Mecánica Estadística de no Equilibrio
Tarea 1 — Entrega 20 de marzo de 2025

Profesor: Rodrigo Soto
Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile

[P1] Modelo de Partículas Excluyentes Persistentes. En el artículo "Run-and-tumble dynamics in a crowded environment: Persistent exclusion process for swimmers", de R. Soto y R. Golestanian, Physical Review E **89**, 012706 (2014) presentamos un modelo muy sencillo que simula el movimiento de las bacterias en una dimensión. Estudie el modelo (hasta la sección III-A).

Muestre, mediante un contraejemplo, que la dinámica microscópica del modelo NO es reversible en el tiempo. Ojo, en este caso la dinámica no es determinista sino probabilística.

[P2] Tipicidad de un estado de vórtice. En clases comentamos que un estado de vórtice es altamente poco probable y que corresponde a un estado raro. Para hacer el análisis más simple, vamos a estudiar un estado de onda de cizalle, pero que es similar a un vórtice. Queremos calcular la probabilidad de un estado con un campo de velocidades

$$\vec{v}(\vec{r}) = V_0 \sin(kx)\hat{y}$$

Si se tiene un fluido en equilibrio, cada partícula (átomo o molécula) tiene una distribución de velocidades maxwelliana

$$p(\vec{v}_i) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{(3/2)} e^{-mv_i^2/2kT}$$

donde $i = 1, 2, \ldots, N$ rotula cada partícula. A partir de las posiciones de las partículas $\vec{r}_i$ es posible definir los campos de densidad y corriente

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$$
$$\vec{J}(\vec{r}) = \sum_i v_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$$

Si bien exactas, estas expresiones son incómodas porque son muy singulares. Incluso no es posible definir el campo de velocidad $\vec{v} = \vec{J}/\rho$. Para evitar este problema (y no tener además que trabajar con distribuciones de probabilidad de espacios funcionales) vamos a pasarnos al espacio de Fourier. Por ejemplo

$$\tilde{\rho}(\vec{k}) = \frac{1}{V}\int dr \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot r}$$
$$= \frac{1}{V}\sum_i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i}$$

que ahora es una función analítica y $\vec{k}$ una variable discreta. Acá $V = L^3$ es el volumen de la caja.

(a) Considere una onda de cizalle caracterizada por una corriente

$$\vec{J}(\vec{r}) = \rho_0 V_0 \sin(kx)\hat{y}$$

Calcule la distribución de probabilidad $P(V_0)$.

(b) Evalúe numéricamente $P(V_0)/P(0)$ para valores razonables de los parámetros. Comente.

[P3] Leyes de crecimiento en coarsening. Investigue sobre los exponentes que caracterizan el crecimiento de dominios, $R(t) \sim R_0 t^\gamma$, para separaciones de fase. Indique los valores de γ para los casos con y sin conservación y si γ depende de la dimensión del espacio

[P4] ** Balance detallado en distribución binomial.** En clase comentamos el sistema consistente en N partículas, donde cada una puede estar en la mitad izquierda o derecha de una caja. Una dinámica microscópica posible consiste en escoger una partícula al azar (independiente de su posición) y cambiarla de lado. Es directo convencerse que esta dinámica microscópica es reversible. Para la variable macroscópica M que cuenta el número de partículas en la izquierda, esta dinámica se traduce en una cadena de Markov maestra para la probabilidad $p(M,n)$ de tener M partículas en la izquierda en el paso n de tiempo:

$$p(M, n+1) = \sum_{M'} Q_{M,M'} P(M', n)$$

(a) Escriba la forma que tiene la matrix Q.

(b) Muestre que la distribución de equilibrio

$$P_{\text{eq}}(M) = \frac{1}{2^N}\binom{N}{M}$$

es una solución estacionaria de la ecuación maestra.

(c) Finalmente, muestre que la solución estacionaria cumple con la condición de balance detallado.

Para este problema puede ser útil estudiar el capítulo V (ecuaciones maestras) del libro "Stochastic processes in physics and chemistry" de N.G. van Kampen. En ese capítulo se ve el caso de ecuaciones diferenciales, es decir evolución continua en el el tiempo en vez de tiempo discreto, pero puede ser útil para revisar conceptos.