacio nulo de este operador es una densidad definida en términos de la vieja como $\bar{P}(\boldsymbol{\eta}, t | \boldsymbol{\eta}_0, t_0) := r^2 \sin \theta P(\boldsymbol{\eta}, t | \boldsymbol{\eta}_0, t_0)$; esto es, es la solución de $S_\lambda[\bar{P}] \equiv 0$.

6.1.3. Ecuación de Fokker-Planck covariante para el caso particular de \mathbb{S}^2

En esta sección partiremos de la ecuación de Fokker-Planck covariante 3.41 y la pondremos en el contexto de este trabajo en el que el movimiento está restringido a la esfera \mathbb{S}^2 . Esto es, partiremos de

$$[g^{-1/2} P],_t = -(F^\alpha);_\alpha, \quad (6.22)$$

en donde F^α está definido como

$$F^\alpha = C^\alpha g^{-1/2} P - \frac{1}{2} (B^{\alpha\beta} g^{-1/2} P);_\beta. \quad (6.23)$$

En esta relación C^α es el vector de arrastre transformado + un símbolo de Christoffel contraído con la matriz inversa de la métrica (o tensor de difusión)

$$C^\alpha = A^\alpha + \frac{1}{2} \Gamma_{\beta\gamma}^\alpha B^{\beta\gamma}, \quad (6.24)$$

en donde el vector de arrastre transformado está dado por

$$A^\alpha = \Lambda_k^\alpha A^k + \frac{1}{2} \Lambda_{i,j}^\alpha B^{ij} \quad (6.25)$$

y

$$B^{\alpha\beta} = \Lambda_i^\alpha \Lambda_j^\beta B^{ij} \quad (6.26)$$

es el tensor de difusión transformado, a partir de $B^{ij} = D\delta^{ij}$ usando la matriz jacobiana

$$\Lambda_k^\alpha = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \\ \frac{\cos \theta \cos \phi}{r} & \frac{\cos \theta \sin \phi}{r} & -\frac{\sin \theta}{r} \\ -\frac{\sin \phi}{r \sin \theta} & \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.27)$$

Por lo tanto, el determinante de la matriz jacobiana es $J = \det \Lambda_k^\alpha = 1/r^2 \sin \theta$ y el inverso por $J^{-1} = r^2 \sin \theta$. La matriz inversa de $B^{\alpha\beta}$, que denotaremos por $B_{\alpha\beta}$, puede jugar el papel de la métrica y está dada en las nuevas coordenadas (esféricas) por

$$B_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} 1/2D & 0 & 0 \\ 0 & r^2/2D & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2 \theta / 2D \end{bmatrix}, \quad (6.28)$$

mientras que el tensor o matriz de difusión está dado en las nuevas coordenadas por

$$B^{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} 2D & 0 & 0 \\ 0 & 2D/r^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2D/r^2 \sin^2 \theta \end{bmatrix} \quad (6.29)$$

Los símbolos de Christoffel o conexiones (afines) $\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha = 2^{-1} B^{\alpha\sigma} [B_{\sigma\gamma,\beta} + B_{\alpha\sigma,\gamma} - B_{\alpha\beta,\gamma}]$, diferentes de cero, están dados por

$$\Gamma_{\beta\gamma}^\theta = \begin{bmatrix} 0 & r^{-1} & 0 \\ r^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sin \theta \cos \theta \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \Gamma_{\beta\gamma}^\phi = \begin{bmatrix} 0 & 0 & r^{-1} \\ 0 & 0 & \cot \theta \\ r^{-1} & \cot \theta & 0 \end{bmatrix}, \quad (6.30)$$

y el determinante de la métrica

$$g := \det(B_{\alpha\beta}) = r^4 \sin^2 \theta, \quad (6.31)$$

entonces

$$g^{-1/2} = \frac{1}{r^2 \sin \theta}. \quad (6.32)$$

$$C^\alpha = A^\alpha + \frac{1}{2} \Gamma_{\beta\gamma}^\alpha B^{\beta\gamma} = \Lambda_k^\alpha A^k + \frac{1}{2} \Lambda_{i,j}^\alpha B^{ij} + \frac{1}{2} \Gamma_{\beta\gamma}^\alpha B^{\alpha\gamma}. \quad (6.33)$$

Desarrollando las sumas

$$C^\theta = \Lambda_x^\theta A^x + \Lambda_y^\theta A^y + \Lambda_z^\theta A^z + \frac{1}{2} \Lambda_{x,x}^\theta B^{xx} + \frac{1}{2} \Lambda_{y,y}^\theta B^{yy} + \frac{1}{2} \Lambda_{z,z}^\theta B^{zz} \quad (6.34)$$

$$= \left(\frac{\cos \theta \cos \phi}{r} \right) \left[-\lambda \frac{4 \sin \theta \cos^2 \theta \cos \phi}{r} \right] + \left(\frac{\cos \theta \sin \phi}{r} \right) \left[-\lambda \frac{4 \sin \theta \cos^2 \theta \sin \phi}{r} \right] \quad (6.35)$$

$$+ \left(-\frac{\sin \theta}{r} \right) \left[-\lambda \frac{4 \sin \theta \cos^2 \theta \sin \phi}{r} \right] + \frac{1}{2} 2D \{ \Lambda_{x,x}^\theta + \Lambda_{y,y}^\theta + \Lambda_{z,z}^\theta \}. \quad (6.36)$$

Como las componentes la matriz jacobiana están dadas por

$$\Lambda_x^\theta = \frac{xz}{\sqrt{x^2 + y^2}(x^2 + y^2 + z^2)}, \quad \Lambda_y^\theta = \frac{yz}{\sqrt{x^2 + y^2}(x^2 + y^2 + z^2)}, \quad \Lambda_z^\theta = -\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{x^2 + y^2 + z^2}. \quad (6.37)$$

Por lo tanto

$$\Lambda_{x,x}^\theta = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2}(x^2 + y^2 + z^2)} \left\{ \frac{y^2}{x^2 + y^2} - \frac{x^2}{x^2 + y^2 + z^2} \right\} \quad (6.38)$$

y

$$\Lambda_{y,y}^\theta = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2}(x^2 + y^2 + z^2)} \left\{ \frac{y^2}{x^2 + y^2} - \frac{y^2}{x^2 + y^2 + z^2} \right\} \quad (6.39)$$

mientras que

$$\Lambda_{z,z}^\theta = \frac{2z\sqrt{x^2 + y^2}}{(x^2 + y^2 + z^2)} \quad (6.40)$$

Por otro lado tenemos que la componentes de la matriz jacobiana asociadas a la coordenada ϕ son

$$\Lambda_x^\phi = -\frac{y}{x^2 + y^2}, \quad \Lambda_y^\phi = \frac{x}{x^2 + y^2}, \quad \Lambda_z^\phi = 0. \quad (6.41)$$

Por lo tanto

$$\Lambda_{x,x}^\phi = \frac{2xy}{(x^2 + y^2)}, \quad \Lambda_{y,y}^\phi = -\frac{2xy}{(x^2 + y^2)}, \quad \Lambda_{z,z}^\phi = 0, \quad (6.42)$$

y entonces

$$\Lambda_{x,x}^\phi + \Lambda_{y,y}^\phi + \Lambda_{z,z}^\phi = 0. \quad (6.43)$$

Mientras que para suma asociada a la coordenada θ obtenemos

$$\Lambda_{x,x}^\theta + \Lambda_{y,y}^\theta + \Lambda_{z,z}^\theta = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2}(x^2 + y^2 + z^2)} = \frac{\cot \theta}{r^2}. \quad (6.44)$$

Ahora pasemos analizar los términos Eq. (6.14), Eq. (6.15) y Eq. (6.16), asociados al campo externo

$$A^\alpha = \Lambda_x^\alpha A^x + \Lambda_y^\alpha A^y + \Lambda_z^\alpha A^z \quad (6.45)$$

en este caso en particular

$$\begin{aligned}
A^\theta[\theta, \phi] &= \Lambda_k^\theta(\theta, \phi) A^k[\theta, \phi] \\
&= \left(\frac{\cos \theta \cos \phi}{r} \right) \left[-\lambda \frac{4 \sin \theta \cos^2 \theta \cos \phi}{r} \right] \\
&\quad + \left(\frac{\cos \theta \sin \phi}{r} \right) \left[-\lambda \frac{4 \sin \theta \cos^2 \theta \sin \phi}{r} \right] - \left(\frac{\sin \theta}{r} \right) \left[\lambda \frac{4 \sin^2 \theta \cos \theta}{r} \right] \\
&= -\frac{4\lambda}{r^2} \{ \sin \theta \cos^3 \theta \cos^2 \phi + \sin \theta \cos^2 \theta \sin^2 \phi + \sin^2 \theta \cos \theta \} \\
&= -\frac{4\lambda}{r^2} \sin \theta \cos \theta \{ \cos^2 \theta \cos^2 \phi + \cos^2 \theta \sin^2 \phi + \sin^2 \theta \} \\
&= -\frac{4\lambda}{r^2} \sin \theta \cos \theta = -\frac{\lambda}{r^2} 2 \sin 2\theta.
\end{aligned}$$

Entonces

$$A^\theta = -\frac{\lambda}{r^2} 2 \sin 2\theta + \frac{1}{2} \frac{2D}{r^2} \cot \theta \quad (6.46)$$

Nótese que

$$-\frac{\lambda}{r^2} 2 \sin 2\theta \equiv \frac{1}{r^2} [\lambda \cos 2\theta]_\theta = B^{\theta\theta}[U(\theta)]_\theta \quad (6.47)$$

y que por lo tanto, es mucho más sencillo escribir el potencial externo directamente en coordenadas esféricas y después tomar la derivada con respecto a la coordenada θ para obtener el primer término del lado derecho en 6.46.

Ahora analicemos el término

$$-\frac{1}{2} (B^{\alpha\beta} g^{-1/2} P)_{;\beta}, \quad (6.48)$$

y para ello necesitamos una identidad para la divergencia de un tensor contra variante de segundo orden que está demostrada en el apéndice G, que dice

$$T^{\mu\nu}_{;\nu} = g^{-1/2} [g^{1/2} T^{\mu\nu}]_{,\nu} + T^{\mu\nu} \Gamma_{\lambda\nu}^\mu. \quad (6.49)$$

Tomando

$$T^{\mu\nu} = B^{\mu\nu} g^{-1/2} P, \quad (6.50)$$

tenemos

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2} (B^{\alpha\beta} g^{-1/2} P)_{;\beta} &= -\frac{1}{2} \{ g^{-1/2} [g^{1/2} B^{\alpha\beta} g^{-1/2} P]_{,\beta} + B^{\lambda\beta} g^{-1/2} P \Gamma_{\lambda\beta}^\alpha \} \\
&= -\frac{1}{2} g^{-1/2} [B^{\alpha\beta} P]_{,\beta} - \frac{1}{2} B^{\lambda\beta} g^{-1/2} P \Gamma_{\lambda\beta}^\alpha
\end{aligned}$$

Nótese que independientemente de cuanto valga el segundo término de la última identidad del lado derecho, como

$$C^\alpha g^{-1/2} P = A^\alpha g^{-1/2} P + \frac{1}{2} g^{-1/2} P B^{\beta\gamma} \Gamma_{\beta\gamma}^\alpha \quad (6.51)$$

el segundo término de lado derecho se cancela con el señalado. Su valor explícito para el caso de movimiento restringido a \mathbb{S}^2 es

$$\frac{1}{2}g^{-1/2}PB^{\beta\gamma}\Gamma_{\beta\gamma}^\alpha = \frac{1}{2}\frac{2D}{r^2}\cot\theta g^{-1/2}P, \quad (6.52)$$

donde $g^{-1/2} = 1/r^2 \sin\theta$. Al final sólo nos queda

$$F^\alpha = g^{-1/2} \left[A^\alpha P - \frac{1}{2} (B^{\alpha\beta} P)_{,\beta} \right]. \quad (6.53)$$

Cuando $\alpha = \phi$ tenemos

$$A^\phi = \Lambda_k^\phi A^k + \Lambda_{i,j}^\phi B^{ij} = \Lambda_k^\phi A^k + \frac{1}{2}2D \{ \Lambda_{x,x}^\phi + \Lambda_{y,y}^\phi + \Lambda_{z,z}^\phi \}, \quad (6.54)$$

pero ya habíamos visto en 6.43, que este término se anula, por lo tanto

$$A^\phi = \Lambda_k^\phi A^k, \quad (6.55)$$

y vemos que esta componente sí se transforma como tensor contravariante. Pero si el campo externo *no* depende explícitamente de ϕ , tenemos

$$\begin{aligned} \Lambda_k^\phi A^k &= \Lambda_x^\phi A^x + \Lambda_y^\phi A^y + \Lambda_z^\phi A^z \\ &= \left(-\frac{\sin\phi}{r\sin\theta} \right) \left[-\lambda \frac{4\sin\theta\cos^2\theta\cos\phi}{r} \right] + \left(\frac{\cos\phi}{r\sin\theta} \right) \left[-\lambda \frac{4\sin\theta\cos^2\theta\sin\phi}{r} \right] \\ &\quad + (0) \left[\lambda \frac{4\sin^2\theta\cos\theta}{r} \right] = \frac{4\lambda}{r^2\sin\theta} [\sin\theta\sin\phi\cos^2\theta\cos\phi - \sin\theta\sin\phi\cos^2\theta\cos\phi] = 0. \end{aligned}$$

Por lo que, naturalmente

$$A^\phi \equiv 0. \quad (6.56)$$

Para continuar en nuestra reducción de la ecuación covariante al caso del movimiento restringido a la esfera \mathbb{S}^2 , necesitamos también la siguiente identidad para la divergencia de un tensor contra variante de primer orden, que también se encuentra demostrada en el apéndice

$$S^\alpha_{;\alpha} = g^{-1/2} (g^{1/2} S^\alpha)_{,\alpha}. \quad (6.57)$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} F^\alpha_{;\alpha} &= g^{-1/2} \left[g^{1/2} \left\{ g^{-1/2} \left[A^\alpha P - \frac{1}{2} (B^{\alpha\beta} P)_{,\beta} \right] \right\}_{,\alpha} \right] \\ &= g^{-1/2} \left[A^\alpha P - \frac{1}{2} (B^{\alpha\beta} P)_{,\beta} \right]_{,\alpha} \\ &= g^{-1/2} \left[(A^\alpha P)_{,\alpha} - \frac{1}{2} (B^{\alpha\beta} P)_{,\beta\alpha} \right] \end{aligned}$$

Sustituyendo las expresiones 6.46, 6.56 y 6.29, para A^θ , A^ϕ , $B^{\theta\theta}$ y $B^{\phi\phi}$ respectivamente

$$\begin{aligned} F^\alpha_{;\alpha} &= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left[\left\{ \left(-\frac{\lambda}{r^2} 2 \sin 2\theta + \frac{1}{2} \frac{2D}{r^2} \cot \theta \right) P[r^2 \sin \theta] \right\}_{,\theta} - \frac{1}{2} \left(\frac{2D}{r^2} P[r^2 \sin \theta] \right)_{,\theta\theta} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \left(\frac{2D}{r^2 \sin^2 \theta} P[r^2 \sin \theta] \right)_{,\phi\phi} \right] \end{aligned} \quad (6.58)$$

Para poder concluir necesitamos señalar que si hacemos una transformación de coordenadas en la ecuación de Fokker-Planck expresada en coordenadas cartesianas

$$[P]_{,t} = -[A^k]_{,k} + \frac{1}{2} [B^{jk}]_{,jk} \quad (6.59)$$

y usamos la regla de la cadena, entonces esta ecuación en coordenadas a esféricas dice

$$\begin{aligned} [P]_{,t} &= -[A^k]_{,\alpha} \Lambda_k^\alpha + \frac{1}{2} \left\{ [B^{jk} P]_{,\alpha\beta} \Lambda_j^\alpha \Lambda_k^\beta + [B^{jk} P]_{,\alpha} \Lambda_{j,k}^\alpha \right\} \\ &= -\frac{1}{r^2} [-2\lambda \sin(2\theta) P]_{,\theta} + \frac{4\lambda}{r^2} \cos^2 \theta P + \frac{D}{r^2 \sin \theta} [\sin \theta P]_{,\theta} + \frac{D}{r^2 \sin^2 \theta} [P]_{,\phi\phi}. \end{aligned} \quad (6.60)$$

Si a esta igualdad la multiplicamos por $\det B_{\alpha\beta} = r^2 \sin \theta$, obtenemos³

$$\begin{aligned} &[r^2 \sin \theta P]_{,t} = \\ &= - \left[\left(-\frac{\lambda}{r^2} 2 \sin 2\theta + \frac{D}{r^2} \cot \theta \right) P(r^2 \sin \theta) \right]_{,\theta} + \left[\frac{D}{r^2} P(r^2 \sin \theta) \right]_{,\theta\theta} + \left[\frac{D}{r^2 \sin^2 \theta} P(r^2 \sin \theta) \right]_{,\phi\phi}. \end{aligned} \quad (6.61)$$

Comparamos con el resultado para $F^\alpha_{;\alpha}$ Eq. (6.58), nos damos cuenta que efectivamente

$$[g^{-1/2} P]_{,t} = -F^\alpha_{;\alpha}. \quad (6.62)$$

Solución analítica para los estados estacionarios

En esta sección vamos a deducir explícitamente las soluciones analíticas a los estados estacionarios, que se simularon en el capítulo anterior. Éstas soluciones se deducen usando la expresión 6.21, con las interacciones dadas en 4.86.

³El primer término puede ser reescrito como

$$\frac{Dr^2 \sin \theta}{r^2 \sin \theta} [\sin \theta [P]_{,\theta}]_{,\theta} = \frac{D}{r^2} \left[\sin \theta \left[\frac{r^2 \sin \theta P}{\sin \theta} \right]_{,\theta} \right]_{,\theta} = \frac{D}{r^2} [r^2 \sin \theta P]_{,\theta\theta} - \left[\frac{D}{r^2} \cot \theta [r^2 \sin \theta P] \right]_{,\theta}$$

Desarrollando y agrupando los términos que contienen primeras derivadas

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{r^4} [-2\lambda \sin(2\theta) P]_{,\theta} r^2 \sin \theta + \frac{4\lambda}{r^2} \cos^2 \theta [r^2 \sin \theta P] - \left[\frac{D}{r^2} \cot \theta [r^2 \sin \theta P] \right]_{,\theta} = \\ &\left[\frac{4\lambda}{r^4} [\cos \theta]_{,\theta} r^2 \sin \theta - \left[\frac{D}{r^2} \cot \theta \right]_{,\theta} + \frac{4\lambda}{r^2} \cos^2 \theta \right] [r^2 \sin \theta P] + \left[\frac{4\lambda}{r^2} \sin \theta \cos \theta - \frac{D}{r^2} \cot \theta \right] [r^2 \sin \theta P]_{,\theta} = \\ &\left[\left[\frac{2\lambda}{r^2} \sin(2\theta) - \frac{D}{r^2} \cot \theta \right]_{,\theta} \right] [r^2 \sin \theta P] + \left[\left[\frac{2\lambda}{r^2} \sin(2\theta) - \frac{D}{r^2} \cot \theta \right] \right] [r^2 \sin \theta P]_{,\theta} \end{aligned}$$

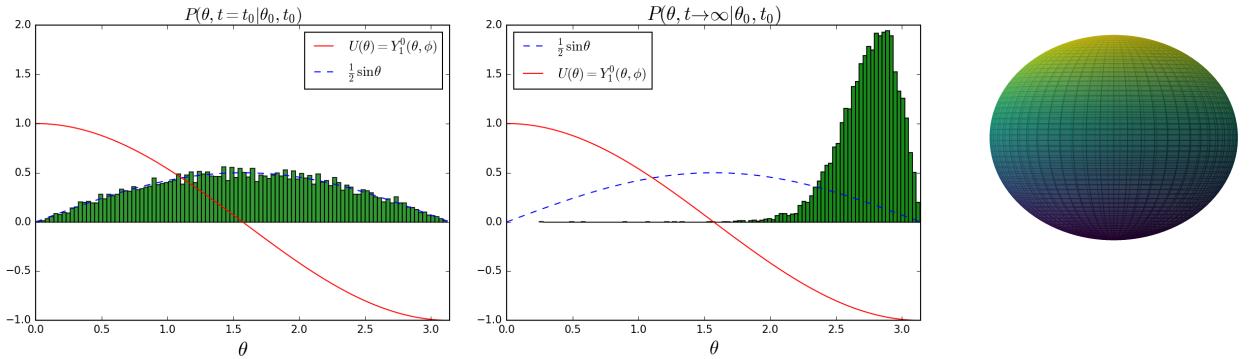


Figura 6.5: En la figura del lado izquierdo y en la de en medio presentamos dos instancias de la evolución del histograma de la variable θ ; la condición inicial (distribución uniforme en la esfera) y el estado estacionario que alcanza para el caso en el que la interacción externa está dada por $\lambda Y_1^0(\theta, \phi)$. Hemos graficado este potencial en rojo como función de la coordenada θ . En la figura del lado derecho, las regiones azuladas corresponden a regiones con una interacción repulsiva mientras que las rojas corresponden a regiones hacia las que el sistema se siente atraído.

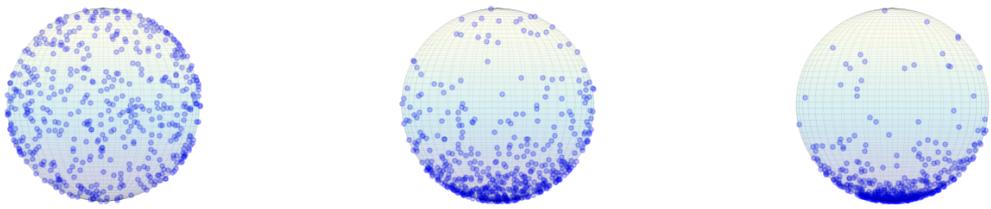


Figura 6.6: En esta figura presentamos tres instancias de la evolución de un ensamble de partículas brownianas embebidas en la interacción generada por el potencial escalar $Y_1^0(\theta, \phi)$. El tiempo corre de izquierda a derecha. Para crear la imagen usamos un ensamble de sólo 1,000 partículas; sin embargo, para hacer el análisis estadístico usamos ensambles de 100,000 partículas. Las animaciones se encuentran en el material complementario de este trabajo.

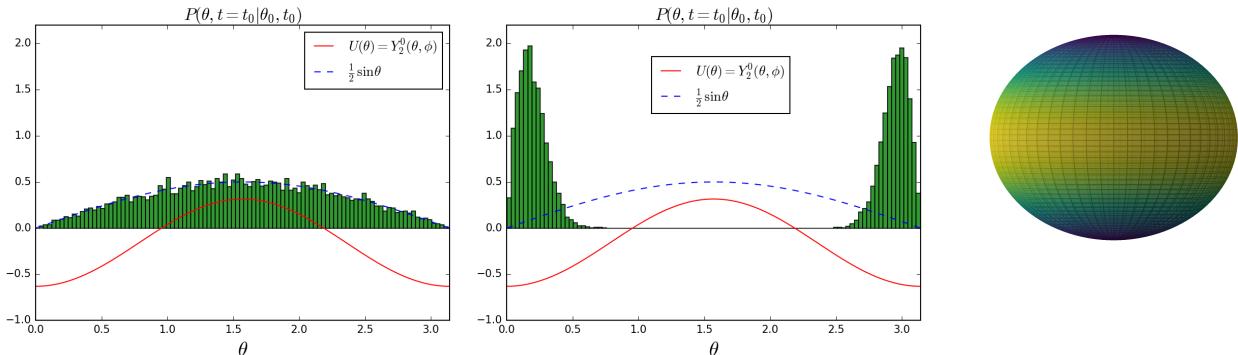


Figura 6.7: En la figura del lado izquierdo y en la de en medio presentamos dos instancias de la evolución del histograma de la variable θ ; la condición inicial (distribución uniforme en la esfera) y el estado estacionario que alcanza para el caso en el que la interacción externa está dada por $\lambda Y_2^0(\theta, \phi)$. Hemos graficado este potencial en rojo como función de la coordenada θ . En la figura del lado derecho, las regiones azuladas corresponden a regiones con una interacción repulsiva mientras que las rojas corresponden a regiones hacia las que el sistema se siente atraído.

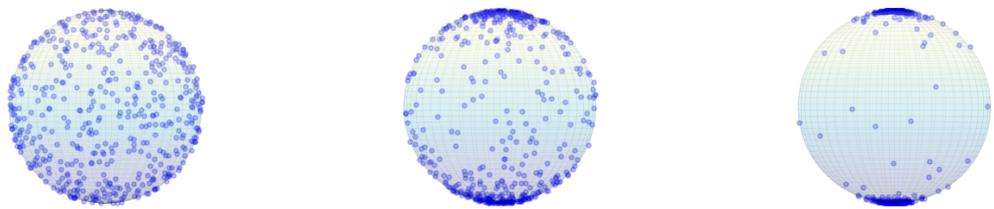


Figura 6.8: En esta figura presentamos tres instancias de la evolución de un ensamble de partículas brownianas embebidas en la interacción generada por el potencial escalar $\lambda Y_2^0(\theta, \phi)$. El tiempo corre de izquierda a derecha. Para crear la imagen usamos un ensamble de sólo 1,000 partículas; sin embargo, para hacer el análisis estadístico usamos ensambles de 100,000 partículas. Las animaciones se encuentran en el material complementario de este trabajo.

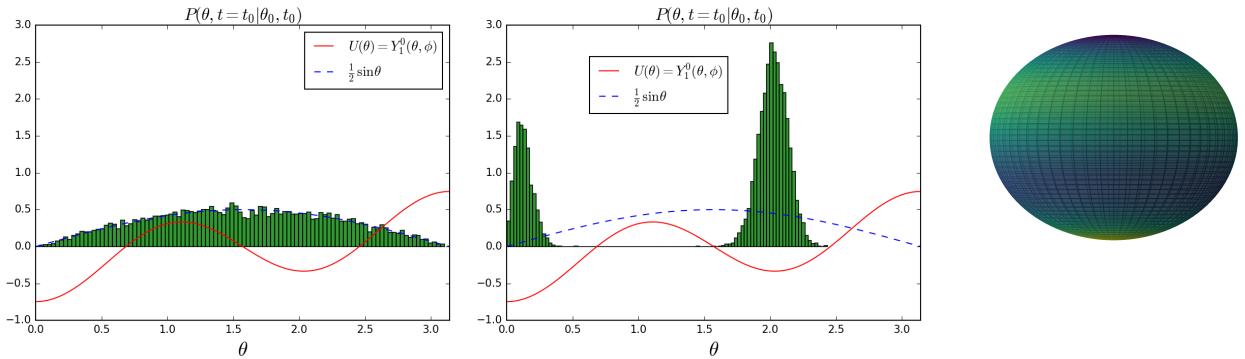


Figura 6.9: En la figura del lado izquierdo y en la de en medio presentamos: dos instancias de la evolución del histograma de la variable θ : la condición inicial (distribución uniforme en la esfera) y el estado estacionario que alcanza para el caso en el que la interacción externa está dada por $\lambda Y_3^0(\theta, \phi)$. Hemos graficado este potencial en rojo como función de la coordenada θ . En la figura del lado derecho, las regiones azuladas corresponden a regiones con una interacción repulsiva mientras que las rojas corresponden a regiones hacia las que el sistema se siente atraído.

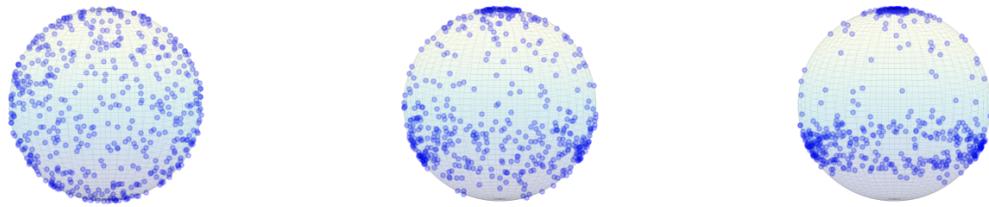


Figura 6.10: En esta figura presentamos tres instancias de la evolución de un ensamble de partículas brownianas embebidas en la interacción generada por el potencial escalar $\lambda Y_3^0(\theta, \phi)$. El tiempo corre de izquierda a derecha. Para crear la imagen usamos un ensamble de sólo 1,000 partículas; sin embargo, para hacer el análisis estadístico usamos ensambles de 100,000 partículas. Las animaciones se encuentran en el material complementario de este trabajo.

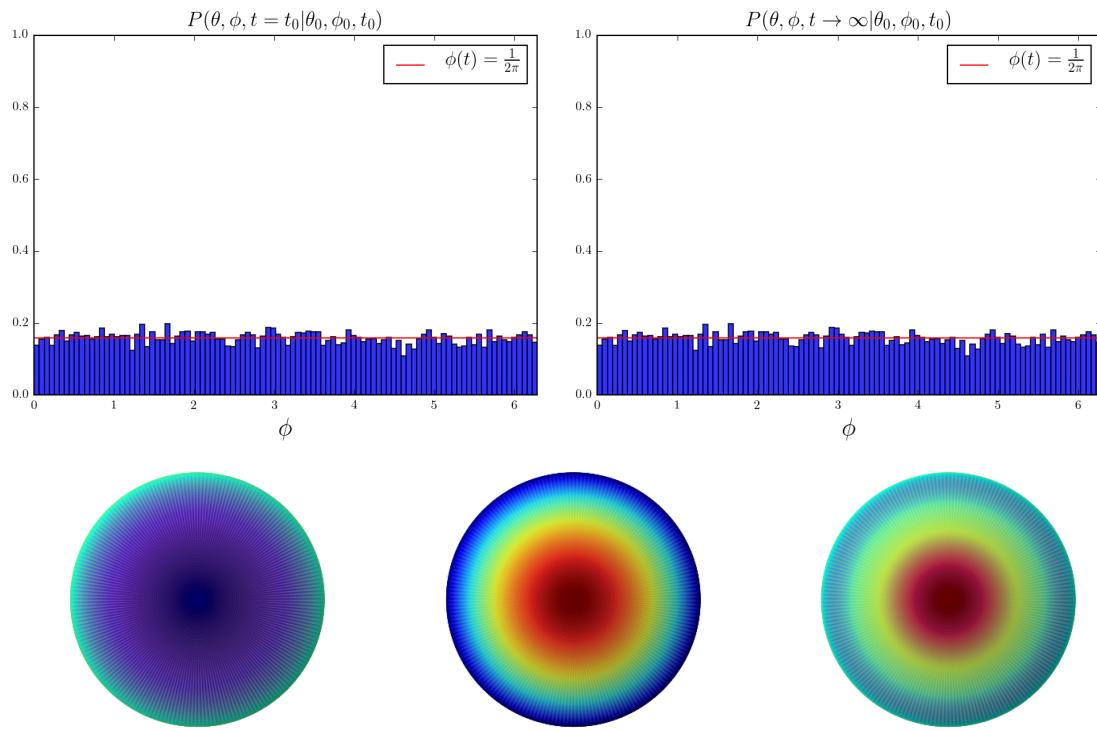


Figura 6.11: En esta figura, en la parte de arriba presentamos el histograma de la variable ϕ . Como debiese ser obvio fijándonos en el potencial; el cual no depende de la coordenada θ : tendremos, para todo tiempo, una distribución uniforme en ϕ . Ésta se ha indicado con una línea roja. La probabilidad es $U(\phi) = 1/2\pi \forall \phi$. Como el proceso no es estático habrá pequeñas fluctuaciones; son las diferencias del histograma normalizado con respecto este valor; esta línea. En la imagen de abajo, presentamos una vista desde arriba de los tres potenciales utilizados en las simulaciones. Todos ellos tienen simetría azimutal y por eso la distribución para todo tiempo es uniforme en ϕ . De la misma forma que en las figuras anteriores, las regiones azules corresponden a regiones repulsivas mientras que las rojas corresponden a regiones a las que se sentirá atraído el sistema o las partículas del ensamble.

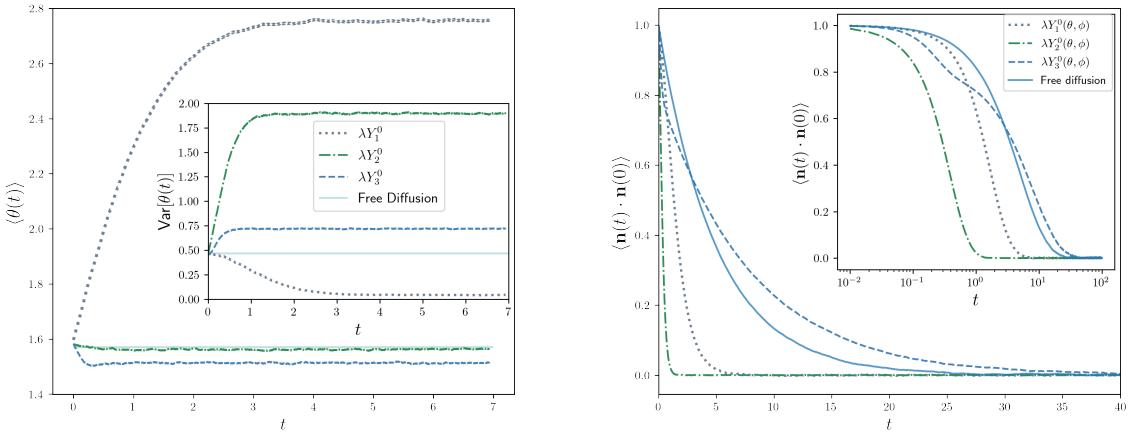


Figura 6.12: En esta imagen presentamos el promedio o media de la variable θ como función del tiempo (izquierdo) y la varianza (inset) de esta misma variable como función del tiempo. En la figura del lado derecho las autocorrelaciones en la posición para las diferentes interacciones en 6.17. La distribución inicial es la distribución uniforme en la esfera. Se presenta el comportamiento de los 3 potenciales.

La forma específica que toma del vector de arrastre A^α y las funciones de difusión $B^{\alpha\beta}$ para los problemas que estamos abordando en este trabajo están dados por

$$\bar{A}^\theta(\theta, \phi) = \Lambda_i^\theta A^i(x(\eta)) + \frac{D}{r^2} \cot \theta \quad (6.63)$$

ya que $\Lambda_{i,j}^\theta = \frac{D}{r^2} \cot \theta$ y en donde los campos externos están dados por A^i en coordenadas cartesianas. La matriz de difusión en estas coordenadas está dada explícitamente

$$\bar{B}^{rs}(\theta, \phi) \equiv \begin{bmatrix} 2D/r^2 & 0 \\ 0 & 2D/(r^2 \sin^2 \theta) \end{bmatrix} \quad (6.64)$$

por lo que es claro que

$$\frac{\partial B^{rs}}{\partial \eta^s} \equiv 0 \quad (6.65)$$

para todos los valores posibles que pueden tomar los índices r y s ; esto es, para $r = \theta, \phi$ y $s = \theta, \phi$. Entonces la doble suma en 4.86

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \eta^s} = (B^{-1})_{s\beta} [B^{\beta l},_l - 2K^\beta] \equiv F_s$$

es nula y el potencial termodinámico generalizado estará dado por

$$\Phi(\eta) - \Phi(\eta_0) = -2 \int_{\eta_0}^{\eta} (B^{-1})_{s\beta} K^\beta(\eta) d\eta^s \quad (6.66)$$

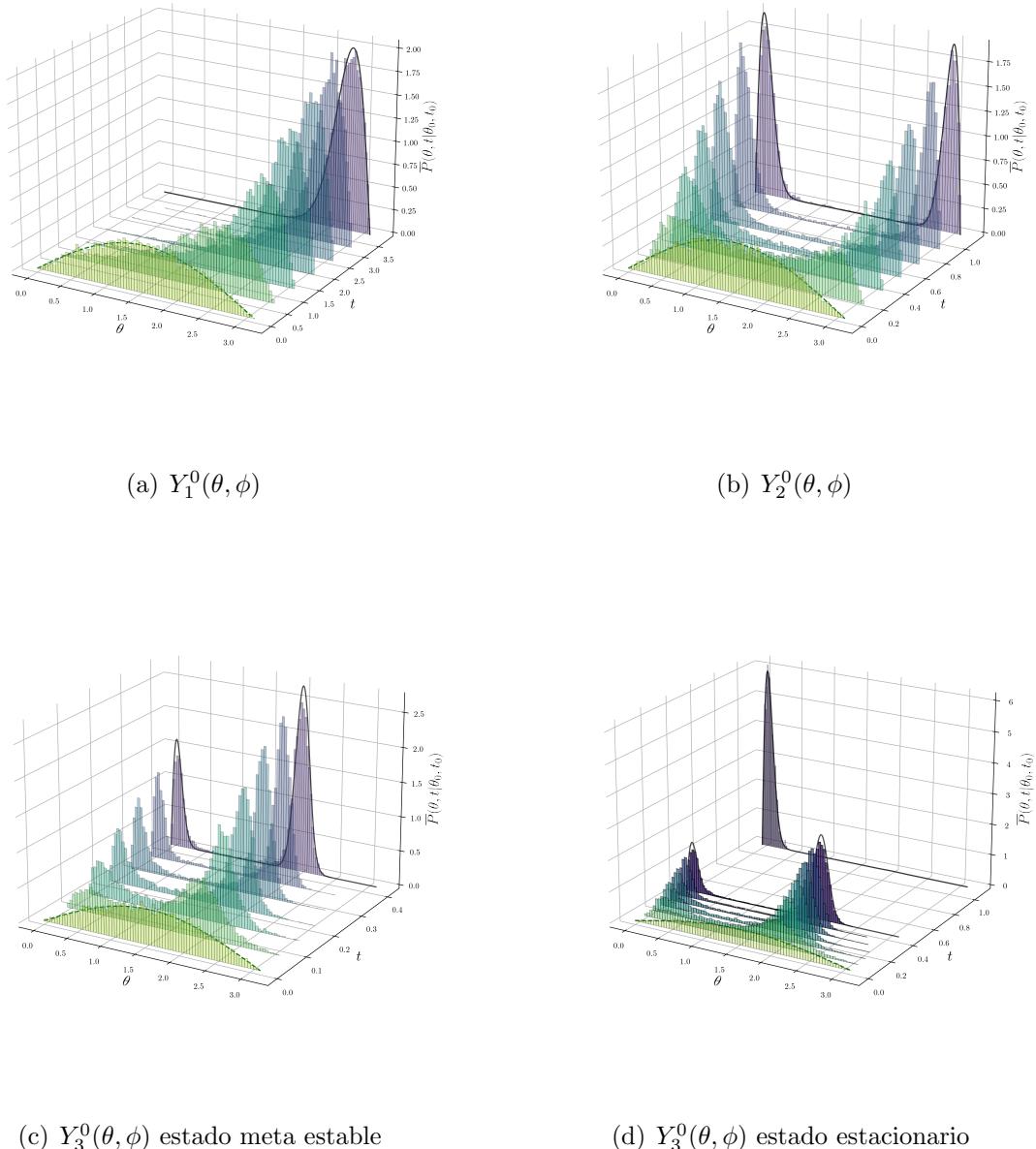


Figura 6.13: Evolución hacia los estados de equilibrio para cada una de las interacciones. Para el tercer caso, el sistema queda atrapado en un estado meta estable, que depende de la distribución inicial de partículas; en este caso, la distribución uniforme. El tiempo que se tarda en alcanzar el verdadero estado estacionario, que se muestra en la imagen (d) es exponencialmente grande y depende de la altura de la barrera de potencial.

En los casos abordados en esta sección A^s es invariante bajo inversiones temporales, entonces $K^s \equiv A^s$. Si insertamos la expresión general para A^s en (6.63) obtenemos una expresión para Φ como una función de este campo

$$\Phi(\theta) = \Phi(\theta_0) - D^{-1} \int_{\theta_0}^{\theta} A^i(\theta) \Lambda_i^\theta d\theta - \ln |\sin \theta| + \ln |\sin \theta_0| \quad (6.67)$$

Los términos $\ln |\sin \theta_0|$ y $\exp \Phi(\theta_0)$ pueden ser absorbidos en N en la ecuación 4.85 y al sustituir los campos generados por 6.13 obtenemos

$$P_{St}(\theta|\theta_0, 0) = \frac{e^{[-A \cos \theta]} \sin \theta}{\int_0^\pi e^{-[A \cos \theta]} \sin \theta d\theta} = \frac{\lambda' \sin \theta}{4\pi k_B T \sinh(\frac{\lambda'}{k_B T})} \exp \left\{ -\frac{\lambda' \cos \theta}{k_B T} \right\} \quad (6.68)$$

$$P_{St}(\theta|\theta_0, 0) = \frac{e^{B[3 \cos^2 \theta - 1]} \sin \theta}{\int_0^\pi e^{B[3 \cos^2 \theta - 1]} \sin \theta d\theta} = \sqrt{\frac{3\lambda'}{\pi k_B T}} \frac{\sin \theta}{\text{Erfi} \left[\sqrt{\frac{3\lambda'}{k_B T}} \right]} \exp \left\{ \frac{3\lambda' \cos^2 \theta}{k_B T} \right\} \quad (6.69)$$

$$P_{St}(\theta|\theta_0, 0) = \frac{e^{C[5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta]} \sin \theta}{\int_0^\pi e^{C[5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta]} \sin \theta d\theta} \quad (6.70)$$

Para el tercer potencial no existe solución en términos de funciones elementales y resolvimos la integral numérica usando el método de Simpson [33] y hemos utilizado la relación de Einstein $D\zeta = k_B T$ y λ' absorbe el factor de normalización del armónico esférico correspondiente. Estas soluciones se muestran en las figuras 6.15 y 6.16 comparadas contra los resultados de nuestras simulaciones. Hacemos énfasis que los estados estacionarios dependen sensiblemente de la intensidad del campo externo (de nuestro parámetro λ), para intensidades despreciables las partículas parecen difundir libremente, mientras que para intensidades muy fuertes las fluctuaciones se vuelven despreciables y las partículas se acumulan alrededor de los mínimos del potencial, excepto cerca de los polos que parece que ahí se desplazan ligeramente hacia el ecuador. Pero esta repulsión es ficticia ya que no está pasando nada especial en los polos desde el punto de vista físico, sino que el área de la esfera se vuelve cada vez menos comparada con la del ecuador y esto cambia los perfiles de los histogramas con respecto a los que se verían en un espacio sin curvatura. Para entender cómo cambian los estados estacionarios en la figura 6.14 mostramos estos perfiles para diferentes lambdas. Es importante remarcar que si la incorporación de los campos externos en el método numérico no fuese la adecuada, los estados estacionarios generados con los ensambles de partículas no reproducirían bien estos perfiles. Sin embargo, la coincidencia (ver figuras 6.15 y 6.16) sugiere que estas interacciones se incorporan de manera adecuada.

Para poder obtener la solución analítica del estado meta estable para la tercera interacción proporcional fue necesario considerar puntos de retorno como se muestra en la imagen 6.17. Esto es, para poder generar las soluciones analíticas para los estados meta estables es necesario considerar puntos de retorno para las partículas como si allí el potencial se volviese infinito. Esto es, la solución estará dada por

$$P_{M-St}^{(k)}(\boldsymbol{\eta}) = \frac{\exp \{-\beta \lambda Y_3^0(\boldsymbol{\eta})\}}{N^{(k)}}, \quad (6.71)$$

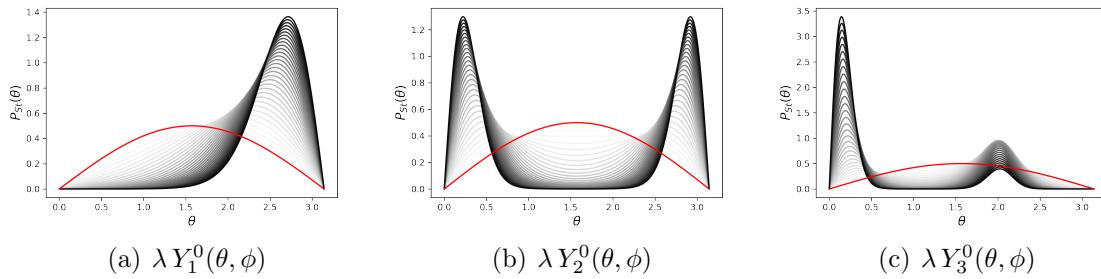


Figura 6.14: Estados estacionarios para diferentes λ (30 casos de 0, sin interacción en color rojo, a 10.35 con incrementos de 0.35), fijando D , para las tres interacciones consideradas en este trabajo.

