



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Dinámica caótica de tres discos en una caja
periódica

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
FÍSICO

PRESENTA:
ARIANA TORRES KNOOP

DIRECTOR DE TESIS:
DR. DAVID PHILIP SANDERS



2010



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

1.Datos del alumno

Torres

Knoop

Ariana

56 65 79 95

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Física

302501980

2.Datos del tutor

Dr

David Philip

Sanders

3.Datos del sinodal 1

Dr

Marcos

Ley

Koo

4.Datos del sinodal 2

Dr

Hernán

Larralde

Ridaura

5.Datos del sinodal 3

Dr

David Philip

Sanders

6.Datos del sinodal 4

Dr

Pedro Eduardo

Miramontes

Vidal

7.Datos del sinodal 5

Dr

Luis

Benet

Fernández

8.Datos del trabajo escrito

Dinámica caótica de tres discos en una caja periódica

92 p

2010

Agradezco a mi familia y amigos que me acompañaron a lo largo de mi carrera y trabajo de tesis.

En particular quisiera agradecer a Patricio y Santiago por su ayuda en la visualización de mi programa, a Memo por su ayuda en general en mis dudas computacionales, a mi asesor David Sanders por introducirme al tema y ayudarme con gran paciencia a lograr este trabajo y al resto de mis sinodales por su tiempo y correcciones.

Agradezco además al programa de becas de la DGAPA por su apoyo económico durante 6 meses.

Índice general

1. Introducción	5
1.1. Enfoque microscópico	5
1.2. Motivación del trabajo	8
2. Conceptos teóricos	9
2.1. Sistemas dinámicos	9
2.2. Sistemas caóticos y sus propiedades	11
2.2.1. Comportamiento caótico	12
2.2.2. Caracterización de sistemas caóticos	13
2.2.3. Ergodicidad	17
2.3. Mecánica estadística	21
2.3.1. Ensembles	23
2.4. Difusión	24
2.4.1. Descripción macroscópica	24
2.4.2. Descripción microscópica	25
2.4.3. Difusión determinista	27
2.4.4. Relaciones Green–Kubo	28
3. Modelos	31
3.1. Fluido de esferas duras	31
3.2. Billares	32
3.3. Billares como modelos de fluidos	33
4. Simulaciones numéricas	35
4.1. Implementación de la dinámica del sistema	35
4.1.1. Cálculo del tiempo del evento.	36
4.1.2. Actualización de las variables de estado.	38
4.2. Implementación de funciones	42

4.2.1.	Funciones de correlación	42
4.2.2.	Exponentes de Lyapunov	43
5.	Resultados y análisis	47
5.1.	Dinámica en el espacio físico y el espacio fase	47
5.2.	Distribuciones de probabilidad de la posición y la velocidad . .	53
5.2.1.	Posición	53
5.2.2.	Velocidad	54
5.3.	Desplazamiento cuadrático medio	66
5.4.	Coefficiente de difusión	68
5.5.	Exponentes de Lyapunov	73
5.5.1.	Exponentes de Lyapunov y variación de parámetros . .	77
6.	Conclusiones	85
6.0.2.	Trabajo futuro	86

Resumen

Se estudia un sistema de tres discos en una caja dos dimensional con condiciones de frontera periódicas como un modelo sencillo de un fluido y como un sistema dinámico tipo billar, utilizando diversos elementos de la teoría de sistemas dinámicos, teoría de transporte y mecánica estadística.

Para ello se desarrolló un programa en C++ que simula la dinámica de los discos duros en la caja periódica unitaria, basado en los denominados algoritmos llevados por evento (event-driven algorithm).

Se caracteriza la dinámica del sistema en el espacio físico y en el espacio fase utilizando diferentes funciones que permiten calcular, a partir de las velocidades y posiciones de los discos en diferentes tiempos, cantidades como el desplazamiento cuadrático medio, el coeficiente de difusión, la distribución de probabilidad de la velocidad y los exponentes de Lyapunov.

La distribución de la probabilidad de la posición en la caja es uniforme, la distribución de probabilidad del módulo de la velocidad es la distribución de Schluter y la distribución de probabilidad de las componentes de la velocidad obedecen una distribución que tiende a una maxweliana en el límite termodinámico.

Los exponentes de Lyapunov son independientes de la condiciones iniciales, lo cual implica que el sistema es ergódico y dado que al menos uno de los exponentes de Lyapunov es positivo el sistema es caótico. La simetría traslacional y temporal del sistema se ve reflejada en la existencia de exponentes de Lyapunov nulos.

Dado que la variación entre el desplazamiento cuadrático medio y el tiempo es lineal, el sistema es difusivo, y la difusividad, caracterizada por el coeficiente de difusión, es proporcional a la raíz de la energía del sistema e inversamente proporcional al radio de los discos.

Por lo tanto, el sistema de tres discos en una caja con condiciones a la frontera periódicas es un sistema ergódico, caótico y con difusión

determinista.

Capítulo 1

Introducción

Debido a la gran cantidad de sistemas fluidos que existen y nos rodean, entender su composición y comportamiento ha sido siempre tema de interés y estudio de la ciencia y particularmente de la física.

Actualmente existen dos maneras de abordar el estudio de los fluidos: desde un punto de vista macroscópico o desde un punto de vista microscópico. En el primer caso, las ecuaciones que gobiernan al sistema se pueden derivar utilizando principios de conservación, mientras que en el segundo caso se pueden derivar mediante la física estadística, bajo el supuesto de que todas las partículas del fluido obedecen las leyes de la mecánica clásica.

Uno de los principales objetivos al estudiar fluidos es entender los fenómenos de *transporte*, por ejemplo el transporte de masa (difusión), el transporte de energía (conductividad térmica) o el transporte de momento (viscosidad). Estos procesos están caracterizados por los llamados coeficientes de transporte, los cuales describen el comportamiento macroscópico de los fluidos con respecto a la variación de ciertos parámetros como la temperatura, la densidad o los campos externos aplicados.

1.1. Enfoque microscópico

El enfoque microscópico para estudiar los fluidos tiene sus orígenes en la mecánica estadística, introducida a finales del siglo XIX, principalmente por Boltzmann en sus estudios acerca del comportamiento de un gas. La mecánica estadística propone que cualquier propiedad macroscópica de un sistema debe poder derivarse de la dinámica microscópica del mismo. Por lo

tanto, el enfoque microscópico para estudiar fluidos se basa en el entendimiento de la dinámica microscópica de los mismos regida por la mecánica clásica.

En sistemas que obedecen la mecánica clásica, la dinámica completa se describe mediante las ecuaciones hamiltonianas del sistema, que son ecuaciones que relacionan las posiciones y los momentos de las componentes del sistema dependiendo del tipo de interacciones y constricciones establecidas para el mismo. Para un fluido con N partículas, cada una con k grados de libertad, para determinar la dinámica se debe entonces resolver $2kN$ ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas.

El primer problema de este enfoque es que el número de componentes en un fluido es muy grande (del orden de 10^{25}) y, por tanto, se requeriría la resolución de un número increíblemente grande de ecuaciones diferenciales. El segundo problema es que las interacciones entre las partículas que componen a los fluidos (átomos y moléculas) son muy complejas y, por lo tanto, las ecuaciones hamiltonianas también.

Un primer paso para estudiar a los fluidos desde este enfoque es intentar simplificar el tipo de interacciones. Las interacciones en el hamiltoniano están representadas por el potencial de interacción (V), de manera que hay que simplificar el potencial. Existen diversos potenciales que cumplen con este propósito tales como el potencial de Lennard-Jones o el de Yukawa, que son potenciales de interacción suaves por pares. uno de los potenciales más utilizados es el que se conoce como *potencial de esferas duras*.

El potencial de esferas duras considera que las partículas del fluido son esferas (o discos, en el caso dos dimensional) impenetrables que se mueven sin aceleración y colisionan elásticamente. Es un potencial de corto alcance, repulsivo y por pares. Es decir, sólo hay interacción cuando las partículas están a una distancia igual a la suma de sus radios y al momento de la colisión la fuerza entre ambas partículas será repulsiva, infinita y por un tiempo infinitesimal. Además sólo dos partículas pueden colisionar a la vez.

Pero sustituir las interacciones reales por interacciones mediante el potencial de esferas duras no es suficiente: en general ni siquiera con esta simplificación existe una solución analítica a las ecuaciones hamiltonianas y por lo tanto al problema de entender la dinámica microscópica de un fluido.

Actualmente este problema, así como muchos otros problemas de la mecánica estadística, han encontrado una solución parcial gracias a la introducción de la teoría de sistemas dinámicos y las simulaciones numéricas.

Un sistema dinámico es básicamente una regla de evolución, que al ser iterada repetidamente puede describir la evolución de un sistema en el tiempo.

En 1963 Ya.Sinai [43], basado en las ideas de sistemas dinámicos, propuso estudiar a los fluidos de esferas duras como *billares*, donde por un billar se entiende un sistema dinámico en el cual una partícula se mueve en una determinada región de acuerdo con las ecuaciones hamiltonianas y colisiona elásticamente con las fronteras. Esto se puede hacer ya que existe un isomorfismo entre cualquier sistema de esferas duras y un billar, como se verá más en detalle en el capítulo 4.

Usando un modelo de billar, el estudio de la dinámica de N esferas o discos duros se reduce a entender la dinámica de una sola partícula en un espacio de altas dimensiones llamado espacio fase. Sin embargo, la dinámica de la partícula del billar puede ser muy complicada debido a que en general los billares son sistemas dinámicos *caóticos*, es decir sistemas que poseen un comportamiento no regular, aperiódico, pero determinista. En el caso de los billares asociados a fluidos de discos duros, dicha caoticidad se genera como consecuencia de la curvatura de las fronteras en el espacio fase, la cual tiende a generar divergencia de trayectorias cercanas.

La aportación esencial del uso de billares para el entendimiento de los procesos de transporte radica en que permite una descripción de la dinámica determinista de los sistemas caóticos, es decir, los movimientos de todas las partículas son tomados en cuenta, sin aproximación, y son caracterizados mediante cantidades bien definidas en el sistema dinámico, como lo son los exponentes de Lyapunov, la entropía de Kolmogorov–Sinai o el coeficiente de difusión[16].

Los billares poseen propiedades matemáticas muy interesantes, la mayoría relacionadas con la *ergodicidad* de los mismos. La ergodicidad es un concepto propuesto por Boltzmann para explicar la irreversibilidad de los procesos y se refiere básicamente a la propiedad de los sistemas que hace que los promedios temporales sean iguales a los espaciales. La existencia de esta propiedad es muy estudiada en los sistemas de la mecánica estadística y por tanto en los billares, ya que permite entender la evolución de los mismos, la cual en general puede ser muy compleja, mediante promedios sobre puntos del espacio fase.

De acuerdo con la llamada *Hipótesis Ergódica de Boltzmann*, todo sistema suficientemente grande es ergódico, de manera que uno pensaría que cualquier fluido de esferas o discos duros, y por lo tanto el billar,

asociado son ergódicos. En 1963 Ya.Sinai reformuló la hipótesis ergódica de Boltzmann para los sistemas de esferas duras. En su formulación conjeturó que cualquier fluido de esferas duras es ergódico.

Si bien los resultados numéricos sugieren que esto puede ser cierto, probarlo es un tarea muy complicada. Se han dedicado muchos estudios en probar esta hipótesis [41].

Se ha demostrado que fluidos de dos, tres y cuatro esferas duras son ergódicos [24][25] y actualmente la conjetura está casi demostrada [30].

1.2. Motivación del trabajo

En su gran mayoría los estudios referentes al comportamiento de los fluidos de esferas duras han considerado o bien un número de partículas suficientemente grande como para poder hacer u obtener inferencia estadística [1, 10], o bien han considerado únicamente dos partículas (billar de Sinai) [40].