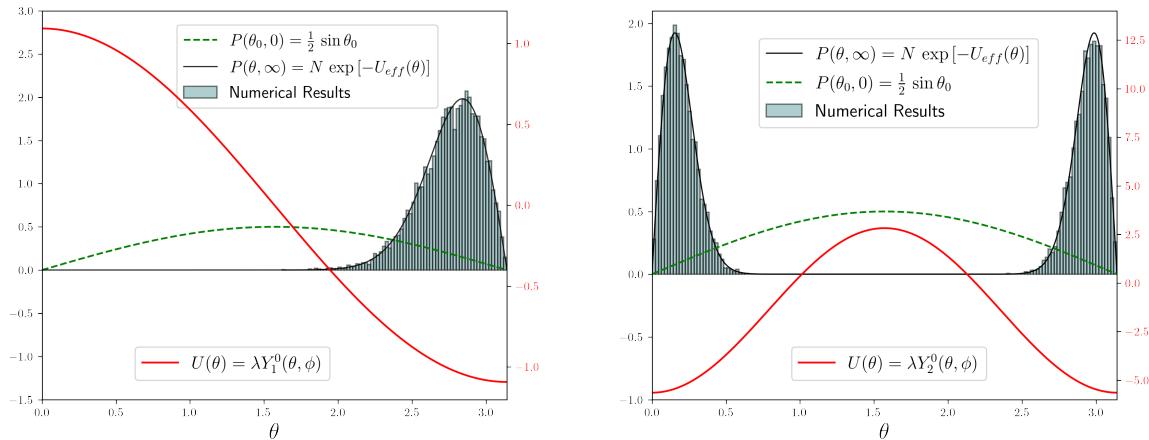


Figura 6.15: Soluciones analíticas de la ecuación estacionaria de Fokker-Planck para los dos primeros potenciales $\lambda Y_1^0(\theta, \phi)$ y $\lambda Y_2^0(\theta, \phi)$, histograma en verde, graficados contra las soluciones analíticas 6.68 y 6.69. Como puede apreciarse, salvo pequeñas fluctuaciones: la coincidencia es excelente. Esto quiere decir que la geometría o restricción del problema fue tomada en cuenta adecuadamente.

en donde

$$N^{(k)} = \frac{\int_{\theta_k}^{\theta_{k+1}} \exp \{-\beta \lambda Y_3^0(\boldsymbol{\eta})\} \sqrt{g(\boldsymbol{\eta})} d\boldsymbol{\eta}}{\sum_{k=1}^m \int_{\theta_k}^{\theta_{k+1}} \sqrt{g(\boldsymbol{\eta})} d\boldsymbol{\eta}}. \quad (6.72)$$

El denominador en esta última expresión es la proporción de partículas del ensamblaje que se encuentra en esta región alrededor del mínimo k del potencial; esto es, el que se encuentra entre los puntos de retorno k y $k + 1$. Como en todos estos casos la distribución inicial era la distribución uniforme en la esfera, la fracción de partículas que se encuentran en estas subregiones accesibles es simplemente proporcional al área que se encuentra entre estos puntos de retorno. En este caso particular $\sqrt{g(\boldsymbol{\eta})} = \sqrt{r^4 \sin^2(\theta)}$.

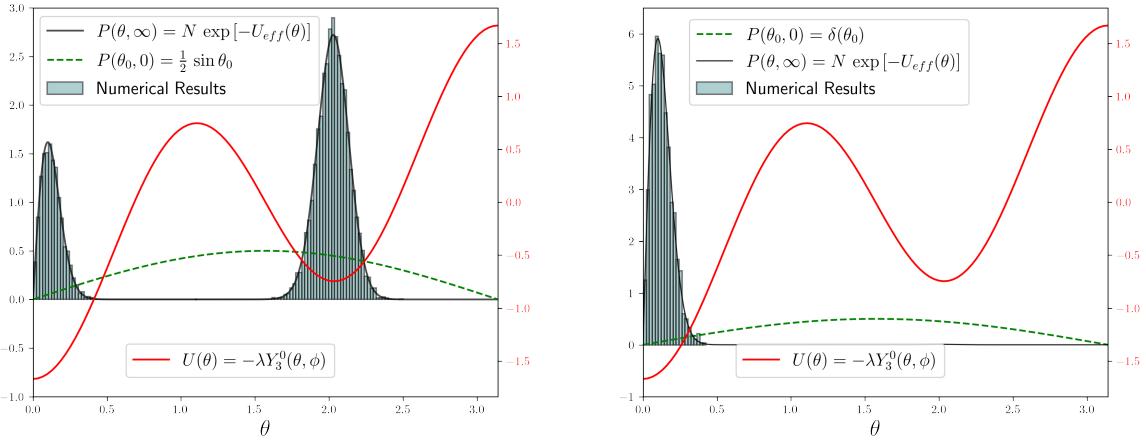


Figura 6.16: De el lado izquierdo presentamos la solución analítica a la ecuación estacionaria de Fokker-Planck para el tercer potencial $\lambda Y_3^0(\theta, \phi)$, histograma en verde, contra las solución analítica en 6.70, cuando partimos de la distribución uniforme. Como puede apreciarse, salvo pequeñas fluctuaciones: la coincidencia es excelente. De el lado derecho presentamos el verdadero estado estacionario que se alcanzaría para tiempos suficientemente grandes. Sin embargo, el tiempo necesario para ello es exponencialmente grande.

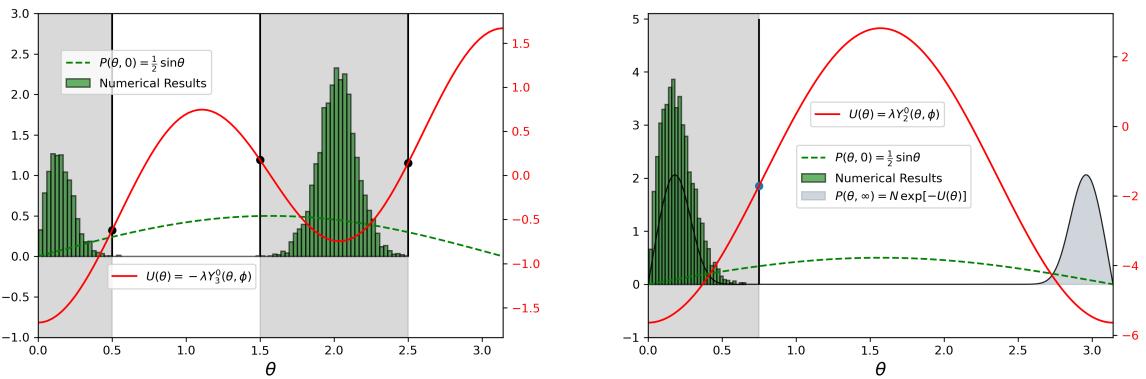


Figura 6.17: En esta imagen mostramos los puntos de retorno que son necesarios considerar para poder obtener el estado estacionario asociado al estado meta estable en la Eq. (6.71) en el lado izquierdo. En el lado derecho es el punto de retorno aproximado que se debería usar para el potencial λY_2^0 si es que, en lugar de empezar con la distribución uniforme, empezáramos con todas las partículas inicialmente en $\theta = 0$.

dt	Muestra	$\Delta\theta$	$\Delta\theta^2$	$\Delta\theta^3$	$\Delta\theta^4$
10^{-3}	10^6	0.001696	0.004167	0.007578	0.011861
	10^7	0.000433	0.000052	0.003786	0.019382
	10^8	0.000395	0.001056	0.001656	0.000316
	10^9	0.000014	0.000008	0.000042	0.000233
10^{-2}	10^6	0.000582	0.001775	0.004418	0.010786
	10^7	0.001468	0.002569	0.004387	0.009928
	10^8	0.000020	0.000398	0.001976	0.007509
	10^9	0.000016	0.000025	0.000016	0.000066
10^{-1}	10^6	0.001791	0.005827	0.016737	0.046506
	10^7	0.001136	0.005466	0.017779	0.052353
	10^8	0.000176	0.002395	0.012649	0.047425
	10^9	0.000005	0.000020	0.000042	0.000061

Cuadro 6.1: Error absoluto, como se define en (6.74), de los primeros cuatro momentos de la distribución numérica de θ de partículas difundiéndose libremente en la superficie de la esfera con $D = 1$. Se muestra la dependencia del error en el tamaño del paso dt y del tamaño del ensamble estadístico N (tamaño de la muestra estadística).

6.1.4. Estabilidad de los estados estacionarios

Debido a que el método de Euler tiene asociado un error proporcional al tamaño del paso dt , y éste puede irse acumulando conforme iteramos, en esta sección estudiaremos la estabilidad de los estados estacionarios obtenidos con nuestros métodos numéricos. Para ello definamos

$$\overline{f(t)} \equiv \frac{1}{N \cdot M} \sum_{i=1}^N \sum_{n=1}^M f[\theta_{i,n}], \quad (6.73)$$

donde $\theta_{i,n}$ denota el valor de θ en la i -ésima trayectoria al tiempo t_n , el promedio de la magnitud f en un ensamble de N muestras. El error absoluto de $\overline{f(t)}$ con respecto al valor de equilibrio

$$\langle f \rangle_{\text{eq}} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta f(\theta) \overline{P}_{st}(\theta, \phi), \quad (6.74)$$

calculado a partir de la distribución exacta de equilibrio dada en (6.69), está dado por

$$\Delta f = |\overline{f(t)} - \langle f \rangle_{\text{eq}}|. \quad (6.75)$$

6.1.5. Método de Euler estocástico

En esta sección damos una cota (conservadora) para el tamaño del paso Δt , para controlar el error asociado al método de Euler estocástico. Como es bien sabido si las funciones que definen la evolución en la ecuación de Langevin (vector de arrastre A y la matriz de difusión B), son constantes, el método es *exacto*, no hay error, no importa que tan grande se elija el tamaño del paso Δt . Sin embargo, si estas funciones varían en el espacio o en el tiempo,

dt	Muestra	$\Delta\theta$	$\Delta\theta^2$	$\Delta\theta^3$	$\Delta\theta^4$
10^{-3}	10^6	0.001184	0.003358	0.008285	0.019857
	10^7	0.000466	0.001950	0.0019499	0.065316
	10^8	0.000001	0.000382	0.001815	0.006381
	10^9	0.000041	0.000335	0.001822	0.006857
10^{-2}	10^6	0.000777	0.006259	0.024629	0.080600
	10^7	0.000166	0.003845	0.018739	0.065316
	10^8	0.004103	0.004103	0.019810	0.069621
	10^9	0.004282	0.004282	0.020471	0.071849
10^{-1}	10^6	0.002058	0.034305	0.175293	0.628564
	10^7	0.000220	0.040534	0.192456	0.672770
	10^8	0.000005	0.041133	0.193835	0.675919
	10^9	0.000052	0.041344	0.194492	0.677735

Cuadro 6.2: Error absoluto, como se define en (6.74), de los primeros cuatro momentos de la distribución numérica de θ de partículas difundiéndose en la superficie de la esfera bajo la influencia del potencial externo $U(\theta) = \lambda Y_2^0(\theta, \phi)$, con $\lambda = k_B T$ y $D = 1$. Se muestra la dependencia del error en el tamaño del paso dt y del tamaño del ensamble estadístico N (tamaño de la muestra estadística).

éste ya no es el caso y esperaríamos que entre más varíen estas funciones mayor pueda ser el error al considerarlos constantes en cada paso de la integración.

Los métodos de tipo Euler son conocidos por su pobre desempeño, ya que el error asociado crece linealmente con el tamaño del paso Δt . Sin embargo, también se sabe que cuando los campos vectoriales, que definen la dinámica asociada son *suaves* (suficientemente diferenciables), estos métodos convergen a la solución al tiempo T , definida en el intervalo $[t_0, T]$, conforme $\Delta t \rightarrow 0$, tanto en el caso determinista [5, p. 168] (*the Euler broken line*), como en el estocástico [140, p. 134]. Más detalles pueden encontrarse en [53], y las siguientes estimaciones pueden encontrarse en [54, p. 197]. Así que sería deseable saber que tan grande podemos permitirnos que sea el tamaño del paso Δt , de tal forma que nuestro error asociado no rebase cierta tolerancia. Como en el presente caso, a cada paso, el desplazamiento puede ser considerado como tomado lugar sobre una geodésica, que en el caso de la esfera de dos dimensiones \mathbb{S}^2 , es un círculo de radio máximo (un subconjunto de \mathbb{S}^1), y éste a su vez puede ser parametrizado por un número real θ , haremos nuestras estimaciones como si el problema fuese unidimensional, sin preocuparnos por las transformaciones que necesitaríamos aplicar para que éste tomase esta forma más simple. Para estimar el tamaño máximo del paso nos gustaría que se cumpliera

$$\frac{(\Delta t)^{1/2} B^{1/2} \{ |[B]_{,\alpha}^{1/2}| (\Delta t)^{1/2} + |[A]_{,\alpha}| (\Delta t) \}}{B^{1/2} (\Delta t)^{1/2} + |A| (\Delta t)} \leq 2\epsilon. \quad (6.76)$$

Ya que si esta condición se cumple, el error cometido al despreciar términos del siguiente orden superior en la expansión de Taylor del vector de arrastre y de la matriz de difusión sería del mismo orden que ϵ . Por supuesto que para que esto se cumpla, estas funciones deben tener derivadas continuas, tal que en un rectángulo cerrado $[\theta_1, \theta_2] \times [t_0, T]$ están

acotadas. En esta notación, como en secciones anteriores, la coma denota derivada parcial ($[\cdot]_{,\alpha} \equiv \partial[\cdot]/\partial x^\alpha$).

Esta relación se deriva de una condición de *auto consistencia* impuesta al propagador del proceso (ver sección 1.4). Los detalles pueden ser consultados en el libro de Gillespie. El término que multiplica a los corchetes es menor que la unidad, por lo que es posible simplificar esta condición, aunque al hacerlo obtenemos una condición más conservadora, y por lo tanto no la más óptima, que dice

$$\{|[B]_{,\alpha}^{1/2}|(\Delta t)^{1/2} + |[A]_{,\alpha}|(\Delta t)\} \leq 2\epsilon. \quad (6.77)$$

Lo cual se cumplirá si

$$\Delta t \leq \min \left\{ \frac{\epsilon}{|[A]_{,\alpha}|}, \left(\frac{\epsilon}{|[B]_{,\alpha}^{1/2}|} \right)^2 \right\} \quad (6.78)$$

El algoritmo numérico trabaja con vectores que viven en \mathbb{R}^3 , la matriz de difusión es una constante, la constante de difusión D , veces la matriz identidad $B^{ik} = D\delta^{ik}$, por lo que las derivadas de las componentes de esta matriz con respecto a las coordenadas son nulas

$$[B^{ik}]_{,\alpha} = 0, \quad (6.79)$$

por lo que la estimación arriba se reduce aún más

$$\Delta t \leq \frac{\epsilon}{|[A]_{,\alpha}|}. \quad (6.80)$$

Las derivadas de las componentes de la fuerza a lo largo de la dirección $\hat{\theta}$ son

$$A_{,\theta} = \lambda \sin \theta, \quad (6.81a)$$

$$A_{,\theta} = 3\lambda \sin 2\theta, \quad (6.81b)$$

$$A_{,\theta} = \lambda [10 \cos^2 \sin \theta - \sin \theta (3 - 5 \cos^2 \theta)], \quad (6.81c)$$

las cuales están acotadas por los valores

$$|A_{,\theta}| \leq \lambda, \quad (6.82a)$$

$$|A_{,\theta}| \leq 6\lambda, \quad (6.82b)$$

$$|A_{,\theta}| \leq \lambda [10|\cos^2 \sin \theta| + |\sin \theta|(3 + 5 \cos^2 \theta)] \leq 18\lambda. \quad (6.82c)$$

Por lo que una estimación muy conservadora sería

$$\Delta t \leq \frac{\epsilon}{18\lambda} \quad (6.83)$$

Es cierto que el método de Euler tiene un costo computacional alto si el vector de arrastre o la matriz de difusión varían mucho en pequeñas regiones del tiempo y del espacio. Sin embargo, queremos hacer énfasis que este tipo de análisis del error está asociado a la noción de *convergencia fuerte* [92], en el que se comparan directamente las trayectorias de cada una de las partículas simuladas numéricamente, con las soluciones exactas (aquellas que resultan de la integración de las ecuaciones diferenciales estocásticas, para una trayectoria particular de la fuerza estocástica). En el análisis del error en la *convergencia débil* lo que se compara es la estadística $P_N(\theta, t)$, generada con un ensamble de trayectorias generadas con el método numérico, contra las soluciones analíticas de la ecuación de Fokker-Planck, el cual es el método utilizado en este trabajo para validar los métodos numéricos.

6.1.6. Rotaciones equivalentes

En esta sección demostramos que la manera de abordar las rotaciones con nuestro método numérico es equivalente a otras alternativas, por lo que no se genera un error sistemático además del que está asociado al considerar los campos externos o la matriz de difusión constantes estudiado en la sección anterior. Esta manera de abordar las rotaciones es más sencilla ya que requiere menos evaluaciones trigonométricas y por la misma razón es más rápida que las otras dos alternativas. No obstante, no funcionará si es necesario considerar colisiones entre las partículas así como en aquellos casos que sea necesario considerar otro tipo de obstáculos o ciertas regiones “prohibidas”.

Rotaciones en \mathbb{S}^2

En esta sección, demostraremos a través de unos ejemplos puntuales registrados en la tabla 6.3, que utilizar la sub rutina del algoritmo numérico encargada de realizar las rotaciones es equivalente a realizar una rotación; que éstas producen resultados prácticamente idénticos, siendo el orden de las diferencias menor a 10^{-16} y nos inclinaríamos a pensar que nuestro método numérico es más preciso ya que involucra menos evaluaciones trigonométricas. Sea \mathbf{r} el vector de la condición inicial, $\hat{\mathbf{dr}}$ denotará el vector unitario en la dirección del

\mathbf{r}	$\hat{\mathbf{dr}}$	\mathbf{N}	$\ \mathbf{dr}\ $
(0,0,1)	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1, 0)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1, 0)$	$\pi/8$
(0,0,1)	$\frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1, 0)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1, 0)$	$2\pi/8$
(0,0,1)	$\frac{1}{\sqrt{2}}(-1, -1, 0)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1, 0)$	$3\pi/8$
(0,0,1)	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1, 0)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1, 0)$	$4\pi/8$
(0,0,1)	(1, 0, 0)	(0, -1, 0)	$4\pi/8 - \epsilon$

Cuadro 6.3: Conjunto de condiciones iniciales en donde \mathbf{r} es el vector de la posición inicial, $\hat{\mathbf{dr}}$ es el vector unitario en la dirección del desplazamiento instantáneo, $\|\mathbf{dr}\|$ es su magnitud, y \mathbf{N} es el vector a lo largo del eje de rotación.

desplazamiento, el cual será un elemento del plano tangente $T_{\mathbf{r}}\mathbb{S}^2$, y $\|\mathbf{dr}\|$ su respectiva magnitud. El radio de la esfera unitaria es $r = 1$ y el arco a lo largo de una geodésica $s = r\Delta\Theta$, por lo que la magnitud del desplazamiento será igual que la magnitud del desplazamiento angular. \mathbf{R} denota el vector que se obtiene después de aplicar el método numérico para rotar la condición inicial, mientras que \mathbf{r}' denota aquél que se obtiene después de utilizar la rotación vectorial dada en la Eq. (6.84), en donde Θ es el ángulo rotado en el sentido de las manecillas del reloj. Demostraremos que este ángulo coincide con $\|\mathbf{dr}\|$ generado en el plano tangente. Denotamos con \mathbf{n} como el vector unitario paralelo al eje de rotación. Para realizar las rotaciones utilizaremos la forma vectorial conocida [59]

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} \cos \Theta + \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r})(1 - \cos \Theta) + (\mathbf{r} \times \mathbf{n}) \sin \Theta, \quad (6.84)$$

Los resultados se muestran en la tabla 6.4.

Otra posibilidad para rotar vectores en \mathbb{R}^3 es parametrizar dicha rotación utilizando los *ángulos de Euler* [59], y en términos de esta matriz de rotación sería

$$\mathbf{x}' = \mathbf{Ax}, \quad (6.85)$$

$\Theta_{\mathbf{R}} = \arccos(\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{z}})$	$\Theta' = \arccos(\mathbf{r}' \cdot \hat{\mathbf{z}})$	$\Delta\Theta(\mathbf{r}', \mathbf{R})$
0.3926990816987242	0.3926990816987242	$< 10^{-18}$
0.7853981633974484	0.7853981633974483	10^{-16}
1.1780972450961722	1.1780972450961724	10^{-16}
1.5707963267948966	1.5707963267948966	$< 10^{-18}$
1.5707938267948967	1.5707938267948967	$< 10^{-18}$

Cuadro 6.4: Desplazamientos angulares generados asociados a las condiciones iniciales de la tabla 6.3 en donde $\Theta_{\mathbf{R}}$ es el desplazamiento angular usando nuestro método numérico, Θ' es el desplazamiento generado con la receta Eq. (6.84) para rotar un vector en \mathbb{R}^3 .

	Media	Desviación estándar
Método numérico	17.1 μs	$\pm 779 \text{ ns}$
Rotación vectorial	50.3 μs	$\pm 2.18 \mu\text{s}$
Matriz de rotación	53.3 μs	$\pm 2.94 \mu\text{s}$

Cuadro 6.5: Tiempos de ejecución para realizar una rotación en \mathbb{S}^2 usando Python, en los que se usó `%timeit` con 100 *rounds* y 10,000 *loops* cada uno. El código en Python para estas tres rutinas se encuentra al final de esta sección.

en donde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \cos \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi & \cos \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \sin \psi & \sin \psi \sin \theta \\ -\sin \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi & -\sin \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \cos \psi & \cos \psi \sin \theta \\ \sin \theta \sin \phi & -\sin \theta \cos \phi & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (6.86)$$

Obviamente, éste es el método que involucra más evaluaciones trigonométricas; al menos 6, por lo tanto el más susceptible a acumular errores. Algunos parámetros estadísticos de los tiempos de ejecución se muestran en la tabla 6.5. La conclusión que podemos obtener de estos es que nuestro método numérico, en cuanto la ejecución de las rotaciones utilizadas para desplazar a las partículas es al menos dos veces más rápido y con el mismo grado de precisión que la rotación vectorial.

```

1 def numerical_method(r,dr):
2     """Function that given initial three dimensional numpy arrays r,
3     and a displacement dr return a new numpy array nuevo_r as
4     the one generated from a rotation an angular displacement
5     of magnitude ||dr|| around the axis given by cross product of r with dr"""
6     norma = np.linalg.norm(dr)
7     unit_d = (dr)/norma
8     nueva_norma = np.tan(norma)
9     nuevo_d = nueva_norma * unit_d
10    nuevo_r = r + nuevo_d
11    nuevo_r = nuevo_r / np.linalg.norm(nuevo_r)
12    return nuevo_r

```

```

1 def rot_finita(r_ini, N, Phi):
2     """This function rotates a vector r_ini around the direction given by
3     the vector N, an angle Phi. It uses algebraic operations only and three
4     trigonometric evaluations."""
5     n = N/np.linalg.norm(N)
6     cos_theta = np.cos(Phi)
7     r_fin = cos_theta*r_ini + (np.dot(n,r_ini))*(1 - cos_theta)*n + \
8         (np.sin(Phi))*(np.cross(r_ini,n))
9     return r_fin

```

```

1 def Rot_Euler(r,theta, phi, psi):
2     """Rotation of the vector x, a numpy array using the Euler angles theta,
3     phi, and psi. It returns the rotated vector"""
4     x_n = r[0]*(np.cos(psi)*np.cos(phi) - \
5     np.cos(theta)*np.sin(phi)*np.sin(psi)) + \
6         r[1]*(np.cos(psi)*np.sin(phi) - \
7             np.cos(theta)*np.cos(phi)*np.sin(psi)) + \
8                 r[2]*(np.sin(psi)*np.sin(theta))
9     y_n = r[0]*(-np.sin(psi)*np.cos(phi) - \
10     np.cos(theta)*np.sin(phi)*np.cos(psi)) + \
11         r[1]*(-np.sin(psi)*np.sin(phi) - \
12             np.cos(theta)*np.cos(phi)*np.cos(psi)) + \
13                 r[2]*(np.cos(psi)*np.sin(theta))
14     z_n = r[0]*(np.sin(theta)*np.sin(phi)) + \
15         r[1]*(-np.sin(theta)*np.cos(phi)) + \
16             r[2]*(np.cos(theta))
17
18     return np.array([x_n,y_n,z_n])

```

6.2. Extensión a otros regímenes

6.2.1. Proceso de Ornstein-Uhlenbeck en \mathbb{S}^2

En esta sección mostramos los primeros resultados de las simulaciones realizadas con la adaptación de nuestros métodos numéricos para poder trabajar en regímenes más generales; no tan sólo en el sobrearmortiguado. Esto es, aquí se incorpora la dinámica de la velocidad de la partícula Browniana. En esta sección, simulamos lo que sería equivalente al proceso de Ornstein-Uhlenbeck restringido a la superficie de la esfera. La manera en la que validamos que este algoritmo numérico consiste en comparar en dos contextos en donde existen soluciones

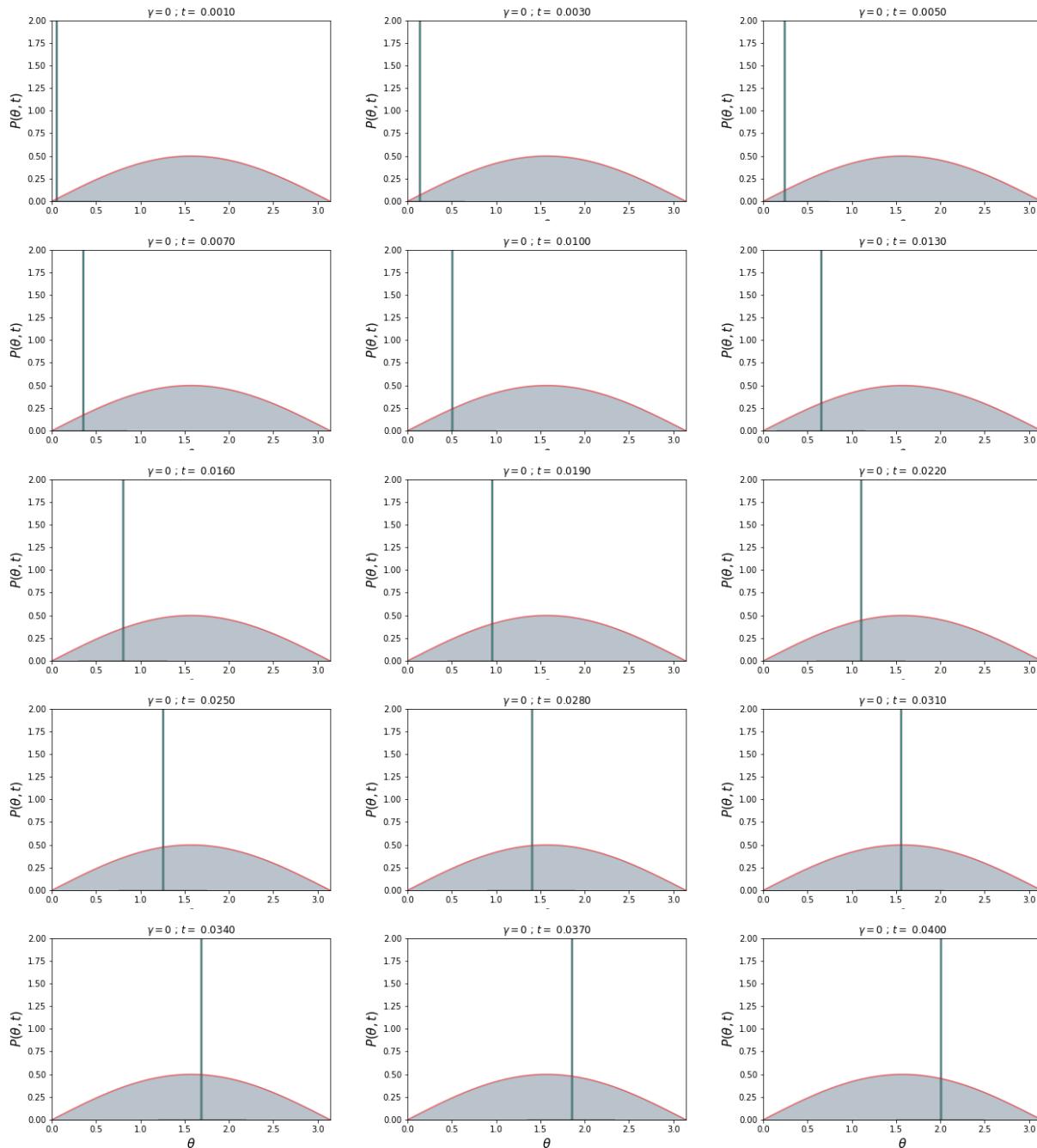


Figura 6.18: En esta imagen presentamos la evolución temporal del histograma de la variable angular θ en azul claro contra la solución analítica 6.2 a la ecuación de Fokker-Planck (o Smoluchowski porque estamos en el régimen sobreamortiguado) en rojo. Para construir esta imagen hemos truncado la solución exacta que está dada por una serie infinita usando sólo los primeros 1000 términos y hemos usado un ensamble de 10,000 partículas para construir esta imagen.

analíticas. El primero consiste en simplemente considerar que no hay fricción, lo cual, dada la ley de evolución que define el proceso de Ornstein-Uhlenbeck ($mdV/dt = -\gamma v + \sqrt{2KT}\gamma\Gamma(t)$) cancela la fuerza disipativa y al mismo tiempo las fluctuaciones (concomitancia dictada por el *teorema de fluctuación disipación*).

Cuando cancelamos estos dos términos el sistema sólo estará urgido por la fuerza de restricción que lo mantiene restringido a moverse sobre la superficie de la esfera. En este caso, el movimiento sigue las geodésicas definidas como aquellas curvas que ya sea minimizan la distancia entre dos puntos o aquellas que tienen un vector tangente que se *transporta paralelamente*, las ecuaciones diferenciales que las definen al final resultan ser las mismas. Este resultado que anunciamos y demostramos a continuación, puede ser consultado en [1]

Teorema 6.2.1 (Curvas integrales base). Sea \mathbb{M} una variedad seudo Riemanniana y sea $L : \mathbb{T}\mathbb{M} \rightarrow \mathbb{R}$ estar definida por $L(v) = \frac{1}{2}(v, v)$, entonces $c_0(t)$ es una *curva integral base*⁴ de X_E , el campo vectorial Lagrangiano de L , si y sólo si $c_0(t)$ es una geodésica.

Demostración. En las coordenadas (q^1, q^2, \dots, q^n) , tenemos $L(v) = g_{ij}v^i v^j$, así que las ecuaciones de Lagrange para la *curva integral base* $c_0(t) = (q^1(t), q^2(t), \dots, q^n(t))$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} = \frac{\partial L}{\partial q^i}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (6.87)$$

se convierten en

$$\frac{d}{dt} (g_{ij} \dot{q}^j) = \frac{1}{2} \frac{\partial g_{jk}}{\partial q^i} \dot{q}^j \dot{q}^k. \quad (6.88)$$

Esto es,

$$g_{ij} \ddot{q}^j = \left(\frac{1}{2} \frac{\partial g_{jk}}{\partial q^i} + \frac{\partial g_{ij}}{\partial q^k} \right) \dot{q}^j \dot{q}^k \quad (6.89)$$

éstas son en efecto, las ecuaciones geodésicas, ya que si usamos la expresión de los símbolos de Christoffel Eq. (3.40), de la sección 3.3

$$\Gamma_{jk}^i = \frac{1}{2} g^{il} (g_{lk,j} + g_{jl,k} - g_{jk,l}), \quad (6.90)$$

y la contraemos con $\dot{q}^j \dot{q}^k$

$$\Gamma_{jk}^i \dot{q}^j \dot{q}^k = \frac{1}{2} g^{il} (g_{lk,j} + g_{jl,k} - g_{jk,l}) \dot{q}^j \dot{q}^k \quad (6.91)$$

$$= g^{il} \left(g_{lj,k} - \frac{1}{2} g_{jk,l} \right) \dot{q}^j \dot{q}^k, \quad (6.92)$$

ya que los dos primeros son idénticos, dada la simetría de $\dot{q}^j \dot{q}^k$. □

⁴

Definición 3 (Curva Integral base). Si $c : I \rightarrow \mathbb{T}\mathbb{M}$ es una curva integral de un campo vectorial X en $\mathbb{T}\mathbb{M}$, denominamos $\tau_M \circ c : I \rightarrow \mathbb{M}$ una *curva integral base* de X . De manera similar, si X es un campo vectorial en $\mathbb{T}^*\mathbb{M}$ (el haz cotangente), y $c : I \rightarrow \mathbb{T}^*\mathbb{M}$ es una curva integral de X , $\tau_M^* \circ c : I \rightarrow \mathbb{M}$ se denomina una *curva integral base*.

Aquí τ es la proyección (*homeomorfismo*) del haz tangente a la variedad $\mathbb{T}\mathbb{M}$ a un abierto U de \mathbb{R}^d , si d es la dimensión de la variedad.

Por supuesto, en el caso de la esfera dos dimensional \mathbb{S}^2 , las geodésicas satisfacen

$$\ddot{\theta} = \sin \theta \cos \theta \dot{\phi}^2, \quad (6.93)$$

$$\ddot{\phi} = -2 \cot \theta \dot{\theta} \dot{\phi}. \quad (6.94)$$

Estas ecuaciones son no lineales y están acopladas. También son exactamente las mismas que obtenemos si planteamos las ecuaciones de Euler-Lagrange, sin necesidad de usar los símbolos de Christoffel. Las geodésicas son círculos de radio máximo, que en el caso de la esfera: pueden ser obtenidas haciendo sólo rotaciones. Si la curvatura no fuese constante esto ya no sería posible. Para ver esto, analicemos un caso especial en el que $\dot{\theta} = 0$ y $\theta(0) = \pi/2$, en ese caso las ecuaciones geodésicas se reducen a

$$\ddot{\theta} = 0, \quad (6.95)$$

$$\ddot{\phi} = 0, \quad (6.96)$$

por lo tanto las velocidades son constantes, iguales a sus valores iniciales $\dot{\theta} = \dot{\theta}_0 = 0$ y $\dot{\phi} = \dot{\phi}_0$, y por lo tanto la coordenada θ no cambia. La solución de este caso es $\phi(t) = \dot{\phi}_0 t + \phi_0$ y $\theta(t) = \theta_0 = \pi/2$. El ecuador de la esfera se recorre a velocidad constante, que es justo el comportamiento que registramos en la figura 6.18, donde se presenta la función de densidad de probabilidad, cuando no hay fricción en el problema de Ornstein-Uhlenbeck. Esta función de probabilidad, en este caso, se vuelve una delta de Dirac centrada en la solución a las ecuaciones diferenciales que representan al sistema dinámico.

Análisis de autocorrelaciones del proceso de Ornstein-Uhlenbeck

En esta sección hacemos un análisis de las funciones de autocorrelación para las posiciones y para las velocidades.

A continuación presentamos una comparación para los diferentes valores yuxtapuestos, para poder apreciar mejor las diferencias cualitativas que existe entre estas funciones al variar la constante de fricción γ .

6.2.2. Proceso de Kramers constreñido a \mathbb{S}^2

En esta sección analizaremos la dinámica cuando hay un campo externo. En este caso, a la ecuación de Fokker-Planck se le suele denominar la ecuación de Kramers. Puede pensarse como la siguiente extensión al procesos de Ornstein-Uhlenbeck.

En la primera sección deduciremos la solución al estado estacionario. Posteriormente, usaremos un conjunto de parámetros cuyos valores nos permiten usar los resultados de la dinámica sobre amortiguada para validar los métodos numéricos.

La primera prueba a la que será sometida esta versión del algoritmo será que reproduzca los resultados de la sección 6.1.2 en el límite de alta fricción. Después, una vez verificado esto tenemos en mente probarlo con interacciones dependientes del espacio y del tiempo y fuera del régimen de alta fricción.

Posteriormente introduciremos obstáculos estáticos en la dinámica con diferentes tipos de interacción. Naturalmente esto es mucho más ambicioso pero factible, ya que las rutinas para incorporar obstáculos con interacción inelástica y elástica ya se ha trabajado durante la maestría. Ahí se utilizó una versión del algoritmo que sólo es válido para el límite de alta

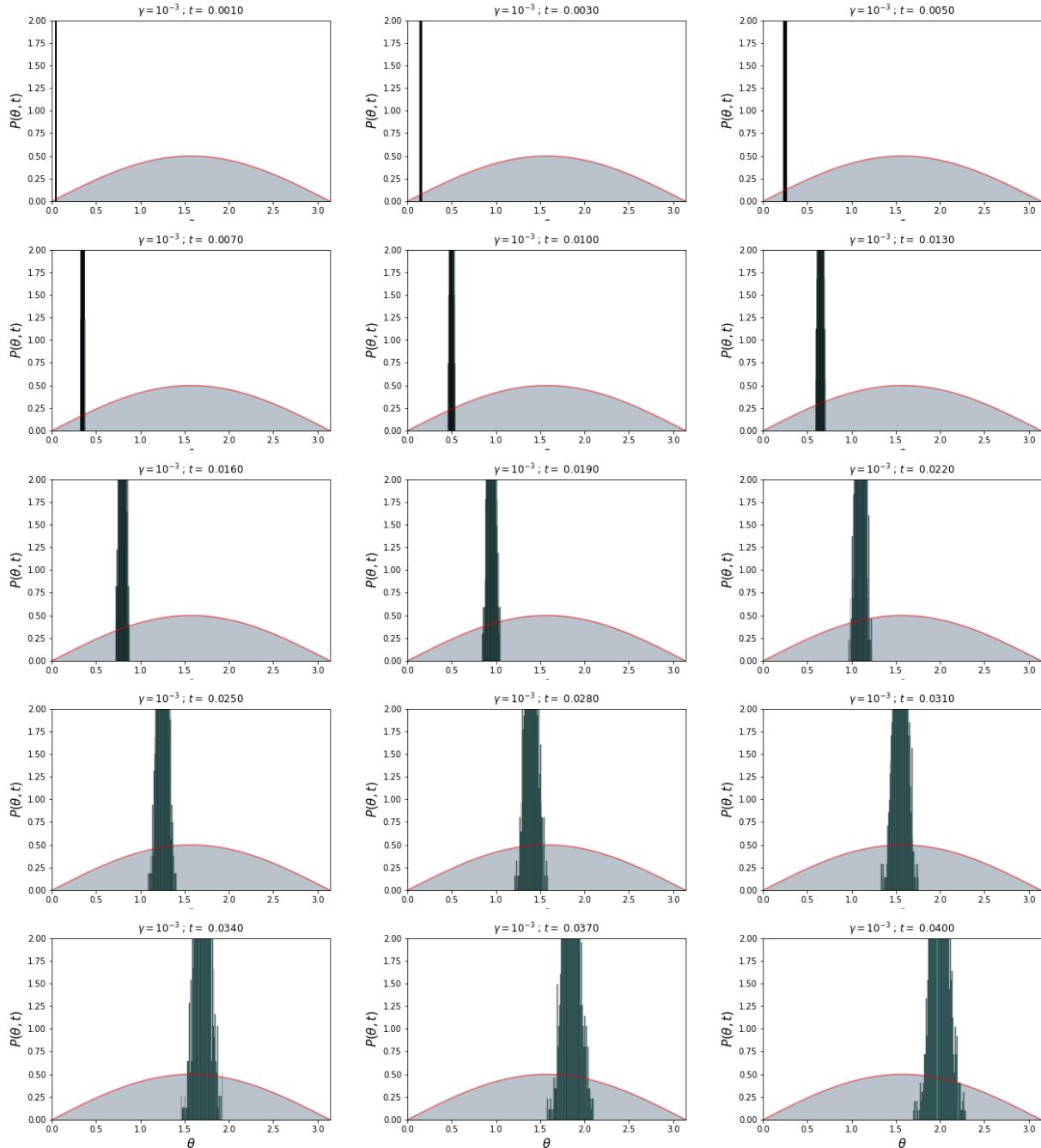
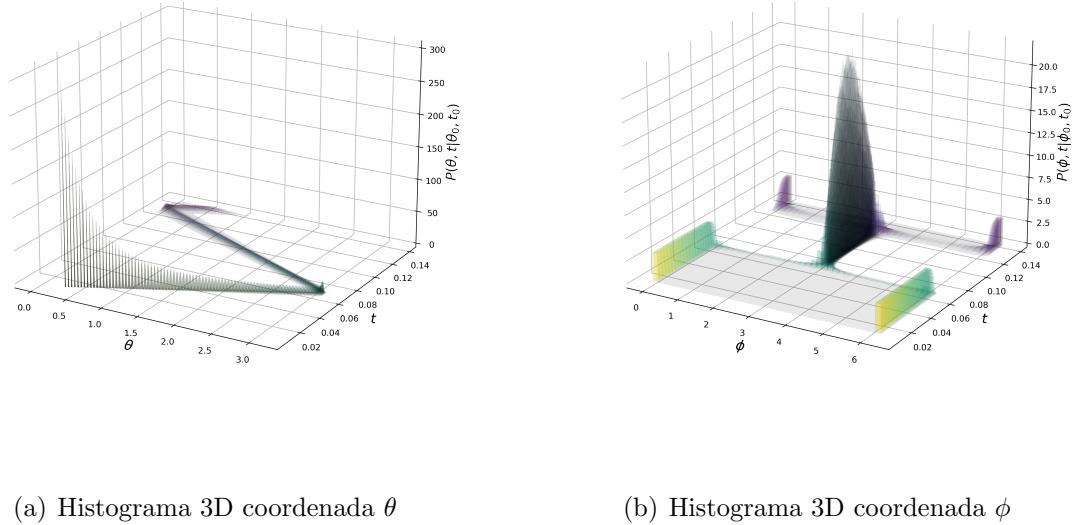
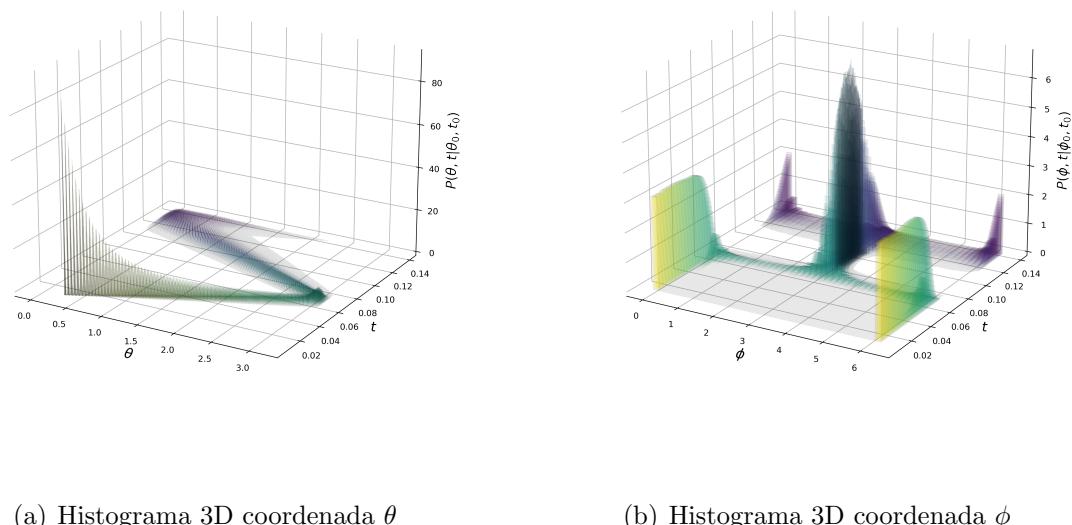


Figura 6.19: En esta imagen presentamos la evolución temporal del histograma de la variable angular θ en azul claro contra la solución analítica 6.2 a la ecuación de Fokker-Planck (o Smoluchowski porque estamos en el régimen sobreamortiguado) en rojo. Para construir esta imagen hemos truncado la solución exacta que está dada por una serie infinita usando sólo los primeros 1000 términos y hemos usado un ensamble de 10,000 partículas para construir esta imagen.

(a) Histograma 3D coordenada θ (b) Histograma 3D coordenada ϕ Figura 6.20: Histogramas del proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 10^{-3}$.(a) Histograma 3D coordenada θ (b) Histograma 3D coordenada ϕ Figura 6.21: Histogramas del proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 10^{-2}$.

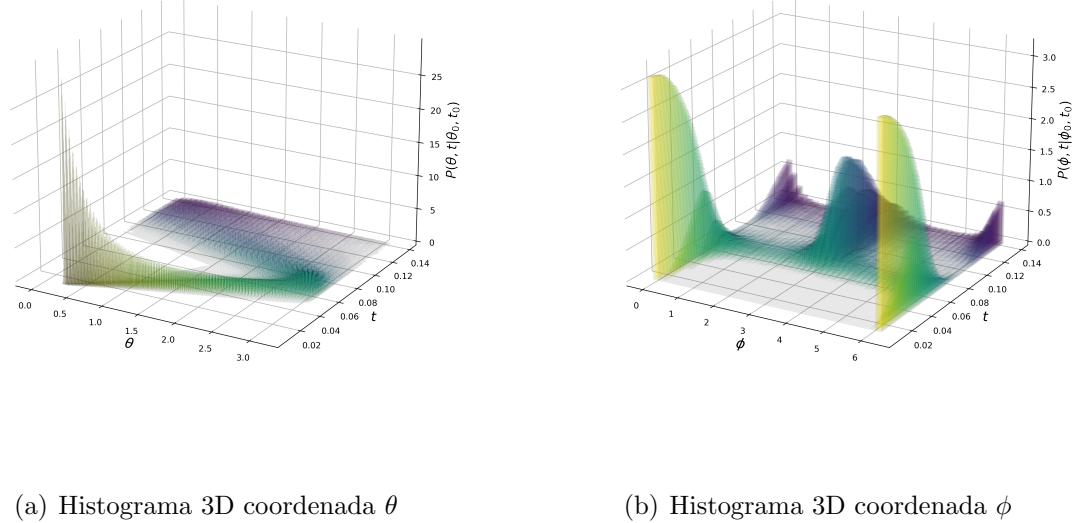


Figura 6.22: Histogramas del proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 10^{-1}$.

fricción, pero con las nuevas técnicas desarrolladas en este trabajo, es fácil incorporarlas y lo más probables es que el problema se centre más bien en una cuestión de capacidad de poder de computo.

6.2.3. Solución estacionaria a la ecuación de Kramers

En esta sección deducimos una solución explícita a la ecuación estacionaria de Kramers constreñida a \mathbb{S}^2 , cuando. Partimos de la ecuación de Kramers que depende del tiempo [124] y que deducimos nosotros en la sección 5.4.3 pero que aquí la expresamos en unas coordenadas (locales) arbitrarias para la variedad

$$P_{,t} = -v^a P_{,x^a} + [(\Gamma_{bc}^a v^b v^c + \gamma v^a + \lambda g^{ab} U_{,x^b}) P]_{,v^a} + \sigma g^{ab} [P]_{,v^a v^b}, \quad (6.97)$$

en donde $\lambda U(x^a)$ es el potencial externo y λ , γ y σ son constantes⁵. Está claro que si $\lambda = 0$, la dinámica es la misma que para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck. Necesitaremos una identidad que deducimos en la sección 3.3 para la derivada parcial del determinante de la métrica

$$g_{,\mu} = gg^{\alpha\beta}g_{\beta\alpha,\mu}, \quad (6.98)$$

además de observar que los símbolos de Christoffel no dependen de las velocidades

$$\Gamma_{bc,v^d}^a = 0, \quad (6.99)$$

⁵En esta ecuación γ es la constante de fricción dividida entre la masa m de la partícula Browniana y $\sigma = KT\gamma$, en donde esta γ está definida como la constante de fricción γ' dividida entre la masa m de la partícula.

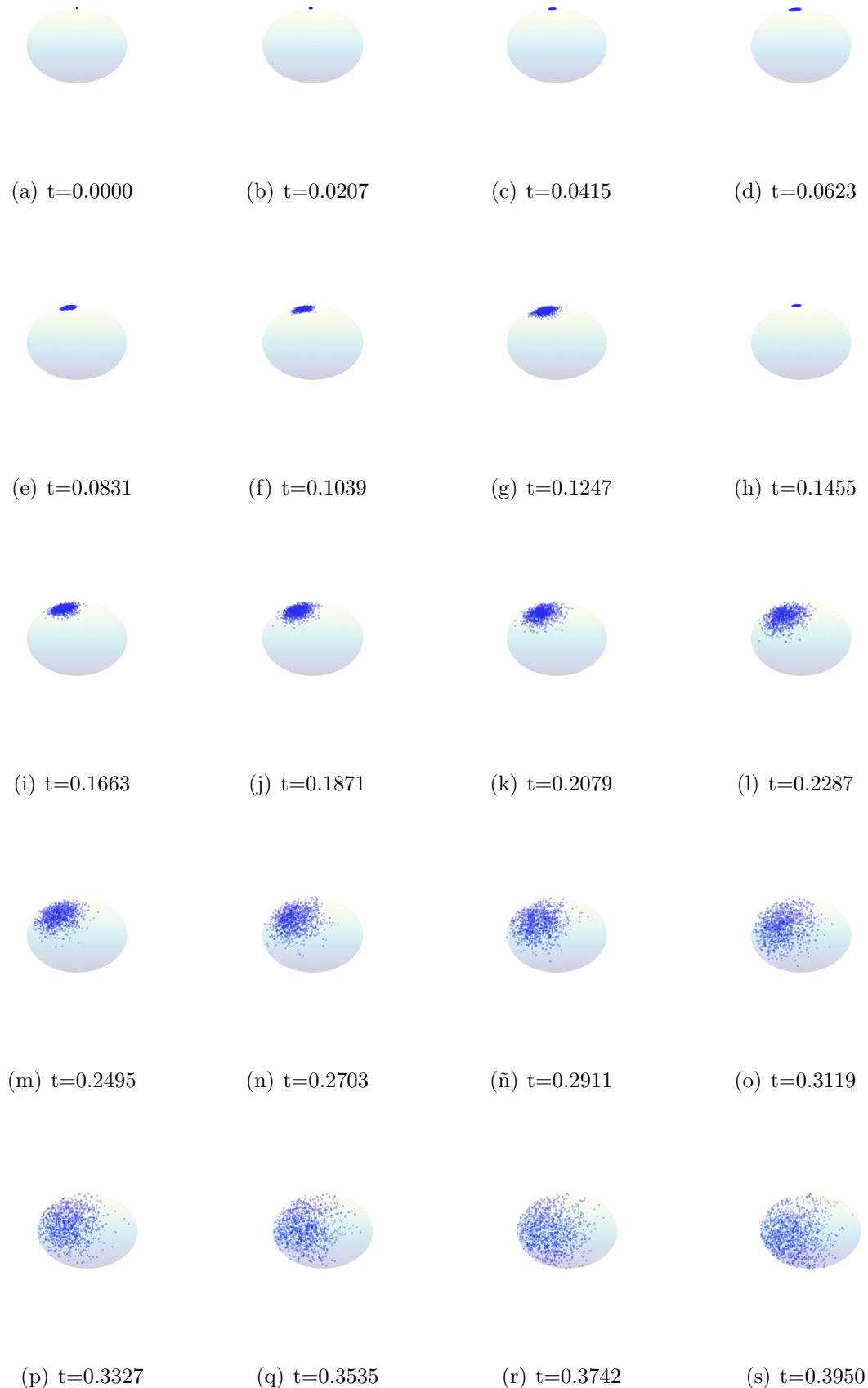
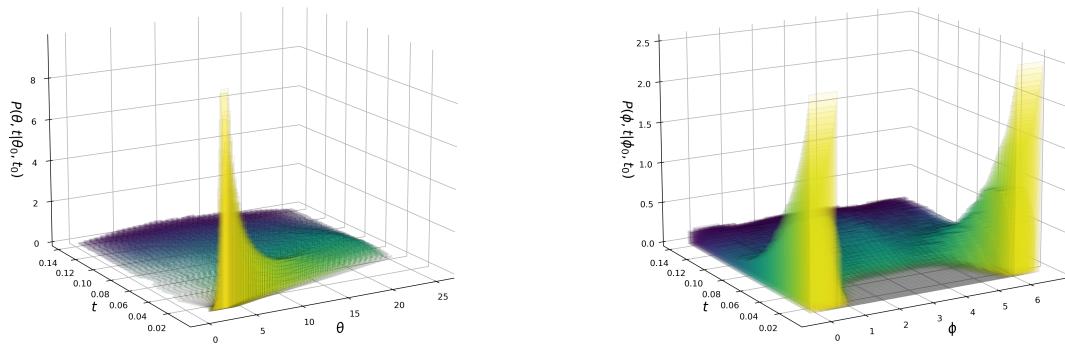
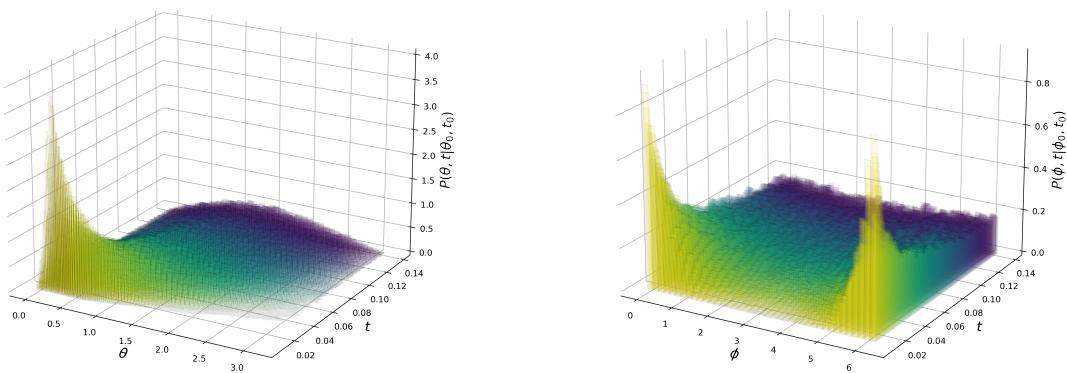


Figura 6.23: Secuencia de tiempos para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 1$.

(a) Histograma 3D coordenada θ (b) Histograma 3D coordenada ϕ Figura 6.24: Histogramas del proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 1$.(a) Histograma 3D coordenada θ (b) Histograma 3D coordenada ϕ Figura 6.25: Histogramas del proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 10^1$.

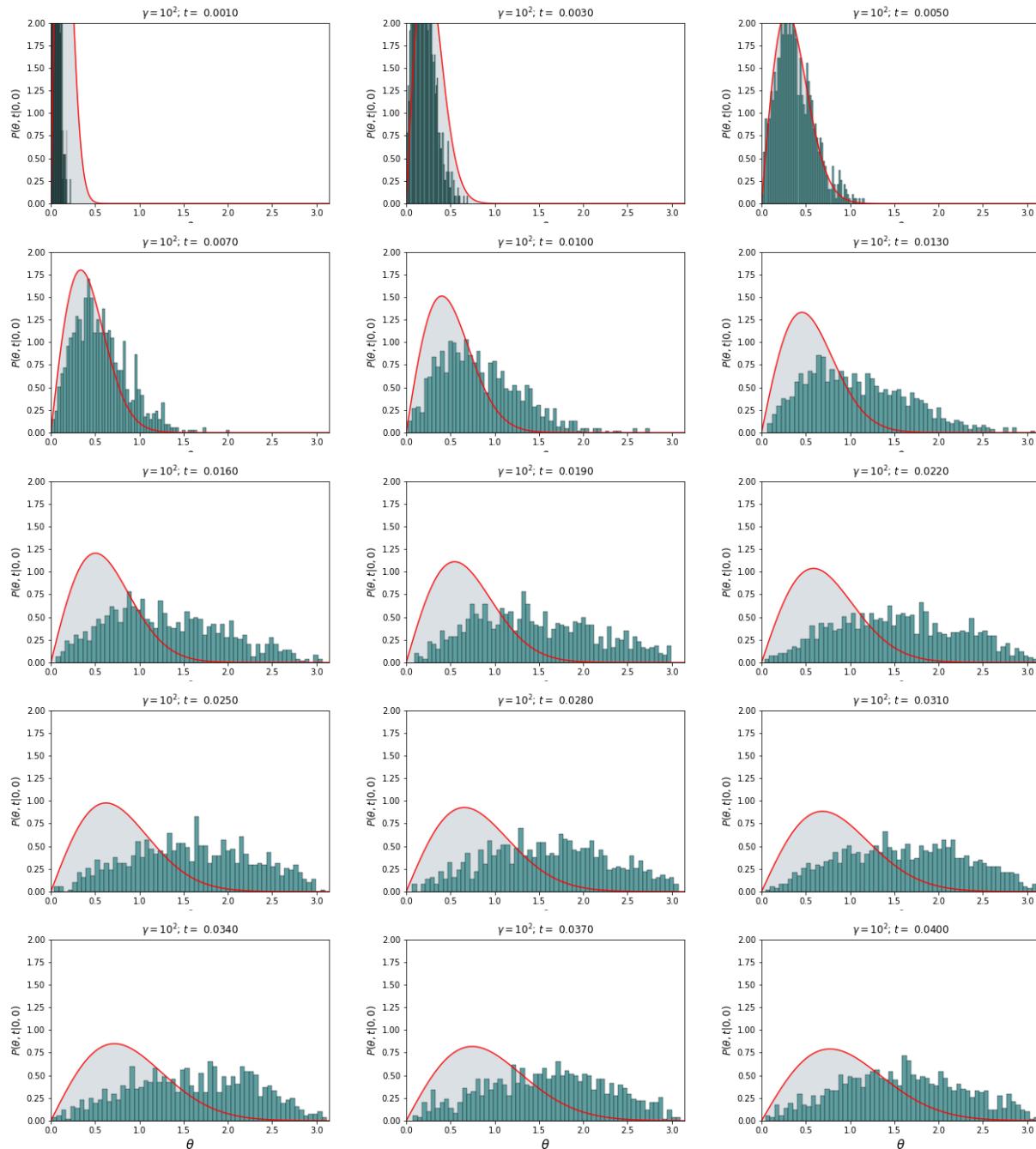
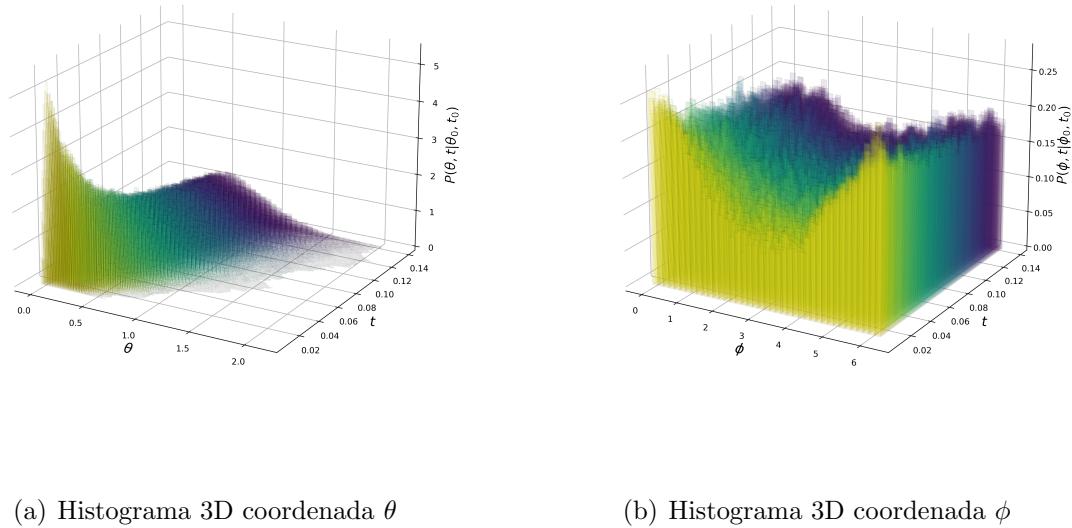
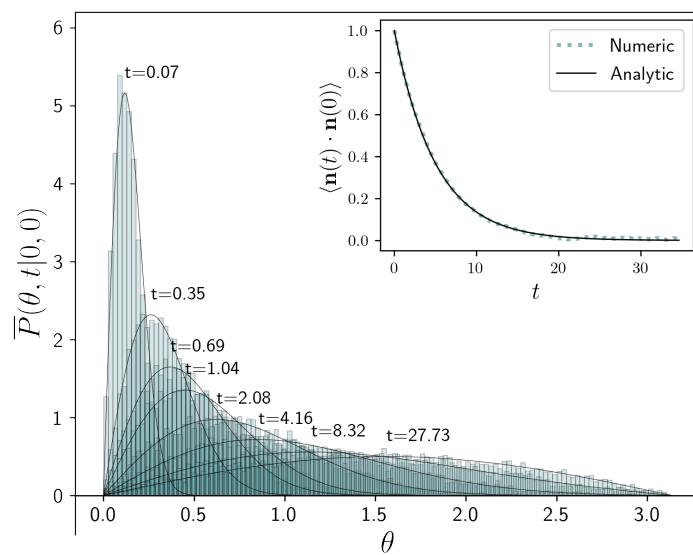


Figura 6.26: En esta imagen presentamos la evolución temporal del histograma de la variable angular θ en azul claro contra la solución analítica 6.2 a la ecuación de Fokker-Planck (o Smoluchowski porque estamos en el régimen sobreamortiguado) en rojo. Para construir esta imagen hemos truncado la solución exacta que está dada por una serie infinita usando sólo los primeros 1000 términos y hemos usado un ensamble de 10,000 partículas para construir esta imagen.

(a) Histograma 3D coordenada θ (b) Histograma 3D coordenada ϕ Figura 6.27: Histogramas del proceso de Ornstein-Uhlenbeck cuando $\gamma = 10^2$.Figura 6.28: Simulación cuando $\gamma \approx O(10^3)$, y se cumplen las condiciones del límite sobreamortiguado. El comportamiento de esta variable es el mismo que si hubiésemos usado la versión del algoritmo numérico para la ecuación de Smoluchowski con interacciones nulas.

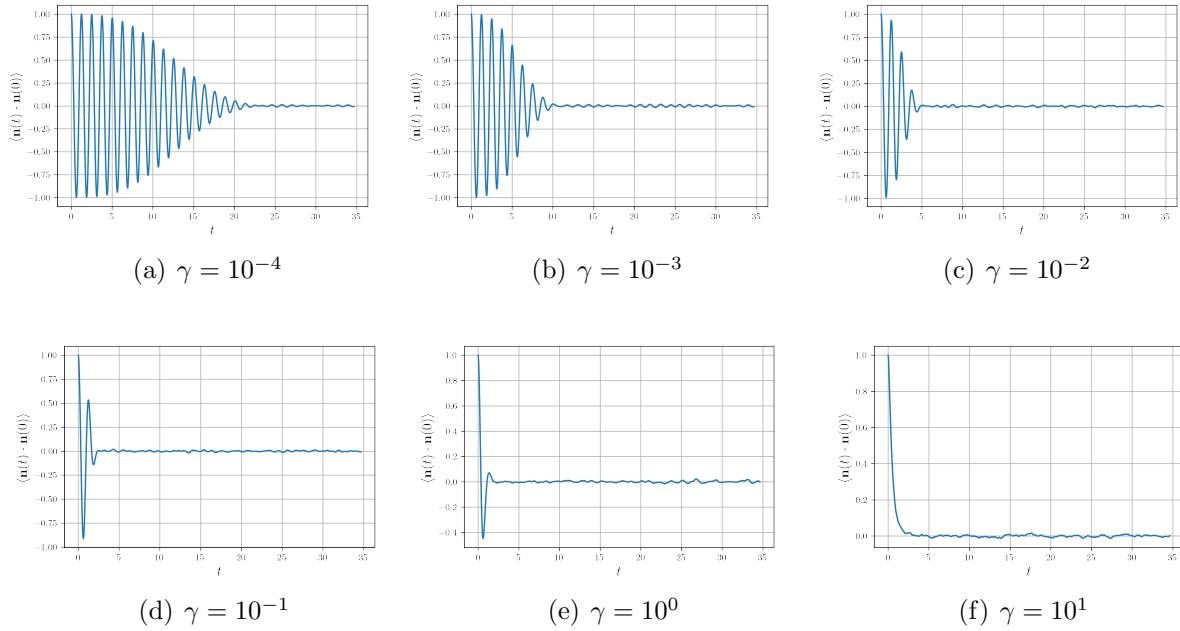


Figura 6.29: Comparación de las funciones de autocorrelación de la posición, para 6 órdenes de magnitud diferente en la constante de fricción γ .

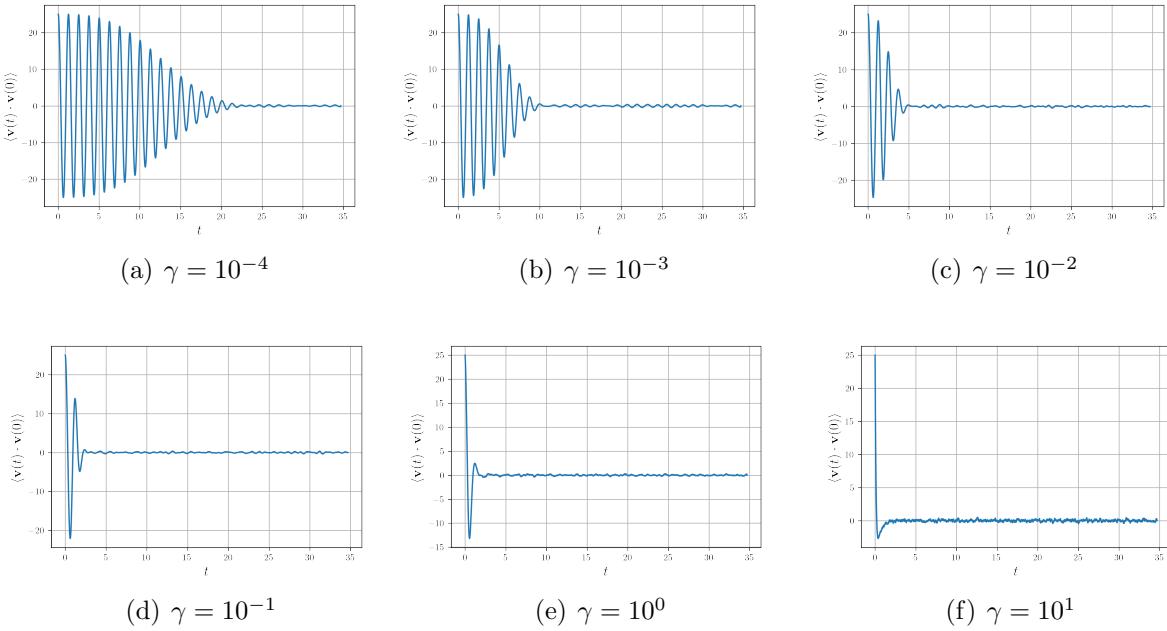


Figura 6.30: Comparación de las funciones de autocorrelación de la velocidad, para 6 órdenes de magnitud diferente en la constante de fricción γ .

para cualquier d . Demostraremos que la solución al estado estacionario, definida por

$$-v^a P^0_{,x^a} + [(\Gamma_{bc}^a v^b v^c + \gamma v^a + \lambda g^{ab} U_{,x^b}) P^0]_{,v^a} + \sigma g^{ab} [P^0]_{,v^a v^b} = 0, \quad (6.100)$$

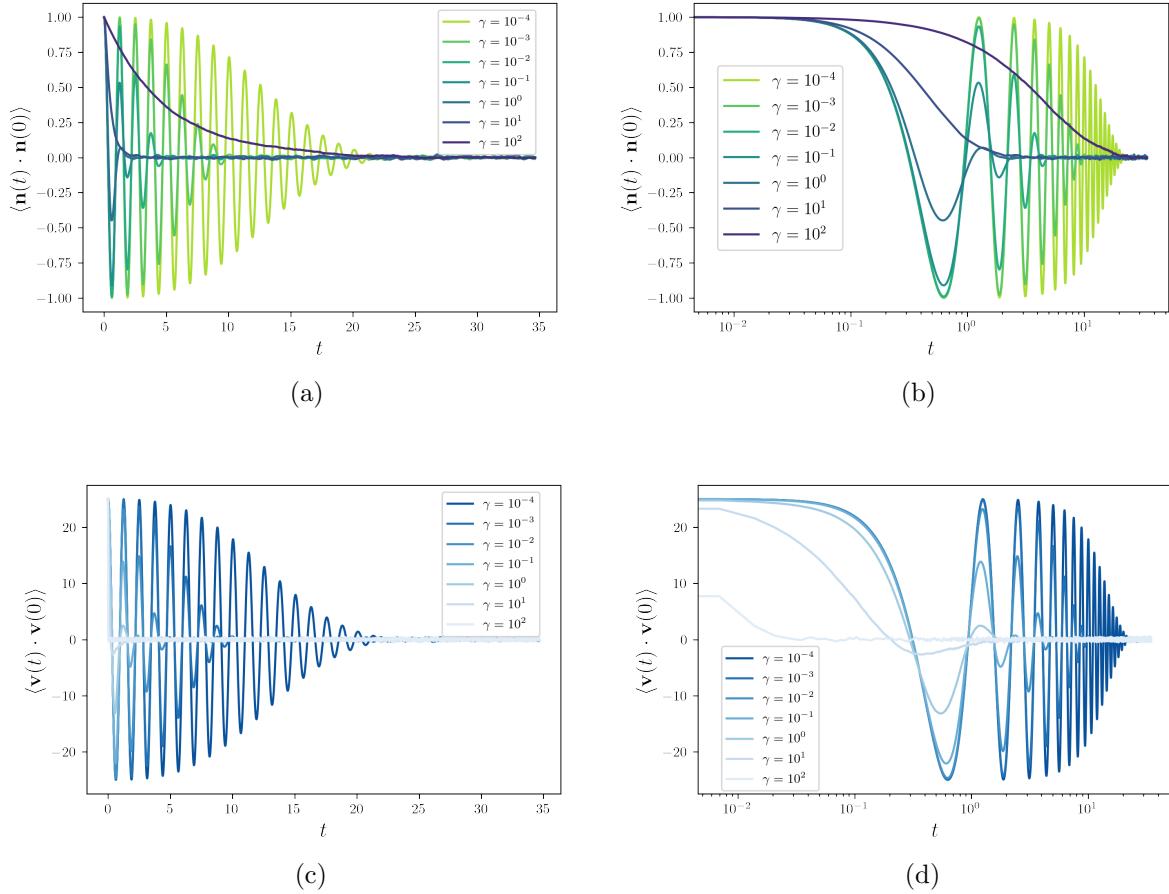


Figura 6.31: Comparación de las funciones de autocorrelación de la posición ya la velocidad, para 7 órdenes de magnitud diferente en la constante de fricción γ . La imagen del lado derecho está en escala logarítmica.

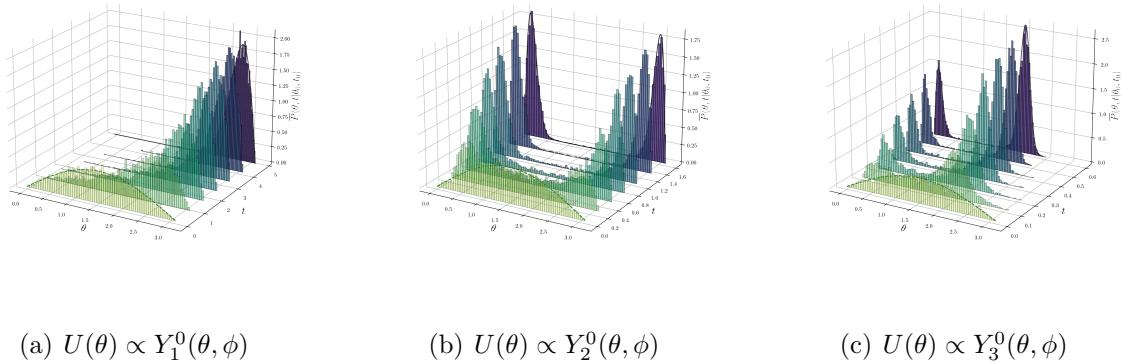


Figura 6.32: Dinámica hacia los estados estacionarios para el proceso de Kramers, cuando los parámetros son tales que definen el límite sobreamortiguado.

está dada por

$$P^0(x^a, v^a) = \frac{g(x)}{N} \exp \left[-\frac{\gamma}{2\sigma} \left\{ g_{a'b'} v^{a'} v^{b'} + 2\lambda U \right\} \right]. \quad (6.101)$$

Para ello calcularemos todas las derivadas de esta ecuación y las sustituiremos en la ecuación para la ecuación Eq. (6.100) que define el estado estacionario⁶. Las primeras derivadas con respecto a las coordenadas dicen

$$\begin{aligned} P^0,_x^a &= \frac{1}{N} g(x),_x^a \exp [\dots] + \frac{g(x)}{N} \exp [\dots] \left(-\frac{\gamma}{2\sigma} \left\{ g_{a'b',x^a} v^{a'} v^{b'} + 2\lambda U,_x^a \right\} \right) \\ &= \frac{1}{N} g(x) g^{a'b'} g_{b'a',x^a} \exp [\dots] + \frac{g(x)}{N} \exp [\dots] \left(-\frac{\gamma}{2\sigma} \left\{ g_{a'b',x^a} v^{a'} v^{b'} + 2\lambda U,_x^a \right\} \right). \end{aligned} \quad (6.102)$$

Mientras que las primeras derivadas parciales del término de arrastre con respecto las velocidades

$$\begin{aligned} [(\Gamma_{bc}^a v^b v^c + \gamma v^a + \lambda g^{ab} U,_x^b) P^0],_v^a &= (\Gamma_{bc}^a v^b v^c + \gamma v^a),_v^a P^0 + (\Gamma_{bc}^a v^b v^c + \gamma v^a + \lambda g^{ab} U,_x^b) P^0,_v^a \\ &= (\Gamma_{bc}^a \delta_a^b v^c + \Gamma_{bc}^a v^b \delta_a^c + \gamma) P^0 + (\Gamma_{bc}^a v^b v^c + \gamma v^a + \lambda g^{ab} U,_x^b) P^0,_v^a \\ &= (\Gamma_{ac}^a v^c + \Gamma_{ba}^a v^b + \gamma) P^0 + (\Gamma_{bc}^a v^b v^c + \gamma v^a + \lambda g^{ab} U,_x^b) P^0,_v^a \\ &= (2\Gamma_{ab}^a v^b + \gamma) P^0 + (\Gamma_{bc}^a v^b v^c + \gamma v^a + \lambda g^{ab} U,_x^b) P^0,_v^a \end{aligned} \quad (6.103)$$

Las primeras derivadas de la solución estacionaria con respecto a las v^a

$$\begin{aligned} P^0,_v^a &= \frac{g(x)}{N} \exp [\dots] \left[-\frac{\gamma}{2\sigma} g_{a'b'} v^{a'} v^{b'} \right],_v^a \\ &= \frac{g(x)}{N} \exp [\dots] \left[-\frac{\gamma}{2\sigma} g_{a'b'}(x) \left(\delta_a^{a'} v^{b'} + \delta_a^{b'} v^{a'} \right) \right] = \frac{g(x)}{N} \exp [\dots] \left[-\frac{\gamma}{\sigma} g_{ab'} v^{b'} \right] \end{aligned} \quad (6.104)$$

La última igualdad se sigue de que $g_{ab'} v^{b'} + g_{aa'} v^{a'} = 2g_{ab'} v^{b'}$. Entonces la segunda derivada de la solución estacionaria con respecto a v^b

$$\begin{aligned} \sigma g^{ab} P^0,_v^a v^b &= \sigma g^{ab} \left\{ \frac{g(x)}{N} \exp [\dots] \left[-\frac{\gamma}{\sigma} g_{ab'} v^{b'} \right] \right\},_v^b \\ &= \sigma g^{ab} \left\{ \frac{g(x)}{N} \exp [\dots] \left(-\frac{\gamma}{\sigma} g_{ba'} v^{a'} \right) \left(-\frac{\gamma}{\sigma} g_{ab'} v^{b'} \right) + \frac{g(x)}{N} \exp [\dots] \left(-\frac{\gamma}{\sigma} g_{ab'} \delta_b^{b'} \right) \right\} \\ &= \sigma g^{ab} \frac{g(x)}{N} \exp [\dots] \left\{ \left(-\frac{\gamma}{\sigma} g_{ba'} v^{a'} \right) \left(-\frac{\gamma}{\sigma} g_{ab'} v^{b'} \right) + \left(-\frac{\gamma}{\sigma} g_{ab} \right) \right\} \\ &= \sigma g^{ab} \frac{g(x)}{N} \exp [\dots] \left\{ \frac{\gamma^2}{\sigma^2} g_{ab'} g_{ba'} v^{a'} v^{b'} - \frac{\gamma}{\sigma} g_{ab} \right\} \\ &= \frac{\gamma^2}{\sigma^2} \frac{g(x)}{N} \exp [\dots] g_{a'b'} v^{a'} v^{b'} - \gamma g^{ab} g_{ab} \frac{g(x)}{N} \exp [\dots] \end{aligned} \quad (6.105)$$

⁶En lo que sigue omitiremos el argumento de la exponencial que es el mismo en todos los casos

Como g_{ab} y g^{ab} son inversa la una de la otra y además son matrices simétricas tenemos que se cumple

$$g^{ab}g_{ab'} = g^{ba}g_{ab'} = \delta_{b'}^b. \quad (6.106)$$

Si multiplicamos la ecuación Eq. 6.102 por $-v^a$ obtenemos

$$-v^a P^0_{,x^a} = -\frac{1}{N} g(x) g^{a'b'} g_{b'a',x^a} v^a \exp[\dots] + \frac{g(x)}{N} \exp[\dots] \left(\frac{\gamma}{2\sigma} \left\{ g_{a'b',x^a} v^{a'} v^{b'} + 2\lambda U_{,x^a} \right\} v^a \right). \quad (6.107)$$

Si sumamos la ecuación Eq. (6.103) con la ecuación Eq. (6.104) veces el término $(\Gamma_{bc}^a v^b v^c + \gamma v^a + \lambda g^{ab} U_{,x^b})$, de la regla de producto con respecto v^a , obtenemos

$$(2\Gamma_{ab}^a v^b + \gamma) \frac{g(x)}{N} \exp[\dots] + (\Gamma_{bc}^a v^b v^c + \gamma v^a + \lambda g^{ab} U_{,x^b}) \left[-\frac{\gamma}{\sigma} \frac{g(x)}{N} \exp[\dots] g_{ab'} v^{b'} \right]. \quad (6.108)$$

Ahora si multiplicamos el resultado de la ecuación la suma de la Eq. (6.107) con la Eq. (6.108) por $N/g(x) \exp[\dots]$

$$\begin{aligned} & -g^{a'b'} g_{b'a',x^a} v^a + \frac{\gamma}{2\sigma} g_{a'b',x^a} v^{a'} v^{b'} v^a + \frac{\gamma}{\sigma} \lambda U_{,x^a} v^a + (2\Gamma_{ab}^a v^b + \gamma) \\ & -\frac{\gamma}{\sigma} g_{ab'} v^{b'} (\Gamma_{bc}^a v^b v^c + \gamma v^a + \lambda g^{ab} U_{,x^b}) + \frac{\gamma^2}{\sigma} g_{a'b'} v^{a'} v^{b'} - \gamma g^{ab} g_{ab} = \\ & \frac{\gamma}{2\sigma} g_{a'b',x^a} v^{a'} v^{b'} v^a - \frac{\gamma}{\sigma} g_{ab'} v^{b'} \Gamma_{bc}^a v^b v^c + 2\Gamma_{ab}^a v^b - g^{a'b'} g_{b'a',x^a} v^a \end{aligned}$$

Pero como

$$\Gamma_{ba}^a = \frac{1}{2} g^{ad} g_{da,x^b} = \frac{1}{2} g^{-1}(x) g_{,x^b}, \quad (6.109)$$

y $\Gamma_{ab}^a v^b = \Gamma_{ba}^b v^a = \Gamma_{ab}^b v^a$, los últimos dos términos de la identidad anterior se cancelan

$$\frac{\gamma}{2\sigma} g_{a'b',x^a} v^{a'} v^{b'} v^a - \frac{\gamma}{\sigma} g_{ab'} v^{b'} \Gamma_{bc}^a v^b v^c + 2\underline{\Gamma_{ab}^b v^a} - 2\underline{\Gamma_{ab}^b v^a} \quad (6.110)$$

Para poder seguir reduciendo esta expresión necesitamos utilizar la expresión de los símbolos de Christoffel en términos de derivadas de la métrica. Las derivadas son con respecto a las coordenadas, por lo que, para aliviar la notación usaremos $[\cdot]_{,x^a} = [\cdot]_a$

$$\Gamma_{bc}^a = \frac{1}{2} g^{ad} [g_{dc,b} + g_{ad,c} - g_{bc,d}] \quad (6.111)$$

Entonces tenemos que⁷

$$\begin{aligned}
 -v^a P_{,x^a}^0 + [(\Gamma_{bc}^a v^b v^c + \gamma v^a + g^{ab} U_{,x^b}) P^0]_{,v^a} + \sigma g^{ab} [P^0]_{,v^a v^b} &= \\
 = \frac{\gamma}{2\sigma} [g_{bc,b'} - g_{ab'} g^{ad} (g_{dc,b} + g_{ad,c} - g_{bc,d})] v^b v^c v^{b'} &= \\
 = \frac{\gamma}{2\sigma} [g_{bc,b'} - \delta_{b'}^d (g_{dc,b} + g_{bd,c} - g_{bc,d})] v^b v^c v^{b'} &= \\
 = \frac{\gamma}{2\sigma} [g_{bc,b'} - (g_{bc,b'} + g_{bb',c} - g_{bc,b'})] v^b v^c v^{b'} &= \\
 = \frac{\gamma}{2\sigma} [g_{bc,b'} - g_{bb',c}] v^b v^c v^{b'} &= 0
 \end{aligned}$$

Entonces, las distribuciones marginal y condicional de $P^0(x, v)$ dicen

$$P(x) = \int_{\mathbb{R}^{3N}} P^0(x, v) dv = \frac{\sqrt{g(x)} e^{-\beta U(x)}}{\int_M e^{-\beta U(x)} \sqrt{g(x')} dx'} \quad (6.112)$$

y

$$P^0(v|x) = \frac{P^0(x, v)}{P(x)}. \quad (6.113)$$

En los casos particulares que abordamos en este trabajo la Eq. (6.101) dice

$$P^0(x^a, v^a) = \frac{g(x)}{N} \exp \left[-\beta \left\{ \frac{1}{2} m(r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}^2) + \lambda Y_l^0(\theta, \phi) \right\} \right] = \frac{g(x)}{N} \exp [-\beta H]. \quad (6.114)$$

En donde $H = H(\zeta, \dot{\zeta})$ es la función hamiltoniana clásica de nuestro sistema conservativo y en el caso particular en el que la variedad es la dos esfera $M = \mathbb{S}^2$. El factor de masa está presente en el tensor de inercia, mientras que está ausente en el elemento (cuadrático) de longitud, por eso es conveniente tomar a la métrica como dada por el tensor de inercia es, naturalmente

$$m g_{a'b'} v^{a'} v^{b'} = m(r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}^2) \equiv I_{a'b'} v^{a'} v^{b'}. \quad (6.115)$$

Razón por la cual se tiene que entender que m , en este esquema está considerada en lo que denominamos como tensor métrico $g_{a'b'}$. Como se puede observar en la imágenes en 6.32 y en 6.33, se reproducen los resultados del límite sobreamortiguado descritos pos la ecuación de Smoluchowski Eq. (6.61). Esto quiere decir que la incorporación de la dinámica de la velocidad es consistente, al menos en este límite.

⁷Por simplicidad consideramos índices que sólo toman dos valores $b, c, b' = 1, 2$

$$\begin{aligned}
 [g_{bc,b'} - g_{bb',c}] v^b v^c v^{b'} &= [g_{11,1} - g_{11,1}] v^1 v^1 v^1 + [g_{11,2} - g_{12,1}] v^1 v^1 v^2 + [g_{21,1} - g_{21,1}] v^2 v^1 v^1 + [g_{21,2} - g_{22,1}] v^2 v^1 v^2 \\
 &\quad + [g_{12,1} - g_{11,2}] v^1 v^2 v^1 + [g_{12,2} - g_{12,2}] v^1 v^2 v^2 + [g_{22,1} - g_{21,2}] v^2 v^2 v^1 + [g_{22,2} - g_{22,2}] v^2 v^2 v^2 \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

Aunque debería ser obvio porque son índices mudos y todos están contraídos.

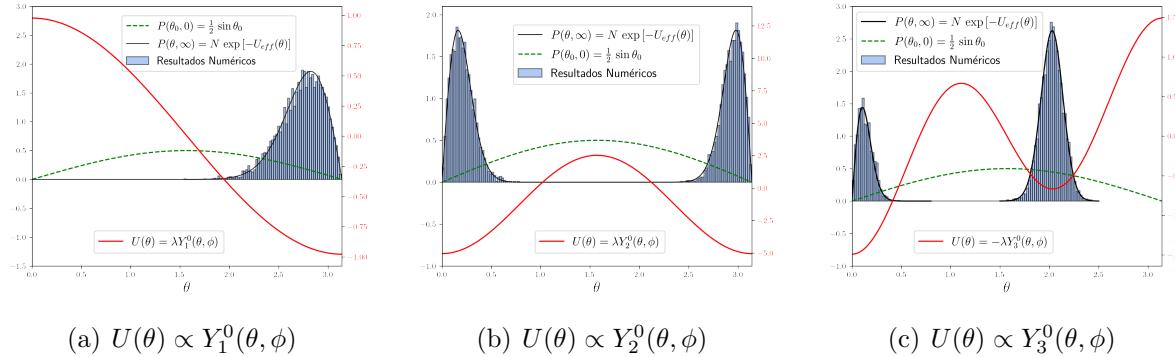


Figura 6.33: Estados estacionarios para el proceso de Kramers, cuando los parámetros son tales que definen el límite sobreamortiguado.

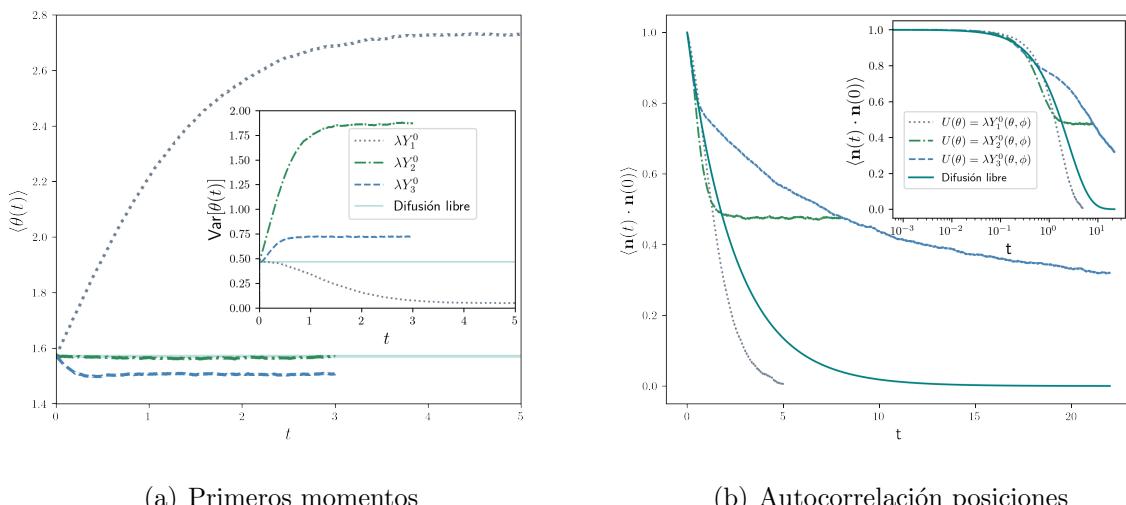


Figura 6.34: Estadística de los primeros momentos y de las autocorrelaciones, para el proceso de Kramers, en el límite sobreamortiguado, para las tres interacciones consideradas en este trabajo.