Debido al interés en general de comprender fluidos de diferentes números de esferas o discos duros, el sistema que se propuso estudiar en esta tesis es un fluido de tres discos. Se escogió tres como el número de discos básicamente por ser el billar semidispersivo más simple. Un sistema de cuatro o más discos es un sistema cuya complejidad rebasa a un trabajo de tesis de licenciatura, ya que al aumentar el número de discos el problema no se puede simplemente extrapolar. Por ejemplo, las dimensiones del espacio fase del sistema, y por lo tanto del billar, aumentan en cuatro dimensiones por cada disco que se aumente. Y el billar dispersivo de dos discos es un sistema muy estudiado.

Para abordar dicho estudio, en el capítulo 2 se presentan los conceptos teóricos necesarios para la comprensión y análisis de los resultados, incluyendo conceptos de sistemas dinámicos, conceptos de mecánica estadística y conceptos del proceso de difusión.

En el capítulo 3 se presenta de manera más extensa el modelo de fluido de esferas duras y el modelo de billar. En el capítulo 4 se plantea el algoritmo utilizado para el estudio del sistema. En el capítulo 5 se exponen los resultados obtenidos y por último en el capítulo 6 se dan las conclusiones del trabajo.

Capítulo 2

Conceptos teóricos

En este capítulo se presentan los conceptos teóricos de sistemas dinámicos, mecánica estadística y teoría de transporte necesarios para la comprensión y análisis de los resultados.

2.1. Sistemas dinámicos

En general, todo lo que observamos evoluciona en el tiempo. La información que caracteriza cualquier sistema cambia continuamente, por ejemplo, el estado de un oscilador armónico, que se caracteriza por la posición y la velocidad de la partícula. Los sistemas dinámicos son modelos matemáticos que tratan de entender la evolución de los sistemas como una iteración (aplicación repetida) de una regla matemática al estado inicial del mismo.

De acuerdo con Klages [34], un sistema dinámico es una regla matemática determinista para evolucionar el estado de un sistema, donde por determinista se entiende que para cualquier estado inicial y tiempo (o número de iteración) existe un único estado futuro posible.

De manera más formal, un sistema dinámico describe una trayectoria en un espacio o conjunto P , llamado espacio de estados o *espacio fase*.

Es decir, un sistema dinámico posee tres ingredientes: el espacio fase o conjunto de todos los estados posibles del sistema; el tiempo que puede ser hacia delante o atrás, continuo o discreto; y una regla de evolución que permite determinar los estados presentes del sistema a partir de los estados pasado [21].

Definición 1. Se le llama sistema dinámico al triplete $(T, (P, \mathcal{A}, \mu), \Phi)$ donde T puede ser $(\mathbb{R}, +)$ o $(\mathbb{Z}, +)$, (P, \mathcal{A}, μ) es un espacio de probabilidad y Φ (llamada función de evolución) es una transformación $\Phi : T \times P \rightarrow P$ que preserva la medida μ y es \mathcal{A} -medible (i.e. preserva la medida de P).

La función de evolución Φ debe cumplir que:

1. $\Phi(0, x) = x$ (identidad),
2. $\Phi(t, \Phi(s, x)) = \Phi(t + s, x) \forall t, s \in T$ (aditividad).

Al definir $\Phi^t(x) = \Phi(t, x)$, el sistema dinámico se puede ver como una familia de funciones $\Phi^t : P \rightarrow P$, $t \in T$, que representan la evolución por un tiempo t y mapea al espacio de estados en sí mismo.

Las tres clases de sistemas dinámicos importantes son: los discretos, los continuos y los denominados suaves (“smooth” en inglés).

Un sistema dinámico *discreto* es aquel en el que el tiempo es discreto, $T = (\mathbb{Z}, +)$. En este caso a la función de evolución $\Phi : P \rightarrow P$ tal que $x_{t+1} = \Phi(x_t) = \Phi^t(x_0)$, $t \in T$ se le llama *mapeo*.

Un sistema dinámico *continuo* es aquel en el cual el tiempo es continuo, $T = (\mathbb{R}, +)$. En este caso a la función o regla de evolución $\Phi : P \rightarrow P$ tal que $x(t) = \Phi^t(x_0)$, $t \in T$ se le llama *flujo*.

Por último, un sistema dinámico *suave* es un sistema dinámico continuo que varía con el tiempo de manera diferencial, es decir el flujo es continuamente diferenciable (todas sus derivadas parciales existen y son continuas)[29].

Tanto para el caso de mapeos como para el caso de flujos, se puede ver fácilmente que dada una condición inicial x_0 , los siguientes valores quedan totalmente determinados siempre y cuando la regla de evolución no varíe en el tiempo. Por ejemplo, en el caso discreto,

$$x_1 = \Phi(x_0) = \Phi^1(x_0), \quad (2.1)$$

$$x_2 = \Phi(x_1) = \Phi(\Phi(x_0)) = \Phi^2(x_0), \quad (2.2)$$

y

$$x_n = \Phi^n(x_0) = \Phi \circ \Phi \circ \Phi \circ \dots \circ \Phi(x_0). \quad (2.3)$$

En otras palabras, existe una única solución para las ecuaciones de la forma $x_t = \Phi^t(x_0)$, $t \in T$, llamadas también ecuaciones de movimiento del sistema [34].

Definición 2. Dada un función de evolución $\Phi : P \rightarrow P$, al conjunto de valores definidos por una condición inicial x_0 , $\{x_0, x_1, x_2 \dots x_n\}$ se le conoce como órbita de x_0 bajo la acción de Φ .

En la física a las órbitas muchas veces se les llama trayectorias debido a su comportamiento en el espacio fase.

Al estudiar sistemas dinámicos, una de las propiedades que nos interesa es establecer qué es un estado en equilibrio, las condiciones de su existencia y la estabilidad local y global del mismo [2]. La idea de estados estacionarios o estados de equilibrio de un sistema dinámico esta contenida en conceptos como las órbitas periódicas o puntos periódicos y los puntos fijos.

Definición 3. Sea $\Phi : P \rightarrow P$ una función de evolución, decimos que $x \in P$ es un punto periódico de Φ o tiene una órbita periódica bajo Φ si existe $t \in \mathbb{T}, t > 0$ tal que $\Phi^t(x) = x$.

Al menor de los valores de t que cumple lo anteriores se le llama *periodo* de x . Si $\Phi(x) = x$, decimos que x es un *punto fijo* (además de ser un punto periódico de periodo 1) [26].

2.2. Sistemas caóticos y sus propiedades

Los sistemas dinámicos, además de poderse clasificar por el tipo de regla de evolución, se pueden clasificar por el tipo de dinámica que generan en dos grandes grupos: los que de una u otra forma exhiben solamente comportamientos “simples”, por ejemplo estados estacionarios o periódicos y de los cuales se puede predecir bajo cierto formalismo los estados futuros, y los que se comportan de manera compleja y en general se estudian empleando herramientas del tipo estadístico. Durante muchos años se creyó que este segundo tipo de sistemas debía la complejidad de su dinámica a la complejidad interna del sistema. Es decir, una dinámica compleja implicaba un sistema intrínsecamente complejo. Actualmente se sabe que la dinámica de estos sistemas, que se pensaban únicamente descriptibles mediante métodos y herramientas estadísticos, se deben en su mayoría a un fenómeno de carácter determinista denominado *caos*.

2.2.1. Comportamiento caótico

Un sistema se dice tiene comportamiento *caótico* o es caótico si su comportamiento no es regular o predecible a largo tiempo, sino aperiódico o aparentemente aleatorio.

El comportamiento caótico aparece cuando en el espacio fase del sistema existe divergencia exponencial local de trayectorias cercanas acompañada con un confinamiento global. La divergencia produce un alargamiento local en el espacio fase y el confinamiento no permite que la dilatación continúe sin plegarse. Repetidos redobles y plegamientos producen un comportamiento muy complicado de la órbita o trayectoria, llamado *comportamiento caótico*¹[34].

Según Devaney [12], una función de evolución $\Phi : P \rightarrow P$ es *caótica* (genera una dinámica caótica) si:

1. Φ tiene sensibilidad a las condiciones iniciales.
2. Φ es topológicamente transitiva en P .
3. Los puntos periódicos de Φ son densos en P .

A continuación se explican estos conceptos.

Sensibilidad a condiciones iniciales

Se dice que un mapeo tiene sensibilidad a las condiciones iniciales si dada una condición inicial x , existe al menos un punto en una vecindad cercana que eventualmente se separa una distancia $d > 0$:

Definición 4. Sea $\Phi : P \rightarrow P$, $P \subseteq \mathbb{R}$, se dice que el sistema dinámico tiene sensibilidad a condiciones iniciales si $\exists \varepsilon > 0$ tal que $\forall x \in P$ y $\forall \delta > 0, \exists y \in P$ y $\exists n \in \mathbb{N}$ tal que $d(x, y) < \delta$ y $d(\Phi^n(x), \Phi^n(y)) > \varepsilon$.

Es importante mencionar que no es necesario que todos los puntos alrededor de x se separen, basta con que exista al menos uno que sí lo haga [20].

¹A éste mecanismo se le conoce como el mecanismo *stretch-fold*

Transitividad topológica

El concepto de transitividad topológica refleja en general la idea de “mezcla” en el espacio fase. Dadas dos regiones cualesquiera en P donde está definida la función de evolución, $\Phi : P \rightarrow P$, existe un punto en la primera zona cuya órbita visita, en algún momento, la segunda [26].

Formalmente se dice que $\Phi : P \rightarrow P$ es topológicamente transitiva en P si para cualquier pareja de subconjuntos disjuntos $U, V \subset P$ no vacíos, existen $u \in U$ y $n \geq 1$ tales que $\Phi^n(u) \in V$. Una definición más formal se puede encontrar en [5].

Puntos periódicos densos

Sean J y K dos conjuntos tales que $J \subset K$. Decimos que J es *denso* en K si para todo punto $x \in K$ y para toda $\epsilon > 0$, existe $y \in J$ tal que la distancia de x a y es menor que ϵ , $d(x, y) < \epsilon$. Los puntos periódicos de Φ son densos en P si existe un punto periódico en cualquier subconjunto abierto $U \subset P$ [34].

Por lo tanto, un sistema caótico posee tres ingredientes: impredecibilidad a largo tiempo, no descomposición y elementos de regularidad. Es impredecible por su sensibilidad a las condiciones iniciales. No se puede descomponer en dos subconjuntos abiertos invariantes que no interactúen mediante Φ debido a la transitividad topológica; y posee un elemento de “regularidad” debido a que los puntos periódicos son densos.

2.2.2. Caracterización de sistemas caóticos

La caracterización de sistemas caóticos se basa principalmente en dos cantidades: los exponentes de Lyapunov, que son una medida de la sensibilidad a condiciones iniciales, y la entropía KS.

Exponentes de Lyapunov

Dado que la sensibilidad a condiciones iniciales es una propiedad necesaria (aunque no suficiente) para que un sistema dinámico sea caótico, poder medirla es de gran interés. Los exponentes de Lyapunov son una medida del grado o razón de crecimiento de una perturbación a una cierta

condición inicial, y por lo tanto son una medida de la sensibilidad de trayectorias a condiciones iniciales.

Supongamos que se tiene un sistema cuya evolución está gobernada por ecuaciones de la forma $\dot{\mathbf{x}}(t) = F(\mathbf{x}(t))$ donde $F : P \rightarrow P$, P el espacio fase, es continuamente diferenciable. Sabemos entonces que cualquier condición inicial $\mathbf{x}_0 \in P$, $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}(t_0)$ define una trayectoria γ única parametrizada por el tiempo $\mathbf{x}_t = \Phi^t(\mathbf{x}_0)$.

Si en el tiempo t_0 perturbamos infinitesimalmente dicha condición inicial, $\mathbf{x}'_0 := \mathbf{x}_0 + \delta\mathbf{x}_0$, dado que la correspondencia entre condición inicial y trayectoria es uno a uno, se produce una nueva trayectoria γ' , la cual después de un determinado tiempo dt puede haberse alejado o acercado de la original (figura (2.1)).

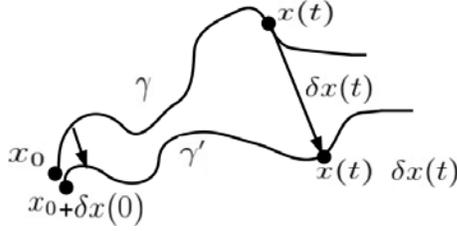


Figura 2.1: Evolución de la perturbación δx en el espacio fase.