Péndulo esférico

Dada la estructura de la ecuación dinámica que define al proceso de Kramers, debiese estar claro que si la constante de fricción es cero, lo que se describe es a un sistema dinámico que en este caso está restringido a moverse en la superficie de la esfera. Por ejemplo, si la fuerza fuese cero, las soluciones deberían ser las soluciones a las ecuaciones geodésicas en la esfera, mientras que si la fuerza fuese por ejemplo la fuerza gravitacional (en una región pequeña de su superficie), ésta sería como una fuerza constante paralela a la dirección normal a la superficie y el problema es análogo a el problema del *péndulo esférico*. En la sección 6.2.1 abordamos el problema de Ornstein-Uhlenbeck y vimos que, efectivamente, cuando la fricción es nula, las trayectorias son geodésicas; círculos de radio máximo, recorridas con rapidez constante.

En esta sección vamos a demostrar que si hay una fuerza externa, que es homogénea (magnitud y dirección constantes), en \mathbb{R}^3 , nuestro método numérico es equivalente a un método de Euler con cierta ventaja. Comencemos con elegir un sistema de coordenadas con vector $\hat{\mathbf{z}}$ paralelo al vector normal a la superficie y utilizamos coordenadas esféricas, la función *lagrangiana* asociada a este sistema, donde el potencial es el potencial gravitacional, está dada por

$$L = \frac{1}{2}m \left[r^2\dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}^2 \right] - mgr \cos \theta. \quad (6.116)$$

Al plantear las ecuaciones de Lagrange

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^k} - \frac{\partial L}{\partial q^k} = 0, \quad (6.117)$$

obtenemos las ecuaciones⁸

$$mr^2\ddot{\theta} - mr^2 \sin \theta \cos \theta \dot{\phi}^2 - mgr \sin \theta = 0, \quad (6.118)$$

$$\frac{d}{dt}(mr^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}) = 0. \quad (6.119)$$

En el límite $\gamma \rightarrow 0$ nuestro método numérico debiese describir la misma dinámica que estas ecuaciones diferenciales. Lo cual es el caso, con una ventaja: a pesar de tener un método de primer orden en el tamaño del paso ($O(dt)$), como los objetos con los que realiza las operaciones viven en \mathbb{R}^3 , las inestabilidades que estas ecuaciones manifiestan tanto por las singularidades de las coordenadas en los polos, como por las no linealidades en las velocidades y las coordenadas angulares, las vuelven terriblemente inestables como lo sugiere su estructura matemática y los resultados a continuación. En ese sentido el método es más estable que el clásico *método de Euler* aplicado a estas ecuaciones diferenciales.

Para entender la esencia del movimiento es conveniente considerar la energía del péndulo esférico como la suma de dos términos: la energía cinética y un potencial efectivo dado por

$$V_{ef} = \frac{p_\phi^2}{2mr^2 \sin^2 \theta} + mgr \cos \theta, \quad (6.120)$$

⁸La ausencia de ϕ en las ecuaciones implica la conservación de la componente en la dirección z, del momento angular $M_z = p_\phi = mr^2 \sin^2 \theta \dot{\phi}$ y esto es naturalmente debido a que la fuerza gravitacional $\mathbf{F} \approx -mg\hat{\mathbf{z}}$, en una región pequeña de la superficie terrestre, no tiene componentes en el plano X-Y.

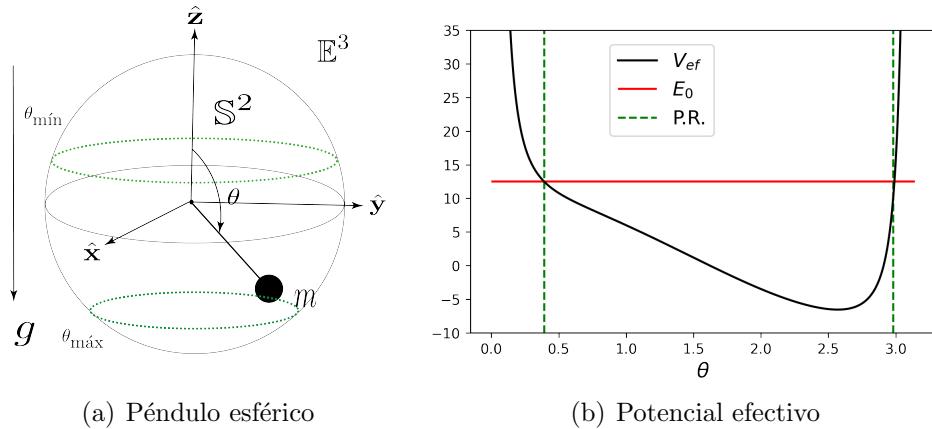


Figura 6.35: En esta figura presentamos el p\'endulo esf\'erico y el potencial efectivo Eq. (6.120), cuando la energ\'ia inicial es . Pusimos el cero de la energ\'ia en $z = 0$, raz\'on por la cual hay energ\'ias negativas en la gr\'afica del potencial. P.R. denota los puntos de retorno para la energ\'ia inicial particular dada E_0 , los cuales est\'an definidos por la intersecci\'on de la curva de potencial con la recta horizontal de la energ\'ia total inicial y definen la regi\'on donde es f\'isicamente posible el movimiento.

en donde p_ϕ es la componente del momento angular en la direcci\'on z , el cual mostramos en la figura 6.35, junto con la idea de lo que es un p\'endulo esf\'erico f\'isicamente. Las ecuaciones de Euler-Lagrange pueden ser integradas por el m\'etodo de Euler. Primero debemos escribir estas dos ecuaciones de segundo orden, como un sistema de 4 ecuaciones diferenciales de primer orden. Despu\'es definimos una partici\'on del tiempo $t_n = t_0 + ndt$ y las cantidades $\theta_n = \theta(t_n)$, $\phi_n = \phi(t_n)$, $\dot{\theta}_n = \dot{\theta}(t_n)$ y $\dot{\phi}_n = \dot{\phi}(t_n)$, entonces llegamos a la siguiente receta num\'erica:

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \dot{\theta}_n dt \quad (6.121)$$

$$\phi_{n+1} = \phi_n + \dot{\phi}_n dt \quad (6.122)$$

$$\dot{\theta}_{n+1} = \dot{\theta}_n + \sin \theta_n \cos \theta_n \dot{\phi}_n^2 dt + \frac{g}{r} \sin \theta_n dt \quad (6.123)$$

$$\dot{\phi}_{n+1} = \dot{\phi}_n - 2 \cot \theta_n \dot{\theta}_n \dot{\phi}_n dt \quad (6.124)$$

Dada una configuraci\'on inicial $[\theta_0, \phi_0, \dot{\theta}_0, \dot{\phi}_0]$, en $t = t_0$, podemos ir actualizando a cada paso la configuraci\'on del sistema⁹. Esta soluci\'on la mostramos en azul en las figuras 6.36 y 6.38, comparadas contra los resultados obtenidos con nuestro m\'etodo geom\'etrico. Tambi\'en utilizamos el m\'etodo de Runge-Kutta de cuarto orden[14, 113], ecuaciones Eq. (6.125a) y

⁹Como podemos apreciar del razonamiento anterior y del ejemplo que estamos abordando, los sistemas din\'amicos son un caso especial de los procesos Markovianos continuos, en los que las fluctuaciones son nulas.

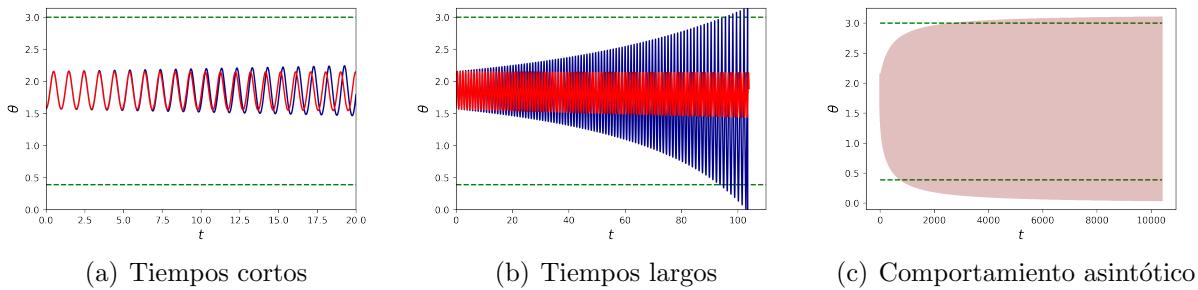


Figura 6.36: En esta figura comparamos la solución obtenida usando el método de Euler para integrar las ecuaciones de Euler-Lagrange asociadas al péndulo esférico, en color azul, contra las soluciones obtenidas con nuestro método geométrico en color rojo. Pocos pasos después el método de Euler explota, mientras que el algoritmo geométrico no explota y permanece en la región permitida $[\theta_{\min}, \theta_{\max}]$, mucho más tiempo. El tamaño de paso que se utilizó en estas simulaciones fue $dt = \log 2 \times 10^{-3}$.

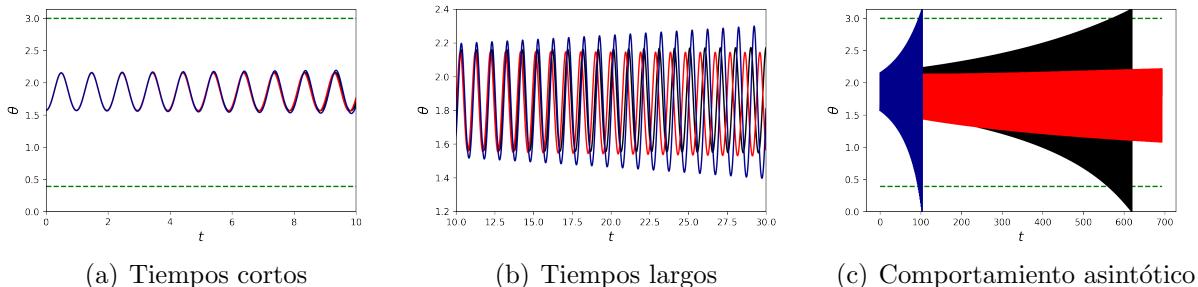


Figura 6.37: En esta figura comparamos la solución obtenida usando el método de Euler para integrar las ecuaciones de Euler-Lagrange asociadas al péndulo esférico, en color azul, contra las soluciones obtenidas con nuestro método geométrico en color rojo y junto con las soluciones usando el método de Runge-Kutta de orden 4 en negro. Al principio, los tres métodos coinciden, después el método de Euler se degrada primero, posteriormente el método de Runge-Kutta de orden 4 también explota y se sale de la región físicamente permitida, mientras que el algoritmo geométrico no explota y permanece en la región permitida $[\theta_{\min}, \theta_{\max}]$, mucho más tiempo. El tamaño de paso que se utilizó en estas simulaciones fue $dt = \log 2 \times 10^{-3}$.

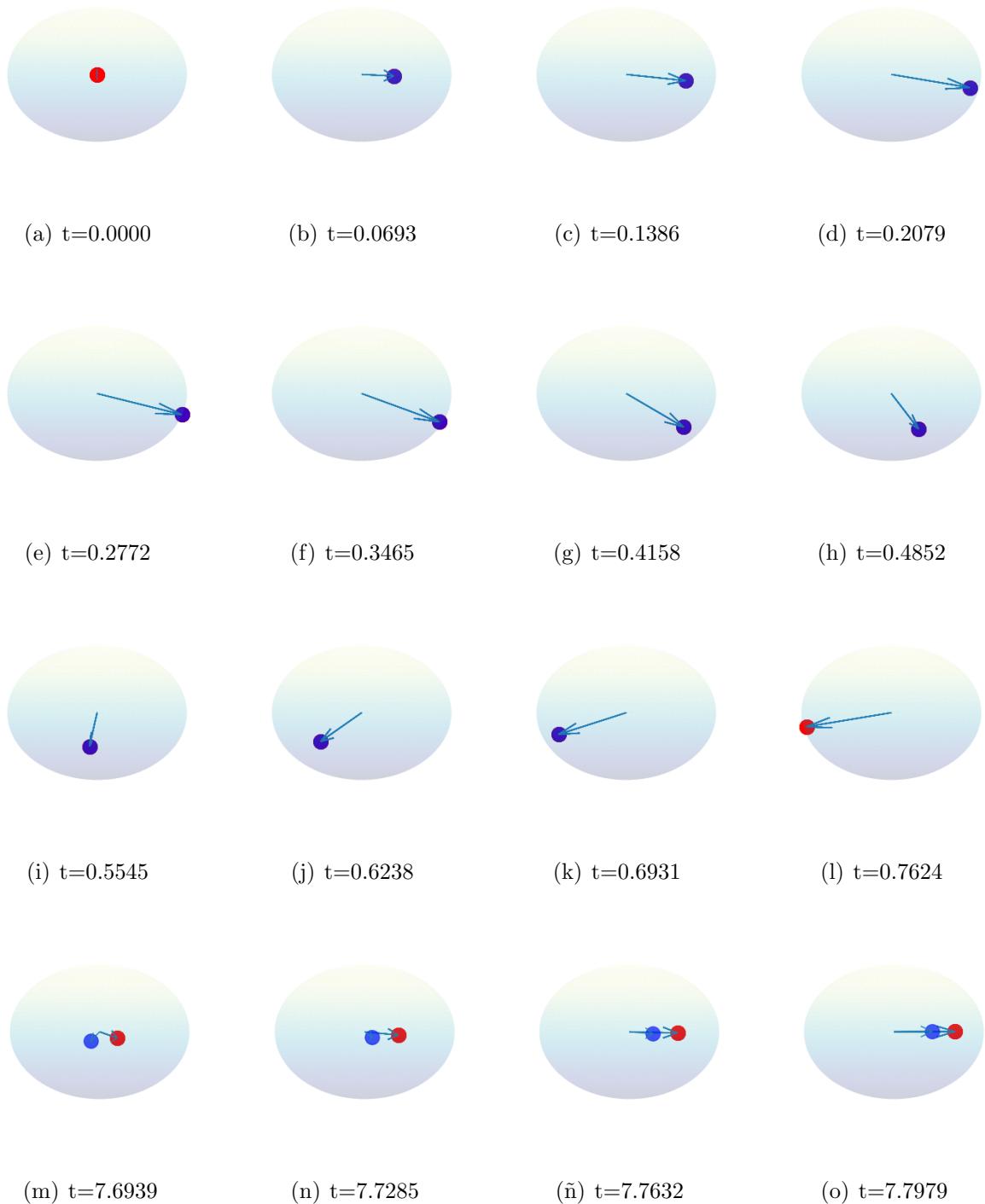


Figura 6.38: En esta serie presentamos la evolución temporal de dos péndulos esféricos, uno simulado con el método de Euler (azul) y el otro con nuestro método geométrico (rojo). Para tiempos cortos la congruencia es bastante buena; empero, para tiempos largos (últimas 4 imágenes) el método de Euler aplicado a las ecuaciones de Euler-Lagrange Eq. (6.118) explota, mientras que el método geométrico se degrada pero nunca explota.

Eq. (6.126a), para integrar las ecuaciones de Euler-Lagrange.

$$x_{n+1}^\alpha = x_n^\alpha + \frac{1}{2}(k_1^\alpha + k_2^\alpha) \quad (6.125a)$$

$$\dot{x}_{n+1}^\alpha = \dot{x}_n^\alpha + \frac{1}{2}(l_1^\alpha + l_2^\alpha) \quad (6.125b)$$

en donde $\alpha = \theta, \phi$ y k^α y l^α están dadas por

$$k_1^\alpha = h\dot{x}^\alpha(x^\alpha, \dot{x}^\alpha) \quad (6.126a)$$

$$l_1^\alpha = hf^\alpha(x^\alpha, \dot{x}^\alpha) \quad (6.126b)$$

$$k_2^\alpha = h(\dot{x}^\alpha + l_1^\alpha) \quad (6.126c)$$

$$l_2^\alpha = hf^\alpha(x^\alpha + k_1^\alpha, \dot{x}^\alpha + l_1^\alpha) \quad (6.126d)$$

La comparación de los tres métodos se muestra en la figura 6.37. Como puede apreciarse los tres métodos coinciden para tiempos cortos. Posteriormente, el método es el primero en “degradarse”, a continuación el método de Runge-Kutta de cuarto orden y, aunque el método geométrico que nosotros desarrollamos no genera valores infinitos, en un tiempo finito, tampoco podemos garantizar que sus soluciones son consistentes, debido a que al fin y al cabo es un método de primer orden. Las cotas para mantener controlado el error, se pueden estimar de la misma manera que en la sección 6.1.5.

Capítulo 7

Exploratorios

En este capítulo exploramos otra serie de escenarios, pero como los resultados analíticos de estos son aún más difíciles de obtener y su costo computacional es en general más elevado, su validez queda aún por sustentarse. Los exponemos aquí porque parecen todos muy razonables. Los casos abordados aquí son, campos externos que dependen explícitamente del tiempo, para los que ya no existen estados estacionarios, regiones inaccesibles para todas las partículas de los ensambles y al final sugerimos cómo adaptar los métodos numéricos para considerar colisiones elásticas con los obstáculos y dinámicas no locales en el tiempo; esto es, *procesos con memoria*.

7.1. Problemas con frontera

En esta sección generalizamos los métodos para empezar a incorporar obstáculos en la dinámica. Primero exponemos los resultados de analizar cómo varía el tiempo de relajación, o lo que es equivalente, el coeficiente de difusión efectivo que aparece en la fórmula de autocorrelación de las posiciones, conforme aumentamos la densidad de obstáculos con una distribución uniforme. Estos resultados están reportados en [60] y después de exponerlos proponemos generalizaciones a régimes subamortiguados. Los obstáculos cambian la *topología* de la esfera y matemáticamente se vuelve un problema mucho más complicado ya que las soluciones dependerán; naturalmente, de las condiciones a la frontera.

La manera de incorporar los obstáculos en la dinámica consiste básicamente en definir regiones prohibidas y en cada actualización es necesario hacer una partición de los arcos de geodésicas a lo largo de los cuales se desplazan las partículas del ensamble y verificar si alguno de estos puntos está dentro de una región prohibida. Si éste es el caso, nos regresamos a un punto anterior. El modelo físico de este tipo de interacción corresponde a un choque no elástico, ya que cada vez que una partícula se intenta introducir a una región prohibida ésta queda en la frontera y se anula su movimiento restante sobre la geodésica que intercepta el obstáculo.

En la siguiente sección sugerimos, sin entrar en demasiados detalles cómo tendrían que generalizarse los métodos si quisieramos contemplar, el otro caso extremo, colisiones elásticas.

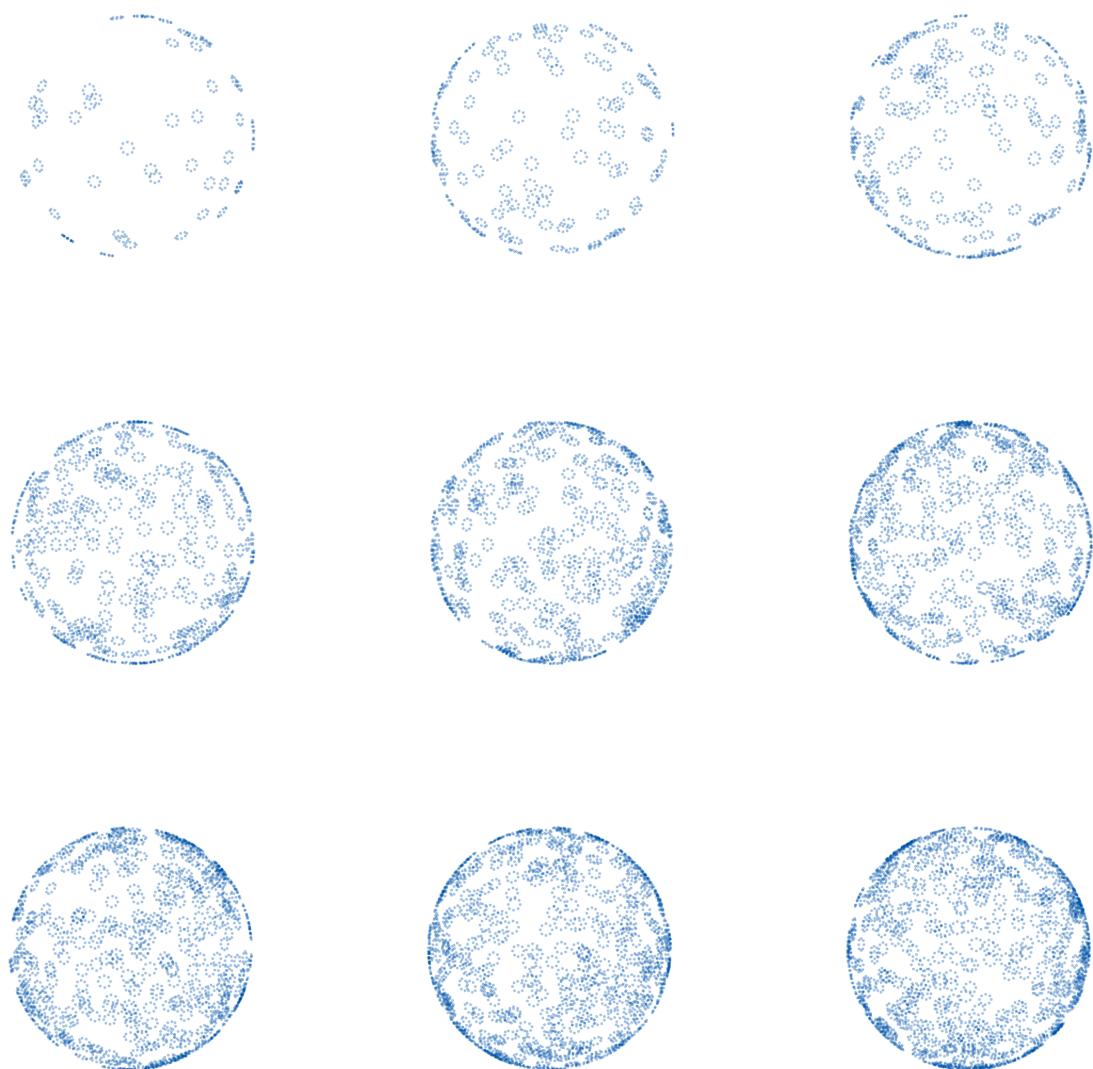


Figura 7.1: Secuencia de obstáculos (monotónica creciente); varios múltiplos de 50. Mostramos esta serie con la finalidad de apreciar cualitativamente cómo varían los tiempos de relajación, conforme se varía el número de obstáculos.

n	σ	D_{ef}/D_0	n	σ	D_{ef}/D_0
0	0.000000	1.000000	600	0.374922	0.270966
50	0.031243	0.719578	700	0.437409	0.277933
100	0.062487	0.943572	800	0.499896	0.176113
150	0.093730	0.639320	900	0.562383	0.149278
200	0.124974	0.727761	1000	0.624870	0.103226
250	0.156217	0.560032	1100	0.687357	0.125432
300	0.187461	0.589184	1200	0.749844	0.023718
400	0.249948	0.467274	1400	0.874818	0.041488
500	0.312435	0.365108			

Cuadro 7.1: En esta tabla presentamos los valores obtenidos en [60] para el coeficiente de difusión efectivo en función del número de obstáculos distribuidos de manera uniforme. Utilizamos ensambles de 500 partículas para sondar el comportamiento.

7.1.1. Obstáculos con distribución uniforme: límite sobreamortiguado

Los resultado obtenidos de variar la densidad superficial de obstáculos (figura 7.1) e inferir el coeficiente de difusión efectivo D_{ef} . Estos valores los presentamos en el cuadro 7.1. Como se puede apreciar en ellos, este coeficiente de difusión efectivo va disminuyéndose, y parece que lo hace exponencialmente en función de la densidad. Por ello, hicimos un ajuste lineal en escala semilogarítmica

$$D_{ef} = D_0 \exp [-\lambda \sigma]. \quad (7.1)$$

Encontramos que el valor característico para este decaimiento, según nuestros resultados numéricos es

$$\lambda = 3,819508. \quad (7.2)$$

De ahí, por ejemplo [49], podrímos inferir cuál es la densidad de estructuras que limitan el movimiento de algunos fosfolípidos de la membrana celular como PIP2

$$\sigma_{PIP2} = \frac{1}{\lambda} \log 5,4 \approx 0,441523. \quad (7.3)$$

Es natural pensar que este resultado es sólo una aproximación burda en dos sentidos. El primero es en relación a que los obstáculos que encuentran estos fosfolípidos no son sólo de un tipo, sino de muchos tipos diferentes, que además se mueven, y tienen geometrías diferentes que pueden variar, por lo tanto, este tamaño que hemos elegido sólo puede hacer alusión a un tamaño promedio. El segundo es en relación a que si al momento de generar estas distribuciones uniformes en la esfera podrían interceptarse y estaríamos contando dos veces la región de traslape. Podría acontecer con más de dos obstáculos, pero la probabilidad de que ocurra esto es aún más pequeña. Por lo tanto, también esta densidad σ es otro valor aproximado, así que el carácter de este análisis aunque parezca razonable, necesita una investigación más detallada de varios aspectos.

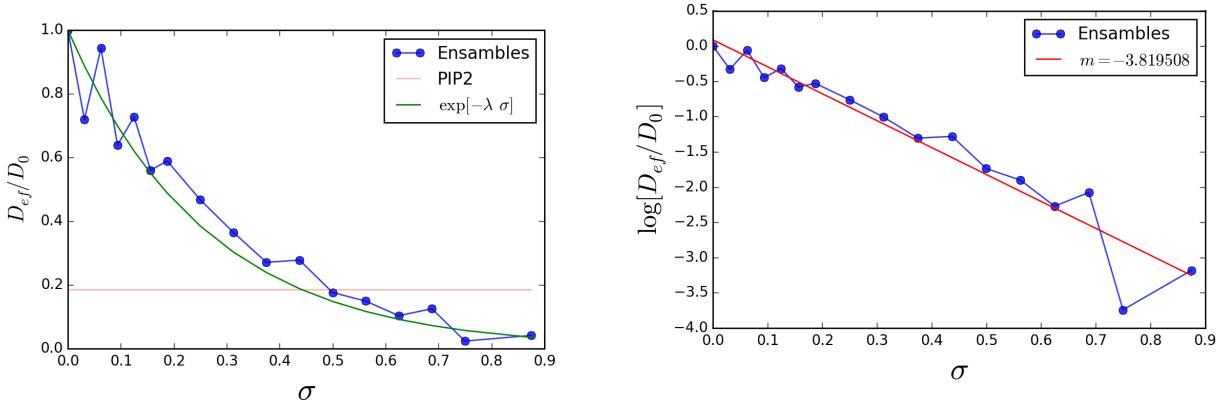


Figura 7.2: En esta gráfica presentamos la relación que hay entre el coeficiente de difusión efectivo D_{ef} , y la densidad superficial de obstáculos σ . Debido a que el comportamiento en (7.1.1) parece tipo exponencial, hemos hecho un ajuste lineal.

7.2. Billar en \mathbb{S}^2

En esta sección presentamos un algoritmo numérico para simular un billar en la esfera que se integra bien con los métodos anteriores; esto es, en el contexto el proceso de Kramers en la esfera dos dimensional. Los obstáculos que consideramos, al igual que la sección anterior, tienen simetría axial, alrededor del vector ubicado en su centro. Denotaremos por $\mathbf{r}_{\Omega_\epsilon}$ a este vector (ver imagen 7.3). De manera general Ω_ϵ denotará el conjunto de puntos sobre la esfera que definen al obstáculo y $\partial\Omega_\epsilon$ su frontera.

$$a = \hat{\mathbf{n}}_{\partial\Omega_\epsilon} \cdot \mathbf{v}_1, \quad (7.4)$$

en donde

$$\hat{\mathbf{n}}_{\partial\Omega_\epsilon} = \frac{(\mathbf{r}_{\Omega_\epsilon} \times \mathbf{r}_{pc}) \times \mathbf{r}_{pc}}{\|(\mathbf{r}_{\Omega_\epsilon} \times \mathbf{r}_{pc}) \times \mathbf{r}_{pc}\|}. \quad (7.5)$$

La proyección de este vector sobre el vector normal al espacio tangente

$$b = (\mathbf{r}_{pc} \times \hat{\mathbf{n}}_{\partial\Omega_\epsilon}) \cdot \hat{\mathbf{n}}_{\partial\Omega_\epsilon} \quad (7.6)$$

La reflexión de este vector con respecto el eje paralelo al vector $\mathbf{r}_{pc} \times \mathbf{n}_{\partial\Omega_\epsilon}$ está dada por

$$\mathbf{v}_2 = -[\mathbf{v}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}_{\partial\Omega_\epsilon}] \hat{\mathbf{n}}_{\partial\Omega_\epsilon} + [\mathbf{v}_1 \cdot \hat{\mathbf{T}}] \hat{\mathbf{T}}, \quad (7.7)$$

en donde

$$\hat{\mathbf{T}} = \frac{\mathbf{r}_{pc} \times \mathbf{n}_{\partial\Omega_\epsilon}}{\|\mathbf{r}_{pc} \times \mathbf{n}_{\partial\Omega_\epsilon}\|}. \quad (7.8)$$

Por lo tanto, la nueva posición está dada por la siguiente rotación

$$\mathbf{r}_f = \text{Rot}(\mathbf{r}_{pc} | \alpha | \mathbf{r}_{pc} \times \hat{\mathbf{T}}), \quad (7.9)$$

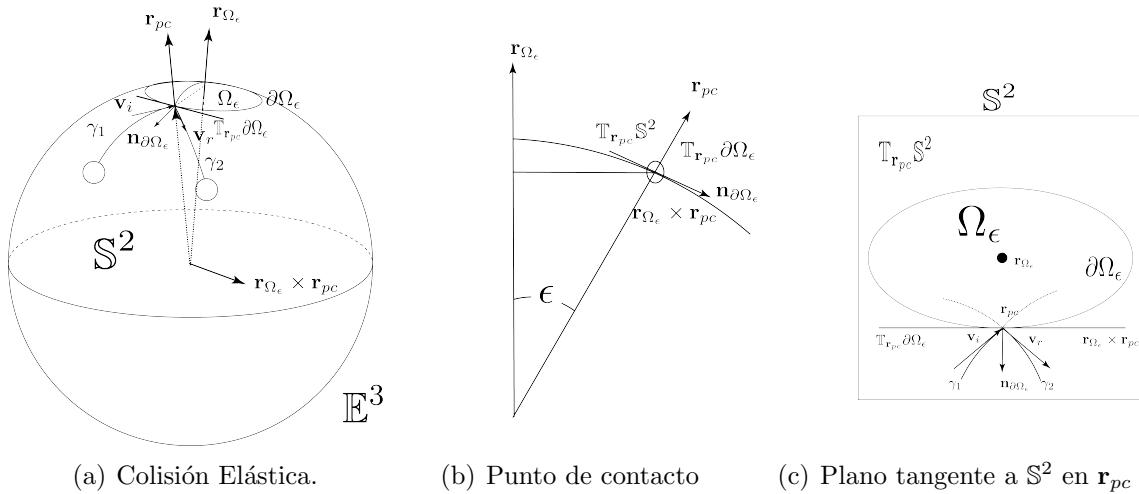


Figura 7.3: En esta imagen presentamos los elementos necesarios para construir el algoritmo que considera colisiones elásticas. Cuando parte del recorrido de una partícula del ensamble atraviesa o intercepta un obstáculo, este pedazo de geodésica tiene que ser re orientado a partir del punto de contacto, de tal manera que la nueva geodésica tenga un vector tangente que haga el mismo ángulo, con respecto la normal, que el ángulo de incidencia; esto es, reflejado con respecto a esta dirección normal a la frontera del obstáculo en el punto de contacto.

en donde

$$\alpha = \arccos [\mathbf{r}_{pc} \cdot \mathbf{r}'], \quad (7.10)$$

y \mathbf{r}' sería la posición final, si la trayectoria entre la posición inicial y la final no interceptara el obstáculo con centro en $\mathbf{r}_{\Omega_\epsilon}$. Esta receta de actualización es lo que produce una colisión elástica.

7.3. Problemas que dependen del tiempo en el límite sobreamortiguado

En esta sección presentamos algunos de los resultados obtenidos durante un trabajo previo [60] en el que se utilizó una versión primitiva del algoritmo numérico para simular difusión constreñida a la superficie de una esfera en presencia de capos externos que dependían explícitamente del tiempo. El acoplamiento entre esta interacción externa con las posiciones y la dinámica de las partículas se hizo en el régimen lineal de la teoría de respuesta. Lo cual no quiere decir que los métodos no se puedan extender a acoplamientos más complicados

Este campo externo armónico en el tiempo que tiene estructura figura 7.4, induce que el estado al que tiende conforme avanza el tiempo nuestro sistema, se ponga a oscilar; que lo conduzca, en lugar de volverse estacionario, figura 7.5. Naturalmente, en este caso no existe una solución al estado estacionario. Se dice que el proceso es “conducido” por el agente externo.



(a) $t=0.0000$ (b) $t=0.4000$ (c) $t=0.8000$ (d) $t=1.2000$



(e) $t=1.6000$ (f) $t=2.0000$ (g) $t=2.4000$ (h) $t=2.8000$



(i) $t=3.2000$ (j) $t=3.6000$ (k) $t=4.0000$ (l) $t=4.4000$



(m) $t=4.8000$ (n) $t=5.2000$ (ñ) $t=5.6000$ (o) $t=6.0000$

Figura 7.4: En esta serie presentamos la evolución temporal de un campo armónico en el tiempo, con simetría azimutal $U(\theta, t) = U_0 \cos \omega t \cos 8\theta$, con $\omega = 0,5$.

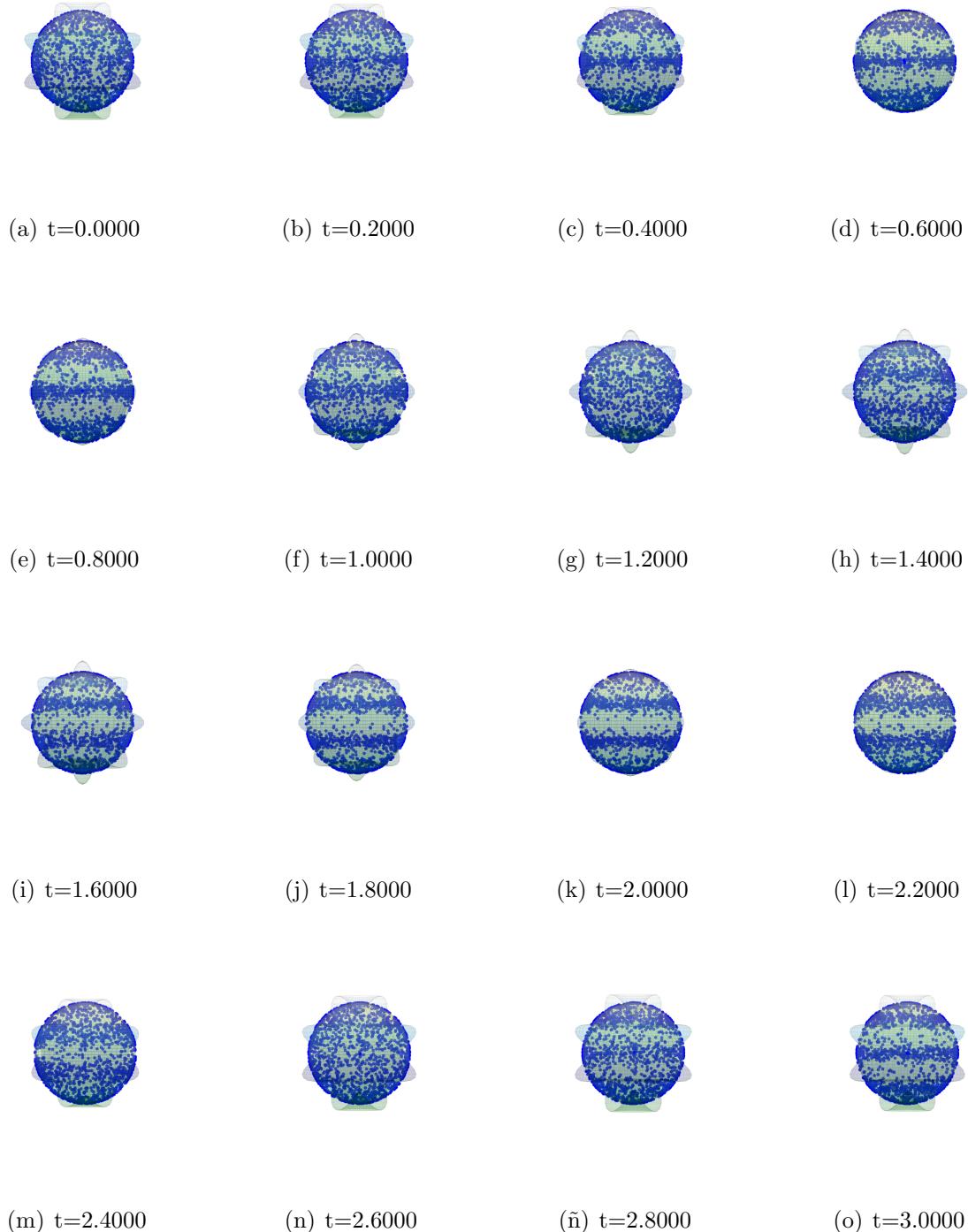


Figura 7.5: En esta serie presentamos la evolución temporal de un campo armónico en el tiempo, con simetría azimutal $U(\theta, t) = \sin \omega t \sin 8\theta$.

7.4. El proceso de Kramers: campo externo dependiente del espacio y del tiempo y presencia de obstáculos

En esta sección analizamos el proceso de Kramers cuando hay un campo externo que depende del tiempo y además hay una serie de obstáculos o regiones prohibidas en la superficie \mathbb{S}^2 . Nuevamente, cuando los valores de los parámetros son tales que podemos hablar del límite sobrearmortiguado o de alta fricción; para valores de γ grandes, los resultados deben ser congruentes con los diseñados exclusivamente para el límite sobrearmortiguado, en donde sólo nos centramos en la dinámica de las posiciones, dejando de lado la dinámica de las velocidades. Si el campo externo tiene estructura, que cambia en el tiempo, es natural que las configuraciones de las partículas cambien en el tiempo también, por supuesto, cuando la intensidad del campo externo, comparada con la de las fluctuaciones, es del mismo orden. Cuando una de estas domina, lo que se tiene es una dinámica gobernada por el término de mayor influencia. Cuando domina el campo externo, las partículas se concentran alrededor de los mínimos del potencial (en los más cercanos de donde inician), mientras que cuando el ruido predomina, el sistema se comporta como si no hubiese campo externo, y las partículas del ensamble se acaban distribuyendo de manera uniforme. Sin embargo, cuando los parámetros no son tales que podamos hablar del límite de alta fricción, la dinámica es cualitativamente diferente. A tiempos cortos el sistema se comporta como un sistema con una cierta inercia, las condiciones iniciales definen la primera parte de la evolución. Por supuesto, para tiempos largos el sistema se termina por relajar hasta que las velocidades tienen una distribución muy cercana a una distribución de Maxwell-Boltzmann, con magnitudes del orden de las fluctuaciones térmicas.

7.5. Procesos No Markovianos

En esta sección indicamos cómo es posible generalizar los métodos numéricos desarrollados hasta el momento para incorporar una dinámica no local en el tiempo análoga a las ecuaciones integro diferenciales de ciertos sistemas electrónicos. Con base en lo estudiado en las secciones 2.3 y 2.4, en donde vimos cómo a partir de la ecuación de Liouville, con el método de operadores de proyección, es posible obtener unas ecuaciones que toman la misma forma que las ecuaciones de Langevin y de Fokker-Planck, cuando se cumplen ciertas condiciones. Esencialmente que hay dos escalas de tiempo muy diferentes. Una en la que el baño térmico se actualiza y otra en el que la partícula Browniana lo hace. Ahí se vio que la fricción resulta de la convolución (un promedio “pesado”) con una función de tipo respuesta, con la variable dinámica, sumada sobre toda la historia de esta variable. El kernel o función de peso, era un objeto muy complicado de calcular explícitamente, ya que involucraba a los operadores de proyección, aplicados al operador de Liouville, compuestos con el operador expoensencial, lo cual a su vez definía lo que denominamos “fuerza estocástica” y que por lo tanto, el kernel de memoria era la función de autocorrelación de esta fuerza estocástica a dos tiempos distintos.

En esta sección damos las líneas de razonamiento y algunas expresiones para exportar estas nociones a cada espacio tangente en donde realizamos las actualizaciones del sistema.



Figura 7.6: Secuencia de tiempos para el proceso de Kramers cuando tenemos 8 obstáculos y un campo externo oscilante en el tiempo. Los parámetros utilizados en esta simulación fueron $dt = \log(2) \times 10^{-3}$, $T = 300$, $K_b/m = 9,3783$, $\gamma = 1000$ y $\lambda = 2\sqrt{2*D} \times 10^4$.



Figura 7.7: Continuación de la secuencia de tiempos para el proceso de Kramers cuando tenemos 8 obstáculos y un campo externo oscilante en el tiempo. Los parámetros utilizados en esta simulación fueron $dt = \log(2) \times 10^{-3}$, $T = 300$, $K_b/m = 9,3783$, $\gamma = 1000$ y $\lambda = 2\sqrt{2*D} \times 10^4$.

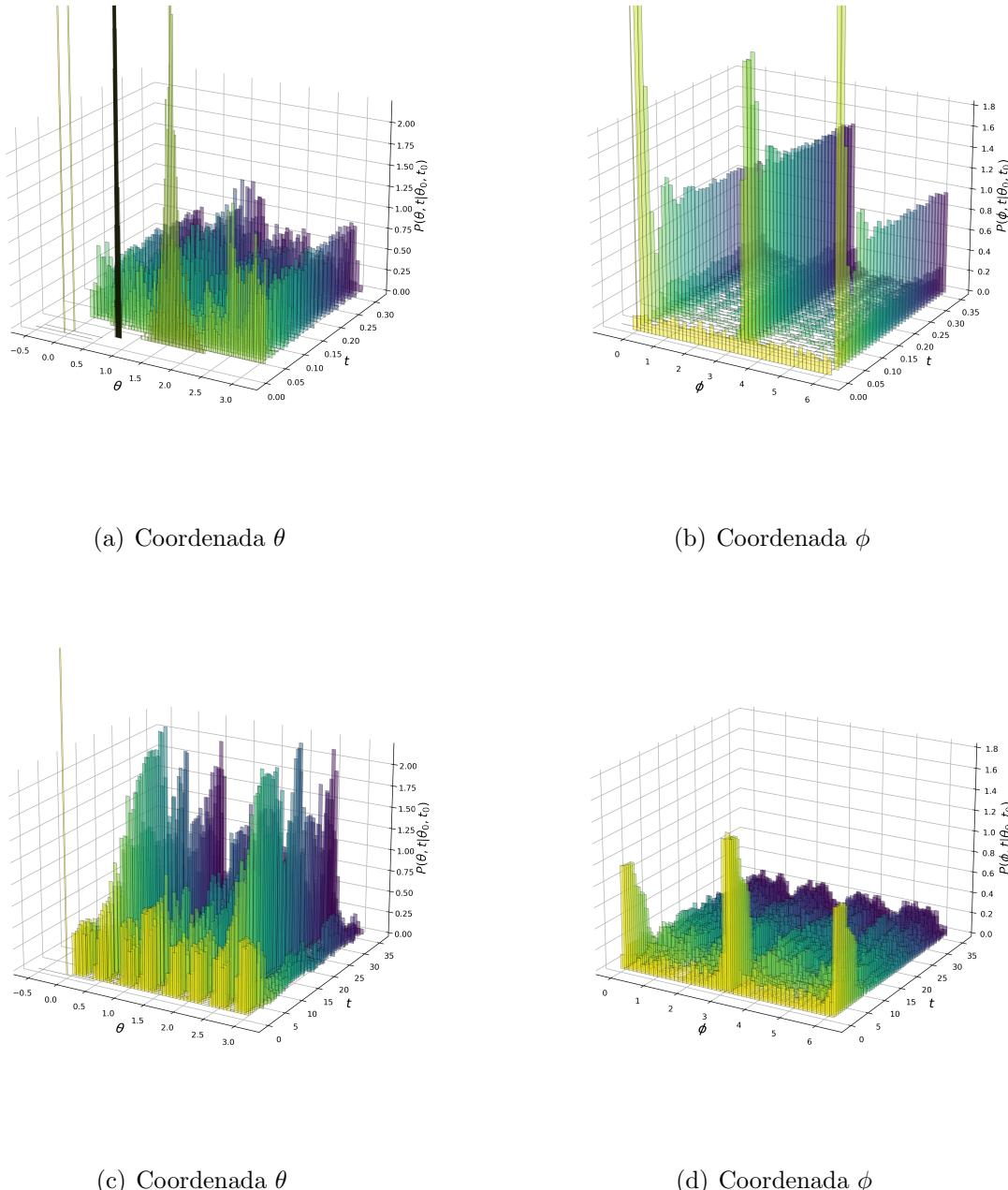


Figura 7.8: Histogramas para las coordenadas θ y ϕ del proceso de Kramers cuando hay un campo externo que depende del tiempo y hay 8 obstáculos o regiones prohibidas. Las imágenes de arriba (a) y (b) es para tiempos cortos, mientras que las de abajo (c) y (d) es la evolución completa. El tamaño del paso que se usó en estas simulaciones fue $dt = 10^{-2}$, la intensidad del campo $U_0 = 8000$, $K_b T/m^2 = 100$, y la velocidad inicial $\mathbf{v}_0 = 10\hat{\mathbf{x}}$.