Dado que

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) = F(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}), \quad (2.4)$$

$\delta\mathbf{x}$ evoluciona en el tiempo de acuerdo con:

$$\dot{\delta\mathbf{x}} = F(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) - \dot{\mathbf{x}}. \quad (2.5)$$

Linealizando la ecuación, encontramos que la variación de $\delta\mathbf{x}$ está definida por:

$$\dot{\delta\mathbf{x}} = F(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) - F(\mathbf{x}) = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}} \delta\mathbf{x} + \mathcal{O}((\delta\mathbf{x})^2), \quad (2.6)$$

de manera que si la perturbación es suficientemente pequeña tenemos que

$$\dot{\delta\mathbf{x}} = D(\mathbf{x}) \cdot \delta\mathbf{x}, \quad (2.7)$$

donde $D(\mathbf{x}) = \frac{\partial F}{\partial \mathbf{x}}$ es la matriz de estabilidad [13] o jacobiano del sistema. Si integramos la ecuación (3.10) obtenemos finalmente que

$$\frac{\delta \mathbf{x}(t)}{\delta \mathbf{x}(0)} = e^{\int_{t_0}^t D(\mathbf{x}(t')) dt'}. \quad (2.8)$$

Cuando t y t_0 son muy cercanos,

$$\frac{\delta \mathbf{x}(t)}{\delta \mathbf{x}(0)} = e^{D(\mathbf{x}(t))_{t_0} dt}. \quad (2.9)$$

Un sistema dinámico tendrá entonces sensibilidad a condiciones iniciales localmente si $D(x(t))_{t_0} > 0$. Se dice que es localmente debido a la suposición de que dt es una cantidad pequeña. El grado o razón de crecimiento de $\delta \mathbf{x}(t)$, cuantificado por $D(\mathbf{x}(t))_{t_0}$ se le conoce como *exponente de Lyapunov*.

Definición 5. Sea $\Phi \in C^1$, $\Phi : P \rightarrow P$. El exponente de Lyapunov para la condición inicial $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^N$, $\lambda(\mathbf{x}_0)$, se define como:

$$\lambda(\mathbf{x}_0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{\delta \mathbf{x}(0) \rightarrow 0} \frac{1}{t} \ln \left| \frac{\delta \mathbf{x}(t)}{\delta \mathbf{x}(0)} \right| \quad (2.10)$$

Entropía

La entropía es una propiedad que en general se refiere a la tendencia de los sistemas a la pérdida de información u orden. En termodinámica se entiende por entropía a la energía no utilizable para trabajo, al grado de irreversibilidad del sistema o bien como una medida de las restricciones de un sistema. En teoría de la información, la entropía se refiere al grado de incertidumbre en un conjunto de datos. En la estadística, se refiere a una media de variación o diversidad definida en un distribución de probabilidad.

La definición de entropía en sistemas dinámicos surgió a partir de la entropía de teoría de la información la cual fue propuesta por Shannon en 1948. Su idea era encontrar una función h que dado un espacio de probabilidad (P, \mathcal{A}, μ) nos permita medir la cantidad de información agregada por el conocimiento de que un suceso o estado $A \in P$ haya ocurrido. Es decir, encontrar una función o propiedad que midiera la creación y pérdida de información de un sistema. Lo que Shannon postuló es que

1. h es no negativa ($h : [0, 1] \rightarrow [0, \infty)$);
2. h es cero si el suceso tiene probabilidad uno ($h(1) = 0$);
3. h crece cuando $\mu(A)$ decrece;
4. h satisface la siguiente relación de independencia: si $A, B \in P$ son sucesos independientes entonces $\mu(A \cap B) = \mu(A)\mu(B)$, es decir, la información agregada por saber que ambos A y B ocurrieron ($A \cap B$ ocurre) es igual a la suma de la información dada por el conocimiento de que A y B han ocurrido.

Se puede probar [8] que hay una única función que satisface todas esas condiciones es:

$$h(\mu(A)) = -k \log \mu(A) \quad k > 0. \quad (2.11)$$

Por lo tanto, dada una variable aleatoria X con valores posibles x_1, x_2, \dots, x_n cada uno con probabilidad p_1, p_2, \dots, p_n la incertidumbre asociada con el evento $X = x_i$, es decir la información que se transmite de saber que X ha tomado el valor x_i , se define como $h(p_i) = \log(p_i)$.

La entropía o información media de una variable se puede entonces determinar a partir de la información del conjunto de valores que puede adoptar dicha variable.

Definición 6. (*Entropía de Shannon*)

$$H_S := \sum_{i=1}^r p_i \ln\left(\frac{1}{p_i}\right) \quad (2.12)$$

donde p_i $i = 1, \dots, r$ son las probabilidades de los r posibles resultados.

En 1958, basado en las ideas de Shannon, A.N. Kolmogorov y Ya.G. Sinai desarrollaron su versión del concepto de entropía para sistemas dinámicos, llamada Entropía Métrica o Entropía de Kolmogorov–Sinai (Entropía KS). En este caso, la creación de información se refiere a la capacidad de determinar estados anteriores y la pérdida de información se refiere a la incapacidad de predecir estados futuros. Un aumento en la entropía del sistema implica que hay mayor pérdida y creación de información.

Dado que es muy complicado calcular la entropía KS a partir de la definición formal, en general se calcula de forma indirecta teniendo en

cuenta el Teorema de Pesin [22], el cual relaciona la complejidad dinámica con la sensibilidad a las condiciones iniciales:

Teorema 2.2.1. (*Teorema de Pesin*)

$$h_{KS} = \sum_{i:\lambda_i>0} \lambda_i \quad (2.13)$$

donde los λ_i son los exponentes de Lyapunov positivos del sistema.

Es decir, la poca predecibilidad que impone la sensibilidad a las condiciones iniciales tiene como consecuencia la pérdida de información a medida que pasa el tiempo; de tal forma que la suma de los exponentes de Lyapunov positivos es una medida de la tasa de pérdida de información del sistema por unidad de tiempo.

Un mapeo $\Phi : P \rightarrow P$ se dice caótico, en el sentido de exhibir aleatoriedad dinámica, si $h_{KS} > 0$ [34].

Actualmente la entropía en la física es una medida de la complejidad de los sistemas, ya que mientras más complejo es un sistema, más complicado es extraer información del mismo.

2.2.3. Ergodicidad

La *ergodicidad* se refiere a la propiedad de ciertos sistemas de eventualmente pasar suficientemente cerca de todos sus posibles estados al evolucionar en el tiempo. Cuando esto sucede, promediar sobre una trayectoria en el espacio fase, es decir, obtener un promedio temporal, es equivalente a sacar un promedio sobre puntos respecto a una medida (μ) en el espacio fase (promedio espaciales).

El concepto de ergodicidad fue propuesto por Boltzmann a finales del siglo XIX para explicar la relación entre la termodinámica y la mecánica clásica, particularmente el surgimiento de la irreversibilidad de los procesos [37].

Hipótesis Ergódica de Boltzmann: *Para grandes sistemas de partículas interactuando las medidas temporales son iguales a las espaciales.*

De manera más formal, la hipótesis ergódica establece que dado un

observable² f , si $T \rightarrow \infty$, entonces:

$$\frac{1}{T} \sum_{n=0}^T f(\Phi^n(x)) \rightarrow \int_P f(x) d\mu(x), \quad (2.14)$$

donde μ es la medida de equilibrio en P , y $\Phi^t(x)$ la evolución de un punto en P . Es decir el promedio temporal de f tiende al promedio en el espacio fase de f .

En 1929 Von Neumann probó el primer teorema ergódico.

Teorema 2.2.2. (*Teorema Ergódico*) Sea $f : P \rightarrow \mathbb{R}$, $f \in L_2$ y $T \rightarrow \infty$ entonces

$$\frac{1}{T} \sum_{n=0}^{T-1} f(\Phi^n(x)) \rightarrow \tilde{f}(x) \quad (2.15)$$

donde la convergencia es en el sentido \mathcal{L}_2 y a $\tilde{f}(x)$ se le conoce como la función límite o la media de Birkhoff y es tal que la integral de la función límite sobre todo el espacio fase es igual que la integral del observable sobre todo el espacio fase.

En 1931 Birkhoff y Khinchin probaron la misma fórmula pero con convergencia para casi toda x en el sentido de la medida μ [27].

Teorema 2.2.3. (*Birkhoff*) Sea $f : P \rightarrow \mathbb{R}$ un observable, entonces:

$$\tilde{f}(x) := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int f(\Phi^t(x)) dt \quad (2.16)$$

existe para casi toda $x \in P$.

Un sistema dinámico $(T, (P, \mathcal{A}, \mu), \Phi)$ es ergódico si para toda función razonablemente regular en el sentido de μ ($\int d\mu |f(x)| < \infty$) se satisface que

$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int f(\Phi^t(x)) dt$ es constante para casi todo punto (c.t.p) $x \in P$ [5, 37].

La formulación de ergodicidad de Birkhoff nos permite concluir que las medidas temporales de las propiedades no dependen de x .

$$\tilde{f}(x) = \langle f \rangle = \int_P f(x) d\mu \text{ para c.t.p } x \quad (2.17)$$

μ la medida de probabilidad sobre el espacio fase.

²Es decir $f : P \rightarrow \mathbb{R}$ es una función bien comportada (i.e continua o continua por pedazos) y medible en casi todo $x \in P$

Definición 7. Sea (P, \mathcal{A}, μ) un espacio de probabilidad y $\Phi : P \rightarrow P$ una transformación que preserva la medida se dice que Φ es ergódica si para cualquier $A \in \mathcal{A}$ $\mu(A) = 0$ o $\mu(A) = 1$

Las pruebas de si ciertos sistemas mecánicos son o no ergódicos, como el caso de los billares, surgieron hasta mediados del siglo XX. Dichas pruebas fueron inspiradas básicamente en la teoría de sistemas dinámicos con las ideas de Hedlund y Hopf en 1938 sobre el comportamiento hiperbólico de los sistemas dinámicos, es decir la existencia de direcciones estables e inestables en el espacio fase, lo cual hace que trayectorias inicialmente muy cercanas se separen en el futuro o en el pasado.

En 1963, basado en los progresos de Hedlund y Hopf así como en la observación de N.S.Krylov de la sensibilidad a condiciones iniciales de sistemas de esferas duras, Ya.Sinai reformuló la Hipótesis Ergódica de Boltzmann para el caso de sistemas de esferas duras [39].

Conjetura de Sinai. Para todo $N \geq 2$ y en dimensión 2 o 3, el sistema mecánico de N -esferas duras con condiciones de borde periódicas es un sistema métricamente transitivo, i.e. la medida de Liouville en la hipersuperficie de energía constante es ergódica.

Lo interesante de esta hipótesis es que no asume que N tiene que ser muy grande, de hecho conjetura la ergodicidad para cualquier $N \geq 2$.

Si bien los resultados numéricos y la física sugerían que la conjetura es cierta, la demostración de la misma es una tarea bastante complicada. El primer avance al respecto se logró en 1970 cuando Ya.G.Sinai logró demostrar que el sistema de dos esferas duras moviéndose en el toro T^2 es ergódico [43].

En 1987 N.Chernov y Ya.G.Sinai lograron demostrar la conjetura de Sinai para un sistema de dos esferas duras en cualquier dimensión $d \geq 2$ o d -toro [44].

Lograr demostrar la propiedad de ergodicidad para más de 2 discos ha sido muy complicado ya que en el caso dos esferas duras la dinámica es dispersiva, mientras que para $N > 2$ la dinámica es lo que se denomina *semi-dispersiva*. Entre 1990 y 1992 Krámli, Símányi y Szász demostraron la conjetura para tres y cuatro esferas duras [24][25].

Teorema de Símányi y Szasz La hipótesis de Sinai es cierta para toda dimensión y todo número de esferas. De hecho, el sistema mecánico de N -esferas duras en dimensión d , con condiciones de borde periódicas, es un sistema hiperbólico para todo $N, D \geq 2$.