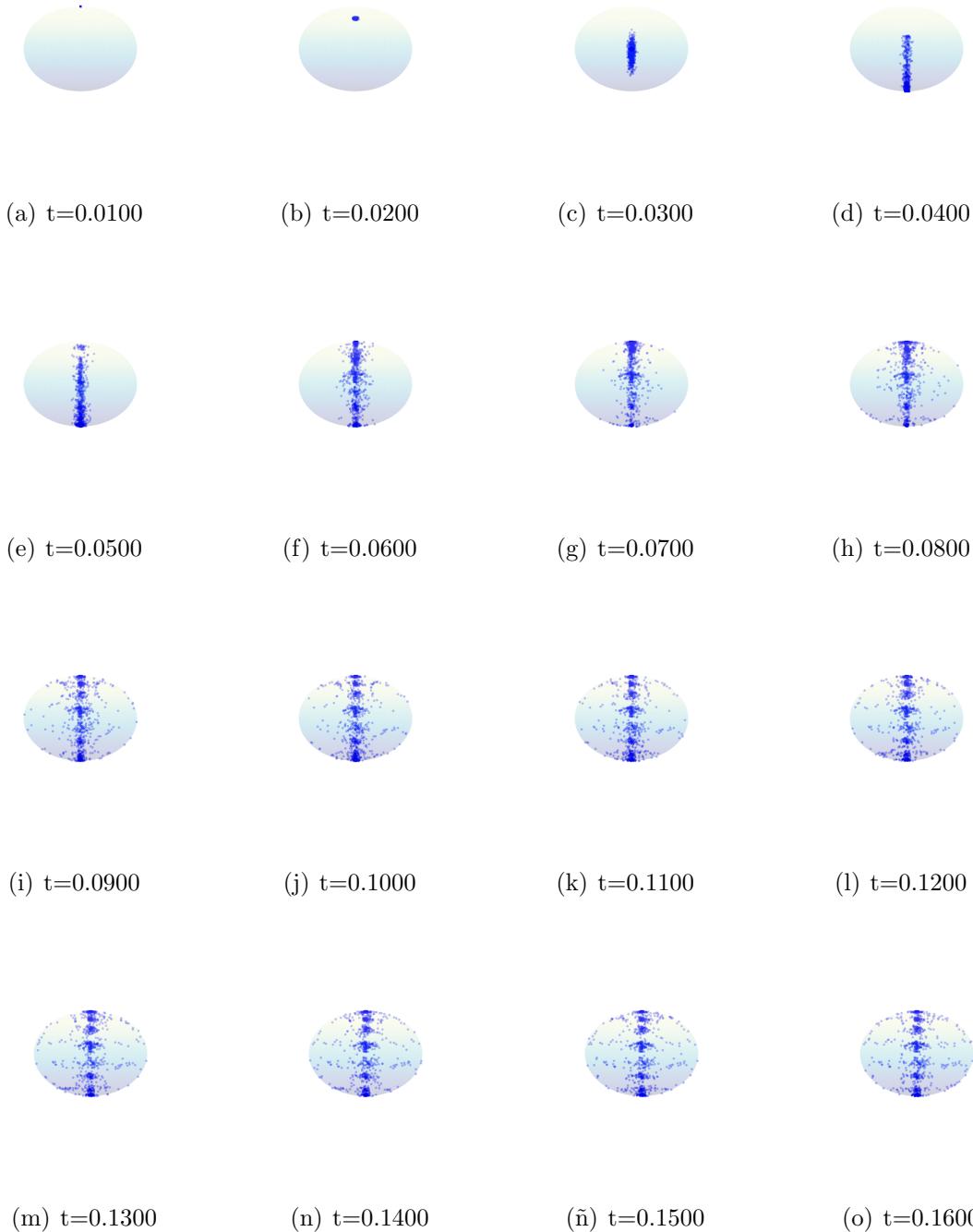


Figura 7.9: Secuencia de tiempos para el proceso de Kramers cuando tenemos 8 obstáculos y un campo externo oscilante en el tiempo en el régimen subamortiguado.

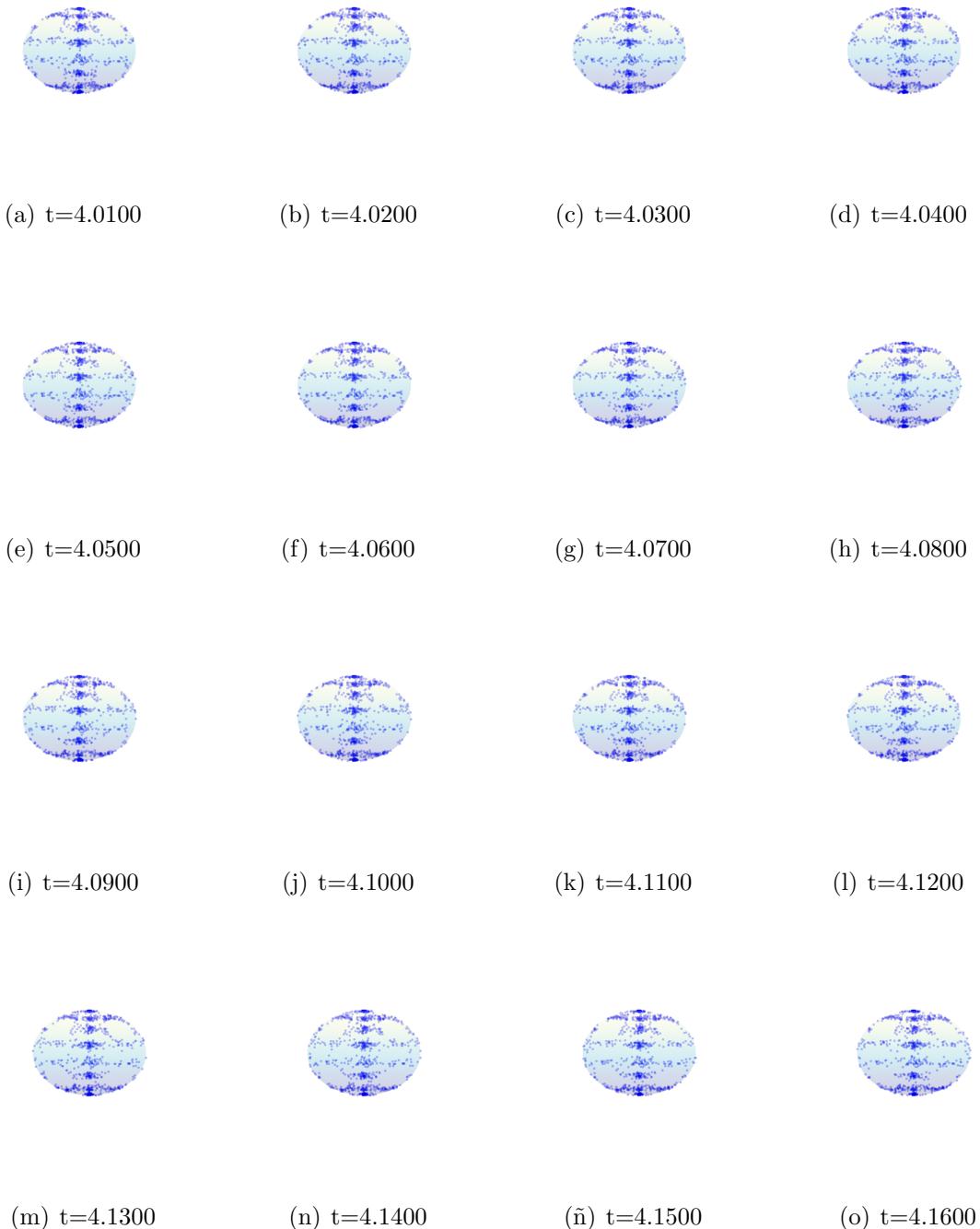


Figura 7.10: Secuencia de tiempos para el proceso de Kramers cuando tenemos 8 obstáculos y un campo externo oscilante en el tiempo en el régimen subamortiguado.

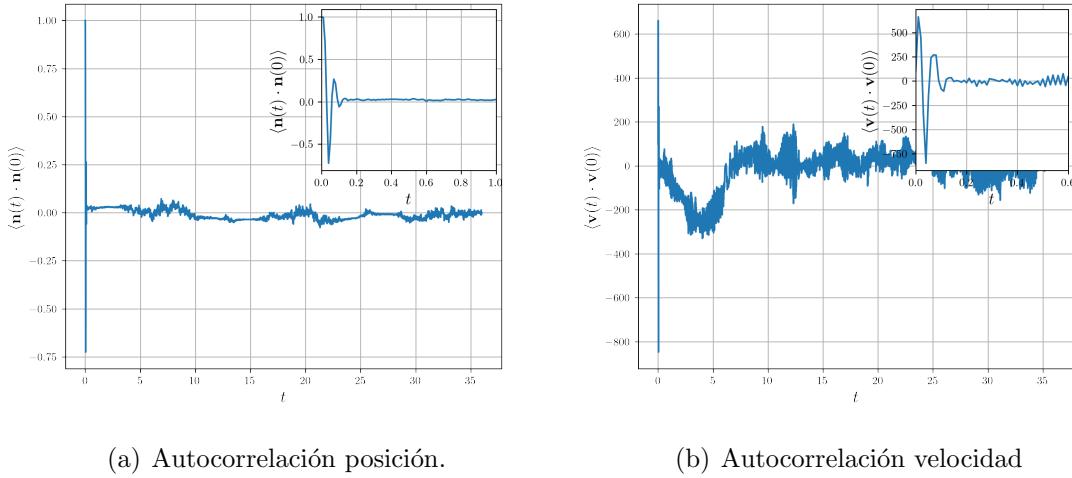


Figura 7.11: Funciones de autocorrelación para la posición y la velocidad, en el procesos de Kramers con un campo externo que depende del tiempo, hay 8 obstáculos en el régimen subamortiguado.

Para ello partimos del algoritmo numérico para el proceso de Kramers

$$\dot{\mathbf{r}}_{n+1} = \text{Rot}((\dot{\mathbf{r}}_n + \Delta \dot{\mathbf{r}}_n), |\dot{\mathbf{r}}_n| \Delta t, \hat{\mathbf{n}}_n) \in T_{\mathbf{r}_{n+1}} \mathbb{S}^2 \quad (7.11)$$

Sólo que ahora, el cambio en la velocidad está dado por

$$\Delta \dot{\mathbf{r}}_n = \mathbf{F}[\mathbf{r}_n, \dot{\mathbf{r}}_n, t_n; \lambda] + \mathbf{N}[0, 2KT\gamma r^2 m^{-2} \Delta t] + \sum_{i=1}^n K(t_n - t_i) \dot{\mathbf{r}}_i \in T_{\mathbf{r}_n} \mathbb{S}^2 \quad (7.12)$$

en donde K es un *kernel de memoria* que dependerá del medio del problema físico en concreto y los demás elementos son los mismos que aparecen en el algoritmo para el proceso de Kramers. Este kernel de memoria captura la dependencia no local en el tiempo que tiene la ley de evolución. Si consideramos por un momento que no hay fuerzas fluctuantes, estos kernels de memoria están asociados con ecuaciones integrodiferenciales. Por supuesto, si el sistema no tiene memoria, entonces estas ecuaciones deberían reducirse al proceso de Kramers. En la versión discreta, este kernel sería del tipo

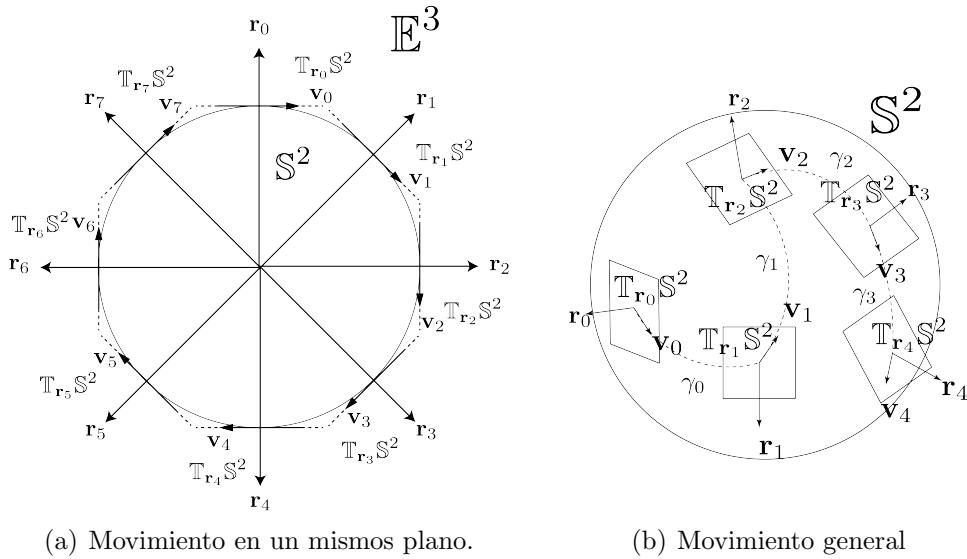
$$K(t_n - t_i) = -\gamma \delta_{ni} \quad (7.13)$$

Entonces el término de la convolución con este kernel se reduce a

$$\sum_{i=1}^n K(t_n - t_i) \dot{\mathbf{r}}_i = -\gamma \sum_{i=1}^n \delta_{ni} \dot{\mathbf{r}}_i = -\gamma \dot{\mathbf{r}}_n \quad (7.14)$$

esto es, el clásico término disipativo. Otros kernels de memoria podrían tener la siguiente forma

$$K(t_n - t_i) = -\gamma e^{-\kappa(t_n - t_i)}, \quad (7.15)$$



(a) Movimiento en un mismo plano.

(b) Movimiento general

Figura 7.12: Las velocidades $\mathbf{v}_k = \dot{\mathbf{r}}_k$ viven en espacios vectoriales diferentes $T_{\mathbf{r}_k}\mathbb{S}^2$, razón por la cual, en principio no pueden ser sumados o combinados. Al considerar *kernels de memoria* en la esfera dos dimensional \mathbb{S}^2 , es necesario tener esto en cuenta, aunque el algoritmo trabaje con elementos de \mathbb{R}^3 , en donde podríamos pensar que todas las velocidades pertenecen al mismo espacio vectorial.

O

$$K(t_n - t_i) = -\chi(t_n - t_i)^{-\alpha}, \quad (7.16)$$

en donde κ y χ tienen las dimensiones de inverso de tiempo y de masa veces tiempo, elevado a la potencia $\alpha - 1$ respectivamente. Este último tiene correlaciones que decaen más lentamente que las exponenciales.

Aquí es importante señalar que la fricción se considera como el resultado de la convolución de la velocidad con este kernel de memoria, en el intervalo de tiempo $[t_0, t]$ y que en el caso de dinámicas cuyo espacio de configuración es una variedad diferencial, no necesariamente algún \mathbb{R}^n , las velocidades en distintos tiempos *no* viven en el *mismo* espacio vectorial, por lo que en principio no pueden ser *sumadas* en un sentido estricto. Para hacer más evidente esto, consideremos una evolución de un sistema que la dos esfera que está restringido a moverse a un círculo de radio máximo como en la figura 7.12. Lo que sugerimos es trasladar, paralelamente ($\nabla_{\mathbf{A}}\mathbf{A} = 0$) y en cada paso k , toda la historia de las velocidades $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_{k-1}\}$ al plano tangente instantáneo $T_{\mathbf{r}_k}\mathbb{S}^2$ y con esta historia trasladada realizar la convolución con el kernel de memoria. La ventaja de trabajar en la esfera es que estos transportes paralelos se reducen trivialmente a rotaciones.

Capítulo 8

Conclusiones y perspectivas

Los métodos numéricos desarrollados en este trabajo son equivalentes a integradores numéricos de ecuaciones diferenciales estocásticas. Los métodos son de primer orden y tienen las modificaciones necesarias para restringir el movimiento a \mathbb{S}^2 . Usan información de vectores en \mathbb{R}^3 para actualizar tanto las posiciones de cada una de las partículas como para actualizar sus respectivas velocidades. Sin embargo, para analizar y validar los resultados numéricos fue necesario utilizar coordenadas esféricas porque sólo en estas ecuaciones se pueden producir soluciones analíticas. Esto nos llevó a estudiar la ley de transformación de la ecuación de Fokker-Planck. La primera pregunta que tuvimos que responder es ¿cuál es la ecuación que le corresponde a *nuestro* método numérico con la cual lo podamos evaluar? Ésta no es una pregunta trivial porque la ecuación de Fokker-Planck *no* es una ecuación invariante bajo transformaciones arbitrarias de coordenadas. En este trabajo demostramos que la versión *covariante*, de la ecuación de Fokker-Planck, se reduce a la *misma* ecuación que obtenemos si hacemos una transformación de coordenadas (de cartesianas a esféricas), suponemos que se vale aplicar la regla de la cadena y multiplicamos por el determinante de la métrica. Nuestro método numérico es consistente precisamente con esta ecuación de Fokker-Planck. La ventaja de esta coincidencia es que *no* tenemos que preocuparnos por el cálculo estocástico (Itô, Stratonovich, etc.), que hay que elegir para integrar las ecuaciones cuando hay *ruido multiplicativo*, mismo que aparece porque el tensor de difusión; en estas coordenadas, depende explícitamente del proceso. Esta consistencia es entre la ecuación de Langevin y la correspondiente ecuación de Fokker-Planck, no entre un fenómeno físico y un modelo matemático (cualquiera que se haya elegido).

El algoritmo presentado en este trabajo es más eficiente, desde el punto de vista computacional, que todos aquellos métodos que implementan matrices de rotación o incluso que aquellos que implementan *rotaciones vectoriales*. Otra ventaja que tiene el algoritmo numérico es que las soluciones que genera son *estables* con respecto a las coordenadas con las que trabaja, a diferencia de las soluciones numéricas generadas con el método de Euler y de Runge-Kutta (de orden cuatro), aplicados a las ecuaciones diferenciales en coordenadas esféricas.

Debido a que la manera de evaluar el algoritmo numérico fue generar una muestra estadística P_N de las N trayectorias, la convergencia de estas soluciones conforme $N \rightarrow \infty$, se denomina *convergencia débil*. En los casos en los que se cuenta con una solución analítica para las ecuaciones diferenciales estocásticas, ésta se utiliza para comparar con los resul-

tados numéricos y en esos casos se hace alusión a una *convergencia fuerte*. Como para las ecuaciones diferenciales estocásticas que describen este problema no existen estas soluciones analíticas, no es posible hacer este tipo de análisis de manera directa. Por otro lado, no existen referencias (o no hemos podido identificarlas), que describan de manera cuantitativa lo que ocurre en el régimen de transición entre la configuración inicial y el estado estacionario (o metaestable), en este caso particular de la esfera \mathbb{S}^2 cuando hay fuerzas externas. Es en este sentido que este trabajo contribuye a la literatura. La evaluación del método numérico en esta región de transición tiene que ser evaluada usando necesariamente *otra* aproximación, ya que no existen soluciones exactas (analíticas cerradas).

El algoritmo numérico es consistente en los siguientes casos límite:

- Alta fricción libre de fuerzas \implies difusión libre.
- Fricción nula libre de fuerzas \implies geodésicas.
- Tiempos largos fuerzas presentes \implies mecánica estadística de equilibrio.
- Fricción nula fuerzas presentes \implies ecuaciones Euler-Lagrange.

Si el algoritmo funciona bien, como sugieren nuestros resultados, tanto en el contexto de la difusión libre, como en la convergencia hacia a los estados estacionarios cuando hay campos externos, es natural suponer que si estos dos elementos se consideran de manera simultánea la descripción sea consistente con la descrita por la ecuación de Kramers, siendo la ecuación de Smoluchowski un caso particular (en el límite de alta fricción).

Con respecto a lo artificial que pudiesen ser algunos de los potenciales empleados en la validación del algoritmo, nos parece relevante señalar un par de aspectos. El potencial proporcional a $Y_1^0(\theta, \phi)$ es uno de los campos más utilizados en la física experimental y usado como un *parámetro de control*. Siempre que se hable de un *campo uniforme*, ya sea magnético, eléctrico o gravitacional, la manifestación de éste en la superficie de la esfera \mathbb{S}^2 , tendrá la misma estructura matemática (será proporcional a $\sin \theta$) y éste puede ser utilizado para deducir otras propiedades de las partículas como su carga efectiva. Además, si tuviésemos otro tipo de potencial en $C^2(\mathbb{S}^2)$, éste podría ser expandido en una serie de armónicos esféricos que convergería uniformemente, por lo que la derivada de este potencial estaría dada por la serie que resulta de derivar término a término. Los términos que más contribuyen son los primeros de la serie, precisamente los que se han estudiado en este trabajo.

Los métodos desarrollados en este trabajo pueden servir para caracterizar subestructuras en el ambiente donde la difusión está ocurriendo. Esto es usando las desviaciones de ciertos parámetros que caracterizan la difusión con respecto los valores que asumen en la difusión libre. Por ejemplo, si encontramos cuál es la relación entre el coeficiente de difusión efectivo, las auto correlaciones, los primeros momentos, etc., con el número, el tamaño y la distribución de obstáculos en el ambiente, podríamos caracterizar estas subestructuras usando simplemente la estadística de las partículas explorando el espacio al que tienen acceso.

Se ha planteado que se pueden caracterizar algunos parámetros (como el desplazamiento cuadrático medio), relacionados con la difusión en función de ciertos invariantes topológicos (como el número de agujeros que le hacemos a la esfera). Quizá esto *no* sea posible, porque

los parámetros estadísticos estándares, como el desplazamiento medio cuadrático, dependen explícitamente de la métrica; y por ende, del tamaño de los obstáculos, no sólo del número que haya. Una manera de ver esto es que si ponemos dos obstáculos diametralmente opuestos, ambos de una apertura ligeramente menor que $\pi/2$, el espacio accesible para las partículas sería aproximadamente el círculo S^1 y el comportamiento de la difusión en esta variedad no es tan solo cuantitativamente diferente si no también cualitativamente diferente al de S^2 . Sin embargo, si estos dos mismos obstáculos fuesen nuevamente diametralmente opuestos pero de una apertura casi despreciable, el problema sería equivalente a la difusión libre en la esfera de dos dimensiones S^2 . Es por esto que la difusión depende íntimamente de la métrica, que es una estructura adicional en la variedad diferencial.

Es posible generalizar los resultados presentados en este trabajo a otras variedades diferenciales de dimensión dos. En el tratamiento clásico de la curvatura (considerando las superficies como subconjuntos dos dimensionales de E^3), se analiza el comportamiento de la curva que resulta de interceptar un plano que contiene al vector normal a una superficie en un punto y al vector tangente en ese mismo punto, con la superficie y analizar la curvatura de la curva contenida en ese plano, en ese punto. Esto es, por definición, la curvatura de la superficie en esa dirección particular. La manera de sintetizar la curvatura de esa curva localmente es construyendo el círculo osculador; el inverso del radio de este círculo es una medida de la curvatura de esa curva. Entonces, si calculamos el plano tangente a la superficie en ese punto, hacemos los cálculos de las fuerzas en ese plano tangente, normalizamos con una tangente la amplitud del desplazamiento, y proyectamos hacia este círculo, dejando la partícula donde este rayo intercepta a la superficie: éste sería una extensión, de nuestros métodos numéricos, que podría aplicarse al, por ejemplo, *paraboloide hiperbólico*. En este contexto, una hipótesis que podría ser abordada con los métodos numéricos es si la curvatura negativa aumenta la velocidad con la que crece el desplazamiento medio cuadrático (geodésico) como sugieren algunos resultados.

Una idea importante que emerge de la variedad de problemas abordados en este trabajo es que un mismo escenario matemático; en este caso, el *haz tangente* a la esfera dos dimensional ($T\mathbb{S}^2 = \bigcup_{q \in \mathbb{S}^2} T_q \mathbb{S}^2$), no cambia mientras la restricción holonómica no cambie, inclusive si modificamos el *modelo físico* para las interacciones. Por ejemplo, en este trabajo hicimos la suposición de que la fuerza disipativa era lineal en la velocidad; pero esto no es necesariamente cierto para velocidades grandes; supusimos que el proceso era sin memoria o markoviano, lo cual tampoco es válido en general, como por ejemplo para algunas membranas celulares; acoplamos la interacción externa linealmente, pero si la intensidad de ésta es demasiado grande la aproximación lineal tiene que ser complementada con más términos. Sin embargo, el problema *geométrico* es el mismo en todos estos casos así como en sus respectivas extensiones. Más aún, si las interacciones externas dependen explícitamente en el tiempo, el escenario matemático ($T\mathbb{S}^2 \times \mathbb{R}$) donde ocurren las cosas sigue siendo esencialmente idéntico (para cada tiempo $t \in \mathbb{R}$ tenemos $T\mathbb{S}^2 \cup \{t\}$). La manera de actualizar las posiciones y las velocidades ocurre en el mismo ente matemático, independientemente de que cambiemos dramáticamente el modelo físico y sorprendentemente éste fue resuelto desde el problema más sencillo que es la difusión libre en el régimen sobre amortiguado. La conclusión es que ideas geométricas simples pueden resultar mucho más poderosas de lo que al principio pudiésemos pensar. No fue necesario introducir matemáticas más abstractas o sofisticadas al usar ideas geométricas suficientemente robustas y unos cuantos razonamientos heurísticos e intuitivos.

Parte IV

Apéndices

Apéndice A

Posibles parametrizaciones de \mathbb{S}^2

En esta sección damos la forma explícita que toman los jacobianos de las transformaciones de coordenadas entre esféricas y cartesianas con la finalidad de hacer referencia a ellas cuando queremos describir ciertos objetos en alguno de los dos sistemas de coordenadas y explotar la sencillez con la que alguno de estos puede ser expresado si se utilizan unas u otras. Primero, definimos \mathbb{S}^2 .

La superficie de la esfera está definida como el espacio geométrico tal que

$$\mathbb{S}^2 = \{\mathbf{p} \in \mathbb{E}^3 \mid p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 = 1\}. \quad (\text{A.1})$$

Aunque no es indispensable un espacio de mayor dimensión para definir un variedad diferencial (\mathbb{E}^3), en este caso ayuda mucho pensar que se vive en un subconjunto de \mathbb{E}^3 y que en éste no tenemos ambigüedad en pasar de cada punto $\mathbf{p} \in \mathbb{S}^2$ a su correspondiente punto en \mathbb{E}^3 . Uno pudiese pensar que esto no es la mejor manera para hacerlo ya que las coordenadas naturales para \mathbb{E}^3 que son las generadas por la base canónica $\{\hat{\mathbf{x}}(\mathbf{p}), \hat{\mathbf{y}}(\mathbf{p}), \hat{\mathbf{z}}(\mathbf{p})\}$ para cada $\mathbf{p} \in \mathbb{E}^3$, no explota la simetría del problema, que en este caso es esférica, con lo cual se reduciría el número de grados de libertad y al mismo tiempo el número de ecuaciones diferenciales a resolver.

A.0.1. Coordenadas Esféricas

En las coordenadas esféricas un punto \mathbf{p} del espacio euclídeo puede ser descrito por la terna

$$\mathbf{p} = (r(\mathbf{p}), \theta(\mathbf{p}), \phi(\mathbf{p})) \in \mathbb{S}^2 \subset \mathbb{E}^3 \quad (\text{A.2})$$

La relación que guardan estas coordenadas con las euclídeas es bien conocida

$$\begin{aligned} r(x, y, z) &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \theta(x, y, z) &= \arccos \left[\frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right] \\ \phi(x, y, z) &= \arctan \left[\frac{y}{x} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

y la inversa de ésta

$$\begin{aligned} x(r, \theta, \phi) &= r \sin \theta \cos \phi \\ y(r, \theta, \phi) &= r \sin \theta \sin \phi \\ z(r, \theta, \phi) &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Con jacobianos

$$\Lambda_i^\eta(x, y, z) = \begin{bmatrix} \partial r / \partial x & \partial r / \partial y & \partial r / \partial z \\ \partial \theta / \partial x & \partial \theta / \partial y & \partial \theta / \partial z \\ \partial \phi / \partial x & \partial \phi / \partial y & \partial \phi / \partial z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{x}{\sqrt{(x^2+y^2+z^2)}} & \frac{y}{\sqrt{(x^2+y^2+z^2)}} & \frac{z}{\sqrt{(x^2+y^2+z^2)}} \\ \frac{xz}{\sqrt{x^2+y^2}(x^2+y^2+z^2)} & \frac{yz}{\sqrt{x^2+y^2}(x^2+y^2+z^2)} & -\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{x^2+y^2+z^2} \\ -\frac{y}{x^2+y^2} & \frac{x}{x^2+y^2} & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.5})$$

$$= \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \\ \frac{\cos \theta \cos \phi}{r} & \frac{\cos \theta \sin \phi}{r} & -\frac{\sin \theta}{r} \\ -\frac{\sin \phi}{r \sin \theta} & \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} & 0 \end{bmatrix} = \Lambda_i^\eta(r, \theta, \phi) \quad (\text{A.6})$$

y

$$\Lambda_\eta^i(r, \theta, \phi) = \begin{bmatrix} \partial x / \partial r & \partial x / \partial \theta & \partial x / \partial \phi \\ \partial y / \partial r & \partial y / \partial \theta & \partial y / \partial \phi \\ \partial z / \partial r & \partial z / \partial \theta & \partial z / \partial \phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \phi & r \cos \theta \cos \phi & -r \sin \theta \sin \phi \\ \sin \theta \sin \phi & r \cos \theta \sin \phi & r \sin \theta \cos \phi \\ \cos \theta & -r \sin \theta & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.7})$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} & \frac{xz}{\sqrt{x^2+y^2}} & y \\ \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} & \frac{yz}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}\sqrt{x^2+y^2}} & x \\ \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} & -\sqrt{x^2+y^2} & 0 \end{bmatrix} = \Lambda_\eta^i(x, y, z) \quad (\text{A.8})$$

respectivamente. Estas relaciones, junto con la forma que toma la métrica en estas coordenadas $g_{\alpha\beta} = \langle \mathbf{e}_\alpha, \mathbf{e}_\beta \rangle$, en donde los vectores generados por las coordenadas esféricas están dados por

$$\mathbf{e}_r = \Lambda_r^\alpha \mathbf{e}_\alpha = \sin \theta \cos \phi \mathbf{e}_x + \sin \theta \sin \phi \mathbf{e}_y + \cos \theta \mathbf{e}_z \quad (\text{A.9})$$

$$\mathbf{e}_\theta = \Lambda_\theta^\alpha \mathbf{e}_\alpha = r \cos \theta \cos \phi \mathbf{e}_x + r \cos \theta \sin \phi \mathbf{e}_y - r \sin \theta \mathbf{e}_z \quad (\text{A.10})$$

$$\mathbf{e}_\phi = \Lambda_\phi^\alpha \mathbf{e}_\alpha = -r \sin \theta \cos \phi \mathbf{e}_x + r \sin \theta \sin \phi \mathbf{e}_y \quad (\text{A.11})$$

por lo tanto, la métrica definida a través del producto escalar euclíadiano tiene las siguientes componentes

$$(g)_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2 \theta \end{bmatrix} \quad (\text{A.12})$$

y para la inversa

$$(g^{-1})_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & r^{-2} \sin^{-2} \theta \end{bmatrix} \quad (\text{A.13})$$

o en términos de uno formas $g = g_{\alpha\beta} dx^\alpha \otimes dx^\beta$. La forma explícita que toma la métricas en estas coordenadas para la esfera expresa el hecho de que el ambiente no es isotrópico; no es lo mismo moverse en la dirección en donde ϕ cambia, para todas las θ en $[0, \pi]$.

Estas relaciones nos permiten describir las interacciones externas en ambos sistemas de coordenadas. Si la fuerza que consideramos es derivable de una función potencial escalar $U(\mathbf{p})$, que por el momento pensemos que no depende del tiempo y eventualmente veremos qué tenemos que hacer para generalizarlo, entonces el campo externo lo podremos escribir como

$$F = g^{ij} \frac{\partial U}{\partial x^j} \mathbf{e}_i = g^{ij} U_{,j} \mathbf{e}_i \quad (\text{A.14})$$

donde las componentes $U_{,j}$ son las componentes de la uno forma que define el diferencial de la función $U(\mathbf{p})$. El vector gradiente es aquel que está en correspondencia con esta uno forma en función de la métrica. Ahora, si hacemos una transformación de coordenadas, estas componentes se transforman de acuerdo a leyes bien establecidas

$$U_{,\bar{\alpha}} = \Lambda_{\bar{\alpha}}^\beta U_{,\beta} \quad (\text{A.15})$$

que es la misma ley de transformación para los vectores de la base

$$\mathbf{e}_{\bar{\alpha}} = \Lambda_{\bar{\alpha}}^\beta \mathbf{e}_\beta \quad (\text{A.16})$$

inducida por las coordenadas cartesianas. Por otro lado, las uno formas se transforman como las componentes de los vectores de desplazamiento

$$dx^{\bar{\alpha}} = \Lambda_{\bar{\alpha}}^\beta dx^\beta \quad (\text{A.17})$$

La gran ventaja de las coordenadas esféricas es que $r(\mathbf{p}) = 1$ para todo \mathbf{p} en \mathbb{S}^2 por lo que el número de grados de libertad en esta descripción se ha reducido a dos; sin embargo, las coordenadas esféricas son singulares en dos puntos $\theta = 0$ y $\theta = \pi$ en los cuales la transformación no es invertible, porque no es uno a uno.

Algunas identidades representativas para las velocidades generalizadas 1

$$\dot{r} = 0 \quad (\text{A.18})$$

$$\dot{\theta} = -\frac{\dot{z}}{\sqrt{x^2 + y^2}} \quad (\text{A.19})$$

$$\dot{\phi} = \pm \left[\frac{\|v\|^2}{x^2 + y^2} - \frac{(x^2 + y^2 + z^2)}{(x^2 + y^2)^2} \dot{z} \right]^{1/2} \quad (\text{A.20})$$

Algunas identidades representativas para los factores de escala

$$\frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{xz}{\sqrt{x^2+y^2}} \frac{1}{x^2+y^2+z^2} = \frac{\cos\theta \cos\phi}{r} \quad (\text{A.21})$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial y} = \frac{yz}{\sqrt{x^2+y^2}} \frac{1}{x^2+y^2+z^2} = \frac{\cos\theta \sin\phi}{r} \quad (\text{A.22})$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial z} = \frac{-\sqrt{x^2+y^2}}{x^2+y^2+z^2} = \frac{-\sin\theta}{r} \quad (\text{A.23})$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial x} = -\frac{y}{x^2+y^2} = -\frac{\sin\phi}{r \sin\theta} \quad (\text{A.24})$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{x}{x^2+y^2} = \frac{\cos\phi}{r \sin\theta} \quad (\text{A.25})$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial z} = 0 \quad (\text{A.26})$$

$$(d\theta, d\theta) = \sum_{k=1}^3 \left[\frac{\partial\theta}{\partial\xi_k} \right]^2 = \left[\frac{\partial\theta}{\partial x} \right]^2 + \left[\frac{\partial\theta}{\partial y} \right]^2 + \left[\frac{\partial\theta}{\partial z} \right]^2 = \frac{1}{r^2} \quad (\text{A.27})$$

$$(d\phi, d\phi) = \sum_{k=1}^3 \left[\frac{\partial\phi}{\partial\xi_k} \right]^2 = \left[\frac{\partial\phi}{\partial x} \right]^2 + \left[\frac{\partial\phi}{\partial y} \right]^2 + \left[\frac{\partial\phi}{\partial z} \right]^2 = \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \quad (\text{A.28})$$

$$\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2}(x^2+y^2+z^2)} \left\{ \frac{y^2}{x^2+y^2} - \frac{x^2}{x^2+y^2+z^2} \right\} \quad (\text{A.29})$$

$$\frac{\partial^2\theta}{\partial y^2} = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2}(x^2+y^2+z^2)} \left\{ \frac{x^2}{x^2+y^2} - \frac{y^2}{x^2+y^2+z^2} \right\} \quad (\text{A.30})$$

$$\frac{\partial^2\theta}{\partial z^2} = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2}(x^2+y^2+z^2)} \left\{ \frac{x^2+y^2}{x^2+y^2+z^2} \right\} \quad (\text{A.31})$$

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} = \frac{2yx}{(x^2+y^2)^2} = \frac{2\sin\phi \cos\phi}{r^2 \sin^2\theta} \quad (\text{A.32})$$

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} = -\frac{2xy}{(x^2+y^2)^2} = -\frac{2\sin\phi \cos\phi}{r^2 \sin^2\theta} \quad (\text{A.33})$$

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2} = 0 \quad (\text{A.34})$$

$$\nabla_{\mathbf{x}}^2\theta = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2\theta}{\partial\xi_k^2} = \frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\theta}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\theta}{\partial z^2} = \frac{z}{\sqrt{x^2+y^2}(x^2+y^2+z^2)} = \frac{\cot\theta}{r^2} \quad (\text{A.35})$$

$$\nabla_{\mathbf{x}}^2\phi = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial^2\phi}{\partial\xi_k^2} = \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2} = 0 \quad (\text{A.36})$$

Algunas identidades representativas para las velocidades generalizadas 2

$$\frac{\partial \dot{\theta}}{\partial x} = -\frac{x\dot{z}}{(x^2 + y^2)^{3/2}} = \frac{\cos \phi}{r}\dot{\theta} \quad (\text{A.37})$$

$$\frac{\partial \dot{\theta}}{\partial y} = -\frac{y\dot{z}}{(x^2 + y^2)^{3/2}} = \frac{\sin \phi}{r}\dot{\theta} \quad (\text{A.38})$$

$$\frac{\partial \dot{\theta}}{\partial z} = 0 \quad (\text{A.39})$$

$$\frac{\partial \dot{\theta}}{\partial \dot{x}} = 0 \quad (\text{A.40})$$

$$\frac{\partial \dot{\theta}}{\partial \dot{y}} = 0 \quad (\text{A.41})$$

$$\frac{\partial \dot{\theta}}{\partial \dot{z}} = -\frac{1}{(x^2 + y^2)^{1/2}} = -\frac{1}{r \sin \theta} \quad (\text{A.42})$$

$$\frac{\partial \dot{\phi}}{\partial x} = \mp x \left[\frac{\|v\|^2}{x^2 + y^2} - \frac{(x^2 + y^2 + z^2)}{(x^2 + y^2)^2} \dot{z} \right]^{-1/2} \left\{ \frac{\|v\|^2}{(x^2 + y^2)^2} + \right. \quad (\text{A.43})$$

$$\left. + \dot{z} \left[\frac{1}{(x^2 + y^2)^2} - \frac{2(x^2 + y^2 + z^2)}{(x^2 + y^2)^3} \right] \right\} \quad (\text{A.44})$$

$$\frac{\partial \dot{\phi}}{\partial y} = \mp y \left[\frac{\|v\|^2}{x^2 + y^2} - \frac{(x^2 + y^2 + z^2)}{(x^2 + y^2)^2} \dot{z} \right]^{-1/2} \left\{ \frac{\|v\|^2}{(x^2 + y^2)^2} + \right. \quad (\text{A.45})$$

$$\left. + \dot{z} \left[\frac{1}{(x^2 + y^2)^2} - \frac{2(x^2 + y^2 + z^2)}{(x^2 + y^2)^3} \right] \right\} \quad (\text{A.46})$$

$$\frac{\partial \dot{\phi}}{\partial z} = \mp \left[\frac{\|v\|^2}{x^2 + y^2} - \frac{(x^2 + y^2 + z^2)}{(x^2 + y^2)^2} \dot{z} \right]^{-1/2} \left\{ \frac{z\dot{z}}{(x^2 + y^2)^2} \right\} \quad (\text{A.47})$$

$$\frac{\partial \dot{\phi}}{\partial \dot{x}} = \pm \left[\frac{\|v\|^2}{x^2 + y^2} - \frac{(x^2 + y^2 + z^2)}{(x^2 + y^2)^2} \dot{z} \right]^{-1/2} \left\{ \frac{\dot{x}}{(x^2 + y^2)} \right\} \quad (\text{A.48})$$

$$\frac{\partial \dot{\phi}}{\partial \dot{y}} = \pm \left[\frac{\|v\|^2}{x^2 + y^2} - \frac{(x^2 + y^2 + z^2)}{(x^2 + y^2)^2} \dot{z} \right]^{-1/2} \left\{ \frac{\dot{y}}{(x^2 + y^2)} \right\} \quad (\text{A.49})$$

$$\frac{\partial \dot{\phi}}{\partial \dot{z}} = \pm \left[\frac{\|v\|^2}{x^2 + y^2} - \frac{(x^2 + y^2 + z^2)}{(x^2 + y^2)^2} \dot{z} \right]^{-1/2} \left\{ \frac{2\dot{z}}{(x^2 + y^2)} - \frac{(x^2 + y^2 + z^2)}{(x^2 + y^2)^2} \dot{z} \right\} \quad (\text{A.50})$$

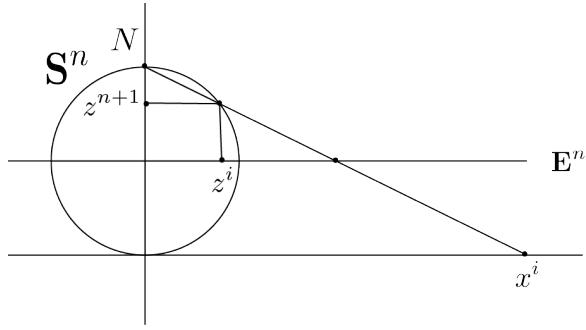


Figura A.1: Proyección estereográfica entre los puntos de una esfera \mathbf{S}^n y \mathbf{E}^n . En el contexto particular de este trabajo $n=2$.