Actualmente sigue habiendo muchos trabajos intentado demostrar la

Conjetura de Boltzmann–Sinai.

Sistemas ergódicos y exponentes de Lyapunov

Algo interesante en los sistemas ergódicos es que los exponentes de Lyapunov ya no dependen de la condición inicial, como en la definición (5), debido a que cualquier condición inicial se puede ver como un desplazamiento temporal de cualquier otra condición inicial. Los exponentes de Lyapunov se convierten entonces en cantidades que caracterizan globalmente al sistema.

De manera más formal, de acuerdo con la definición 5, los exponentes de Lyapunov son una especie de promedio temporal de la razón de crecimiento de la perturbación. Si el sistema es ergódico, sabemos que los promedios temporales son iguales a los promedios espaciales, de manera que podemos redefinir los exponentes de Lyapunov para sistemas ergódicos como un promedio en el sentido de Birkhoff.

Definición 8. Sea $\Phi : P \rightarrow P$ ergódico, $t \in T$ y $x \in P$. Entonces

$$\lambda(x_0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln(\Phi^t(x_0)) = \int_P d\mu \ln |\Phi(x)| = \langle \ln(\Phi) \rangle = \lambda \text{ para c.t.p } x_0.$$

Definición 9. (Caos en el sentido Lyapunov)

Un mapeo ergódico $\Phi : P \rightarrow P$ se dice que es L -caótico en P si $\lambda > 0$ [22].

Espectro de Lyapunov

De acuerdo con la definición 7, sí un sistema es ergódico entonces los exponentes de Lyapunov no dependen de la condición inicial, dependen únicamente de la dirección de la perturbación que se les aplique.

Como cualquier perturbación a puntos $x \in P$ se puede expresar como combinación lineal de n vectores linealmente independientes $\delta\Gamma_1, \delta\Gamma_2, \dots, \delta\Gamma_n \in P_t \subset \mathcal{R}^n$, donde P_t es el espacio tangente a P , resulta que existen únicamente n exponentes de Lyapunov, asociados a los vectores linealmente independientes, llamadas también vectores de Lyapunov. Al conjunto de exponentes de Lyapunov se le conoce como el espectro de Lyapunov del sistema.

2.3. Mecánica estadística

Dado que en ésta tesis se emplean herramientas de la mecánica estadística; es importante introducir algunas ideas y conceptos básicos de la misma.

La mecánica estadística trata de cuantificar grandes ensambles de sistemas como las moléculas en un gas, los átomos en un cristal, fotones en un haz de láser, estrellas en la galaxia o gente en un grupo social. El principal objetivo de esta rama de la física es entender el comportamiento del ensamble como un todo a partir del comportamiento individual de sus componentes, el cual no necesariamente es simplemente una superposición de comportamientos, ya que en general el comportamiento de cada elemento es modificado por la presencia de los demás elementos, de manera que el comportamiento colectivo puede ser cualitativamente distinto.

Como se mencionó en la sección anterior, el espacio fase es el espacio de todos los posibles estados del sistema. En el caso de sistemas mecánicos, como lo es un fluido de esferas duras, es el espacio de todas las posibles posiciones (coordenadas generalizada) y velocidades (momentos generalizados).

De manera más formal, el espacio fase P es un espacio $2kN$ -dimensional donde k es el número de subsistemas idénticos que conforman el sistema (por ejemplo el número de discos o esferas duras) y N los grados de libertad de cada uno. En este espacio cualquier estado del sistema se puede representar como un punto $\Gamma = \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ donde $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_k)$ y $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_k)$ contienen toda la información del sistema y que \mathbf{q}_i y \mathbf{p}_i representan la posición y el momento del i -ésimo disco.

En general, dado un sistema físico, nos interesa medir cantidades macroscópicas u observables (F) del mismo, como la temperatura y la presión. Dado que los observables tienen un valor definido para cada estado del sistema, es razonable suponer que si el sistema evoluciona en el tiempo de manera que $\Gamma = \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$, entonces cualquier observable que midamos será en realidad el promedio de una función mecánica f , que caracteriza la dinámica microscópica del sistema, a lo largo intervalo del tiempo:

$$F = \overline{f(\Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t))} = \lim_{t_{obs}} \frac{1}{t_{obs}} \int f(\Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)) dt, \quad (2.18)$$

donde la evolución de f depende de la evolución de $\Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$:

$$\dot{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i. \quad (2.19)$$

Como la evolución de $\Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ está determinada por las ecuaciones hamiltonianas,

$$\dot{q}_i(t) = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}; \quad \dot{p}_i(t) = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}. \quad (2.20)$$

donde \mathcal{H} , el hamiltoniano del sistema, está dado por:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_{i=0}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N) \quad (2.21)$$

donde V es el potencial de interacción del sistema, la función f evolucionará de acuerdo con:

$$\dot{f}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \sum_{i=1}^N \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}. \quad (2.22)$$

Al lado derecho de la ecuación (2.22) se le conoce como el paréntesis de Poisson y se denota como $[f, \mathcal{H}]$.

Por lo tanto,

$$\dot{f} = [f, \mathcal{H}]. \quad (2.23)$$

Debido a la complejidad que puede tener la evolución temporal de f , es decir las trayectorias en el espacio fase, en 1902 Gibbs propuso sustituir este promedio temporal por un promedio en *ensembles*, también llamado “conjunto representativo” en español, del sistema, donde por ensemble se entiende una colección de puntos en el espacio fase pesados por una función de probabilidad $\rho(\Gamma) = \rho(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, es decir un conjunto de sistemas independientes pesados por una función de probabilidad.

Una de las ventajas de esta visión es que la evolución temporal de $\Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ y por lo tanto de todos los observables se puede transferir a la función de probabilidad ρ , de manera que para calcular los observables en cualquier instante de tiempo no es necesario resolver la ecuación (2.22) para cada f , sino basta con determinar la evolución temporal de ρ , la cual satisface la *Ecuación de Liouville* [4][9].

Los observables se pueden calcular simplemente como:

$$F = \langle f \rangle = \int_P f(q, p) \rho(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{q} d\mathbf{p} \quad (2.24)$$

Es decir hay una transferencia temporal de la función mecánica f a la función de probabilidad ρ [42].

2.3.1. Ensamblés

Como se vio anteriormente, los cálculos de la mecánica estadística se basan en el uso de promedios y los promedios dependen completamente de la función de probabilidad ρ y su evolución, la cual se determina por las características del sistema. Por ejemplo, si un sistema sólo puede existir con una determinada energía, entonces lo primero que debe satisfacer ρ es que:

$$\rho = \begin{cases} 0 & \text{si } \mathcal{H} \neq E, \\ 1 & \text{si } \mathcal{H} = E. \end{cases} \quad (2.25)$$

Es decir, ρ depende de las constricciones del sistema.

Dado que un ensamble se define como el conjunto de todos los posibles estados del sistema junto con una función de probabilidad asociada a cada estado, cada función de probabilidad define un ensamble distinto. Hay una gran variedad de ensambles, pero los más importantes son los llamados *ensamble canónico* y *ensamble microcanónico*.

Ensamble canónico

El ensamble canónico respresenta sistemas que intercambian calor con un baño térmico en los cuales el volumen y el número de partículas son constantes. Para este ensamble, la función de probabilidad está dada por:

$$\rho(E_i) = \rho_i = C e^{-\beta E_i}, \quad (2.26)$$

donde i es el estado del sistema, C un constante y $\beta = 1/K_B T$, K_B la constante de Boltzmann y T la temperatura.

Cómo el sistema no está aislado, la energía fluctúa, pero está en equilibrio para cada temperatura: $\langle E \rangle = U$, donde U es la energía interna del sistema.

Ensamble microcanónico

El ensemble microcanónico representa sistemas aislados que han llegado al equilibrio. La energía, el volumen y el número de partículas están fijos. La función de probabilidad ρ es uniforme en todo el espacio fase.

Dado que el hamiltoniano representa la energía total del sistema, el ensamble microcanónico define una hipersuperficie $P_E \in P$ de dimensión $d - 1$, d la dimensión de P

$$P_E = \{x = (q, p) : \mathcal{H}(q, p) = E\}$$

dentro de la cual está la trayectoria solución de las ecuaciones [18].

Una de las propiedades más importantes del ensamble microcanónico es el *principio de equiprobabilidad*, el cual establece que dado un sistema aislado en equilibrio, el sistema tiene la misma probabilidad de estar en cualquiera de los microestados accesibles.

Ensamble de dinámica molecular

El ensamble de dinámica molecular es un caso particular del ensamble microcanónico en el cual además se conserva el momento lineal. En éste caso, la función de probabilidad también es constante.

Este ensamble es importante en esta tesis ya que al tener un sistema con condiciones de frontera periódicas las únicas colisiones son entre los discos y por lo tanto el momento lineal total del sistema se conserva.

2.4. Difusión

La difusión es uno de los procesos fundamentales mediante los cuales se mueve la materia. Por ello es importante en muchas disciplinas como la biología, medicina, química, física, etc., y de hecho en casi cualquier aspecto de nuestra vida.

Se le llama difusión al proceso macroscópico de transporte de materia en un sistema, consecuencia del movimiento pasivo individual de átomos, moléculas y partículas que tiende a llevar a los sistemas fuera de equilibrio al equilibrio mediante un proceso en el cual los gradientes de concentración son suavizados.

2.4.1. Descripción macroscópica

Desde el punto de vista macroscópico, la difusión se puede explicar mediante leyes fenomenológicas conocidas como *Leyes de Fick*, que son ecuaciones diferenciales que describen la variación de la distribución de la densidad de partículas tanto temporal como espacialmente [3].

Leyes de Fick

La primera Ley de Fick está relacionada con la tendencia de los sistemas a suavizar gradientes de concentración de partículas.

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) := -\mathbf{D} \frac{\partial \tilde{n}(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}}, \quad (2.27)$$

donde $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ denota el flujo de partículas pasando por una superficie perpendicular a la dirección de flujo y $\tilde{n}(\mathbf{x}, t)$ es la concentración de partículas en el punto \mathbf{x} al tiempo t . Es decir, el flujo de partículas que atraviesa una superficie es directamente proporcional al gradiente de concentración.

Por otro lado, la segunda ley de Fick está relacionada con la conservación de partículas. Tomando la hipótesis de conservación, obtenemos que:

$$\frac{\partial \tilde{n}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial \mathbf{x}} = 0 \quad (2.28)$$

Usando esta última ecuación junto con la primera Ley de Fick obtenemos la segunda Ley de Fick, también conocida como ecuación de difusión:

$$\frac{\partial \tilde{n}}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \tilde{n}}{\partial \mathbf{x}^2} \quad (2.29)$$

En las matemáticas a los procesos regidos por esta ecuación se les conoce como *procesos de Wiener*, y en la física se les conoce como *movimientos brownianos*.

2.4.2. Descripción microscópica

En la escala del tamaño de las partículas, que es el que nos interesa en este trabajo, hay dos aproximaciones para entender el proceso de difusión. La primera es considerar que las moléculas o partículas del fluido se mueven por la acción de una fuerza cuyo origen es el gradiente del potencial químico. La segunda aproximación, formulada por Einstein en 1912, consiste en sustituir la fuerza como gradiente del potencial químico por una fuerza estocástica resultante de los choques entre partículas.

El movimiento de las partículas se describe entonces mediante caminatas aleatorias, es decir el movimiento de las partículas depende únicamente del paso o movimiento en el instante previo y de una variable aleatoria,

$$\mathbf{x}(n) = \mathbf{x}(n-1) \pm \delta, \quad (2.30)$$

de manera que cada paso en el movimiento de las partículas es estadísticamente independiente del resto. No hay correlación o memoria de las partículas.

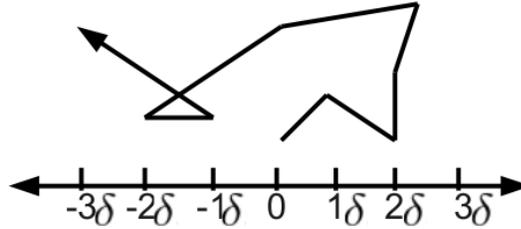


Figura 2.2: Caminata aleatoria de una partícula en el tiempo.

Dado que la dirección y tamaño de cada desplazamiento es aleatoria, el valor medio de cada desplazamiento es cero, $\langle \delta \rangle = 0$ (figura (2.4.2)), y por lo tanto el desplazamiento medio de las partículas, también se anula $\langle x \rangle = 0$ (figura (2.4.2)).

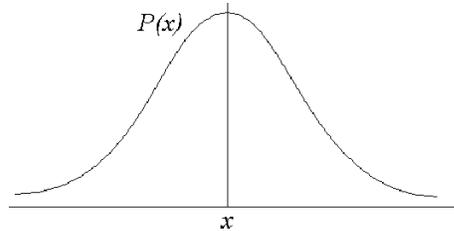


Figura 2.3: Distribución de la probabilidad del desplazamiento de una partícula que se mueve de acuerdo con una caminata aleatoria.

Para analizar la difusión de las partículas, se debe entonces recurrir a la raíz del desplazamiento cuadrático medio, ya que es una cantidad que podemos asegurar es siempre positiva y nos da una medida de que tanto se alejan las partículas de su origen. El desplazamiento cuadrático está dado por

$$x^2(n) = x^2(n-1) \pm 2\delta x(n-1) + \delta^2, \quad (2.31)$$

de manera que el desplazamiento cuadrático promedio para N partículas

está definido por:

$$\langle x^2(n) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle x_i^2(n-1) \pm \delta x_i(n-1) + \delta^2 \rangle, \quad (2.32)$$

de donde, dado que el segundo término del lado derecho se anula ya que $\langle \delta \rangle = 0$, obtenemos que:

$$\langle x^2(n) \rangle = \langle x^2(n-1) \rangle + \langle \delta^2 \rangle. \quad (2.33)$$

Analizando la ecuación anterior, podemos notar que entonces $\langle x^2(n) \rangle = n \langle \delta^2 \rangle$. Si llamamos τ al tiempo promedio que toma cada paso entonces después de un tiempo $t = n\tau$, tenemos

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\langle \delta^2 \rangle}{\tau} t. \quad (2.34)$$

Dado que tanto δ como τ son constantes, podemos agruparlas en una sola constante $D = \frac{\langle \delta^2 \rangle}{2\tau}$. Si sustituimos la expresión anterior en la ecuación (2.34) obtenemos finalmente que el coeficiente de difusión D es directamente proporcional al promedio del desplazamiento cuadrático medio e inversamente proporcional al tiempo.

$$D = \frac{\langle x^2 \rangle}{2t}. \quad (2.35)$$

2.4.3. Difusión determinista

Cuando en un sistema dinámico se encuentra que el coeficiente de difusión definido con la ecuación de Einstein (2.35) es positivo, $D > 0$, dado que los sistemas dinámicos son deterministas, se dice que el sistema tiene *difusión determinista*.

La difusión determinista es una propiedad interesante a estudiar en procesos fuera de equilibrio en mecánica estadística, ya que nos permite entender la relación entre la dinámica microscópica determinista y la descripción al parecer aleatoria macroscópica que el sistema descrito exhibe, por ejemplo la relación entre los exponentes de Lyapunov, la entropía Kolmogorov–Sinai y los coeficientes de transporte macroscópicos.[31]

De manera más formal, de acuerdo con [38] se dice que un sistema tiene difusión determinista si:

1. el desplazamiento cuadrático medio crece asintóticamente lineal con el tiempo, es decir si $2D := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \langle \Delta x^2 \rangle$ existe;
2. la distribución de la posición o desplazamiento, escalada por \sqrt{t} para que sea acotada, converge a una distribución Gaussiana, es decir el teorema del límite central se cumple.
3. Todo el proceso apropiadamente escalado, converge a un proceso de Wiener.

2.4.4. Relaciones Green–Kubo

Los coeficientes de transporte, como los de difusión, viscosidad y conductividad térmica, se pueden expresar como integrales en el tiempo de una *función de correlación* apropiada. A esta formulación se conoce como las *relaciones de Green Kubo*, y su importancia radica en que permiten calcular los coeficientes de transporte que describen la relajación o disipación de un fluido a una perturbación en términos de las funciones de correlación, que describen las fluctuaciones de un fluido en equilibrio.

Funciones de correlación

El concepto de funciones de correlación es tal vez el concepto más importante introducido por la física estadística moderna, ya que casi toda propiedad física se puede expresar en términos de ellas.

Una función de correlación es una función de variables aleatorias microscópicas en dos puntos diferentes en el espacio o tiempo. Es decir, es el promedio sobre un ensamble del producto de dos o más variables.

$$C_{AB}(t) = \int_0^t \langle A(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \tau) \cdot B(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \tau) \rangle d\tau \quad (2.36)$$

donde A, B son dos observables (variables aleatorias) cualesquiera [13].

Estas funciones sirven para entender la relación temporal o espacial de una variable consigo misma (autocorrelación) o con otras (correlación): si A y B no tienen ninguna relación y ambas pueden tomar valores positivos y negativos entonces el promedio será cero. Si A y B están relacionadas de manera que un valor de A implica un valor B , entonces $C_{AB} \neq 0$.

Se puede probar [6] que en sistemas que no están sujetos a condiciones externas, por ejemplo los sistemas hamiltonianos, las funciones de correlación dependen únicamente de la diferencia de tiempos y no de los tiempos absolutos:

$$\langle A(\tau)A(\tau + t) \rangle = \langle A(0)A(t) \rangle, \quad \forall \tau \quad (2.37)$$

y además que

$$\langle A(0)A(t) \rangle = \langle A(0)A(-t) \rangle, \quad (2.38)$$

Deducción de relación Green–Kubo para el coeficiente de difusión

Aunque el desplazamiento cuadrático medio y la función de autocorrelación de velocidad (C_v) parecen ser funciones que distan mucho una de la otra, ambas funciones describen el movimiento de una partícula en el tiempo y por tanto deben estar relacionadas de alguna manera.

El desplazamiento $\mathbf{r}(t) = \mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0)$ de una partícula con velocidad $\mathbf{v}(t)$ se puede expresar como

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0) = \int_0^t dt' \mathbf{v}(t'), \quad (2.39)$$

lo cual implica que

$$\langle r^2 \rangle = \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \langle \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{v}(t'') \rangle, \quad (2.40)$$

donde $\langle \cdot \rangle$ denota un promedio sobre condiciones iniciales.

Dado que en sistemas hamiltonianos existe invarianza temporal y por lo tanto $\langle \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{v}(t'') \rangle = \langle \mathbf{v}(t' - t'') \cdot \mathbf{v}(0) \rangle$, resulta una buena sugerencia cambiar el área de integración de tal forma que una de las variables de integración sea $t' - t''$. Sea $\tau = t' - t''$, entonces

$$\langle r^2 \rangle = \int_0^t dt' \int_{t'}^{t'-t} d\tau \langle \mathbf{v}(\tau) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle. \quad (2.41)$$

Ahora bien, si intercambiamos el orden de las integrales, dado que el área de integración ahora es un paralelogramo, obtenemos que

$$\langle r^2 \rangle = \int_{-t}^0 \langle \mathbf{v}(\tau) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle d\tau \int_0^{t+\tau} dt' + \int_0^t \langle \mathbf{v}(\tau) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle d\tau \int_{\tau}^t dt'. \quad (2.42)$$

Si intercambiamos en la primera integral τ por $-\tau$ y hacemos uso del hecho que que $\langle \mathbf{v}(\tau) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle = \langle \mathbf{v}(-\tau) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle$ obtenemos finalmente que:

$$\langle r^2 \rangle = 2 \int_0^t C_v(\tau)(t - \tau)d\tau \quad (2.43)$$

Para entender la integral anterior hay que analizar dos casos: cuando $t \ll t_c$ y cuando $t \gg t_c$ donde t_c es el tiempo de correlación.

Si separamos la integral en dos partes,

$$\langle r^2 \rangle = 2t \int_0^t d\tau C_v(\tau) - 2 \int_0^t d\tau C_v(\tau)\tau, \quad (2.44)$$

entonces en el primer caso, dado que t es muy pequeño el primer término del lado derecho es despreciable, por lo cual la ecuación (2.43) se reduce a

$$\langle r^2 \rangle = 2C_v(0)(t^2/2) = \langle \mathbf{v} \rangle^2 t^2. \quad (2.45)$$

Es decir la partícula se mueve libre (régimen balístico). En el segundo caso, si $t \gg t_c$, entonces el primer término es dominante de manera que podemos ignorar el otro término [9] y obtener entonces que:

$$\frac{\langle r^2 \rangle}{2t} = \int_0^\infty d\tau C_v(\tau). \quad (2.46)$$

Es decir el desplazamiento cuadrático medio de la partícula es proporcional al tiempo. Comparando con la ecuación de Einstein (2.35), si tenemos un sistema en d dimensiones como $\langle \mathbf{r}^2 \rangle = d\langle x^2 \rangle$ entonces:

$$D = \frac{1}{d} \int_0^\infty C_v(\tau) = \frac{1}{d} \int_0^\infty \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle dt. \quad (2.47)$$

Capítulo 3

Modelos

Los modelos se estudian porque sugieren cómo funciona el mundo real. En el mejor de los casos, cada modelo es una idealización cuyo propósito es capturar algunas propiedades de los procesos físicos de un determinado sistema. En este capítulo se plantean dos modelos muy importantes en la física estadística, el fluido de esferas duras y los billares. El primero es un modelo de las interacciones entre las partículas o moléculas que componen un fluido y el segundo es un modelo del fluido de esferas duras como sistema dinámico.

3.1. Fluido de esferas duras

A nivel microscópico, tal vez la manera más fácil de visualizar un fluido es como una colección de átomos o moléculas idénticas que se mueven en el espacio y colisionan entre sí. Un *fluido de esferas duras* es un modelo matemático que formaliza esta idea. Las moléculas que componen al fluido son representadas por una colección de partículas esféricas que se mueven en líneas rectas, sin rotación, y cuyas interacciones por pares están regidas por un potencial $V(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j)$ que considera únicamente fuerzas repulsivas de corto alcance.

$$V(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) = \begin{cases} 0 & \text{si } |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j| > r_i + r_j \\ \infty & \text{si } |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j| \leq r_i + r_j. \end{cases} \quad (3.1)$$

Es decir las esferas son impenetrables. Si en el sistema se conserva la energía, es decir el sistema es hamiltoniano, entonces la dinámica del mismo se puede

conocer mediante la resolución de las ecuaciones hamiltonianas (2.20), donde en el caso de un fluido de esferas duras el hamiltoniano esta dado por:

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_{i=0}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{j=0}^N \sum_{i \neq j}^N V(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j), \quad (3.2)$$

donde N el número de partículas en el fluido, $m_1 = \dots = m_i = m$ la masa de cada partícula y $V(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j)$ está definido según la ecuación (3.1).

Es decir, para un fluido de N esferas duras moviéndose en un espacio de dimensión k , se tienen en total $2kN$ ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas.

3.2. Billares

Nos interesa entender que es un billar ya que son modelos que nos ayudan a comprender la dinámica de un fluido de esferas duras al haber un isomorfismo entre ambos sistemas.

Un billar es un sistema en el cual una partícula se mueve libremente y sin aceleración en una determinada región y que al llegar a las fronteras de la región colisiona y se refleja especularmente.

De manera más formal, la partícula del billar se mueve dentro de una región $Q \subset \mathbb{R}^n$ cuya frontera $\partial Q \subset \mathbb{R}^{n-1}$ es la unión de un número finito de curvas ∂Q_i . La dinámica de la partícula entre las colisiones está regida por las ecuaciones hamiltonianas:

$$\dot{\mathbf{q}}_i = \mathbf{p}_i, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = 0, \quad (3.3)$$

y en las colisiones con las fronteras se refleja elásticamente de acuerdo con la ecuación:

$$\mathbf{v}_+ = \mathbf{v}_- - 2\langle \mathbf{v}_-, \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{q}) \rangle \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{q}), \quad (3.4)$$

donde \mathbf{v}_- es la velocidad antes de la colisión, \mathbf{v}_+ la velocidad después de la colisión, $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{q})$ es la normal a la frontera en el punto $\mathbf{q} \in \partial Q$ y $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota el producto escalar entre los vectores.