A.0.2. Proyección Estereográfica

Pensando en economizar en las cartas necesarias para definir los estados del sistema, otras “coordenadas” que se nos pudiesen ocurrir son las coordenadas que resultan de la proyección estereográfica. Ya que para cubrir la esfera son necesarias sólo dos cartas [134]

$$U_1 = \mathbf{S}^n \setminus \{0, 0, \dots, 1\} \quad (\text{A.51})$$

con componentes dados por

$$x(z^1, \dots, z^{n+1}) = [x^1(z^1, \dots, z^{n+1}), \dots, x^n(z^1, \dots, z^{n+1})] \quad (\text{A.52})$$

$$= \left[\frac{2z^1}{1 - z^{n+1}}, \dots, \frac{2z^n}{1 - z^{n+1}} \right] \quad (\text{A.53})$$

y con la segunda carta

$$U_2 = \mathbf{S}^n \setminus \{0, 0, \dots, -1\} \quad (\text{A.54})$$

y coordenadas dadas por

$$y(z^1, \dots, z^{n+1}) = [y^1(z^1, \dots, z^{n+1}), \dots, y^n(z^1, \dots, z^{n+1})] \quad (\text{A.55})$$

$$= \left[\frac{2z^1}{1 + z^{n+1}}, \dots, \frac{2z^n}{1 + z^{n+1}} \right] \quad (\text{A.56})$$

Un sólo punto es el que uno se queda sin poder cubrir en ambos casos, pero sólo por eso: necesitamos de otra carta. Además, esto no es estrictamente un cambio de coordenadas porque aunque las z 's parametrizan a las x 's e y 's hay $n+1$ de las primeras y sólo n de las segundas; no se tiene un difeomorfismo en estricto sentido. Algunas de las identidades que facilitan invertirlas

$$1 = \sum_{\alpha=1}^{n+1} z^\alpha z^\alpha = \sum_{\alpha=1}^n \frac{1}{4} x^i x^i (1 - z^{n+1})^2 + z^{n+1} z^{n+1} \quad (\text{A.57})$$

de donde se sigue

$$z^{n+1} = \frac{\frac{1}{4} \sum_{i=1}^n x^i x^i - 1}{\frac{1}{4} \sum_{i=1}^n x^i x^i + 1} \quad (\text{A.58})$$

y

$$z^i = \frac{x^i}{1 + \frac{1}{4} \sum_{j=1}^n x^j x^j} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (\text{A.59})$$

Los elementos del jacobiano dicen

$$\frac{\partial z^j}{\partial x^k} = \frac{\delta_{jk}}{1 + \frac{1}{4} \sum_{j=1}^n x^j x^j} - \frac{x^j x^k}{(1 + \frac{1}{4} \sum_{j=1}^n x^j x^j)^2} \quad (\text{A.60})$$

y para z^{n+1}

$$\frac{\partial z^{n+1}}{\partial x^k} = \frac{x^k}{(1 + \frac{1}{4} \sum_{j=1}^n x^j x^j)^2} \quad (\text{A.61})$$

$$y^k = \frac{4x^k}{\sum_{i=1}^n x^i x^i} \quad (\text{A.62})$$

las cuales tienen una singularidad en el origen. El jacobiano asociado a la relación entre coordenadas

$$\frac{\partial y^k}{\partial x^j} = \frac{4\delta_{jk}}{\sum_{i=1}^n x^i x^i} - \frac{8x^j x^k}{[\sum_{i=1}^n x^i x^i]^2} \quad (\text{A.63})$$

$$\sum_{\alpha=1}^{n+1} dz^\alpha dz^\alpha = \left[\delta_{kl} \frac{\partial z^k}{\partial x^i} \frac{\partial z^l}{\partial x^j} + \frac{\partial z^{n+1}}{\partial x^i} \frac{\partial z^{n+1}}{\partial x^j} \right] dx^i dx^j \quad (\text{A.64})$$

Se tiene un problema nuevamente de no poder invertir la transformación en ese punto; el polo norte o sur dependiendo de la carta ver figura A.1. De ésta misma no es difícil inferir que son necesarias al menos dos cartas para el atlas construido con este tipo de coordenadas; pero, dos son suficientes y eso es una ventaja. Sin embargo, siguen apareciendo todas las coordenadas de \mathbf{E}^n , lo cual a su vez implica que habrá n ecuaciones diferenciales; en general acopladas, que resolver.

A.0.3. Otra alternativa para parametrizar la esfera

En esta sección damos una serie de definiciones de geometría diferencial clásica; de superficies en \mathbb{R}^3 , con la finalidad de entender cómo se puede parametrizar la esfera de manera consistente como un conjunto bidimensional, tal que localmente, cada vecindad de un punto en la esfera se parezca a una vecindad de un punto del plano.

Definición 4. Un parche regular $\mathbf{x} : D \rightarrow \mathbb{R}^3$ es un mapeo regular uno a uno de un conjunto abierto D de \mathbb{R}^2 en \mathbb{R}^3 .

Definición 5. Una superficie en \mathbb{R}^3 es un subconjunto M de \mathbb{R}^3 tal que para cada punto \mathbf{p} de M existe un parche propio en M cuya imagen contiene una vecindad de \mathbf{p} en M .

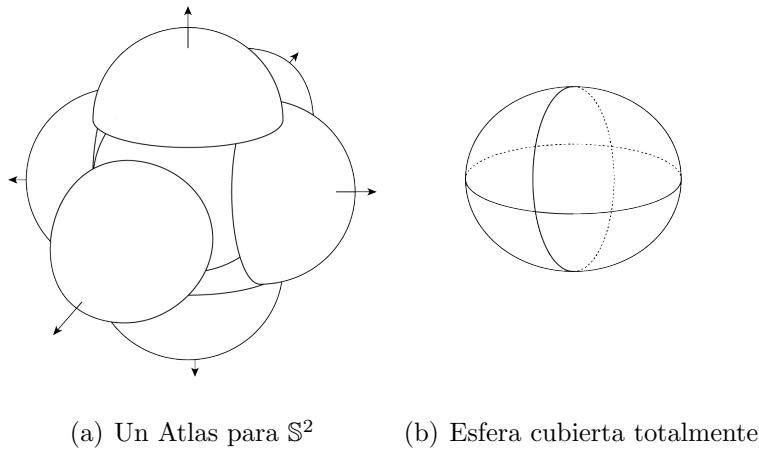


Figura A.2: En esta figura mostramos cómo son necesarias 6 cartas para cubrir la esfera \mathbb{S}^2 . Como las cartas están constituidas por una pareja (U_α, ϕ_α) de un abierto y un homeomorfismo; biyección con inversa continua: los cascarones de arriba y abajo dejan todo el meridiano sin cubrir, para poder cubrir éste usamos los dos cascarones de la izquierda y de la derecha, pero éstos dejan dos puntos de este meridiano, y necesitamos los dos cascarones de adelante y atrás para cubrir estos dos puntos.

Una manera de parametrizar la esfera de tal manera que no tengamos singularidades que se nos pudiese antojar es la siguiente representación que se muestra en la imagen A.2 y se explica con más detalles en [121] o en [18]. Sin embargo, necesitamos 6 cartas al menos para que podamos cubrir toda la variedad. Damos un ejemplo para una vecindad del polo norte. Proyectamos los puntos del cascarón en el plano (x, y) y a éste lo podemos poner en correspondencia uno a uno con \mathbb{R}^2 .

$$(p1, p2, p3) \rightarrow (p1, p2, 0) \leftrightarrow (p1, p2) \quad (\text{A.65})$$

$$\mathbf{x}(u, v) = (u, v, \sqrt{1 - u^2 - v^2}) \quad (\text{A.66})$$

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial u} & \frac{\partial v}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial u} \\ \frac{\partial u}{\partial v} & \frac{\partial v}{\partial v} & \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{\partial u}{\partial v} & \frac{\partial v}{\partial v} & \frac{\partial f}{\partial v} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \frac{\partial f}{\partial u} \\ 0 & 1 & \frac{\partial f}{\partial v} \end{bmatrix} \quad (\text{A.67})$$

Como los renglones de esta matriz son linealmente independientes, el rango de esta matriz es 2 para toda pareja de puntos (u, v) . El parche es regular, porque la inversa

$$\mathbf{x}^{-1}(p1, p2, p3) = (p1, p2) \quad (\text{A.68})$$

claramente es continua.

La manera de soslayar este problema consiste en hacer una migración de carta $(\phi, U) \rightarrow (\psi, V)$ en donde $U \cap V \neq \emptyset$ en los casos en que la posición que alguna de las partículas en el ensamble esté muy cerca de estos puntos y en este nuevo sistema de coordenadas nada extraño acontece; las singularidades, algunos infinitos, se deben a las coordenadas utilizadas exclusivamente, no tienen ningún origen físico.

Apéndice B

Un teorema de Riemann

En esta sección demostramos, sin demasiado rigor, por qué podemos hacer que la métrica de los espacios curvos suaves, parezca euclíadiana (o la del espacio de Minkowski en relatividad general), en la vecindad de todo punto. Riemann [134] presenta estos argumentos en su examen de candidatura del doctorado.

Supongamos que en algunas coordenadas $\{x^\alpha\}$ la métrica no es $\delta_{\alpha\beta}$ en el punto de interés.

Teorema B.0.1 (Teorema Relatividad General). Si la métrica no se ve como la euclíadiana en un punto particular \mathbf{x}_0 de la *variedad diferencial* \mathbb{M} , podemos hacer un cambio de coordenadas $x^{\mu'} = x^{\mu'}(x^\alpha)$ tal que en una vecindad alrededor de ese punto sea aproximadamente euclíadiana, siendo las diferencias de segundo orden con respecto a la distancia a \mathbf{x}_0 .

Demostración. Expresemos las matrices de transformación como su expansión de Taylor de segundo orden alrededor del punto \mathbf{x}_0

$$\begin{aligned}\Lambda_{\mu'}^\alpha(\mathbf{x}) &= \Lambda_{\mu'}^\alpha(\mathbf{x}_0) + (x^{\gamma'} - x_0^{\gamma'})\Lambda_{\mu',\gamma'}^\alpha(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2}(x^{\gamma'} - x_0^{\gamma'})(x^{\lambda'} - x_0^{\lambda'})\Lambda_{\mu',\gamma'\lambda'}^\alpha(\mathbf{x}_0) + o(||\mathbf{x} - \mathbf{x}_0||^2) \\ \Lambda_{\nu'}^\alpha(\mathbf{x}) &= \Lambda_{\nu'}^\alpha(\mathbf{x}_0) + (x^{\theta'} - x_0^{\theta'})\Lambda_{\nu',\theta'}^\alpha(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2}(x^{\theta'} - x_0^{\theta'})(x^{\epsilon'} - x_0^{\epsilon'})\Lambda_{\nu',\theta'\epsilon'}^\alpha(\mathbf{x}_0) + o(||\mathbf{x} - \mathbf{x}_0||^2) \\ g_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) &= g_{\alpha\beta}(\mathbf{x}_0) + (x^{\gamma'} - x_0^{\gamma'})g_{\alpha\beta,\gamma'} + \frac{1}{2}(x^{\gamma'} - x_0^{\gamma'})(x^{\lambda'} - x_0^{\lambda'})g_{\alpha\beta,\gamma'\lambda'} + o(||\mathbf{x} - \mathbf{x}_0||^2)\end{aligned}$$

Sustituyendo las tres expansiones anteriores en la ley de transformación de un tensor covariante de orden dos; para la métrica

$$\begin{aligned}g_{\mu'\nu'}(\mathbf{x}) &= \Lambda_{\mu'}^\alpha\Lambda_{\nu'}^\beta g_{\alpha\beta} \Big|_{\mathbf{x}_0} + (x^{\gamma'} - x_0^{\gamma'}) \left[(\Lambda_{\mu'}^\alpha\Lambda_{\nu',\gamma'}^\beta + \Lambda_{\mu',\gamma'}^\alpha\Lambda_{\nu'}^\beta)g_{\alpha\beta} + \Lambda_{\mu'}^\alpha\Lambda_{\nu',\theta'}^\beta g_{\alpha\beta,\gamma'} \right]_{\mathbf{x}_0} + \\ &+ \frac{1}{2}(x^{\gamma'} - x_0^{\gamma'})(x^{\theta'} - x_0^{\theta'}) \left[(\Lambda_{\mu'}^\alpha\Lambda_{\nu',\gamma'\theta'}^\beta + \Lambda_{\mu',\gamma'}^\alpha\Lambda_{\nu',\theta'}^\beta)g_{\alpha\beta} + \right. \\ &\quad \left. + \Lambda_{\mu',\gamma'\theta'}^\alpha\Lambda_{\nu'}^\beta g_{\alpha\beta} + \Lambda_{\mu'}^\alpha\Lambda_{\nu',\gamma'}^\beta g_{\alpha\beta,\theta'} + \Lambda_{\mu',\gamma'}^\alpha\Lambda_{\nu'}^\beta g_{\alpha\beta,\theta'} + \Lambda_{\mu'}^\alpha\Lambda_{\nu'}^\beta g_{\alpha\beta,\gamma'\theta'} \right]_{\mathbf{x}_0} + o(||\mathbf{x} - \mathbf{x}_0||^2)\end{aligned}$$

Podemos observar que para una transformación arbitraria tenemos n^2 números en Λ (en 3 dimensiones 9) a nuestra disposición para hacer que $g_{\alpha\beta}$ en \mathbf{x}_0 que tiene sólo $n(n+1)/2$ (en 3 dimensiones son 6) sea $\delta_{\alpha\beta}$. Por otro lado $\Lambda_{\beta,\gamma}^\alpha$ tiene $n^3 - n^2(n-1)/2$ términos independientes; mientras que $g_{\alpha\beta,\gamma}$ tiene $n(n(n+1)/2)$, justo los necesarios para que hagamos cero todos los

términos que tienen primeras derivadas de la métrica $g_{\alpha\beta,\gamma'}$; todos los Christoffels. Por otro lado $g_{\alpha\beta,\mu\nu}$ tiene $[n(n+1)/2]^2$ términos independientes mientras que $\Lambda_{\mu,\nu\lambda}^\alpha$ tiene $n[n(n+1)(n+2)/3!]$, razón por la cual no podemos anular todos estos y un espacio curvo será caracterizado por los mismos. Entonces

$$g_{\mu'\nu'} = \delta_{\mu'\nu'} + o(||\mathbf{x} - \mathbf{x}_0||^2)$$

□

La conclusión más importante de este teorema es que las leyes de la física, y en nuestro caso particular, las recetas de actualización que operan en los espacios tangentes $T_{\mathbf{x}_0}\mathbb{S}^2$ no contendrán a la curvatura de manera explícita. Ésta sólo se manifestará globalmente; no localmente.

Apéndice C

Algunos resultados en \mathbb{S}^2

Los resultados a continuación pueden encontrarse en [7]. Empecemos definiendo la notación y algunos objetos centrales en la descripción de fenómenos en la esfera. Sea \mathbf{x} un elemento de \mathbb{R}^d , en donde d denotara la dimensión del espacio

$$\mathbf{x}_{(d)} = \mathbf{x}_{(d-1)} + x_d \mathbf{e}_d \quad (\text{C.1})$$

en donde

$$\mathbf{e}_1 = (1, 0, \dots, 0)^T, \dots, \mathbf{e}_d = (0, 0, \dots, 0, 1)^T \quad (\text{C.2})$$

es la base canónica para \mathbb{R}^d .

$$\mathbb{S}^{d-1} := \{\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d : |\boldsymbol{\xi}| = 1\}. \quad (\text{C.3})$$

Para cualquier $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, tenemos $\mathbf{x} = |\mathbf{x}| \boldsymbol{\xi}$ con $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{S}^{d-1}$.

Usaremos dV^d para el elemento de volumen diferencial en d dimensiones y a $d\mathbf{S}^{d-1}$ para el elemento de superficie de $d-1$ dimensiones en la esfera unitaria \mathbb{S}^{d-1} . Para $d \geq 3$, denotamos para los elementos $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}_{(d)} \in \mathbb{S}^{d-1}$

$$\boldsymbol{\xi}_{(d)} = t \mathbf{e}_d + \sqrt{1-t^2} \boldsymbol{\xi}_{(d-1)}, \quad t \in [-1, 1], \quad \boldsymbol{\xi}_{(d-1)} \in \mathbb{S}^{d-2} \quad (\text{C.4})$$

Tanto como el vector $(\xi_1, \xi_1, \dots, \xi_{d-1}, 0) \in \mathbb{R}^d$, como el vector $(\xi_1, \xi_1, \dots, \xi_{d-1}) \in \mathbb{S}^{d-1}$, serán denotados por $\boldsymbol{\xi}_{(d-1)}$. Se puede demostrar [117] que para $d \geq 3$

$$d\mathbf{S}^{d-1} = (t \mathbf{e}_d + \sqrt{1-t^2} \boldsymbol{\xi}_{(d-1)}) = (1-t^2)^{\frac{d-3}{2}} dt d\mathbf{S}^{d-2}(\boldsymbol{\xi}_{(d-1)}) \quad (\text{C.5})$$

Definimos

$$|\mathbb{S}^{d-1}| := \int_{\mathbb{S}^{d-1}} d\mathbf{S}^{d-1}. \quad (\text{C.6})$$

Usando la relación Eq. (C.5)

$$|\mathbb{S}^{d-1}| = \int_{-1}^1 (1-t^2)^{\frac{d-3}{2}} dt \int_{\mathbb{S}^{d-2}} d\mathbf{S}^{d-2} = |\mathbb{S}^{d-2}| \int_{-1}^1 (1-t^2)^{\frac{d-3}{2}} dt \quad (\text{C.7})$$

Para poder calcular la integral es necesario hacer el cambio de variable $s = t^2$

$$\int_{-1}^1 (1-t^2)^{\frac{d-3}{2}} dt = \int_0^1 s^{-\frac{1}{2}} (1-s)^{\frac{d-3}{2}} ds = B\left(\frac{1}{2}, \frac{d-1}{2}\right) \quad (\text{C.8})$$

$$= \frac{\Gamma(\frac{1}{2}) \Gamma(\frac{d-1}{2})}{\Gamma(\frac{d}{2})} = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(\frac{d-1}{2})}{\Gamma(\frac{d}{2})} \quad (\text{C.9})$$

$$|\mathbb{S}^{d-1}| = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma(\frac{d-1}{2})}{\Gamma(\frac{d}{2})} |\mathbb{S}^{d-2}| \quad \text{para } d \geq 3, \quad |\mathbb{S}^1| = 2\pi \quad (\text{C.10})$$

De donde se puede derivar la siguiente fórmula

$$|\mathbb{S}^{d-1}| = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})}. \quad (\text{C.11})$$

Las siguientes relaciones, que también pueden encontrarse en [117], nos serán útiles para calcular ciertas integrales en la esfera y para poder demostrar el teorema de Green-Beltrami. Si $A \in \mathbb{R}^{d \times d}$ es una matriz ortogonal¹, entonces $d\mathbb{S}^{d-1}(A\xi) = d\mathbb{S}^{d-1}(\xi)$ y $dV^d(Ax) = dV^d(x)$. En el caso particular de coordenadas polares $x_{(d)} = r\xi_{(d)}$, $r = |x_{(d)}|$ y $\xi_{(d)} = \xi \in \mathbb{S}^{d-1}$, se tiene $dV^d(r\xi) = r^{d-1} dr d\mathbb{S}^{d-1}(\xi)$.

Para $\delta \in (0, 1)$, definimos el conjunto

$$\Omega_\delta = \{x \in \mathbb{R}^d : |x| \in [1 - \delta, 1 + \delta]\}. \quad (\text{C.12})$$

Cuando se estudia el comportamiento de funciones f definidas en \mathbb{S}^{d-1} , es ventajoso considerar la siguiente extensión

$$f^*(x) := f\left(\frac{x}{|x|}\right) = f(\xi) \quad \text{para } x \in \Omega_\delta. \quad (\text{C.13})$$

C.1. Armónicos esféricos

Teorema C.1.1 (Teorema de suma de armónicos). Sea $\{Y_{n,j} : 1 \leq j \leq N_{n,d}\}$ una base ortogonal normal de \mathbb{Y}_n^d ; esto es

$$\int_{\mathbb{S}^{d-1}} Y_{n,j}(\eta) Y_{n,k}(\eta) d\mathbb{S}^{d-1}(\eta) = \delta_{jk}, \quad 1 \leq j, k \leq N_{n,d}. \quad (\text{C.14})$$

Entonces

$$\sum_{j=1}^{N_{n,d}} Y_{n,j}(\xi) \overline{Y_{n,j}(\eta)} = \frac{N_{n,d}}{|\mathbb{S}^{d-1}|} P_{n,d}(\xi \cdot \eta) \quad \forall \xi, \eta \in \mathbb{S}^{d-1} \quad (\text{C.15})$$

La demostración puede encontrarse en [7]. En el caso particular $d = 3$ que es el relevante para este trabajo

$$\sum_{j=1}^{2n+1} Y_{n,j}(\xi) \overline{Y_{n,j}(\eta)} = \frac{2n+1}{4\pi} P_{n,3}(\xi \cdot \eta) \quad \forall \xi, \eta \in \mathbb{S}^2. \quad (\text{C.16})$$

¹ A es una matriz ortogonal si su inversa es igual a la matriz transpuesta: $A^T = A^{-1}$.

C.2. El operador de Laplace-Beltrami

El operador de Laplace en coordenadas arbitrarias es

$$\Delta_{(d)} = \sum_{j=1}^d \left(\frac{\partial}{\partial x_j} \right)^2 = \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial}{\partial u_i} \left(g^{ij} \sqrt{g} \frac{\partial}{\partial u_j} \right) \quad (\text{C.17})$$

Si utilizamos coordenadas polares

$$\Delta_{(d)} = \frac{1}{r^{d-1}} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^{d-1} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{(d-1)}^* \quad (\text{C.18})$$

en donde el segundo término

$$\Delta_{(d-1)}^* = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \sum_{i,j=1}^{d-1} \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\gamma^{ij} \sqrt{\gamma} \frac{\partial}{\partial u_j} \right) \quad (\text{C.19})$$

se denomina el operador de Laplace-Beltrami. Para la extensión f^* de f , si $f \in C^2(\mathbb{S}^{d-1})$, entonces

$$\Delta_{(d)} f^*(\mathbf{x}) \Big|_{|\mathbf{x}|=1} = \Delta_{(d-1)}^* f(\boldsymbol{\xi}). \quad (\text{C.20})$$

Por lo tanto el valor de $\Delta_{(d-1)}^* f(\boldsymbol{\xi})$ no depende de las coordenadas que se le hayan dado a \mathbb{S}^{d-1} . En estas mismas coordenadas polares $u_1, u_2, \dots, u_{d-1}, u_d = |\mathbf{x}|$, el operador gradiente

$$\nabla = \boldsymbol{\xi} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \nabla_{(d-1)}^*, \quad (\text{C.21})$$

en donde

$$\nabla_{(d-1)}^* = \sum_{i,j=1}^{d-1} \gamma^{ij} \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial u_i} \frac{\partial}{\partial u_j} \quad (\text{C.22})$$

es el operador de Beltrami de primer orden. Nótese que el operador

$$\nabla_{(d-1)}^* = r \nabla - \boldsymbol{\xi} r \frac{\partial}{\partial r}, \quad (\text{C.23})$$

no depende de las coordenadas utilizado para \mathbb{S}^{d-1} y además, de manera análoga a la Eq. (C.20), se cumple

$$\nabla_{(d)} f^*(\mathbf{x}) \Big|_{|\mathbf{x}|=1} = \nabla_{(d-1)}^* f(\boldsymbol{\xi}) \quad (\text{C.24})$$

para $f \in C^1(\mathbb{S}^{d-1})$.

Por ejemplo, para $d = 3$

$$\mathbf{x} = r \boldsymbol{\xi}, \quad \boldsymbol{\xi} = \begin{pmatrix} \cos \phi \sin \theta \\ \sin \phi \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi. \quad (\text{C.25})$$

Naturalmente tenemos $u_1 = \theta$ y $u_2 = \phi$, por lo que la matriz γ_{ij} , su inversa γ^{ij} y sus respectivos determinantes están dados por

$$\gamma_{11} = 1, \quad \gamma_{22} = \sin^2 \theta, \quad \gamma_{12} = \gamma_{21} = 0, \quad (\text{C.26})$$

$$\gamma = \sin^2 \theta, \quad \sqrt{\gamma} = \sin \theta, \quad (\text{C.27})$$

$$\gamma^{11} = 1, \quad \gamma^{22} = \sin^{-2} \theta, \quad \gamma^{12} = \gamma^{21} = 0. \quad (\text{C.28})$$

Por lo tanto²,

$$\nabla_{(2)}^* = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi \\ \cos \theta \sin \phi \\ -\sin \theta \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin \theta} \begin{pmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (\text{C.29})$$

$$\Delta_{(2)}^* = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}. \quad (\text{C.30})$$

C.3. El teorema de Green-Beltrami

Proposición C.3.1 (Teorema Green-Beltrami). Para cualesquiera $f \in C^2(\mathbb{S}^{d-1})$ y $g \in C^1(\mathbb{S}^{d-1})$

$$\int_{\mathbb{S}^{d-1}} g \Delta_{(d-1)}^* f \, d\mathbf{S}^{d-1} = - \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \nabla_{(d-1)}^* g \cdot \nabla_{(d-1)}^* f \, d\mathbf{S}^{d-1} \quad (\text{C.31})$$

Demostración. Para las extensiones $f^*(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}/|\mathbf{x}|)$ y $g^*(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}/|\mathbf{x}|)$, utilizamos el teorema de Green [137]

$$\int_{1-\delta \leq |\mathbf{x}| \leq 1+\delta} (g^* \Delta f^* + \nabla g^* \cdot \nabla f^*) \, dx = 0, \quad (\text{C.32})$$

por lo tanto

$$\int_{1-\delta}^{1+\delta} r^{d-3} \left[\int_{\mathbb{S}^{d-1}} (g \Delta_{(d-1)}^* f + \nabla_{(d-1)}^* g \cdot \nabla_{(d-1)}^* f) \, d\mathbf{S}^{d-1} \right] dr = 0, \quad (\text{C.33})$$

y lo tanto se cumple la relación (C.31). □

Una consecuencia inmediata de esta proposición C.3.1 es el siguiente corolario

Corolario C.3.1. Para cualesquiera $f, g \in C^2(\mathbb{S}^{d-1})$

$$\int_{\mathbb{S}^{d-1}} g \Delta_{(d-1)}^* f \, d\mathbf{S}^{d-1} = \int_{\mathbb{S}^{d-1}} f \Delta_{(d-1)}^* g \, d\mathbf{S}^{d-1} \quad (\text{C.34})$$

²Se puede demostrar incluso que $\Delta_{(2)}^* = \nabla_{(2)}^* \cdot \nabla_{(2)}^*$

Apéndice D

Derivadas funcionales

En este apéndice damos una breve definición (no rigurosa), de lo que es un *funcional*, con énfasis en aquellos que están definidos a través de una integral, como en el caso de la *acción* en mecánica clásica. Esta información fue tomada de [43] casi textualmente. La finalidad de hacer una breve presentación de las definiciones es poder entender el método de eliminación de variables rápidas que se describe en este trabajo para poder pasar de la ecuación de Kramers, a la ecuación de Smoluchowski de manera rigurosa,¹ así como también poder entender el modelo matemático asociado a la *función respuesta*.

Cuando decimos que F es un *funcional* de la función $q(\sigma)$ significa que F produce un número el cual depende de la *forma* de la función $q(\sigma)$, en donde σ es un parámetro el cual se utiliza para especificar la forma. Por ejemplo:

$$F = \int_{\mathbb{R}} q(\sigma)^2 e^{-\sigma^2} d\sigma, \quad (\text{D.1})$$

es un funcional de $q(\sigma)$, ya que pone en correspondencia con cada $q(\sigma)$ elegida, un número (el valor de la integral). Denotaremos que F es un funcional de $q(\sigma)$, como $F[q(\sigma)]$.

Podemos ver al funcional $F[q(\sigma)]$ como una función que depende de un número infinito de variables, siendo las variables el valor que asume la función q en cada punto σ . Si dividimos el dominio de σ en una gran cantidad de puntos σ_i y denotamos por q_i a los valores que asume la función q en estos puntos $q_i = q(\sigma_i)$, entonces de manera aproximada F puede ser visto como una función de las q_i . Por ejemplo, en el caso de el funcional en D.1

$$F(\cdots q_i \cdots) = \sum_{-\infty}^{\infty} q_i^2 e^{-\sigma_i^2} (\sigma_{i+1} - \sigma_i) \quad (\text{D.2})$$

Esta idea de ver a un funcional como una función de muchas variables para manipularlo y eventualmente tomar el límite cuando las variables se vuelven infinitas, que se la debemos en realidad a Leonard Euler², más que a Richard P. Feynman, la utilización del *método de diferencias finitas* para resolver problemas del *cálculo de variaciones* [51]; sin embargo,

¹Para un desarrollo más riguroso de los funcionales puede consultar [145], así como otra referencia clásica, que aún sigue siendo muy citada, es [162].

²Que al mismo tiempo quizá la aprendió de Jakob Bernoulli [79, 8], que la usó para resolver el problema de la *Braquistocrona*, planteado por su hermano Johannes Bernoulli.

independientemente del autor intelectual del método: nos ayudará a definir la noción de *derivada funcional*. Si la función $q(\sigma)$ varía un poco $q(\sigma) + \lambda(\sigma)$ cuando le sumamos una pequeña cantidad dada por la función $\lambda(\sigma)$, entonces el valor de cada una de las variables q_i cambia a $q_i + \lambda_i$, en ese caso la función con la que estamos aproximando el funcional cambia

$$\sum_i \frac{\partial F(\cdots q_i \cdots)}{\partial q_i} \lambda_i. \quad (\text{D.3})$$

En el caso de una cantidad no numerable de variables, la suma se vuelve una integral

$$F[q(\sigma) + \lambda(\sigma)] - F[q(\sigma)] = \int K(t) \lambda(t) dt \quad (\text{D.4})$$

En donde K depende de F y es lo que se denomina la *derivada funcional* de F con respecto a q en t y se denota por $\frac{\delta F[q(\sigma)]}{\delta q(t)}$. Como señala Feynman, no es sólo $\frac{\partial F(\cdots q_i \cdots)}{\partial q_i}$ ya que éste es en general un infinitesimal, si no más bien la suma de estos infinitesimales en todo un rango, por ejemplo de $i-k$ a $i+k$, dividido por el intervalo del parámetro, $\sigma_{i+k} - \sigma_{i-k}$. Por lo tanto escribimos

$$F[q(\sigma) + \lambda(\sigma)] = F[q(\sigma)] + \int \frac{\delta F[q(\sigma)]}{\delta q(t)} \lambda(t) dt + O(\lambda^2). \quad (\text{D.5})$$

Por ejemplo, para el caso del funcional en D.1

$$F[q + \lambda] = \int [q(\sigma)^2 + 2q(\sigma)\lambda(\sigma) + \lambda^2(\sigma)] e^{-\sigma^2} d\sigma \quad (\text{D.6})$$

$$= \int q(\sigma)^2 e^{-\sigma^2} d\sigma + 2 \int q(\sigma)\lambda(\sigma)e^{-\sigma^2} d\sigma + O(\lambda^2). \quad (\text{D.7})$$

Por lo tanto, $\frac{\delta F[q(\sigma)]}{\delta q(t)} = 2q(t)e^{-t^2}$. De manera análoga, si $F[q(\sigma)] = q(0)$, entonces $\frac{\delta F[q(\sigma)]}{\delta q(t)} = \delta(t)$. En donde $\delta(t)$ es la delta de Dirac.

Otras referencias como [95], definen la derivada funcional como³

$$\frac{\delta F}{\delta f(x)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f(\xi) + \epsilon\delta(\xi - x)] - F[f(\xi)]}{\epsilon}, \quad (\text{D.8})$$

que naturalmente es equivalente a la dada en la Eq. (D.5).

³De manera similar a la tesis de Feynman, en [28], puede encontrarse una discusión de la derivada funcional, en el contexto de la teoría de campos y una referencia excelente también es [153], pero que utiliza una notación para los funcionales un poco diferente.

Apéndice E

Eliminación de variables “rápidas”

Para un estudio más detallado y sistemático del método de eliminación de variables o modos rápidos referimos a los trabajos [85, 50]. El resumen a continuación está basado en la síntesis que aparece en [105] y éste también refiere al lector al trabajo de Samoletov [139].

Supongamos que podemos descomponer el operador de evolución temporal de la siguiente forma

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = (L + \Lambda) \psi \quad (\text{E.1})$$

en donde Λ satisface

$$\int \Lambda \phi(x, \xi, t) d\xi = 0 \quad (\text{E.2})$$

Supongamos también que L puede ser expresado como una serie de potencias en μ

$$L = \mu L' + \mu^2 L'' + \dots \quad (\text{E.3})$$

y estamos naturalmente considerando a Λ como de orden μ^0 . Sea

$$n(x, t) = \int \psi(x, \xi, t) d\xi \quad (\text{E.4})$$

Integrando E.1 con respecto a ξ y usando la propiedad E.2

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \int L \psi d\xi \quad (\text{E.5})$$

Ahora supongamos que transcurrido un tiempo corto ψ depende de t como un funcional de n , por lo tanto [153]

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \int \frac{\delta \psi(x, \xi | n)}{\delta n(y, t)} \frac{\partial n(y, t)}{\partial t} dy = \int \frac{\delta \psi(x, \xi | n)}{\delta n(y, t)} \int L \psi(y, \eta, t) d\eta dy \quad (\text{E.6})$$

Expandamos ψ en una serie de potencias en μ

$$\psi = \psi^{(0)} + \mu \psi^{(1)} + \mu^2 \psi^{(2)} + \dots \quad (\text{E.7})$$

Si insertamos esta expresión en E.1 vemos que $\partial\psi/\partial t$ es de orden cero con respecto a μ , por lo tanto se tiene que cumplir

$$\Lambda\psi^{(0)} = 0 \quad (\text{E.8})$$

Como Λ sólo opera en las variables ξ , la solución a E.8 se debe poder escribir como $f(\xi)g(x, t)$ donde f satisface $\Lambda f = 0$. Insistimos en que

$$\int \psi^{(0)}(x, \xi, t) d\xi = n(x, t) \quad (\text{E.9})$$

lo que significa que $n(x, t)$ es de orden cero con respecto a μ^1

$$\int f(\xi)g(x, t) d\xi = n(x, t) \quad (\text{E.10})$$

de donde se sigue que

$$\psi^{(0)} = \bar{f}(\xi)n(x, t) \quad (\text{E.11})$$

$$\bar{f}(\xi) = \frac{f(\xi)}{\int f(\xi) d\xi} \quad (\text{E.12})$$

Lo cual determina $\psi^{(0)}$. El siguiente paso es determinar $\psi^{(1)}$, la cual satisface

$$\frac{\partial\psi^{(1)}}{\partial t} = \Lambda\psi^{(1)} + L'\psi^{(0)} \quad (\text{E.13})$$

que por la ecuación E.6

$$\frac{\partial\psi^{(1)}}{\partial t} = \int \frac{\delta\psi^{(0)}(x, \xi, |n|)}{\delta n(y, t)} dy \int L'\psi^{(0)}(y, \eta, t) d\eta \quad (\text{E.14})$$

Esta ecuación puede ser simplificada si usamos el hecho

$$\frac{\delta\psi^{(0)}(x, \xi, |n|)}{\delta n(y, t)} = \bar{f}(\xi) \delta(x - y) \quad (\text{E.15})$$

por lo que

$$\frac{\partial\psi^{(1)}}{\partial t} = \int L'\psi^{(0)}(x, \eta|n|) \bar{f}(\xi) d\eta \quad (\text{E.16})$$

y de la ecuación

$$\Lambda\psi^{(1)} = \bar{f}(\xi) \int L' \bar{f}(\eta) n(x, t) - L' \bar{f}(\xi) n(x, t) \quad (\text{E.17})$$

La cual puede ser resuelta usando la función de *Green generalizada* [32, 45]. Tiene que ser la generalizada porque un eigen valor es cero. El resultado final, de segundo orden en μ , es

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \mu \int L'\psi^{(0)} d\xi + \mu^2 \int L''\psi^{(0)} d\xi + \mu^2 \int L'\psi^{(1)} d\xi \quad (\text{E.18})$$

¹Es una condición extra que se le puede exigir a $\psi^{(0)}$.

Apéndice F

Notación $o(f[x])$ y $O(f[x])$

En esta sección definimos qué queremos decir con $f(x) = O(g(x))$ cuando $x \rightarrow a$ y $f(x) = o(g(x))$ cuando $x \rightarrow a$ siguiendo los argumentos en [118].

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)} = A, \quad 0 < A < \infty. \quad (\text{F.1})$$

Lo que esencialmente quiere decir que $|f(x)| \leq A|g(x)|$, para toda x suficientemente cerca de a . En particular, $f(x) = O(1)$, quiere decir que f está acotada en una vecindad alrededor de x ; esto es, que existe un $\delta > 0$, tal que para toda z , si $z \in (x - \delta, x + \delta)$, se tiene $|f(z)| < A$.

Muy atinadamente Nayfeh hace la aclaración que esta es una definición matemática que hace la suposición implícita de que las constantes involucradas en las relaciones funcionales, por ejemplo si $f(x) = kg(x)$, en donde k es una constante, f y g son del mismo orden de magnitud desde el punto de vista matemático, pero desde el punto de vista físico, es muy importante el orden de la constante k . Matemáticamente se supone que estas constantes son del orden de la unidad.

Algunas veces la información acerca de una función puede ser insuficiente para determinar la velocidad particular con la que se aproxima a su límite; si embargo, puede ser suficiente para decir si es más rápido o más lento que ciertas *funciones de norma*. En esos casos usamos la notación $f(x) = o(g(x))$, lo cual quiere decir formalmente que

$$\lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x)}{g(x)} = 0. \quad (\text{F.2})$$

Apéndice G

Algunos elementos de geometría diferencial

A continuación hacemos un resumen de algunas definiciones y resultados elementales de geometría diferencial que se usan en este trabajo. Las demostraciones de estos resultados pueden encontrarse en [121].

Definición 6. (Derivada direccional) Sea f una función diferenciable de valores reales en \mathbb{R}^3 y sea \mathbf{v}_p un vector tangente a \mathbb{R}^3 en p , entonces el número

$$\mathbf{v}_p[f] = \left. \frac{d}{dt} (f(\mathbf{p} + t\mathbf{v})) \right|_{t=0}, \quad (\text{G.1})$$

se denomina *derivada direccional* de f con respecto a \mathbf{v}_p .

Lema G.0.1. Si $\mathbf{v}_p = (v^1, v^2, v^3)$ es un vector tangente a \mathbb{R}^3 , entonces

$$\mathbf{v}_p[f] = \sum v^i \frac{\partial f}{\partial x^i}(\mathbf{p}) \quad (\text{G.2})$$

Una consecuencia inmediata de este lema es que $U_i[f] = \partial f / \partial x^i$, en donde U_1, U_2, U_3 es el sistema de referencia *natural* en \mathbb{R}^3 .

Teorema G.0.1. Sean f y g funciones definidas en \mathbb{R}^3 , \mathbf{v}_p y \mathbf{w}_p vectores tangentes a \mathbb{R}^3 en p , a y b números. Entonces

$$(a\mathbf{v}_p + b\mathbf{w}_p)[f] = a\mathbf{v}_p[f] + b\mathbf{w}_p[f] \quad (\text{G.3})$$

$$\mathbf{v}_p[af + bg] = a\mathbf{v}_p[f] + b\mathbf{v}_p[g] \quad (\text{G.4})$$

$$\mathbf{v}_p[fg] = \mathbf{v}_p[f] \cdot g(\mathbf{p}) + f(\mathbf{p}) \cdot \mathbf{v}_p[g] \quad (\text{G.5})$$

Corolario G.0.1. Si V y W son campos vectoriales y f , g y h funciones de valores reales definidas en \mathbb{R}^3 , entonces

$$(fV + gW)[h] = fV[h] + gW[h] \quad (\text{G.6})$$

$$V_p[af + bg] = aV_p[f] + bV_p[g] \text{ para cualesquiera } a, b \in \mathbb{R} \quad (\text{G.7})$$

$$V[fg] = V[f] \cdot g + f \cdot V[g] \quad (\text{G.8})$$

Definición 7. Una *1-forma* ϕ en \mathbb{R}^3 es una función que asume valores en los números reales definida en el conjunto de todos los vectores tangentes a \mathbb{R}^3 tal que ϕ es lineal en cada punto, esto es

$$\phi(a\mathbf{v} + b\mathbf{w}) = a\phi(\mathbf{v}) + b\phi(\mathbf{w}), \quad (\text{G.9})$$

para cualesquiera dos números a, b y \mathbf{v}, \mathbf{w} en el mismo punto de \mathbb{R}^3 .

Esto es, para cada vector tangente \mathbf{v} , una uno forma define un número real $\phi(\mathbf{v})$ y para cada punto \mathbf{p} de \mathbb{R}^3 la función resultante $\phi_{\mathbf{p}} : T_{\mathbf{p}}\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ es lineal. Por lo tanto, $\phi_{\mathbf{p}}$ es un elemento del *espacio dual* de $T_{\mathbf{p}}\mathbb{R}^3$.

Definición 8. Si f es una función diferenciable de variable real definida en \mathbf{R}^3 , el *diferencial* df de f es la uno forma tal que

$$df(\mathbf{v}_{\mathbf{p}}) = \mathbf{v}_{\mathbf{p}}[f] \text{ para todos los vectores } \mathbf{v}_{\mathbf{p}} \quad (\text{G.10})$$

Lema G.0.2. Si ϕ es una uno forma en \mathbb{R}^3 , entonces $\phi = \sum f_i dx_i$, en donde $f_i = \phi(U_i)$. Estas funciones f_1, f_2, f_3 se denominan las funciones coordenadas (Euclidianas) de ϕ .

Corolario G.0.2. Si f es una función diferenciable en \mathbb{R}^3 , entonces

$$df = \sum \frac{\partial f}{\partial x^i} dx^i. \quad (\text{G.11})$$

Definición 9. Derivada covariante. Sea W un campo vectorial en \mathbb{R}^3 y sea \mathbf{v} un vector tangente a \mathbb{R}^3 en el punto \mathbf{p} . Entonces la *derivada covariante* de W en la dirección del vector \mathbf{v} es el vector tangente

$$\nabla_{\mathbf{v}} W = W(\mathbf{p} + t\mathbf{v})'(0) \quad (\text{G.12})$$

Lema G.0.3. Si $W = \sum w^i U_i$ es un campo vectorial definido en \mathbb{R}^3 , y \mathbf{v} es un vector tangente en \mathbf{p} , enbtonces

$$\nabla_{\mathbf{v}} W = \sum \mathbf{v}[w^i] U_i(\mathbf{p}) \quad (\text{G.13})$$

Teorema G.0.2. Sean V, W, X y Z campos vectorial definidos en una *variedad diferencial* M , f una función escalar definida en M , y a una constante definida en el campo donde estén definidos los campos vectoriales. Entonces

$$\nabla_{aV+W}[X] = a\nabla_V X + \nabla_W X \quad (\text{G.14a})$$

$$\nabla_V[aX + Z] = a\nabla_V[X] + \nabla_V[Z] \quad (\text{G.14b})$$

$$\nabla_V[fX] = \nabla_V[f]X + f\nabla_V X \quad (\text{G.14c})$$

$$V[Y \cdot Z] = \nabla_V Y \cdot Z + Y \cdot \nabla_V Z \quad (\text{G.14d})$$

Las primeras dos condiciones están relacionadas con la linealidad de la derivada convierte como operador; la primera con respecto a las dirección con la que se toma la derivada; la segunda con respecto al campo vectorial al que se le aplica propiamente. Las últimas dos propiedades se les suele denominar la propiedad de Leibniz. Esta última es una propiedad que encontraremos en toda noción de derivada así como el ser un operador lineal.

Definición 10. Campos vectoriales E_1 , E_2 y E_3 en \mathbb{R}^3 constituyen un *campo vectorial de referencia* en \mathbb{R}^3 , si se cumple

$$E_i \cdot E_j = \delta_{ij} \quad (1 \leq i, j \leq 3). \quad (\text{G.15})$$

Por lo tanto, en cada punto \mathbf{p} de \mathbb{R}^3 los vectores tangente $E_1(\mathbf{p})$, $E_2(\mathbf{p})$ y $E_3(\mathbf{p})$ constituyen un *sistema de referencia* (vectores ortogonales y de magnitudes unitarias).

Definición 11. Conexiones.

$$\omega_{ij}(\mathbf{v}) = \nabla_{\mathbf{v}} E_i \cdot E_j(\mathbf{p}). \quad (\text{G.16})$$

Entonces cada conexión ω_{ij} es una uno forma antisimétrica $\omega_{ij} = -\omega_{ji}$. Esta conexión ω_{ij} es la velocidad inicial con la que E_i rota hacia la dirección E_j conforme el punto \mathbf{p} se mueve en la dirección de \mathbf{v} . Las conexiones contienen esta información para todos los vectores tangentes a \mathbb{R}^3 .