Observaciones:

1. Como $\langle \mathbf{v}, \hat{\mathbf{n}} \rangle \hat{\mathbf{n}}$ es invariante ante el cambio de signo de $\hat{\mathbf{n}}$, no importa la elección de $\hat{\mathbf{n}}$.

2. La dinámica no está bien definida en los vértices de ∂Q , ya que ahí puede haber más de un vector normal. Sin embargo, para lo que se quiere en este trabajo, no es de gran importancia ya que este conjunto de singularidades es de medida cero.
3. Estas ecuaciones preservan la norma de \mathbf{v} , que es análogo a decir que se conserva la energía en el sistema. Por lo tanto podemos fijar $|\mathbf{v}| = 1$.

Dado que las ecuaciones hamiltonianas son ecuaciones diferenciales de primer orden donde para cada punto $x \in Q$ existe una solución única bien definida para todo $t \in \mathbb{R}$, un billar es un sistema dinámico continuo cuyo flujo $f^t(x)$, $f : Q \rightarrow Q$, está definido por las ecuaciones hamiltonianas, junto con las reglas de colisión.

Como la velocidad dentro de Q es constante, la dinámica del billar se puede caracterizar por completo mediante las colisiones de la partícula en ∂Q . Es decir, el flujo del billar se puede estudiar reduciéndolo a un mapeo $T : P \rightarrow P$, $P \subset \mathbb{R}^{n-1}$, construyendo una sección transversal, llamada también sección de Poincaré [34].

En los billares una sección natural es una transversal al flujo, $P = \{(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in R^n : \mathbf{q} \in \partial Q, \langle \mathbf{v}, \hat{n}(\mathbf{q}) \rangle \geq 0\}$, ya que cualquier trayectoria cruza dicha superficie.

3.3. Billares como modelos de fluidos

Si bien no es evidente la relación entre un billar y un fluido de esferas duras, se puede demostrar que la dinámica de cualquier fluido de esferas duras es isomorfa a un billar de altas dimensiones [27].

Teorema 3.3.1. *Cualquier fluido de N discos duros en \mathbb{R}^n es equivalente a un billar.*

Demostración:

Supongamos que tenemos N discos duros de masa m y radio r moviéndose y colisionando entre sí en una caja periódica $Q \in R^m$.

Sea $\mathbf{q}_i \in Q \subset R^m$ y $\mathbf{v}_i \in R^n$ la posición y velocidad del i -ésimo disco respectivamente. Sabemos entonces que si conocemos la dinámica de $\Gamma = (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N)$ en $P = Q \times R^n$, dado que Γ tiene la información completa del sistema mecánico en cada instante, conoceremos entonces la evolución de las variables de estado del fluido de esferas duras.

Por lo tanto estudiar la dinámica de Γ en P es lo mismo que estudiar la evolución del sistema mecánico, i.e. la dinámica del sistema mecánico es isomorfa a la dinámica de Γ , la cual está descrita por rectas en P .

Dado que en el sistema mecánico los discos no pueden ocupar el mismo espacio y las colisiones son por pares, si denotamos por $q_i^1, q_i^2, \dots, q_i^m$ las coordenadas del i -ésimo disco, resulta que no puede ocurrir que:

$$(q_i^1 - q_j^1)^2 + (q_i^2 - q_j^2)^2 + \dots + (q_i^N - q_j^N)^2 < 2r \quad (3.5)$$

donde $i, j = 1, \dots, N$.

Dicha restricción tiene como consecuencia en P que Γ no puede estar dentro de regiones *cilíndricas* C_{ij} . De manera que si la trayectoria de Γ al evolucionar en el tiempo llega a la frontera de estos cilindros colisionará y posteriormente se alejará de ella. Por lo tanto, la dinámica de un fluido de discos duros es equivalente a la dinámica en de Γ en P colisionando con los cilindros C_{ij} .

Para ver que el sistema mecánico fuera isomorfo a un billar en altas dimensiones, específicamente un billar de dimensión $2Nd$ donde d es la dimensión de Q faltaría únicamente demostrar que dichas colisiones con las fronteras de los cilindros son elásticas. Dicha demostración se puede encontrar en el capítulo 3 de la referencia [9].

Capítulo 4

Simulaciones numéricas

El sistema que se modela y simula es un sistema de tres discos moviéndose en una caja con condiciones de frontera periódicas y en algunos casos con condiciones de frontera cerradas.

El trabajo de simulación numérica se puede dividir en dos partes:

- La implementación del sistema, es decir la creación de los discos y la frontera y la especificación de las interacciones entre ellos.
- La implementación de funciones que a partir del conocimiento periódico de las posiciones y velocidades de los discos permiten obtener cantidades como el desplazamiento cuadrático medio, el coeficiente de difusión y los exponentes de Lyapunov.

4.1. Implementación de la dinámica del sistema

Se implementaron dos sistemas. El primero fue una caja con fronteras cerradas y N discos colisionando elásticamente dentro de ella y el segundo una caja con condiciones periódicas y N discos colisionando dentro de ella. La implementación de la dinámica en ambos casos está basada en la actualización de las variables de estado de los discos cada vez que ocurre un evento, donde por *evento* se entienden las colisiones entre los discos o de los discos con la frontera, sin importar si es periódica o cerrada. Es decir, la dinámica funciona bajo un algoritmo llevado por eventos (event driven algorithm)[35].

Este tipo de algoritmo consta de dos pasos fundamentales que se repiten constantemente:

- encontrar el tiempo del evento;
- actualizar las variables de estado hasta el tiempo del evento.

4.1.1. Cálculo del tiempo del evento.

El tiempo del evento, se define como el tiempo mínimo necesario para que ocurra una colisión entre discos o de los discos con la frontera.

Para determinar dicho tiempo, se deben calcular todos los posibles tiempos de colisión en el sistema y encontrar el mínimo.

Tiempos de colisión con la frontera

Dado que los discos se mueven en líneas rectas, los tiempos de colisión de los diferentes discos con las componentes de la frontera se pueden determinar como los escalares para los cuales hay una intersección entre las trayectorias de los discos y la i -ésima componente de la frontera, donde la forma de determinar la intersección dependerá de la geometría de la componente de la frontera. En el caso del sistema que se estudia en esta tesis, la frontera está compuesta únicamente por líneas rectas, de manera que sólo se expondrá el cálculo para este caso.

Colisiones con componentes de la frontera tipo recta

La intersección entre la trayectoria de un disco y una recta sucederá siempre y cuando exista $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$, tal que:

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = 0, \quad (4.1)$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{v}t, \quad (4.2)$$

donde \mathbf{x}_0 es un punto en la recta, $\hat{\mathbf{n}}$ el vector normal a la recta, \mathbf{x} la posición del disco y \mathbf{v} la velocidad del disco.

Por lo tanto, el tiempo que debe transcurrir para que haya una intersección entre un disco y una recta es

$$t = \frac{\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x} - \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}_0}{\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}}. \quad (4.3)$$

Como dos rectas cualesquiera eventualmente se intersectan a menos que sean paralelas, cada disco tendrá tantos tiempos de colisión como componentes tenga la frontera. Algunos de esos tiempos serán negativos y no nos interesan y los restantes se pueden ordenar de mayor a menor. El tiempo de intersección del i -ésimo disco con la frontera (t_{if}) se encuentra entonces como el mínimo de los tiempos positivos de colisión con las componentes de la frontera.

$$t_{if} = \text{mín}\{t_{i1}, t_{i2}, \dots, t_{iM}\}, \quad (4.4)$$

donde M es el número de componentes de la frontera. Por ejemplo, para una frontera compuesta por cuatro rectas formando una caja, existen cuatro tiempos de intersección, un por cada lado. En la figura (4.1) los tiempos t_1 y t_2 son negativos y por lo tanto no nos interesan y los tiempo positivos cumplen que $t_4 > t_3$ Por lo tanto el tiempo de colisión del disco con al frontera de la caja es $t_{if} = t_3$.

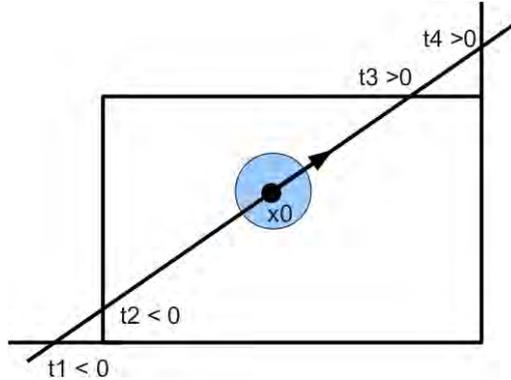


Figura 4.1: Intersecciones posibles de un disco con las rectas que componen la frontera del sistema.

Tiempos de colisión entre discos

Los tiempos de colisión entre discos se determinan encontrando los tiempos para los cuales las trayectorias de dos discos se encuentran a una distancia $d(x_i, x_j) = r_i + r_j$ donde r_i y r_j son los radios de los discos i y j respectivamente y \mathbf{x}_i y \mathbf{x}_j las posiciones. Es decir, se cumple que

$$|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| = |\mathbf{x}_{0i} + \mathbf{v}_i t - (\mathbf{x}_{0j} + \mathbf{v}_j t)| = r_i + r_j. \quad (4.5)$$

Elevando ambos lados al cuadrado y despejando el tiempo obtenemos que:

$$t = \frac{-(\Delta \mathbf{x}_0 \cdot \Delta \mathbf{v}) \pm \sqrt{(\Delta \mathbf{x}_0 \cdot \Delta \mathbf{v})^2 - 4(\Delta \mathbf{v})^2(\Delta \mathbf{x}_0^2 - (r_i + r_j)^2)}}{\Delta \mathbf{v}^2} \quad (4.6)$$

donde $\Delta \mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_{0i} - \mathbf{x}_{0j}$ y $\Delta \mathbf{v} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$

Si se tienen N discos, entonces cada disco tendrá $N - 1$ tiempos de colisión con los demás discos. Por lo tanto el tiempo de colisión del i -ésimo disco con los demás discos se definirá como el mínimo

$$t_{id} = \min\{t_{i1}, t_{i2}, \dots, t_{iN}\}. \quad (4.7)$$

Finalmente el **tiempo del evento** se define como el mínimo de los tiempos de colisión con los discos y las fronteras de todos los discos del sistema:

$$t_e = \min\{t_{1d}, t_{2d}, \dots, t_{Nd}; t_{1f}, t_{2f}, \dots, t_{Nf}\}. \quad (4.8)$$

4.1.2. Actualización de las variables de estado.

La actualización de las variables de estado consiste primero en la actualización de las posiciones de todos los discos al tiempo del evento (t_e), de acuerdo con

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_i + \mathbf{v}_i t_e, \quad i=1,2,\dots,N, \quad (4.9)$$

y segundo en la actualización de la velocidad o posición (dependiendo del tipo de evento) de las partículas involucradas en la colisión o evento.

Modificación de la velocidad debido a eventos con la frontera

Si suponemos que la frontera está compuesta por obstáculos fijos, entonces al colisionar un disco con la frontera, éste se reflejará elásticamente. La energía total del sistema se conserva pero no el momento total.

Dado que en dichas colisiones podemos suponer que los discos son objetos puntuales, es decir podemos despreocupar su radio debido a que modificaciones en el radio de los discos generan exactamente la misma dinámica que modificaciones en el tamaño de los obstáculos, al colisionar un disco con un obstáculo fijo no interviene la curvatura del mismo.

De manera que si denotamos por $\mathbf{v}_i^{(-)}$ la velocidad del disco antes de la colisión y por $\mathbf{v}_i^{(+)}$ la velocidad del disco después de la colisión, entonces

$$\mathbf{v}_i^{(+)} = \mathbf{v}_i^{(-)} - 2\langle \mathbf{v}_i^{(-)}, \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{q}) \rangle \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{q}). \quad (4.10)$$

Es decir, la nueva dirección del disco duro se puede determinar haciendo una reflexión del vector de velocidad del disco en la normal del obstáculo. independientemente del tipo de obstáculos. La diferencia entre las diferentes colisiones radicarán únicamente en el cálculo del vector normal.

Modificación de la velocidad debido a eventos entre discos

En el caso de colisiones entre dos discos sí hay conservación del momento, de manera que la nueva velocidad no es simplemente una reflexión especular, sino que quedará determinada por el intercambio de las componentes de las velocidades paralelas al vector que une los centros de los discos involucrados en la colisión.

Al momento de colisionar dos discos, la fuerza que cada uno ejerce en el otro mutuamente va en la dirección de la línea que conecta sus centros. Podemos entonces pensar la colisión entre los discos como una colisión unidimensional, en la cual los discos se mueven en las direcciones \mathbf{v}_{p1} y \mathbf{v}_{p2} (figura (4.2)) donde \mathbf{v}_{p1} y \mathbf{v}_{p2} son las componentes paralelas de la velocidad del disco 1 y 2 respectivamente al vector que une los centros de los discos.

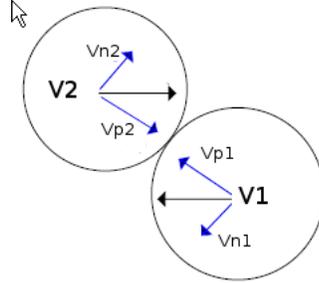


Figura 4.2: Modificación de las componentes de la velocidad de los discos en una colisión disco-disco.

Bajo este supuesto, utilizando la conservación del momento obtenemos que:

$$\mathbf{v}_{p2}^{(+)} = \frac{(m_1 - m_2)}{(m_1 + m_2)} \mathbf{v}_{p2}^{(-)} + \frac{2m_2}{(m_1 + m_2)} \mathbf{v}_{p1}^{(-)} \quad (4.11)$$

$$\mathbf{v}_{p1}^{(+)} = \frac{(2m_1)}{(m_1 + m_2)} \mathbf{v}_{p2}^{(-)} + \frac{(m_2 - m_1)}{(m_2 + m_1)} \mathbf{v}_{p1}^{(-)}. \quad (4.12)$$

Si las masas de los discos son iguales, entonces

$$\mathbf{v}_{p2}^{(+)} = \mathbf{v}_{p1}^{(-)}, \mathbf{v}_{p1}^{(+)} = \mathbf{v}_{p2}^{(-)}. \quad (4.13)$$

Si definimos \mathbf{v}_{n1} y \mathbf{v}_{n2} como las componentes de las velocidades de los discos 1 y 2 normales al vector que une sus centros, entonces

$$\mathbf{v}_{n2}^{(+)} = \mathbf{v}_{n2}^{(-)}, \mathbf{v}_{n1}^{(+)} = \mathbf{v}_{n1}^{(-)}. \quad (4.14)$$

Por lo tanto, las velocidades después de la colisión estarán dadas por:

$$\mathbf{v}_2^{(+)} = \mathbf{v}_{p2}^{(+)} + \mathbf{v}_{n2}^{(+)} = \mathbf{v}_{p1}^{(-)} + \mathbf{v}_{n2}^{(-)}; \quad (4.15)$$

$$\mathbf{v}_1^{(+)} = \mathbf{v}_{p1}^{(+)} + \mathbf{v}_{n1}^{(+)} = \mathbf{v}_{p2}^{(-)} + \mathbf{v}_{n1}^{(-)}. \quad (4.16)$$

Frontera periódica

Cuando suponemos condiciones periódicas, si bien el tiempo del evento puede ser calculado de la misma manera, la actualización de las variables de estado no es la misma, ya que en éste caso la variable de estado que se modifica cuando hay un evento debido a la frontera es la posición final, no la velocidad.

Modificación de la posición debido a evento con la frontera

Cuando suponemos que nuestro sistema tiene condiciones periódicas, la frontera deja de ser un obstáculo contra el que hay reflexiones y se convierte simplemente en un “delimitador” de celdas.

Suponer condiciones de frontera periódicas es lo mismo que pensar que el sistema está compuesto por una infinidad de celdas con la misma dinámica que la celda principal (figura (4.3)). A los “discos” en el resto de las celdas se les denomina las *imágenes* de los discos.

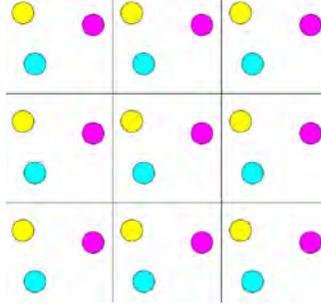


Figura 4.3: Visualización de una caja con condiciones de frontera periódicas como una red periódica de cajas.

Si lo vemos así, entonces cada vez que hay un evento debido a la frontera, el disco involucrado cambia de celda, es decir los discos se van desplazando en la red infinita de cajas. Como en el resto de las celdas la dinámica es la misma, esto necesariamente implica que las imágenes también se van desplazando en la red infinita de cajas y en particular entran y salen de la celda o caja principal.

Por lo tanto, cada vez que se registra un evento debido a la frontera, la posición final $\mathbf{x}_f = (\mathbf{x}_{f1}, \mathbf{x}_{f2}, \dots, \mathbf{x}_{fn})$ del disco involucrado deberá ser modificada de acuerdo a la siguiente regla:

Si la frontera está a una distancia L en la dirección j ,

$$x_{fj} = x_{ij} - L * \lfloor \frac{x_{ij}}{L} \rfloor, \quad (4.17)$$

donde $\lfloor \cdot \rfloor$ es la operación de tomar el menor entero. y si la frontera está en 0 en la dirección j :

$$x_{fj} = x_{ij} - L * \lfloor \frac{x_{ij} - L}{L} \rfloor \quad (4.18)$$

Lo cual hará que el disco se pase al lado opuesto de la caja.

Colisiones de los discos con las imágenes

En el caso de condiciones periódicas, además de considerar las colisiones entre discos o con las fronteras, hay que considerar las colisiones de los discos con las imágenes de los demás discos.

Para determinar el tiempo de colisión entre discos e imágenes, se toma el i -ésimo disco y en vez de intersectar su trayectoria con los demás discos se

intersecta su trayectoria con las imágenes de los demás discos. Es decir, se intersecta la trayectoria del i -ésimo disco con discos en las celdas contiguas cuya velocidad es igual a la velocidad del j -ésimo disco en la caja pero cuya posición es $\mathbf{q}_j + celda$ (figura (4.4)), donde el factor *celda* es una translación del j -ésimo disco a las celdas contiguas.

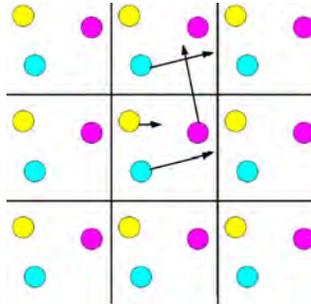


Figura 4.4: Intersección entre un disco y una imagen

En este caso el tiempo del evento será el mínimo entre los tiempos de colisión entre discos, de los discos con la frontera y de los discos con las imágenes.

Cuando el evento es una colisión entre un disco y una imagen, como en las colisiones entre discos, la variable que se actualiza es la velocidad y se actualiza de acuerdo con la ecuación (4.15), pero tomando en cuenta el desplazamiento del disco.

4.2. Implementación de funciones

4.2.1. Funciones de correlación

Para calcular el coeficiente de difusión a partir de la función de correlación de la velocidad, se calcula $\langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle$ para los diferentes discos cada determinado tiempo y la suma de éstos valores se promedia sobre las simulaciones.

Una vez que se tiene la función de correlación, se utiliza el algoritmo del trapecio para integrar dicha función y obtener el coeficiente de difusión.

4.2.2. Exponentes de Lyapunov

Debido a que rara vez se pueden resolver las ecuaciones dinámicas explícitamente y es prácticamente imposible hallar expresiones analíticas de los exponentes de Lyapunov, generalmente para determinarlos se utilizan métodos numéricos.

El método que se utilizó en este trabajo está basado en el artículo de Dellago -Posch [33][7] en el cual los exponentes de Lyapunov se calculan a partir de entender la dinámica en el espacio tangente (P_T) al espacio fase, es decir el espacio generado por las perturbaciones infinitesimales también llamados vectores de Lyapunov.

De acuerdo con la ecuación (2.4), cualquier perturbación $\delta\Gamma \in P_T$ evoluciona de acuerdo a:

$$\delta\dot{\Gamma} = D(\Gamma) \cdot \delta\Gamma. \quad (4.19)$$

$D(\Gamma)$ la matriz Jacobiana. Como los fluidos de esferas duras y por lo tanto los billares evolucionan de acuerdo con las ecuaciones hamiltonianas, entonces Γ evoluciona en el espacio fase de acuerdo con

$$\dot{\Gamma} = (\dot{\mathbf{q}}, \dot{\mathbf{p}}) = (\mathbf{p}/m, 0), \quad (4.20)$$

excepto en las colisiones en donde, de acuerdo con [7], las coordenadas y momentos asociadas a los discos que colisionan, k, l , varían como:

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_j^f &= \mathbf{q}_j^i \text{ si } j = 1, 2, \dots, N; \\ \mathbf{p}_j^f &= \mathbf{p}_j^i \text{ si } j \neq k, l; \\ \mathbf{p}_k^f &= \mathbf{p}_k^i + (\mathbf{p} \cdot \mathbf{q})\mathbf{q}/\sigma^2; \\ \mathbf{p}_l^f &= \mathbf{p}_l^i - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{q})\mathbf{q}/\sigma^2, \end{aligned} \quad (4.21)$$

donde los superíndices i y f se refieren a los tiempos iniciales y finales respectivamente, σ es el radio de los discos, $\mathbf{q} = \mathbf{q}_k^i - \mathbf{q}_l^i$ y $\mathbf{p} = \mathbf{p}_k^i - \mathbf{p}_l^i$.

Si se define $\delta\tau_c$ como el tiempo de retraso de la colisión de la trayectoria perturbada respecto a la trayectoria referencia,

$$\delta\tau_c = -\frac{(\delta\mathbf{q} \cdot \mathbf{q})}{(\mathbf{p}/m \cdot \mathbf{q})}, \quad (4.22)$$

donde $\delta\mathbf{q} = \delta\mathbf{q}_l - \delta\mathbf{q}_k$, resulta entonces que la perturbación $\delta\Gamma$ se transforma en las colisiones de acuerdo a:

$$\begin{aligned}
\delta \mathbf{q}_j^f &= \delta \mathbf{q}_j^i \text{ si } j \neq k, l; \\
\delta \mathbf{p}_j^f &= \delta \mathbf{p}_j^i \text{ si } j \neq k, l; \\
\delta \mathbf{q}_k^f &= \delta \mathbf{q}_k^i + (\delta \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}) \mathbf{q} / \sigma^2; \\
\delta \mathbf{q}_l^f &= \delta \mathbf{q}_l^i - (\delta \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}) \mathbf{q} / \sigma^2; \\
\delta \mathbf{p}_k^f &= \delta \mathbf{p}_k^i + (\delta \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}) \mathbf{q} / \sigma^2 + \frac{1}{\sigma^2} [(\mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{q}_c) \mathbf{q} + (\mathbf{p}, \mathbf{q}) \delta \mathbf{q}_c]; \\
\delta \mathbf{p}_l^f &= \delta \mathbf{p}_l^i - (\delta \mathbf{p} \cdot \mathbf{q}) \mathbf{q} / \sigma^2 - \frac{1}{\sigma^2} [(\mathbf{p} \cdot \delta \mathbf{q}_c) \mathbf{q} + (\mathbf{p}, \mathbf{q}) \delta \mathbf{q}_c], \tag{4.23}
\end{aligned}$$

donde ahora $\delta \mathbf{p} = \delta \mathbf{p}_l - \delta \mathbf{p}_k$. El resto del tiempo la perturbación $d\Gamma$ obedece las ecuaciones hamiltonianas.