Teorema G.0.3.

$$\nabla_V E_i = \sum_j \omega_i^j(V) E_j \quad (\text{G.17})$$

Corolario G.0.3. Si $W = \sum f^i E_i$, entonces

$$\nabla_V W = \sum_j \left\{ V[f^j] + \sum_i \omega_i^j(V) \right\} E_j \quad (\text{G.18})$$

Proposición G.0.1. Las componentes de la derivada covariante de una uno forma \tilde{p} están dadas por

$$(\nabla_{\beta} \tilde{p})_{\alpha} \equiv p_{\alpha;\beta} = p_{\alpha,\beta} - p_{\lambda} \Gamma_{\alpha\beta}^{\lambda} \quad (\text{G.19})$$

Demuestra. Tomemos $\phi = p_{\alpha} V^{\alpha}$. Como en este caso ϕ es una función escalar, la derivada covariante de una función escalar coincide con la derivada parcial

$$\nabla_{\sigma} \phi = p_{\alpha;\sigma} V^{\alpha} + p_{\alpha} V^{\alpha;\sigma} \quad (\text{G.20})$$

Por otro lado, sabemos que se debe cumplir la propiedad de Leibniz para la derivada G.14c, por lo tanto

$$\begin{aligned} \nabla_{\sigma} \phi &= p_{\alpha;\sigma} V^{\alpha} + p_{\alpha} V^{\alpha;\sigma} \\ &= p_{\alpha;\sigma} V^{\alpha} + p_{\alpha} [V^{\alpha,\sigma} + V^{\lambda} \Gamma_{\lambda\sigma}^{\alpha}] \end{aligned}$$

Igualando esta última expresión con G.20

$$p_{\alpha,\sigma} V^{\alpha} + p_{\alpha} V^{\alpha,\sigma} = p_{\alpha;\sigma} V^{\alpha} + p_{\alpha} [V^{\alpha,\sigma} + V^{\lambda} \Gamma_{\lambda\sigma}^{\alpha}]$$

Ahora si renombramos los índices mudos de la siguiente manera $\lambda \rightarrow \alpha \rightarrow \lambda$

$$p_{\alpha,\sigma} V^\alpha + p_\alpha V^\alpha{}_{,\sigma} = p_{\alpha;\sigma} V^\alpha + p_\alpha V^\alpha{}_{,\sigma} + p_\lambda V^\alpha \Gamma^\lambda_{\alpha\sigma}$$

Podemos cancelar los segundos términos de cada lado de la igualdad y reescribir lo relación de la siguiente manera

$$[p_{\alpha;\sigma} - p_{\alpha,\sigma} + p_\lambda \Gamma^\lambda_{\alpha\sigma}] V^\alpha = 0$$

De donde se sigue lo que se quería demostrar. \square

Proposición G.0.2. Las componentes de la derivada covariante de un tensor contravariante de segundo orden $T^{\alpha\beta}$ están dadas por

$$(\nabla_\sigma T)^{\alpha\beta} \equiv T^{\alpha\beta}{}_{;\sigma} = T^{\alpha\beta}{}_{,\sigma} + T^{\lambda\beta} \Gamma^\alpha_{\lambda\sigma} + T^{\alpha\lambda} \Gamma^\beta_{\lambda\sigma} \quad (\text{G.21})$$

Demostración. La demostración es totalmente análoga a la que se empleó en la proposición anterior, sólo que en este caso, consideramos

$$C^\alpha = T^{\alpha\beta} p_\beta$$

Ya sabemos cómo se ve la derivada covariante de los vectores contravariantes y de las uno formas

$$\begin{aligned} C^\alpha{}_{;\sigma} &= [T^{\alpha\beta} p_\beta]_{,\sigma} + T^{\lambda\beta} p_\beta \Gamma^\alpha_{\lambda\sigma} \\ &= T^{\alpha\beta}{}_{,\sigma} p_\beta + T^{\alpha\beta} p_\beta{}_{,\sigma} + T^{\lambda\beta} p_\beta \Gamma^\alpha_{\lambda\sigma} \end{aligned}$$

Por otro lado, se debe satisfacer la regla de Leibniz

$$\begin{aligned} C^\alpha{}_{;\sigma} &= T^{\alpha\beta}{}_{;\sigma} p_\beta + T^{\alpha\beta} p_\beta{}_{;\sigma} \\ &= T^{\alpha\beta}{}_{;\sigma} p_\beta + T^{\alpha\beta} [p_\beta{}_{,\sigma} - p_\lambda \Gamma^\lambda_{\beta\sigma}] \end{aligned}$$

En donde hemos usado G.0.1 para las componentes de la derivada convariante de la uno forma p_β . Si ahora reenombramos los índices en el último término de esa expresión $\beta \rightarrow \lambda$ y $\lambda \rightarrow \beta$ e igualamos estas últimas dos relaciones

$$T^{\alpha\beta}{}_{;\sigma} p_\beta + T^{\alpha\beta} p_\beta{}_{,\sigma} - T^{\alpha\lambda} p_\beta \Gamma^\beta_{\lambda\sigma} = T^{\alpha\beta}{}_{,\sigma} p_\beta + T^{\alpha\beta} p_\beta{}_{,\sigma} + T^{\lambda\beta} p_\beta \Gamma^\alpha_{\lambda\sigma}, \quad (\text{G.22})$$

en donde se cancelan los segundos términos de ambos lados de la igualdad y si factorizamos p_β

$$[T^{\alpha\beta}{}_{;\sigma} - T^{\alpha\beta}{}_{,\sigma} - T^{\lambda\beta} \Gamma^\alpha_{\lambda\sigma} - T^{\alpha\lambda} \Gamma^\beta_{\lambda\sigma}] p_\beta = 0 \quad (\text{G.23})$$

de donde se sigue la proposición. \square

Apéndice H

Código en Python

```
1 import numpy as np
2 import math
3 from matplotlib import pyplot as plt
4 def orto(x):
5     """Given a vector x, this function generates another one that is orthogonal with respect
6     to the natural scalar product on 3 dimensional euclidean space E3"""
7     if np.dot(x,x) == 0:
8         return 'No se puede: ese es el vector cero!'
9     else:
10        if 0 not in x:
11            v1 = 1
12            v2 = -(x[0]/x[1])
13            v3 = 0
14            #return np.array([v1,v2,v3])
15        else:
16            if x[0] == 0:
17                if x[1] == 0:
18                    v1 = 1
19                    v2 = 0
20                    v3 = 0
21                else:
22                    v1 = 0
23                    v2 = 0
24                    v3 = 1
25            elif x[1] == 0:
26                v1 = 0
27                v2 = 1
28                v3 = 0
29            else:
30                v1 = 0
31                v2 = 0
32                v3 = 1
33        return np.array([v1,v2,v3])
34
35
36 def base_ort_nor(x):
37     """This function generates a basis of vetors orthogonal, with respect to the natural scalar
38     product on 3 dimensional euclidean space, to the vector x"""
39     y = orto(x)
```

```

40     v1 = y/np.linalg.norm(y)
41     z = np.cross(x,v1)
42     v2 = z/np.linalg.norm(z)
43     return v1, v2
44
45
46 def vector_des(v1,v2):
47     """This function generates a unit random vector, with uniform distribution among all possible directions,
48     in the plane spanned by the linearly independent vectors v1 and v2"""
49     na = 2 * np.pi*np.random.rand()
50     vn = v1*np.cos(na) + v2*np.sin(na)
51     return vn/np.linalg.norm(vn)
52
53
54
55 def vector_q(x,s):
56     """This function returns a vector in the direction of x of length tan(s)"""
57     q = np.tan(s)
58     return q*x
59
60
61
62 def nuevo_r(r, vector_q):
63     """This function returns a point on the unit sphere, originally in r, a geodesic distance s,
64     in the direction of vector_q"""
65     y = r + vector_q
66     y = y/np.linalg.norm(y)
67     return y
68
69
70 def actualiza(r,s):
71     """This function updates the position of a particle assembling one a function that generates a
72     random vector in the plane orthogonal to r and of displacement magnitude s"""
73     v1, v2 = base_ort_nor(r)
74     pre_q = vector_des(v1,v2)
75     q = vector_q(pre_q, s)
76     return nuevo_r(r, q)
77
78
79 def act_n(lista, D, delta_t):
80     """This function updates all the elements in a list using the actualiza function on each element"""
81     l = []
82     for v in lista:
83         s = ese(D,delta_t)
84         l.append(actualiza(v,s))
85     return l
86
87
88 def b_steps_(ri,rf, n):
89     """ This function returns n points between ri and rf along the geodesic which pass through them"""
90     l = [ri]
91     r0 = ri
92     lamb = (np.dot(ri,rf))/((np.linalg.norm(ri))*(np.linalg.norm(rf)))
93
94     if abs(lamb) > 1:
95         #print('Is fucked up: there was a rounding ')

```

```

96         if lamb < 0:
97             lamb = -1
98         else:
99             lamb = 1
100
101
102     theta = np.arccos(lamb)
103     #if theta < 1e17:
104     #    return l
105     if theta == 0:
106         return [ri,rf]
107
108
109     else:
110
111         normal = np.cross(ri, rf)/ np.linalg.norm(np.cross(ri,rf))
112         for i in range(1,n + 1):
113             #vi = rot_theta(r0, theta/n, normal)
114             vi = rot_finita(r0, -normal, theta/n)
115             l.append(vi)
116             r0 = vi
117
118     return l
119
120
121
122 def trans_s_c(r,theta, phi):
123     """This function transform from spherical coordinates (r,theta,phi) into cartesian coordinates (x,y,z)"""
124     x = r*np.sin(theta)*np.cos(phi)
125     y = r*np.sin(theta)* np.sin(phi)
126     z = r*np.cos(theta)
127     return x, y, z
128
129 # Version mas reciente (26 de marzo del 2018)
130
131 def trans_c_s(x,y,z):
132     """This function transform from cartesian coordinates (x,y,z) into spherical coordinates (r,theta,phi)"""
133     r = np.sqrt(x**2 + y**2 + z**2)
134     #print r
135     cociente = z/r
136     if abs(cociente) > 1:
137         #print "cociente mayor a 1"
138         if cociente < 0:
139             theta = np.arccos(-1)
140             #print "cociente negativo", theta
141         else:
142             theta = np.arccos(1)
143             #print theta
144     else:
145
146         theta = np.arccos(z/r)
147         #print theta
148     #Aqui hay un problema relevante: cada vez que y o x sean nulos, habra un problema
149     #de indefinicion de operacion
150     if x == 0.:
151         #print "x=0"

```

```

152     if y == 0.:
153         #print "y=0"
154         phi = 2*np.pi*np.random.rand()
155     else:
156         if y > 0:
157             phi = np.pi/2
158         else:
159             phi = -np.pi/2
160     else:
161
162     if x < 0:
163         #print "x<0"
164         phi = np.arctan(y/x) + np.pi
165     else:
166         #print "x debería ser positivo"
167         if y < 0:
168             #print "y<0 tambien!"
169             phi = np.arctan(y/x) + 2*np.pi
170         else:
171             #print "x<0 pero y>0"
172             phi = np.arctan(y/x)
173
174     return r, theta, phi
175
176
177 def r_uni(theta, phi):
178     """This function returns the unit vector in the direction in which r increases at the point (theta,phi)
179     of the unit sphere"""
180     x = np.sin(theta)*np.cos(phi)
181     y = np.cos(theta)*np.cos(phi)
182     z = np.cos(theta)
183     return np.array([x,y,z])
184
185
186 def theta_uni(theta, phi):
187     """This function returns the unit vector in the direction in which theta increases at the point (theta,phi)
188     of the unit sphere"""
189     x = np.cos(theta)*np.cos(phi)
190     y = np.cos(theta)*np.sin(phi)
191     z = -np.sin(theta)
192     return np.array([x,y,z])
193
194
195 def phi_uni(theta, phi):
196     """This function returns the unit vector in the direction in which phi increases at the point (theta,phi)
197     of the unit sphere"""
198     x = -np.sin(phi)
199     y = np.cos(phi)
200     z = 0
201     return np.array([x,y,z])
202
203
204 def nombre(s):
205     """This function returns a string of length 4 in which s (the input) is a number and it has the necessary
206     zeros to the left in order of being of 4 digit length"""
207     diferencia = 5 - len(str(s))

```

```

208     ceros = ''
209     for i in range(diferencia):
210         ceros = ceros + '0'
211     variable = ceros + str(s)
212     return variable
213
214
215 def var(D, delta_t):
216     """This function returns the varianza of a brownian particle in the 2 dimensional infinite plane, of self
217     difussion coeffient D, and in an interval of time of length delta_t"""
218     return 4 * D * delta_t
219
220
221
222 def ese(D, delta_t):
223     """This function returns the magnitude of the random displacement displacement of a brownian particle
224     that has a self-diffusion coeffient D, in a time interval of length delta_t"""
225     return abs(np.random.normal(loc = 0., scale = np.sqrt(var(D,delta_t)),size = None))
226
227
228 def rot_finita(r_ini, N, Phi):
229     """This function rotates a vector r_ini around the direction given by the vector N, an angle Phi. It uses
230     algebraic operations only and three trigonometric evaluations."""
231     n = N/np.linalg.norm(N)
232     cos_theta = np.cos(Phi)
233     r_fin = cos_theta*r_ini + (np.dot(n,r_ini))*(1 - cos_theta)*n + (np.sin(Phi))*(np.cross(r_ini,n))
234     return r_fin
235
236
237 #Funcion que regresa una lista de n numpy arrays que son l
238 def Trayectoria(ri,rf,n):
239     """This function returns a list of a sequence of n points equally angular spaced between r1 and rf"""
240     l = [ri]
241     r0 = ri
242     theta = np.arccos((np.dot(ri,rf))/((np.linalg.norm(ri))*(np.linalg.norm(rf))))
243     N = np.cross(ri, rf)
244
245     for i in range(1,n + 1):
246         vi = rot_finita(r0, N, theta/n)
247         l.append(vi)
248         r0 = vi
249     return l
250
251
252
253
254 def plot_particles(lista, vpolar, vazim, numero, titulo):
255     """This function plots a list of vectors given in lista on the surface of a unit sphere with a view
256     an angle vpolar of inclination with respect to the plane x-y and rotated an angle of vazim angular units
257     in the direction around the z axis"""
258     from mpl_toolkits.mplot3d import axes3d
259     from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
260     from matplotlib import cm
261
262     from itertools import product, combinations
263     fig = plt.figure(figsize=(8,8))

```

```

264     ax = fig.gca(projection='3d')
265     #ax.set_aspect("equal")
266     ax._axis3don = False
267
268
269     #draw sphere
270     R = 1
271     u, v = np.mgrid[0:2*np.pi:50j, 0:np.pi:50j]
272     x=R*np.cos(u)*np.sin(v)
273     y=R*np.sin(u)*np.sin(v)
274     z=R*np.cos(v)
275     #ax.plot_surface(x, y, z, color="r", alpha = 0.15)
276
277     ax.plot_surface(x, y, z, cmap=cm.YlGnBu_r,rstride=1, cstride=1, alpha = 0.10, linewidth = 0.10)
278     #ax.view_init(vpolar, vazim)
279
280
281     #draw an arrow or a set of arrow
282     #ax.quiver(0,0,1.5,0,0,1, length=0.5, arrow_length_ratio = .5, color = "b")
283     #ax.quiver(1.5,0,0,1,0,0, length=0.5, arrow_length_ratio = .5, color ="g")
284     #ax.quiver(0,1.5,0,0,1,0, length=0.5, arrow_length_ratio = .5, color ="r")
285     #draw patch
286     #u, v = np.mgrid[0:2*np.pi:50j, 0:(np.pi/7):50j]
287     #x=R*np.cos(u)*np.sin(v)
288     #y=R*np.sin(u)*np.sin(v)
289     #z=R*np.cos(v)
290     #ax.plot_surface(x, y, z, color="r", alpha = 0.25)
291
292     #draw points
293     for p in lista:
294         ax.scatter([p[0]],[p[1]],[p[2]],color="b",s=15, alpha = 0.25)
295
296     ax.view_init(vpolar, vazim)
297     #fig.savefig('{}_Img_{}.png'.format(titulo,nombre(numero)))
298
299     plt.show()
300     #plt.close()
301
302
303
304 def polo_n(n, R):
305     """This function generates a list of n vectors in the position [0,0,1]; the north pole in the unit sphere"""
306     l = []
307     for i in range(n):
308         l.append(np.array([0,0,R]))
309     return l
310
311
312
313 def obs_uniforme(N, R, size):
314
315     list_obs = []
316     omega = np.cos(size)
317     while len(list_obs) < N:
318         x, y, z = np.random.uniform(-1,1), np.random.uniform(-1,1), np.random.uniform(-1,1)
319         v = np.array([x, y, z])

```

```

320         norma = np.linalg.norm(v)
321         if norma <= R:
322             n = v/norma
323             if not np.dot(n, np.array([0.,0.,1.]))/R > omega:
324                 list_obs.append(R*n)
325
326     return list_obs
327
328 #Possible Initial Distributions
329
330 #Distribución en el polo sur
331
332 def polo_s(n):
333     """This function returns a list of n vectors all in the position [0,0,-1]"""
334     l = []
335     for i in range(n):
336         l.append(np.array([0,0,-1]))
337     return l
338
339 #Dsitribución en el ecuador
340
341 def dist_ecuador(n):
342     """This function returns a list of n vectors all uniformly distributed on the equator of a unit sphere"""
343     l = []
344     for i in range(n):
345         x, y, z = trans_s_c(1.,np.pi/2, np.random.uniform(0,2*np.pi))
346         l.append(np.array([x,y,z]))
347     return l
348
349
350
351 # FIELDS
352
353
354
355 coff10 = np.sqrt((3./(4*np.pi)))
356
357 def field_y10(ri, v0):
358     """This function generates a vector in the direction of a field proportional to the gradient of the
359     spherical harmonic Y10"""
360     r, theta, phi = trans_c_s(ri[0],ri[1],ri[2])
361
362     theta_field = coff10 * (np.sin(theta))
363
364     phi_field = 0.
365
366     field = v0*(theta_field)*theta_uni(theta, phi)
367
368     return field
369
370
371 # FIELD partial_theta Y20
372
373 coff20 = np.sqrt((5./(16*np.pi)))
374
375 def field_y20(ri, v0):

```

```

376     """This function generates a vector in the direction of a field proportional to the gradient of the
377     spherical harmonic Y20"""
378     r, theta, phi = trans_c_s(ri[0], ri[1], ri[2])
379
380     theta_field = coff20 * (-6 * np.cos(theta) * np.sin(theta))
381
382     phi_field = 0.
383
384     field = v0*(theta_field)*theta_uni(theta, phi)
385
386     return field
387
388
389
390     coff30 = np.sqrt((7./(16*np.pi)))
391
392     def field_y30(ri, v0):
393         """This function generates a vector in the direction of a field proportional to the gradient of the
394         spherical harmonic Y30"""
395         r, theta, phi = trans_c_s(ri[0], ri[1], ri[2])
396
397         theta_field = coff30 * (-15 * np.cos(theta)**2 * np.sin(theta) + 3*np.sin(theta))
398
399         phi_field = 0.
400
401         field = v0 * (theta_field) * theta_uni(theta, phi)
402
403         return field
404
405
406     coff43 = - 105 * np.sqrt((5./math.factorial(7) * np.pi))
407
408     def field_y43(ri, v0):
409         """This function generates a vector in the direction of a field proportional to the gradient of the
410         spherical harmonic Y43"""
411
412         r, theta, phi = trans_c_s(ri[0], ri[1], ri[2])
413         #coff43 = - 105 * np.sqrt((5./math.factorial(7) * np.pi))
414         theta_field = coff43 * (np.cos(3 * phi) * np.sin(theta)**2 * (- np.sin(theta)**2 + 3 * np.cos(theta)**2 ))
415
416         phi_field = coff43 * (- 3 * np.cos(theta) * np.sin(theta)**3 * np.sin(3 * phi))
417
418
419         field = v0 * ( theta_field * theta_uni(theta, phi) + phi_field * phi_uni(theta, phi) )
420
421         return field
422
423
424
425
426     # TIME DEPENDENT FIELDS
427
428
429     def field_harmonic(ri,v0,t, omega):
430         """This field is harmonic in time and has azimuthal symmetry"""
431

```

```

432     r, theta, phi = trans_c_s(ri[0], ri[1], ri[2])
433
434     theta_field = np.sin(8 * theta) * np.cos(omega * t)
435
436     phi_field = 0.
437
438
439     field = v0 * (theta_field * theta_uni(theta, phi) + phi_field * phi_uni(theta, phi))
440
441     return field
442
443
444
445
446
447 def nuevo_r_field(r, vector_q, field):
448     """This function updates the position r of a brownian particle urged by the white noise (vector_r)
449     and an external field acting on the tangent plane of a unit sphere at r"""
450     v_sum = field + vector_q
451     xf = np.linalg.norm(v_sum)
452     if xf == 0:
453         nfield = 0
454     else:
455         fvecuni = (v_sum)/xf
456         nfield = np.tan(xf)*fvecuni
457
458     y = r + nfield
459     y = y/np.linalg.norm(y)
460
461     return y
462
463
464 def actualiza_field(r, s, v0, field):
465     """This function generates the random white noise tangent to the unit sphere at r and applies
466     the updating recipe to consider an external field also"""
467     v1, v2 = base_ort_nor(r)
468     pre_q = vector_des(v1,v2)
469     q = vector_q(pre_q, s)
470
471     return nuevo_r_field(r, q, field(r,v0))
472
473
474 def act_n_field(lista, v0, field, D, dt):
475     """This funtion updates a list of positions of a set of brownian particles in which there is also
476     an external field acting on them"""
477     l = []
478     for v in lista:
479         s = ese(D,dt)
480         l.append(actualiza_field(v, s, v0, field))
481
482
483
484
485 #def act_n2_field(arreglo, D, delta_t, v0, field):
486 #
487 #    #s = ese(D,delta_t)

```

```
488
489     #     arreglo = np.apply_along_axis(actualiza_field, 1, arreglo, s, v0, field)
490     #     return arreglo
491
492
493
494
495     # Some Analysis functions
496
497
498
499     def mean_var_hist_theta(lista):
500         """This function returns from a list of vectors a list of the theta angle of each vector
501             along with the mean and the variance of this set"""
502         thetas = []
503         for r in lista:
504             cociente = r[2]
505             if abs(cociente) > 1.:
506                 if cociente < 0:
507                     theta = np.arccos(-1)
508                 else:
509                     theta = np.arccos(1)
510             else:
511
512                 theta = np.arccos(r[2])
513
514             thetas.append(theta)
515
516         return thetas, np.mean(thetas), np.var(thetas)
517
518
519
520     def mean_var_hist_phis(lista):
521         """This function returns from a list of vectors a list of the phis angles of each vector
522             along with the mean and the variance of this set"""
523         phis = []
524         for r in lista:
525
526             if r[0] == 0:
527                 if r[1] == 0:
528                     phi = 2*np.pi*np.random.rand()
529                 else:
530                     if r[0] < 0:
531
532                         phi = np.arctan(r[1]/r[0]) + np.pi
533
534                     else:
535                         if r[1] < 0:
536                             phi = np.arctan(r[1]/r[0]) + 2*np.pi
537                         else:
538
539                             phi = np.arctan(r[1]/r[0])
540
541             phis.append(phi)
542         return phis, np.mean(phis), np.var(phis)
543
```

```

544
545
546
547 # Generalized Langevin Equation
548
549 def act_gLan(pos_ini, vel_ini, Ext_F, ud_rand_F, m, gamma, delta_t):
550     """This function updates de position and velocity of a diffusion process restricted to move
551     on the surface of the unit sphere"""
552
553     vel_fin = vel_ini*(1 - (gamma/m) * delta_t) + ud_rand_F + Ext_F * delta_t
554     #print('vel_fin', vel_fin, 'norm_vel_ini-delta_t',np.linalg.norm(vel_ini)*delta_t, 'ud_rand_F',
555     #ud_rand_F,'Ext_field-delta', Ext_F * delta_t)
556     if np.linalg.norm(vel_ini) > 0.:
557
558         vel_fin = rot_finita(vel_fin, np.cross(vel_ini, pos_ini), np.linalg.norm(vel_ini * delta_t))
559
560     s = np.linalg.norm(vel_ini * delta_t)
561
562     #if s > 1e-8:
563     if s > 0 and s < np.pi/2:
564         #print('s',s)
565         uni_des = vel_ini * delta_t / s
566         #print('uni_des',uni_des)
567         q = np.tan(s)
568         pos_fin = pos_ini + q*uni_des
569         pos_fin = pos_fin / np.linalg.norm(pos_fin)
570     else:
571         pos_fin = pos_ini
572     #print(np.linalg.norm(pos_fin))
573     #print('pos_fin dot vel_fin', np.dot(pos_fin, vel_fin))
574     return pos_fin, vel_fin
575
576
577 #Kb = 13.8064852
578
579
580 def ese_V(T, m, delta_t, gamma, Kb):
581     """This function returns the variance of the velocity of a brownian particle whose velocity is normally
582     distributed and is at absolute temperature T, has a mass m, the friction coefficient of the medium is gamma
583     and the fluctuatons is considered in a window of time delta_t"""
584     sigma2 = 4 * Kb * T * gamma * delta_t / m**2
585
586     return abs(np.random.normal(loc=0., scale= np.sqrt(sigma2), size=None))
587
588
589 def tangent_white_noise(x, delta_t, T, m, gamma, Kb):
590     """This function returns a vector with a 2 dimensional gaussian distribution of variance 4 K T gamma/m**2
591     on the ttangent plane to the unit sphere at x"""
592     v1, v2 = base_ort_nor(x)
593     s = ese_V(T, m, delta_t ,gamma ,Kb)
594     return s * vector_des(v1,v2)
595
596 def act_ensamble(l_pos, l_vel, Ext_F, U0, m, T, gamma, delta_t,Kb):
597     """This function applies the updating recipe act_gLan to a list of initial positions and velocities
598     l_pos, and l_vel and returns the updates of these lists"""
599     l_npos = []

```

```

600     l_nvel = []
601     for i in range(len(l_pos)):
602         pos, vel = l_pos[i], l_nvel[i]
603         random_wn = tangent_white_noise(pos, delta_t, T, m, gamma, Kb)
604         #pos_fin, vel_fin = act_gLan(pos, vel, Ext_F(*args), random_wn, m, gamma, delta_t)
605         pos_fin, vel_fin = act_gLan(pos, vel, Ext_F(pos, U0), random_wn, m, gamma, delta_t)
606         #print(Ext_F(pos, U0))
607         l_npos.append(pos_fin)
608         l_nvel.append(vel_fin)
609     return l_npos, l_nvel
610
611 def act_ensamble_td_field(l_pos, l_vel, Ext_F, U0, m, T, gamma, delta_t, t, omega,Kb):
612     """This function applies the updating recipe act_gLan to a list of initial positions and velocities
613     l_pos, and l_vel and returns the updates of these lists"""
614     l_npos = []
615     l_nvel = []
616     for i in range(len(l_pos)):
617         pos, vel = l_pos[i], l_vel[i]
618         random_wn = tangent_white_noise(pos, delta_t, T, m, gamma,Kb)
619         #pos_fin, vel_fin = act_gLan(pos, vel, Ext_F(*args), random_wn, m, gamma, delta_t)
620         pos_fin, vel_fin = act_gLan(pos, vel, Ext_F(pos, U0, t, omega), random_wn, m, gamma, delta_t)
621         #print(Ext_F(pos, U0))
622         l_npos.append(pos_fin)
623         l_nvel.append(vel_fin)
624     return l_npos, l_nvel
625
626
627
628 def act_ensamble_arr(arr_pos, arr_vel, Ext_F, U0, m, T, gamma, delta_t):
629     """This function updates the position and velocity of an array of initial positions and velocities
630     It uses np.apply_along_axis instead of a list"""
631
632     random_wn = tangent_white_noise(arr_pos, delta_t, T, m, gamma)
633     Ext = Ext_pos(pos,U0)
634     #s = ese(D,delta_t)
635     #arreglo = np.apply_along_axis(actualiza_field, 1, arreglo, s, v0, field)
636     #(pos, vel, Ext_F(pos, U0), random_wn, m,gamma,delta_t)
637     pos_fin, vel_fin = np.apply_along_axis(act_gLan,1,arr_pos,arr_vel, Ext, random_wn, m, gamma, delta_t)
638
639     return pos_fin, vel_fin
640
641
642 def n_vel_ini(x, n, delta_t, T, m, inten, gamma,Kb):
643     """This functions returns a list of n vectors in the tangent plane to the unit sphere at x,
644     normally distributed and multiplied by the factor inten"""
645     l_vel = []
646     for i in range(n):
647         l_vel.append(inten * tangent_white_noise(x,delta_t,T,m,gamma,Kb))
648     return l_vel
649
650
651
652
653
654 # Functions for the statistics
655

```

```

656 def theta_phi(l_pos):
657     thetas = []
658     phis = []
659     for pos in l_pos:
660         r,theta, phi = trans_c_s(pos[0],pos[1],pos[2])
661         thetas.append(theta)
662         phis.append(phi)
663     return thetas, phis
664
665 def momentos_theta(thetas):
666     promedio = np.mean(thetas)
667     varianza = np.var(thetas)
668     return promedio, varianza
669
670
671
672
673 # SIMULATIONS WITH OBSTACLES
674
675 def particion_esfera(ccero, Nphi):
676     Ntheta = int(4*np.pi/(ccero*Nphi))
677     print('Ntheta', Ntheta, 'Nphi', Nphi, 'Ntheta*Nphi', Ntheta*Nphi)
678     sigmaPhi = 2*np.pi/Nphi
679     deltaphi = 2*np.pi/Nphi
680     thetas = []
681     phis = [0]
682     cociente = ccero/sigmaPhi
683     for i in range(Ntheta + 1):
684         theta = np.arccos(1 - (i)*cociente)
685         thetas.append(theta)
686     for j in range(Nphi):
687         phis.append(phis[j] + deltaphi)
688     return thetas, phis
689
690
691 def secuencia_part(tamini, Nfi, numero):
692     l1, l2 = particion_esfera(4*np.pi/tamini, Nfi)
693     particion = []
694     for i in range(len(l2)):
695         for j in range(len(l1)):
696             x, y, z = trans_s_c(1, l1[j], l2[i])
697             particion.append(np.array([x, y, z]))
698
699     return plot_particles(particion, 45, 45, numero)
700
701
702
703 def coordenadas_centro(l1,l2):
704     """Funcion que regresa las coordenadas del centro de dos arreglos para
705     las coordenadas theta y phi"""
706     thetas_centro = []
707     phis_centro = []
708     for i in range(len(l1) - 1):
709         theta_media = l1[i] + (l1[i + 1] - l1[i])/2.
710         thetas_centro.append(theta_media)
711     for j in range(len(l2) - 1):

```

```
712     phi_media = l2[j] + (l2[j + 1] - l2[j])/2.
713     phis_centro.append(phi_media)
714     return thetas_centro, phis_centro
715
716
717 def secuencia_obs(N, Nfi, numero):
718     l1_prima, l2_prima = particion_esfera(4*np.pi/N, Nfi)
719     l1, l2 = coordenadas_centro(l1_prima, l2_prima)
720     particion = []
721     for i in range(len(l2)):
722         for j in range(len(l1)):
723             x, y, z = trans_s_c(1, l1[j], l2[i])
724             particion.append(np.array([x, y, z]))
725
726     print(len(particion))
727
728 #return plot_particles(particion, 0, 0, numero)
729 return particion
730
731
732 def plot_particle_traj_obs(lista_obstaculos, trayectoria, vpolar, vazim, numero, title):
733     from mpl_toolkits.mplot3d import axes3d
734     from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
735     from matplotlib import cm
736
737     #import matplotlib.pyplot as plt
738     #import numpy as np
739     from itertools import product, combinations
740     fig = plt.figure(figsize=(8,8))
741     ax = fig.gca(projection='3d')
742     #ax.set_aspect("equal")
743     ax._axis3don = False
744     ax.margins(.2,.2,.2)
745
746
747
748
749
750
751     #draw sphere
752     R = 1
753     u, v = np.mgrid[0:2*np.pi:50j, 0:np.pi:50j]
754     x=R*np.cos(u)*np.sin(v)
755     y=R*np.sin(u)*np.sin(v)
756     z=R*np.cos(v)
757     #ax.plot_surface(x, y, z, color="r", alpha = 0.15)
758
759     ax.plot_surface(x, y, z, cmap=cm.YlGnBu_r,rstride=1, cstride=1, alpha = 0.10, linewidth = 0.15)
760     ax.view_init(vpolar, vazim)
761     #draw patch
762     #u, v = np.mgrid[0:2*np.pi:50j, 0:(np.pi/7):50j]
763     #x=R*np.cos(u)*np.sin(v)
764     #y=R*np.sin(u)*np.sin(v)
765     #z=R*np.cos(v)
766     #ax.plot_surface(x, y, z, color="r", alpha = 0.25)
767
```

```

768
769
770     #draw obstacles
771
772     for p in lista_obstaculos:
773         ax.scatter([p[0]],[p[1]],[p[2]], color="b", s=10, alpha = 0.2)
774
775     #draw trajectory
776     for p in trayectoria:
777         ax.scatter([p[0]],[p[1]],[p[2]], color="k",s=20, alpha = 0.7)
778
779     #Plot the x positive direction
780
781     #ax.quiver(1.5,0,0,1,0,0, length=0.5, arrow_length_ratio = .5)
782     #ax.quiver(0,1.5,0,0,1,0, length=0.5, arrow_length_ratio = .5)
783     #ax.quiver(0,0,1.5,0,0,1, length=0.5, arrow_length_ratio = .5)
784
785     fig.savefig('{}-{}.png'.format(title,nombre(numero)))
786     #ax.view_init(80, 30)
787     plt.close()
788     #plt.show()
789
790 def obs_uniforme(N, R, size):
791     """This function generates a sequence of N obstacles uniformly distributed on the surface of a unit sphere
792     outside a neighborhood of radius R of given angular aperture size"""
793     list_obs = []
794     omega = np.cos(size)
795     while len(list_obs) < N:
796         x, y, z = np.random.uniform(-1,1), np.random.uniform(-1,1), np.random.uniform(-1,1)
797         v = np.array([x, y, z])
798         norma = np.linalg.norm(v)
799         if norma <= R:
800             n = v/norma
801             if not np.dot(n, np.array([0.,0.,1.]))/R > omega:
802                 list_obs.append(R*n)
803
804     return list_obs
805
806 def obs_uniforme_S2(N, size):
807     """This function generates a sequence of N obstacles uniformly distributed on the surface of a unit sphere
808     outside a neighborhood of radius R of given angular aperture size"""
809     list_obs = []
810     omega = np.cos(size)
811     while len(list_obs) < N:
812         x, y, z = np.random.uniform(-1,1), np.random.uniform(-1,1), np.random.uniform(-1,1)
813         v = np.array([x, y, z])
814         norma = np.linalg.norm(v)
815         if norma <= 1:
816             n = v/norma
817             if not np.dot(n, np.array([0.,0.,1.])) > omega:
818                 list_obs.append(n)
819
820     return list_obs
821
822 def puntos_obs_j(r_omega, theta_omega, n):

```

```

824     r , theta, phi = trans_c_s(r_omega[0],r_omega[1],r_omega[2])
825     rp = rot_finita(r_omega, phi_uni(theta, phi), theta_omega)
826     puntos_obs_j = [rp]
827     for i in range(1,n):
828         x = rot_finita(rp, r_omega, 2*np.pi/n)
829         puntos_obs_j.append(x)
830         rp = x
831     return puntos_obs_j
832
833
834
835 def puntos_obs(lista_obstaculos, size, n_countor):
836     mis_obs = []
837     for i in range(len(lista_obstaculos)):
838         a = lista_obstaculos[i]
839         b = size
840         mis_obs = mis_obs + puntos_obs_j(a, b, n_countor)
841     return mis_obs
842 #Collision_check es una función que, dada una trayectoria: una lista de vectores que
843 #pasan por puntos sucesivos de la trayectoria, verifica si alguna de estas posiciones
844 #intersecció a alguno de los obstáculos. En caso de que así sea, actualiza conforme una
845 #colisión elástica. En caso de no intersectar a ningun obstáculo regresa una lista
846 #con dos vectores: posición inicial y posición final en ese orden.
847
848 def penetrate_obs(lista_vect, lista_obs, size):
849     metiches = []
850     for obs in lista_obs:
851         r_omega, theta_omega = obs, size
852         #frontera = .2
853         #metiches = []
854         for v in lista_vect:
855             tamanho = np.cos(theta_omega)
856             if np.dot(v,r_omega) >= tamanho:
857                 #print('Penetro el mother fucker obstacle')
858                 metiches.append(v)
859
860             else:
861                 continue
862             #print('no choco el mother fucker')
863             #valor = False
864     return metiches
865
866
867 def check_collision(lista_vect, lista_obs, size):
868     for obs in lista_obs:
869         r_omega, theta_omega = obs, size
870         for v in lista_vect:
871             tamanho = np.cos(theta_omega)
872             if np.dot(v,r_omega) > tamanho:
873                 return True
874             else:
875                 continue
876     return False
877
878
879 def tangent_space(x1,x2,xo):

```

```

880     np_prima = np.cross(np.cross(xo, x1), x1)
881     nor_p = np_prima/np.linalg.norm(np_prima)
882     up_prima = np.cross(np.cross(x1, x2), x1)
883     up = up_prima/np.linalg.norm(up_prima)
884     tp_prima = np.cross(x1, nor_p)
885     tp = tp_prima/np.linalg.norm(tp_prima)
886     y = (np.dot(up,tp))*tp - (np.dot(up, nor_p))*nor_p
887     v_rot_prima = np.cross(x1, y)
888     v_rot = v_rot_prima/np.linalg.norm(v_rot_prima)
889     return v_rot
890
891 def compute_all(lista_vec):
892     thetas = []
893     phis = []
894     thetaphis = []
895     cos_thetas = []
896
897     for v in lista_vec:
898         r, theta, phi = trans_c_s(v[0],v[1],v[2])
899         thetas.append(theta)
900         phis.append(phi)
901         thetaphis.append(theta*phi)
902         cos_thetas.append(np.cos(theta))
903
904     mean_theta, mean_phi = np.mean(thetas), np.mean(phis)
905
906     var_theta, var_phi = np.var(thetas), np.var(phis)
907
908     mean_theta_phi = np.mean(thetaphis)
909
910     mean_cos_theta = np.mean(cos_thetas)
911
912     return thetas, phis, mean_theta, mean_phi, var_theta, var_phi, mean_theta_phi, mean_cos_theta
913
914
915
916
917 def simulacion_obs(lista_obs, estructura, size_obs, initial_cond, sim_size, sensitiveness, D, delta_t):
918     """This function simulates the diffusion of brownian particles on the unit two dimensional sphere in which
919     there are certain prohibited regions, defined by its centers lista_obs and angular apertures size_obs"""
920     to_update = initial_cond
921     thetas_t = []
922     phis_t = []
923     m_theta_t = []
924     m_phi_t = []
925     v_theta_t = []
926     v_phi_t = []
927     cov_theta_phi_t = []
928     m_cos_theta_t = []
929     #plot_particle_traj_obs(estructura, to_update, 90,0,0)
930
931
932
933     for i in range(sim_size):
934         tentative_paths = []
935         updated_pos_at_t = []

```

```

936     tentative_pos = act_n(to_update, ese(D, delta_t))
937     for j in range(len(tentative_pos)):
938         tentative_paths.append(b_steps_(to_update[j], tentative_pos[j], sensitiveness))
939
940     for path in tentative_paths:
941         if check_collision(path, lista_obs, size_obs):
942             for k in range(1,len(path)):
943                 if check_collision([path[k]], lista_obs, size_obs):
944                     updated_pos_at_t.append(path[k-1])
945                     break
946             else:
947                 updated_pos_at_t.append(path[-1])
948
949     #plot_particle_traj_obs(estructura, updated_pos_at_t, 90,0,i + 1)
950     thetas, phis, mean_theta, mean_phi, var_theta, var_phi, mean_theta_phi, mean_cos_theta=\
951     compute_all(updated_pos_at_t)
952     thetas_t.append(thetas)
953     phis_t.append(phis)
954     m_theta_t.append(mean_theta)
955     m_phi_t.append(mean_phi)
956     v_theta_t.append(var_theta)
957     v_phi_t.append(var_phi)
958     cov_theta_phi_t.append(mean_theta_phi - mean_theta*mean_phi)
959     m_cos_theta_t.append(mean_cos_theta)
960
961     #print penetrate_obs(updated_pos_at_t, lista_obs , size_obs)
962     to_update = updated_pos_at_t
963     return thetas_t, phis_t, m_theta_t, m_phi_t, v_theta_t, v_phi_t, cov_theta_phi_t, m_cos_theta_t
964
965
966
967 def adapted_path(pos_ini, vel_ini, field, U0, m, T, gamma, delta_t, l_obs, size_obs, sensitiveness):
968     to_update = pos_ini
969     tentative_paths = []
970     updated_pos_at_t = []
971     # Here it would be desireble; more economic computational speaking, to update just the position
972     # of the particles using the velocities, but leave the velocities untouch.
973     tentative_pos, tentaive_vel = act_ensamble(pos_ini, vel_ini, field, U0, m, T, gamma, delta_t)
974
975     # Generates the points between initial and final points for each particle called the path
976
977     for j in range(len(tentative_pos)):
978         tentative_paths.append(b_steps_(to_update[j], tentative_pos[j], sensitiveness))
979
980     # In this part we check which paths intersect an obstacle
981
982     for path in tentative_paths:
983         if check_collision(path, l_obs, size_obs):
984             for k in range(1,len(path)):
985                 if check_collision([path[k]], l_obs, size_obs):
986                     updated_pos_at_t.append(path[k - 1])
987                     break
988             else:
989                 updated_pos_at_t.append(path[-1])
990
991     return updated_pos_at_t

```

```

992
993
994 def adapted_path_tfield(pos_ini, vel_ini, field, U0, m, T, gamma, delta_t, l_obs, size_obs, \
995 sensitiveness, t, omega,Kb):
996     to_update = pos_ini
997     tentative_paths = []
998     updated_pos_at_t = []
999     # Here it would be desireble; more economic computational speaking, to update just the position
1000    # of the particles using the velocities, but leave the velocities untouched.
1001    tentative_pos, tentaive_vel = act_ensamble_td_field(pos_ini, vel_ini, field, U0, m, T, \
1002    gamma, delta_t, t, omega,Kb)
1003
1004    # Generates the points between initial and final points for each particle called the path
1005
1006    for j in range(len(tentative_pos)):
1007        tentative_paths.append(b_steps_(to_update[j], tentative_pos[j], sensitiveness))
1008
1009    # In this part we check which paths intersect an obstacle
1010
1011    for path in tentative_paths:
1012        if check_collision(path, l_obs, size_obs):
1013            for k in range(1,len(path)):
1014                if check_collision([path[k]], l_obs, size_obs):
1015                    updated_pos_at_t.append(path[k - 1])
1016                    break
1017            else:
1018                updated_pos_at_t.append(path[-1])
1019
1020    return updated_pos_at_t
1021
1022
1023 def init_uni_dist_out_obs(n_part, l_obs, obs_size):
1024     """This function generates a uniform initial distribution of particles in which all of
1025     them are outside of all obstacles in the list l_obs"""
1026     l_part = []
1027     omega = np.cos(obs_size)
1028     while len(l_part) < n_part:
1029         # We generate a possible location for particle n
1030         x, y, z = np.random.uniform(-1,1), np.random.uniform(-1,1), np.random.uniform(-1,1)
1031         v = np.array([x, y, z])
1032         norma = np.linalg.norm(v)
1033         if norma <= 1:
1034             n = v/norma
1035         # Then we check whether this particle lies inside one of the obstacles
1036         l_trues = []
1037         for obs in l_obs:
1038             if not np.dot(n, obs) > omega:
1039                 l_trues.append(True)
1040             if sum(l_trues) == len(l_obs):
1041                 l_part.append(n)
1042
1043     return l_part
1044
1045 def coeficiente(n,N,D,dt):
1046     #N es el numero de pasos, por lo que el tiempo total transcurrido hasta ese momento es
1047     t = dt * N

```

```

1048     return ((2*n + 1.)/(4*np.pi)) * np.exp(-n*(n + 1)*D*t)
1049
1050
1051 def distribucion(theta, N, orden,D,dt):
1052     #lista = []
1053     c = np.zeros(orden)
1054     for n in range(orden):
1055         c[n] = coeficiente(n,N,D,dt)
1056         #lista.append(coeficiente(n,N)*np.polynomial.legendre.legval(np.cos(theta), c))
1057     lista = np.polynomial.legendre.legval(np.cos(theta), c)
1058     #print lista
1059     #return sum(lista)
1060     return lista
1061
1062 def distribucion_weighted(theta, N, orden,D,dt):
1063     #lista = []
1064     c = np.zeros(orden)
1065     for n in range(orden):
1066         c[n] = coeficiente(n,N,D,dt)
1067         #lista.append(coeficiente(n,N)*np.polynomial.legendre.legval(np.cos(theta), c))
1068     lista = np.polynomial.legendre.legval(np.cos(theta), c)*np.sin(theta)*2*np.pi
1069     #print lista
1070     #return sum(lista)
1071     return lista
1072
1073
1074 def plot_free_diff(thetas, l_steps, title, dpi, save=False, show=True):
1075
1076     theta = np.linspace(0.0,np.pi,1000)
1077     tiempos = []
1078     suma = 0.
1079     for i in range(len(thetas)):
1080         suma += i*dt
1081         tiempos.append(suma)
1082
1083     mean_cos_thetas_t = []
1084     for ensamble in thetas:
1085         ensamble = np.array(ensamble)
1086         cos_ens = np.cos(ensamble)
1087         mean_cos_thetas_t.append(np.mean(cos_ens))
1088
1089     fig, ax = plt.subplots(figsize=(7,6))
1090
1091     ax.spines['bottom'].set_position('zero')
1092     for i in l_steps:
1093
1094         ax.hist(thetas[i], bins=int(( np.array(thetas[i][:]).max() - np.array(thetas[i][:]).min() )*40),
1095                 density=True,color='cadetblue', alpha=0.25, label='Numeric Solution', edgecolor='black',
1096                 linewidth=.55);
1097         ax.set_xlim(-.5,6.2)
1098
1099         if ((distribucion_weighted(theta,i,1000,D,dt)[np.argmax(distribucion_weighted(theta,i,1000,D,dt))] + 0.35) \
1100             < 6.5):
1101             ax.text(theta[np.argmax(distribucion_weighted(theta,i,1000,D,dt))],
1102                     distribucion_weighted(theta,i,1000,D,dt)[np.argmax(distribucion_weighted(theta,i,1000,D,dt))] + \
1103                     0.2,

```

```

1104         't={0:.2f}'.format(i*dt), fontsize=12)
1105     ax.plot(theta, distribucion_weighted(theta,i,1000,D,dt), color = 'k', alpha = .96,#
1106             label=r"\$P(\theta,t|0,0) = \sum P_{l}(\cos{\theta})\cdot, \exp\{[-l(l+1)D,t]\}$",\
1107             linewidth=.3);
1108     ax.set_xlabel(r'$\theta$', size=19)
1109     ax.set_ylabel(r'$P(\theta,t|0,0)$', size=19)
1110
1111     ax.set_xticks([i*.5 for i in range(7)])
1112     ax.set_yticks([i for i in range(7)])
1113
1114     ax.set_xticklabels([str(i*.5) for i in range(7)], fontsize=13)
1115     ax.set_yticklabels([str(i) for i in range(7)], fontsize=13)
1116
1117     ins = inset_axes(ax,
1118                     width="50%", # width = 30% of parent_bbox
1119                     height=2.0, # height : 1 inch
1120                     loc=1)
1121     #print(len(tiempos))
1122     ins.plot(tiempos, mean_cos_thetas_t, label= 'Numeric', alpha=.75, linewidth=2.5,
1123               color = 'cadetblue', linestyle=':')
1124     #plt.scatter(tiempos, mean_cos_thetas_t, label= 'Numeric', marker='o', s=5, alpha=.05)
1125     ins.plot(tiempos, np.exp(-(2*D*np.array(tiempos))), label='Analytic', color='k', linewidth=0.85,\n
1126               linestyle='--')
1127     ins.legend(fontsize=12)
1128     ins.set_xlabel(r'$t$', fontsize=15)
1129     ins.set_ylabel(r'$\langle \mathbf{n}(t) \cdot \mathbf{n}(0) \rangle$', fontsize=14);
1130     #ax.set_tight_layout();
1131     if save:
1132         fig.savefig(title, dpi=dpi)
1133     if show:
1134         plt.show()
1135
1136
1137
1138
1139
1140 def plot_particles_Ylm(lista, vpolar, vazim, numero):
1141     """This function plots an ensamble of particles on the surface of a unit sphere and a heatmap of the
1142     potential interaction given by the first Spherical Harmonic with azimuthal symmetry, a Legendre
1143     Polynomial. vpolar and vazim
1144     the angles for the perspective and numero is the number of a sequence to be appended to the saved
1145     exported file
1146     with the purpose of making animations"""
1147
1148     #import matplotlib.pyplot as plt
1149     #import numpy as np
1150     from itertools import product, combinations
1151     fig = plt.figure(figsize=(8,8))
1152     ax = fig.gca(projection='3d')
1153     #ax.set_aspect("equal")
1154     ax._axis3don = False
1155
1156
1157
1158
1159

```

```

1160     #draw sphere
1161
1162     u, v = np.mgrid[0:2*np.pi:60j, 0:np.pi:60j]
1163
1164     radio = np.sqrt(3./(4*np.pi))*np.cos(v)
1165
1166     x=1.05*np.cos(u)*np.sin(v)
1167     y=1.05*np.sin(u)*np.sin(v)
1168     z=1.05*np.cos(v)
1169     #ax.plot_surface(x, y, z, color="r", alpha = 0.15)
1170
1171
1172     fcolors = np.sqrt(3./(4*np.pi))*np.cos(v)
1173     fmax, fmin = fcolors.max(), fcolors.min()
1174     fcolors = (fcolors - fmin)/(fmax - fmin)
1175
1176     ax.plot_surface(x, y, z, rstride=1, cstride=1, facecolors=cm.viridis(fcolors), alpha = 0.38)
1177
1178     #ax.plot_surface(x, y, z, cmap=cm.YlGnBu_r, rstride=1, cstride=1, alpha = 0.10, linewidth = 0.10)
1179     ax.view_init(vpolar, vazim)
1180
1181
1182
1183
1184     #draw particles
1185     for p in lista:
1186         ax.scatter([p[0]],[p[1]],[p[2]],color="cadetblue", s=20, alpha = 0.85,
1187                    linewidth=1.0, edgecolor='k')
1188
1189     fig.savefig('SHY10_Field_X01_Img{}.png'.format(nombre(numero)))
1190     #ax.view_init(80, 30)
1191     #plt.show()
1192     plt.close()
1193
1194
1195
1196
1197
1198 def dist_vel_ini(xs,delta_t, T,m,inten,gamma,Kb):
1199     """Function that given a list of initial positions xs, generates an initial velocities distribution
1200     one for each position, sampled from the bi gaussian distribution in each tangent plane with variance
1201     4 Kb T gamma/m """
1202     l_vel = []
1203     for x in xs:
1204         l_vel.append(inten*tangent_white_noise(x,delta_t,T,m,gamma,Kb))
1205     return l_vel
1206
1207
1208
1209 # Dynamics with Memory Kernels
1210
1211 def act_gLan_MKernels(pos_ini, vel_ini, Ext_F, ud_rand_F, m, gamma, delta_t, history):
1212     """This function updates de position and velocity of a diffusion process restricted to move
1213     on the surface of the unit sphere"""
1214
1215     vel_fin = vel_ini*(1 - (gamma/m) * delta_t) + ud_rand_F + Ext_F * delta_t

```

```

1216     #print('vel_fin', vel_fin, 'norm_vel_ini-delta_t',np.linalg.norm(vel_ini)*delta_t, 'ud_rand_F',
1217     #ud_rand_F,'Ext_field-delta', Ext_F * delta_t)
1218     if np.linalg.norm(vel_ini) > 0.:
1219
1220         vel_fin = rot_finita(vel_fin, np.cross(vel_ini, pos_ini), np.linalg.norm(vel_ini * delta_t))
1221
1222     s = np.linalg.norm(vel_ini * delta_t)
1223
1224     #if s > 1e-8:
1225     if s > 0 and s < np.pi/2:
1226         #print('s',s)
1227         uni_des = vel_ini * delta_t / s
1228         #print('uni_des',uni_des)
1229         q = np.tan(s)
1230         pos_fin = pos_ini + q*uni_des
1231         pos_fin = pos_fin / np.linalg.norm(pos_fin)
1232     else:
1233         pos_fin = pos_ini
1234     #print(np.linalg.norm(pos_fin))
1235     #print('pos_fin dot vel_fin', np.dot(pos_fin, vel_fin))
1236     return pos_fin, vel_fin
1237
1238
1239 #Kb = 13.8064852
1240
1241
1242
1243 def act_ensemble_MKernels(l_pos, l_vel, Ext_F, U0, m, T, gamma, delta_t,Kb):
1244     """This function applies the updating recipe act_gLan to a list of initial positions and velocities
1245     l_pos, and l_vel and returns the updates of these lists"""
1246     l_npos = []
1247     l_nvel = []
1248     l_memories = []
1249     for i in range(len(l_pos)):
1250         pos, vel = l_pos[i], l_vel[i]
1251         random_wn = tangent_white_noise(pos, delta_t, T, m, gamma, Kb)
1252         #pos_fin, vel_fin = act_gLan(pos, vel, Ext_F(*args), random_wn, m, gamma, delta_t)
1253         pos_fin, vel_fin = act_gLan_MKernels(pos, vel, Ext_F(pos, U0), random_wn, m, gamma, delta_t,history)
1254         #print(Ext_F(pos, U0))
1255         l_npos.append(pos_fin)
1256         l_nvel.append(vel_fin)
1257     return l_npos, l_nvel
1258
1259 def act_ensemble_td_field_MKernels(l_pos, l_vel, Ext_F, U0, m, T, gamma, delta_t, t, omega,Kb):
1260     """This function applies the updating recipe act_gLan to a list of initial positions and velocities
1261     l_pos, and l_vel and returns the updates of these lists"""
1262     l_npos = []
1263     l_nvel = []
1264     for i in range(len(l_pos)):
1265         pos, vel = l_pos[i], l_vel[i]
1266         random_wn = tangent_white_noise(pos, delta_t, T, m, gamma,Kb)
1267         #pos_fin, vel_fin = act_gLan(pos, vel, Ext_F(*args), random_wn, m, gamma, delta_t)
1268         pos_fin, vel_fin = act_gLan(pos, vel, Ext_F(pos, U0, t, omega), random_wn, m, gamma, delta_t)
1269         #print(Ext_F(pos, U0))
1270         l_npos.append(pos_fin)
1271         l_nvel.append(vel_fin)

```

```

1272     return l_npos, l_nvel
1273
1274
1275
1276 def plot_particles_pendulum(lista, vpolar, vazim, numero, titulo):
1277     """This function plots a list of vectors given in lista on the surface of a unit sphere with a view
1278     an angle vpolar of inclination with respect to the plane x-y and rotated an angle of vazim angular units
1279     in the direction around the z axis"""
1280     from mpl_toolkits.mplot3d import axes3d
1281     from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
1282     from matplotlib import cm
1283
1284     from itertools import product, combinations
1285     fig = plt.figure(figsize=(8,8))
1286     ax = fig.gca(projection='3d')
1287     #ax.set_aspect("equal")
1288     ax._axis3don = False
1289
1290
1291     #draw sphere
1292     R = 1
1293     u, v = np.mgrid[0:2*np.pi:50j, 0:np.pi:50j]
1294     x=R*np.cos(u)*np.sin(v)
1295     y=R*np.sin(u)*np.sin(v)
1296     z=R*np.cos(v)
1297
1298     ax.plot_surface(x, y, z, cmap=cm.YlGnBu_r,rstride=1, cstride=1, alpha = 0.10, linewidth = 0.10)
1299
1300
1301     #draw points
1302     for p in lista:
1303         #ax.scatter([p[0]], [p[1]], [p[2]],color="b",s=15, alpha = 0.25)
1304         ax.quiver(0,0,0,p[0],p[1],p[2])
1305
1306     ax.view_init(vpolar, vazim)
1307     fig.savefig('{}_Img_{}.png'.format(titulo,nombre(numero)))
1308
1309     #plt.show()
1310     plt.close()
1311
1312
1313
1314 def time_histograms(l_s, palette, array, bins, fig_sx, fig_sy, theta,
1315                     phi, alpha, dt, xpnt2, p0_Ylm, ypot, path, put_back=False):
1316     """
1317     fig = plt.figure(figsize=(fig_sx,fig_sy))
1318     ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
1319
1320     colors = sns.color_palette(palette, len(l_s))
1321
1322
1323     for step, c in zip(range(len(l_s)+1), colors):
1324
1325
1326         hist_h, bins_h = np.histogram(array[l_s[step]], bins=bins,

```

```

1328                               density=True)
1329
1330     xs = np.convolve(bins_h, np.ones(2), "valid")/2
1331
1332     xwidth = np.diff(bins_h)
1333
1334     ax.bar(xs, hist_h, zs=l_s[step]*dt, width=xwidth, zdir='y', color=c, ec='k', alpha=alpha, \
1335             linewidth=0.5)
1336
1337
1338 if put_back:
1339     ax.plot(xpot2, p0_Ylm, zs=l_s[-1]*dt + 160*dt, zdir='y', color='k', alpha=0.8, linewidth=1.5)
1340     hist_h, bins_h = np.histogram(x4[-1], bins=40,
1341                                   density=True)
1342
1343     xs = np.convolve(bins_h, np.ones(2), "valid")/2
1344
1345     xwidth = np.diff(bins_h)
1346
1347     ax.bar(xs, hist_h, zs=l_s[step]*dt+ 160*dt, width=xwidth, zdir='y', color=c, ec='k', \
1348             alpha=alpha, linewidth=0.5)
1349
1350 else:
1351     ax.plot(xpot2, p0_Ylm, zs=l_s[-1]*dt, zdir='y', color='k', alpha=0.8, linewidth=1.5)
1352
1353
1354 label = r"$U(\theta) = \lambda Y_2^0(\theta, \phi)$"
1355
1356 ax.plot(xpot2, 0.5*np.sin(xpot2), zs=l_s[0]*dt, zdir='y', color = "g", linestyle = "--", \
1357 label = r"$P(\theta,0) = \frac{1}{2}, \sin{\theta}$")
1358
1359
1360
1361 ax.set_xlabel(r'$\theta$', fontsize=18)
1362 ax.set_ylabel(r'$t$', fontsize=18)
1363 ax.set_zlabel(r'$\overline{P}(\theta,t)|\theta_0,t_0|$', fontsize=18)
1364 #ax.tick_params(axis='z', labelrotation=45)
1365 #ax.view(0,0)
1366 ax.view_init(theta, phi)
1367 #ax._axis3don = False
1368 #ax.set_facecolor((1,1,1))
1369 ax.w_xaxis.set_pane_color((1.0, 1.0, 1.0, 1.0))
1370 ax.w_yaxis.set_pane_color((1.0, 1.0, 1.0, 1.0))
1371 ax.w_zaxis.set_pane_color((1.0, 1.0, 1.0, 1.0))
1372 plt.savefig(path, dpi=300)
1373 plt.show()
1374
1375
1376 #Fourth Order Runge-Kutta Method for the Spherical Pendulum
1377
1378 l_theta = [theta0]
1379 l_phi = [phi0]
1380 l_dtheta = [dtheta0]
1381 l_dphi = [dphi0]
1382 x, y, z = trans_s_c(1,theta0, phi0)
1383 l_pos_t = [np.array([x, y, z])]
```

```
1384
1385     for n in range(Np):
1386         k1_theta = h * dtheta0
1387         l1_dtheta = h * f1(theta0, phi0, dtheta0, dphi0)
1388         k1_phi = h * dphi0
1389         l1_dphi = h * f2(theta0, phi0, dtheta0, dphi0)
1390         k2_theta = h * (dtheta0 + 1/2. * l1_dtheta)
1391         l2_dtheta = h * f1(theta0 + 1/2. * k1_theta, phi0 + 1/2. * k1_phi , dtheta0 + 1/2. * l1_dtheta,
1392                             dphi0 + 1/2.*l1_dphi)
1393         k2_phi = h * (dphi0 + 1/2. * l1_dphi)
1394         l2_dphi = h * f2(theta0 + 1/2. * k1_theta, phi0 + 1/2. * k1_phi , dtheta0 + 1/2. * l1_dtheta,
1395                             dphi0 + 1/2.*l1_dphi)
1396         k3_theta = h * (dtheta0 + 1/2. * l2_dtheta)
1397         l3_dtheta = h * f1(theta0 + 1/2. * k2_theta, phi0 + 1/2. * k2_phi , dtheta0 + 1/2. * l2_dtheta,
1398                             dphi0 + 1/2.*l2_dphi)
1399         k3_phi = h * (phi0 + 1/2. * l2_dphi)
1400         l3_dphi = h * f2(theta0 + 1/2. * k2_theta, phi0 + 1/2. * k2_phi , dtheta0 + 1/2. * l2_dtheta,
1401                             dphi0 + 1/2.*l2_dphi)
1402         k4_theta = h * (dtheta0 + 1/2. * l3_dtheta)
1403         l4_dtheta = h * f1(theta0 + 1/2. * k3_theta, phi0 + 1/2. * k3_phi , dtheta0 + 1/2. * l3_dtheta,
1404                             dphi0 + 1/2.*l3_dphi)
1405         k4_phi = h * (phi0 + 1/2. * l3_dphi)
1406         l4_dphi = h * f2(theta0 + 1/2. * k3_theta, phi0 + 1/2. * k3_phi , dtheta0 + 1/2. * l3_dtheta,
1407                             dphi0 + 1/2.*l3_dphi)
1408         theta0 = theta0 + 1/6. * (k1_theta + 2 * k2_theta + 2 * k3_theta + k4_theta)
1409         phi0 = phi0 + 1/6. * (k1_phi + 2 * k2_phi + 2 * k3_phi + k4_phi)
1410         dtheta0 = dtheta0 + 1/6. * (l1_dtheta + 2 * l2_dtheta + 2 * l3_dtheta + l4_dtheta)
1411         dphi0 = dphi0 + 1/6. * (l1_dphi + 2 * l2_dphi + 2 * l3_dphi + l4_dphi)
1412
1413         l_theta.append(theta0)
1414         l_phi.append(phi0)
1415         l_dtheta.append(dtheta0)
1416         l_dphi.append(dphi0)
1417         x, y, z = trans_s_c(1,theta0, phi0)
1418         l_pos_t.append(np.array([x, y, z]))
```

Bibliografía

- [1] Ralph Abraham and Jerrold E. Marsden. *Foundations of Mechanics*. Addison wesley, 1987.
- [2] Ludwig Arnold. *Stochastic Differential Equations: Theory and Applications*. Wiley Intersciences publication. John Wiley and Sons, Inc., 1974.
- [3] Vladimir I. Arnol'd. *Ordinary Differential Equations*. The MIT Press, first edition, 1973.
- [4] Vladimir I. Arnold. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Graduate Texts in Mathematics. Springer-Verlag, 1980.
- [5] Vladimir I. Arnold. *Ordinary Differential Equations*. Springer-Verlag, 1992.
- [6] Vladimir I. Arnol'd, Valery V. Kozlov, and Anatoly I. Neishtadt. *Mathematical Aspects of Classical and Celestial Mechanics*. Springer, third edition, 2006.
- [7] Kendall Atkinson and Weimin Han. *Spherical Harmonics and Approximations on the Unit Sphere: An introduction*. Number 2044 in Lectures Notes in Mathematics. Springer, 2012.
- [8] E. T. Bell. *Men of Mathematics The Lives and Achievements of the Great Mathematicians from Zeno to Poincaré*. Simon and Schuster, 1986.
- [9] G. W. Bluman. Similarity solutions of the one-dimensional Fokker-Planck Equation. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 6(2):143–153, March 1971.
- [10] George W. Bluman and Stephen C. Anco. *Symmetry and Integration Methods for Differential Equations*, volume 154 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer, 2002.
- [11] Vladimir I. Bogachev, Nicolai V. Krylov, Michael Röckner, and Stanislav V. Shaposhnikov. *Fokker-Planck-Kolmogorov Equations*, volume 207 of *Mathematical Surveys and Monographs*. American Mathematical Society, 2015.
- [12] Lisa Borland and Hermann Haken. Unbiased determination of forces causing observed processes. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 88:95–103, January 1992.
- [13] Lisa Borland and Hermann Haken. Unbiased estimate of forces from measured correlation functions, including the case of strong multiplicative noise. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 1:452–459, June 1992.

- [14] Richard L. Burden, Douglas J. Faires, and Annette M. Burden. *Numerical Analysis*. Cengage Learning, tenth edition, 2016.
- [15] T. Calandre, O. Bénichou, D. S. Grebenkov, and R. Voituriez. Splitting probabilities and interfacial territory covered by two-dimensional and three-dimensional surface-mediated diffusion. *Physical Review E*, 89(012149):1–15, January 2014.
- [16] Herbert B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley and Sons Inc, 1985.
- [17] Tobias Carlsson, Tobias Ekholm, and Christer Elvingson. Algorithm for generating a brownian motion on a sphere. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 43(505001):1–10, noviembre 2010.
- [18] Manfredo Perdigão Do Carmo. *Riemannian Geometry*. Birkhäuser, 1992.
- [19] Ramón Castañeda-Priego, Pavel Castro-Villarreal, Sendic Estrada-Jiménez, and José Miguel Méndez-Alcaraz. Brownian motion of free particles on curved surfaces. arXiv:1211.5799v2, June 2013.
- [20] Pavel Castro-Villarreal. Brownian motion meets Riemann curvature. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2010:1–16, August 2010.
- [21] Pavel Castro-Villarreal and Francisco Javier Sevilla. Active motion on curved surfaces. *Physical Review E*, 97(052605):1–12, May 2018.
- [22] Pavel Castro-Villarreal, Alejandro Villada-Balbuena, José Miguel Méndez-Alcaraz, Ramón Castañeda-Priegoa, and Sendic Estrada-Jiménez. A brownian dynamic algorithm for colloids in curved manifolds. *The Journal of Chemical Physics*, 140(214115):1–10, junio 2014.
- [23] David Chandler. *Introduction to Modern Statistical Mechanics*. Oxford University Press, 1987.
- [24] S. Chandrasekhar. Stochastic problems in physics and astronomy. *Reviews of Modern Physics*, 15(1):1–87, January 1943.
- [25] Alexandre J. Chorin and Jerrold E. Marsden. *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*. Text in Applied Mathematics. Springer, third edition, 2000.
- [26] Mónica Clapp. *Análisis Matemático*. Textos. Papirhos, segunda edición, 2017.
- [27] William T. Coffey and Yuri P. Kalmikov. *The Langevin Equation With Applications to Stochastic Problems in Physics, Chemistry and Electrical Engineering*. World Scientific, third edition, 2012.
- [28] Claude Cohen-Tannoudji, Jaques Dupont-Roc, and Gilbert Grynberg. *Photons and Atoms Introduction to Quantum Electrodynamics*. Wiley Intersciences publication. John Wiley and Sons, Inc., 1989.

- [29] P. Constantin, I. G. Kevrekidis, and E. S. Titi. Asymptotic States of a Smoluchowski Equation. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 174:365–384, 2004.
- [30] Peter Constantin, Ioannis Kevrekidis, and Edriss S. Titi. Remarks on a Smoluchowski equation. *Discrete and Continuous Dynamical Systems*, 11(1):101–112, July 2004.
- [31] Richard Courant and David Hilbert. *Methods of Mathematical Physics*, volume 2. Wiley-VCH, 2004.
- [32] Richard Courant and David Hilbert. *Methods of Mathematical Physics*, volume 1. Wiley-VCH, 2004.
- [33] Richard Courant and Fritz John. *Introduction to Calculus and Analysis*, volume I of *Classics in Mathematics*. Springer-Verlag, 1999.
- [34] S. R. de Groot and P. Mazur. *Non-Equilibrium Thermodynamics*. Dover Publications Inc., 1984.
- [35] J. L. Doob. The brownian movement and stochastic equations. *Annals of Mathematics*, 43(2):351–369, April 1942.
- [36] J. L. Doob. *Stochastic Processes*. Wiley Publications in Statistics. John Wiley and Sons Inc, 1964.
- [37] Jörn Dunkel and Peter Hänggi. Relativistic Brownian motion. *Physics Reports*, 471:1–73, January 2009.
- [38] Albert Einstein. *Investigation on the Theory of Brownian Motion*. Dover Publications Inc., May 1956.
- [39] K. David Elworthy. *Stochastic Differential Equations on Manifolds*. London Mathematical Society Lecture Note Series. Cambridge University Press, 1982.
- [40] Michel Emery. *Stochastic Calculus in Manifolds*. Universitext. Springer-Verlag, 1989.
- [41] Lawrence C. Evans. *An Introduction to Stochastic Differential Equations*. American Mathematical Society, 2013.
- [42] Lawrence C. Evans. *Partial Differential Equations*. Graduate Studies in Mathematics. American Mathematical Society, 2015.
- [43] Richard P. Feynman. *The Principle of Least Action in Quantum Mechanics*. PhD thesis, Princeton, 1942.
- [44] Gerald B. Folland. *Real Analysis Modern Techniques and their Applications*. Pure and Applied Mathematics: A Wiley-Intersciences series of Texts, Monographs and Tracts. John Wiley and Sons, Inc., 1999.
- [45] Gerald B. Folland. *Fourier Analysis and its Applications*, volume 4 of *Pure and Applied Undergraduate Texts*. American Mathematical Society, 2009.

- [46] Stephen H. Friedberg, Arnold J. Insel, and Lawrence E. Spencer. *Linear Algebra*. Prentice Hall, 2003.
- [47] Avner Friedman. *Partial Differential Equations of Parabolic Type*. Dover Publications, Inc. Mineola, New York, 1964.
- [48] Avner Friedman. *Stochastic Differential Equations and Applications*. Dover Publications Inc., 2004.
- [49] Takahiro Fujiwara, Ken Ritchie, Hideji Murakoshi, Ken Jacobson, and Akihiro Kusumi. Phospholipids undergo hop diffusion in compartmentalized cell membrane. *The Journal of Cell Biology*, 157(6):1071–1081, 2002.
- [50] C. W. Gardiner. *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*. Springer Series in Synergetics. Springer, 2nd edition, 1997.
- [51] I. M. Gelfand and S. V. Fomin. *Calculus of variations*. Dover Publications Inc., 2000.
- [52] Abhijit Ghosh, Joseph Samuel, and Supurna Sinha. A “gaussian” for diffusion on the sphere. *A Letters Journal Exploring The Frontiers of Physics*, 98, May 2012.
- [53] Iosif I. Gikhman and Anatoli V. Skorokhod. *The Theory of Stochastic Processes*, volume II of *Classics in Mathematics*. Springer, 2004.
- [54] Daniel T. Gillespie. *Markov Processes: An introduction for the physical sciences*. Academic Press, 1992.
- [55] Daniel T. Gillespie. The mathematics of brownian motion and johnson noise. *American Journal of Physics*, 64(3):225–240, March 1996.
- [56] Daniel T. Gillespie. The multivariate Langevin and Fokker-Planck equations. *American Journal of Physics*, 64(10):1246–1257, October 1996.
- [57] Daniel T. Gillespie. Describing the state of a stochastic process. *American Journal of Physics*, 66(533):534–536, 1998.
- [58] P. Glansdorff and I. Prigogine. Non-equilibrium stability theory. *Physica*, 46(3):344–366, March 1970.
- [59] Herbert Goldstein, Charles Poole, and John Safko. *Classical Mechanics*. Addison wesley, third edition, 2002.
- [60] Adriano Valdés Gómez. Simulaciones numéricas usando las ecuaciones multivariadas de Langevin y Fokker-planck para tiempos de primer escape en la esfera con obstáculos: Un modelo para PIP2. Master thesis, UNAM, 2016.
- [61] R. Graham and H. Haken. Fluctuations and Stability of Stationary Non-Equilibrium Systems in Detailed Balance. *Z. Physik*, 245:141–153, March 1971.

- [62] Robert Graham. Covariant Formulation of Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics. *Zeitschrift für Physik B*, 26:397–405, Dec 1977.
- [63] Robert Graham and Hermann Haken. Generalized Thermodynamic Potential for markoff Systems in Detailed Balance and far from Thermal Equilibrium. *Z. Physik*, 243:289–302, January 1971.
- [64] Melville S. Green. Markoff random processes and the statistical mechanics of time-dependent phenomena. *The Journal of Chemical Physics*, 20(8):1281–1295, August 1952.
- [65] Walter Greiner. *Classical Mechanics*. Theoretical Physics. Springer, 2003.
- [66] Peter J. M. Van Haastert and Peter N. Devrotes. Chemotaxis: Signalling the way forward. *Nature*, 5:626–634, 2004.
- [67] Wolfgang Hahn. *Stability of Motion*, volume 138 of *Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften in Einzeldarstellungen*. Springer-Verlag, 1967.
- [68] Hermann Haken. Generalized Onsager-Machlup Function and Classes of Path Integral Solutions of the Fokker-Planck Equation and the Master Equation. *Zeitschrift für Physik B*, 24:321–326, 1976.
- [69] Hermann Haken. *Synergetics An Introduction Nonequilibrium Phase Transitions and Self-Organization in Physics, Chemistry and Biology*, volume 1 of *Springer Series in Synergetics Springer Complexity*. Springer-Verlag, 1983.
- [70] Brian C. Hall. *Lie Groups, Lie Algebras, and Representations An Elementary Introduction*. Graduate Texts in Mathematics. Springer, 2015.
- [71] Philip Hartman and Geoffrey S. Watson. “normal” distributions function on spheres and the modified bessel functions. *The Annals of Probability*, 2(4):593–607, August 1974.
- [72] Desmod J. Higham. An Algorithmic Introduction to Numerical Simulation of Stochastic Differential Equations. *SIAM*, 43(3):525–546, September 2001.
- [73] Desmod J. Higham, Xuerong Mao, and Andrew M. Stuart. Strong convergence of Euler-type methods for non-linear stochastic differential equations. *Journal of Society for Industrial and Applied Mathematics*, 40(3):1041–1063, 2002.
- [74] F. Hofelich. On the definition of entropy for non-equilibrium states. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei*, 226:395–408, October 1969.
- [75] Leon Van Hove. The approach to equilibrium in quantum statistics. *Physica*, 23:441–480, 1957.
- [76] Elton P. Hsu. *Stochastic Analysis on Manifolds*, volume 38 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, 2002.

- [77] Kiyosi Itô. Stochastic differential equations in a differentiable manifold. *Nagoya Mathematical Journal*, 1:35–47, June 1950.
- [78] Kyosi Itô. Stochastic integrals. *Proceedings of the Imperial Academy*, 20(8):519–524, 1944.
- [79] Jorge Ize. *Cálculo de variaciones*. Fenomec, 2002.
- [80] John David Jackson. *Classical Electrodynamics*. John Wiley and Sons Inc, third edition, 1999.
- [81] Fritz John. *Partial Differential Equations*. Springer-Science+Business Media, LLC, fourth edition edition, 1982.
- [82] Jorge V. José and Eugene J. Saletan. *Classical Dynamics A Contemporary Approach*. Cambridge University Press, 2000.
- [83] N. G. Van Kampen. Quantum statistics of irreversible processes. *Physica*, 20:603–622, 1954.
- [84] N. G. Van Kampen. Itô versus stratonovich. *Journal of Statistical Physics*, 24(1):175–187, January 1980.
- [85] N. G. Van Kampen. Elimination of fast variables. *Physics Reports*, 124(2):69–160, 1985.
- [86] N. G. Van Kampen. Brownian motion on a manifold. *Journal of Statistical Physics*, 44(1/2):1–24, January 1986.
- [87] N. G. Van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. North-Holland Personal Library. Elsevier, 2007.
- [88] N. G. Van Kampen and I. Oppenheim. Brownian motion as a problem of eliminating fast variables. *Physica*, 138A:231–248, 1986.
- [89] V. M. Kenkre, E. W. Montroll, and M. F. Shlesinger. Generalized master equations for continuous-time random walks. *Journal of Statistical Physics*, 9(1):45–50, April 1973.
- [90] Peter E. Kloeden and Eckhard Platen. *Numerical Solutions to Stochastic Differential Equations*, volume 23 of *Applications of Mathematics Stochastic Modeling and Applied Probability*. Springer, 1999.
- [91] H. A. Kramers. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. *Physica*, VII(4):284–304, April 1940.
- [92] Raphael Kruse. *Strong and Weak approximation of Semilinear Stochastic Evolution Equations*. Lectures Notes in Mathematics. Springer, 2014.
- [93] Bernt Øksendal. *Stochastic Differential Equations An Introduction with Applications*. Universitext. Springer-Verlag, 4th edition, 1995.

- [94] R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume. *Statistical Physics II Nonequilibrium Statistical Mechanics*, volume II of *Springer Series in Solid-State Sciences*. Springer, 1998.
- [95] Tom Lancaster and Stephen J. Blundell. *Quantum Field Theory for the Gifted Amateur*. Oxford University Press, 2018.
- [96] David P. Landau and E. M. Lifshitz. *Statistical Physics*, volume 5 of *Course of Theoretical Physics*. Butterworth-Heinemann, 3th edition, 2008.
- [97] L. D. Landau. *Mecánica*. Editorial Reverté, S. A., first edition, 1965.
- [98] Paul Langevin. Sur la théorie du mouvement brownien. *C. R. Acad. Sci.*, 146:530–533, 1908.
- [99] J. L. Lebowitz and E. Rubin. Dynamical study of brownian motion. *The Physical Review*, 131(6):2381–2396, September 1963.
- [100] Paul Lévy. Sur certains processus stochastiques homogènes. *Compositio Mathematica*, 7:283–339, 1940.
- [101] Xuerong Mao. The truncated Euler–Maruyama method for stochastic differential equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 290:370–384, December 2015.
- [102] Xuerong Mao. Convergence rates of the truncated Euler-Maruyama method for stochastic differential equations. *Journal of computational and applied mathematics*, 296:362–375, April 2016.
- [103] P. Masami, editor. *Norbert Wiener Collected Works With Commentaries*, volume 1 of *Mathematicians of Our Time*. MIT Press, 1976.
- [104] Peter Matthews. Covering problems for brownian motion on spheres. *The Annals of Probability*, 16(1):189–199, January 1988.
- [105] Robert M. Mazo. *Brownian Motion Fluctuations, Dynamics and Applications*, volume 112 of *International Series of Monographs on Physics*. Oxford University Press, 2002.
- [106] P. Mazur and I. Oppenheim. Molecular theory of brownian motion. *Physica*, 50:241–258, 1970.
- [107] B. T. McClure. Statistics of particle diffusion in spherical geometry. *Physical Review*, 130(4):1295–1300, May 1963.
- [108] Ralf Metzler, J.-H. Jeon, and A.G. Cherstvy. Non-brownian diffusion in lipid membranes: Experiments and simulations. *Biochimica et Biophysica Acta*, 1858:2451–2467, January 2016.
- [109] Ralf Metzler and Joseph Klafter. The random walk’s guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. *Physics Reports*, 339(2000):1–77, 2000.

- [110] Radu P. Mondescu and M. Muthukumar. Brownian motion and polymer statistics on certain curved manifolds. *Physical Review E*, 57(4):4411–4419, April 1998.
- [111] Elliott W. Montroll and M. S. Green. Statistical mechanics of transport and non-equilibrium processes. *Annual Review of Physical Chemistry*, 5:449–476, 1954.
- [112] Elliott W. Montroll and Joseph E. Mayer. Statistical mechanics of imperfect gases. *The Journal of Chemical Physics*, 9:626–637, August 1941.
- [113] Raúl Espejel Morales and Alipio Calles Martínez. *Métodos numéricos para la solución de ecuaciones diferenciales*. Las prensas de ciencias, 2019.
- [114] Hazime Mori. Collective motion of particles at finite temperatures. *Progress of theoretical Physics*, 28(5):763–783, November 1962.
- [115] Hazime Mori. Transport, Collective Motion, and Brownian motion. *Progress of theoretical Physics*, 33(3):423–455, March 1965.
- [116] Hazime Mori and Kyozi Kawasaki. Theory of dynamical behavior of ferromagnetic spins. *Progress of theoretical Physics*, 27(3):529–570, March 1962.
- [117] Claus Müller. *Analysis of Spherical Symmetries in Euclidean Spaces*. Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, 1998.
- [118] Ali Hasan Nayfeh. *Introduction to Perturbation Techniques*. John Wiley and Sons, Inc., first edition, 1981.
- [119] A. Novikov, D. Kuzmin, and O. Ahmadi. Random walk methods for Monte Carlo simulations of Brownian diffusion on a sphere. *Applied Mathematics and Computation*, 364(124670):1–14, January 2020.
- [120] Keith B. Oldham and Jerome Spanier. *The Fractional Calculus Theory and Applications of Differentiation and Integration to Arbitrary Order*. Dover Publications, Inc. Mineola, New York, 2002.
- [121] Barret O'Neill. *Elementary Differential Geometry*. Academic Press, 2006.
- [122] Lars Onsager. Reciprocal relations in reversible processes. 1. *Physical Review*, 37:405–426, February 1931.
- [123] Lars Onsager. Reciprocal relations in reversible processes. 2. *Physical Review*, 38(405):2265–2279, December 1931.
- [124] Matteo Polettini. Diffusion in nonuniform temperature and its geometric analog. *Physical Review E*, 87(032126):1–8, 2013.
- [125] Matteo Polettini. Generally covariant state-dependent diffusion. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2013(07):P07005, jul 2013.

- [126] Marten Postma, Leonard Bosgraaf, Harriët M. Loovers, and Peter J. M. Van Haastert. Chemotaxis: signalling modules join hands at front and tail. *EMBO reports*, 5(1):35–40, 2004.
- [127] I. Prigogine. *Non-Equilibrium Statistical Mechanics*. Monographs in Statistical Physics and Thermodynamics. John Wiley and Sons Inc, 1962.
- [128] I. Prigogine, R. Balescu, F. Henin, and P. Résibois. On the dynamical derivation of equilibrium statistical mechanics. *Physica*, 26:S36–S48, 1960.
- [129] I. Prigogine and P. Résibois. On the kinetics of the approach to equilibrium. *Physica*, 27:629–646, 1961.
- [130] Frederick Reif. *Berkely Physics Course 5; Física estadística*. Editorial Reverté, S. A., 1969.
- [131] P. Résibois. On the approach to equilibrium in quantum systems. *Physica*, 27:541–570, 1961.
- [132] P. Résibois. On the equivalence between two generalized master equations. *Physica*, 29, 1963.
- [133] Anne J. Ridley, Martin A. Schwartz, Keith Burridge, Richard A. Firtel, Mark H. Ginsberg, Gary Borisy, J. Thomas Parsons, and Alan Rick Horwitz. Cell migration: Integrating signals from front to back. *Science*, 302:1704–1709, December 2003.
- [134] Bernhard Riemann. *On the Hypotheses Which Lie at the Bases of Geometry*. Classic Texts in the Sciences. Birkhäuser, 2016.
- [135] Hannes Risken. *The Fokker-Planck equation Methods of solution and applications*. Springer Series in Synergetics. Springer-Verlag, 1989.
- [136] P. H. Roberts and H. D. Ursell. Random walk on a sphere and on riemannian manifold. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences.*, 252(A.1012):317–356, March 1960.
- [137] Walter Rudin. *Principles of Mathematical Analysis*. International Series in Pure and Applied Mathematics. McGraw-Hill, 1976.
- [138] J. J. Sakurai and Jim Napolitano. *Modern Quatum Mechanics*. Cambridge University Press, 2nd edition, 2018.
- [139] Alex A. Samoletov. A remark on the kramers problem. *Journal of Statistical Physics*, 96(5-6):1351–1357, 1999.
- [140] Zeev Schuss. *Theory and Applications of Stochastic Processes An Analytical Approach*. Number 170 in Applied Mathematical Sciences. Springer, 2009.
- [141] Bernard Schutz. *A First Course in General Relativity*. Cambridge University Press, 2009.

- [142] M. Schwartz and Y. Navot. Stochastic dynamics of constrained systems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 245:517–522, 1997.
- [143] A. N. Shirayev, editor. *Selected Works of A. N. Kolmogorov Volume II Probability Theory and Mathematical Statistics*, volume 26 of *Mathematics and its Applications (Soviet Series)*. Springer-science+business media, B.V., 1992.
- [144] Elias M. Stein and Rami Shakarchi. *Fourier analysis An introduction*, volume 1 of *Princeton Lectures in Analysis*. Princeton University Press, 2003.
- [145] Elias M. Stein and Rami Shakarchi. *Functional Analysis*, volume 4 of *Princeton Lectures in Analysis*. Princeton University Press, 2011.
- [146] R. L. Stratonovich. A new representation for stochastic integrals and equations. *J. SIAM Control*, 4(2):362–371, 1966.
- [147] R. L. Stratonovich. *Topics in the Theory of Random Noise*, volume I. Martino Publishing, 2014.
- [148] Rouslan L. Stratonovich. *Nonlinear Nonequilibrium Thermodynamics*, volume I of *Springer Series in Synergetics*. Springer-Verlag, 1992.
- [149] Daniel W. Stroock. *An Introduction to the Analysis of Paths on a Riemannian Manifold*, volume 74 of *Mathematical Surveys and Monographs*. American Mathematical Society, 2000.
- [150] V. Tulovsky and L. Papiez. Formula for the Fundamental Solution of the Heat Equation on the Sphere. *Applied Mathematics Letters*, 14:881–884, 2001.
- [151] G. E. Uhlenbeck and L. S. Ornstein. On the Theory of the Brownian Motion. *Physical Review*, 36:823–841, September 1930.
- [152] Eric Vanden-Eijnden and Giovanni Ciccotti. Second-order integrators for Langevin equations with holonomic constraints. *Chemical Physics Letters*, 429:310–316, August 2006.
- [153] Vito Volterra. *Theory of Functionals and of Integral and Integro-Differential Equations*. Dover Publications Inc., 1959.
- [154] von M. Smoluchowski. Zur kinestischen theoric der brownschen molekularbewegung und der suspension. *Ann. d. Physik*, 4:756, July 1906.
- [155] Ming Chen Wang and G. E. Uhlenbeck. On the Theory of the Brownian Motion II. *Reviews of Modern Physics*, 17(2-3):323–342, 1945.
- [156] Xue Ping Wang. Large-Time Asymptotics of Solutions to the Kramers-Fokker-Planck Equation with Short-Range Potential. *Communications in Mathematical Physics*, 336:1435–1471, January 2015.

- [157] Norbert Wiener. The average of an analytic functional and the brownian movement. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 7(10):294–298, March 1921.
- [158] Norbert Wiener. The avergae of an analytic functional. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 7(9):253–260, September 1921.
- [159] Michael Wilkinson and Alain Pumir. Spherical Ornstein-Uhlenbeck Processes. *Journal of Statistical Physics*, 145:113–142, September 2011.
- [160] Kôsaku Yosida. Brownian motion on the surface of the 3-sphere. *The Annals of Mathematical Statistics*, 20(2):292–296, June 1949.
- [161] Kôsaku Yosida. Integration of Fokker-Planck’s equation in a compact riemannian space. *Arkiv för Matematik*, 1(1):71–75, September 1949.
- [162] Kôsaku Yosida. *Functional Analysis*, volume 123 of *Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften in Einzeldarstellungen*. Springer-Verlag, 2nd edition, 1968.
- [163] Robert Zwanzig. Ensemble method in the theory of irreversibility. *The Journal of Chemical Physics*, 33(5):1338–1341, November 1960.
- [164] Robert Zwanzig. Memory Effects in Irreversible Thermodynamics. *Physical Review*, 124(4):983–992, November 1961.
- [165] Robert Zwanzig. On the identity of three generalized master equations. *Physica*, 30:1109–1123, 1964.
- [166] Robert Zwanzig. *Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Oxford University Press, 2001.