Dado que podemos calcular $\delta\Gamma(t)$ en cualquier tiempo podemos entonces calcular el exponente de Lyapunov asociado a la perturbación.

Espectro completo

Cómo los diferentes exponentes de Lyapunov que componen el espectro corresponden a perturbaciones linealmente independientes, uno pensaría que para encontrar el espectro completo bastaría con tomar un conjunto de vectores de Lyapunov y evolucionar cada uno de acuerdo con la ecuación (4.23). Sin embargo, cuando existe un exponente de Lyapunov máximo positivo esto no se puede hacer así, ya que al existir una dirección de máxima expansión, cualquier perturbación que tomemos se alineará en esta dirección y por lo tanto siempre obtendremos el exponente de Lyapunov máximo. Para encontrar el espectro completo de Lyapunov, se debe por lo tanto hacer una pequeña variante de la ecuación (4.23), que básicamente consiste en evolucionar una trayectoria simultáneamente con una base ortonormal de vectores de Lyapunov que son periódicamente ortonormalizados.

Dado un conjunto de vectores de Lyapunov ortogonales $\delta\Gamma_0, \delta\Gamma_1, \dots, \delta\Gamma_n$, el volumen n -dimensional entre ellos está definido por:

$$V_n = |\delta\Gamma_1| \cdot |\delta\Gamma_2| \cdot \dots \cdot |\delta\Gamma_n|. \tag{4.24}$$

Como

$$\frac{\delta\Gamma_i(t)}{\delta\Gamma_i(0)} = e^{\lambda_i t}, \tag{4.25}$$

donde λ_i es el exponente de Lyapunov asociado a la perturbación $\delta\Gamma_i$, el volumen evoluciona en el tiempo de acuerdo con

$$V_n(t) = \prod_{i=1}^n |\delta\Gamma_i(t)| = \prod_{i=1}^n |\delta\Gamma_i(0)| e^{\lambda_i t}. \quad (4.26)$$

Usando las propiedades de la función exponencial y notando que $V_n(0) = \prod_{i=1}^n |\delta\Gamma_i(0)|$, obtenemos entonces que la evolución del volumen entre los diferentes vectores de Lyapunov está determinada por:

$$V_n(t) = V_n(0) e^{\sum_{i=1}^n \lambda_i t}. \quad (4.27)$$

Por lo tanto si conocemos el exponente máximo y la razón de crecimiento de los volúmenes podemos determinar los restantes exponentes de Lyapunov: $\lambda_2 = -\lambda_1 + \frac{1}{t} \ln \frac{V_2(t)}{V_2(0)}$, $\lambda_3 = -\lambda_1 - \lambda_2 + \frac{1}{t} \ln \frac{V_3(t)}{V_3(0)}$, y así sucesivamente.

De manera que lo único que necesitamos para obtener el espectro completo de exponentes es ortogonalizar el conjunto de vectores de Lyapunov previamente al muestreo. Ésto se puede lograr empleando, por ejemplo, el método de ortogonalización de Gram-Schmidt.

Si además normalizamos periódicamente los vectores de Lyapunov (para evitar divergencia numérica), entonces el i -ésimo exponente de Lyapunov al tiempo t , $\lambda_i(t)$, se puede expresar como

$$\lambda_i = \frac{1}{t} (\ln \|\delta\Gamma_i(0)\| + \ln \|\delta\Gamma_i(dt)\| + \dots + \ln \|\delta\Gamma_i(t)\|), \quad (4.28)$$

es decir, como la suma de los logaritmos de los factores de normalización de $\delta\Gamma_i$. Por lo tanto si además de ortogonalizar los vectores de Lyapunov cada vez que queremos calcular los exponente de Lyapunov, los normalizamos, como $V_n(t)/V_n(0) = 1$ ya que se preserva la medida en el espacio fase, obtenemos finalmente que:

$$\lambda_i(t) = \frac{1}{t} \sum_{n=1}^i (\ln \|\delta\Gamma_n(0)\| + \ln \|\delta\Gamma_n(dt)\| + \dots + \ln \|\delta\Gamma_n(t)\|), \quad (4.29)$$

Capítulo 5

Resultados y análisis

En éste capítulo se presentarán los resultados obtenidos mediante las simulaciones numéricas. Los resultados están divididos en cinco secciones: dinámica en el espacio físico y espacio fase, distribuciones de probabilidad, desplazamiento cuadrático medio, coeficiente de difusión y exponentes de Lyapunov. En cada sección se discuten los resultados a medida que se presentan.

5.1. Dinámica en el espacio físico y el espacio fase

Al hablar de la dinámica del sistema, podemos analizar dos aspectos diferentes aunque no independientes. El primero es la dinámica en el espacio físico (la caja) y el segundo es la dinámica en el espacio fase.

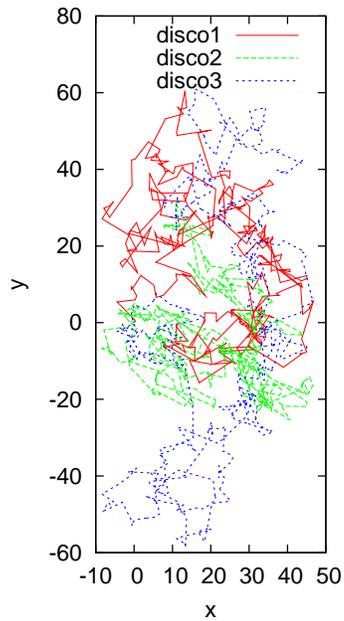


Figura 5.1: Trayectorias descritas por tres discos de radio 0.1 en una red de cajas unitarias.

De acuerdo con la figura (5.1), en el espacio físico las trayectorias de los tres discos a medida que avanzan por la red de cajas unitarias y colisionan entre ellos y con las imágenes son totalmente erráticas y aleatorias, lo cual sugiere que el sistema se puede tratar como un sistema caótico determinista.

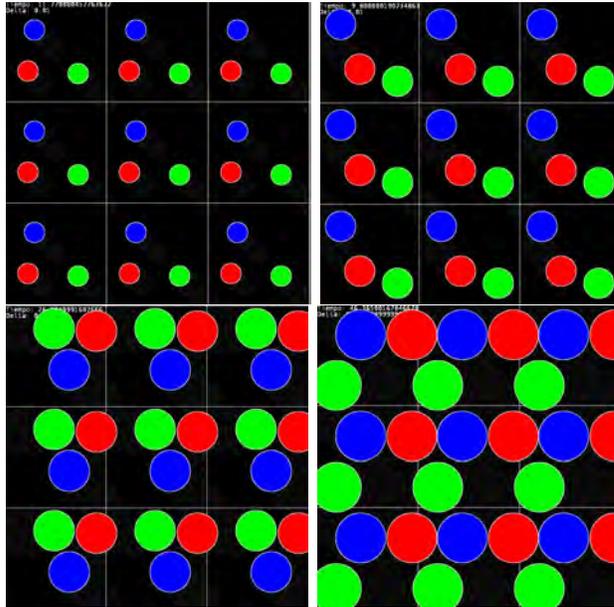


Figura 5.2: Red de cajas unitarias con discos de radios 0.1, 0.15, 0.2 y 0.25.

En general, los discos se mueven libremente como en un fluido. Sin embargo, al aumentar el tamaño de los discos y dejar fijo el volumen de la caja, como se puede apreciar en la figura (5.2), el espacio en el que se pueden mover los discos disminuye y por lo tanto los discos se van quedando atrapados. Esto ocasiona que la dinámica del sistema cambie cualitativamente. En vez de verse como un fluido parece ser un sólido vibrando.

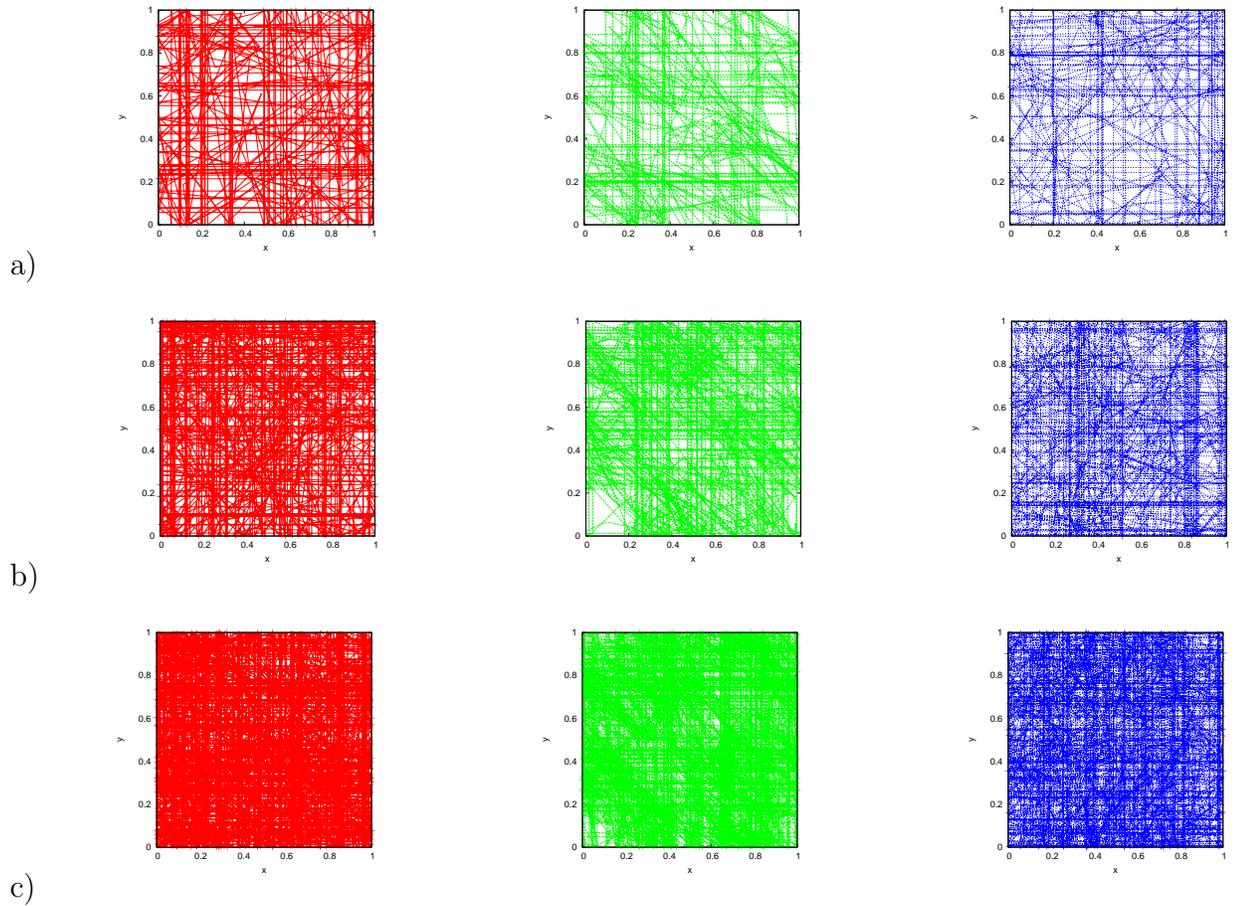


Figura 5.3: Trazas de trayectorias 3 discos de radio 0.1 en una caja periódica unitaria. La figura a) corresponde a 500 colisiones, la b) a 1000 y por último al c) a 2000 colisiones.

De acuerdo con la figura (5.3) los discos pasan eventualmente por todas las posiciones posibles dentro de la caja unitaria. Esto sugiere que el sistema posiblemente es ergódico.

Al graficar una especie de espacio fase para un disco, donde un eje es la posición en x , otro la posición en y y el otro es v_x o v_y , podemos notar que cada disco no sólo pasa por todas las posibles posiciones sino que de hecho eventualmente visita todos sus posibles estados. En la figura (5.4) se puede ver que mientras mayor es el tiempo que se deja evolucionar el sistema, es decir mientras mayor es el número de colisiones, más se llena el espacio

correspondiente a todos los posibles conjuntos de velocidades y posiciones para un disco.

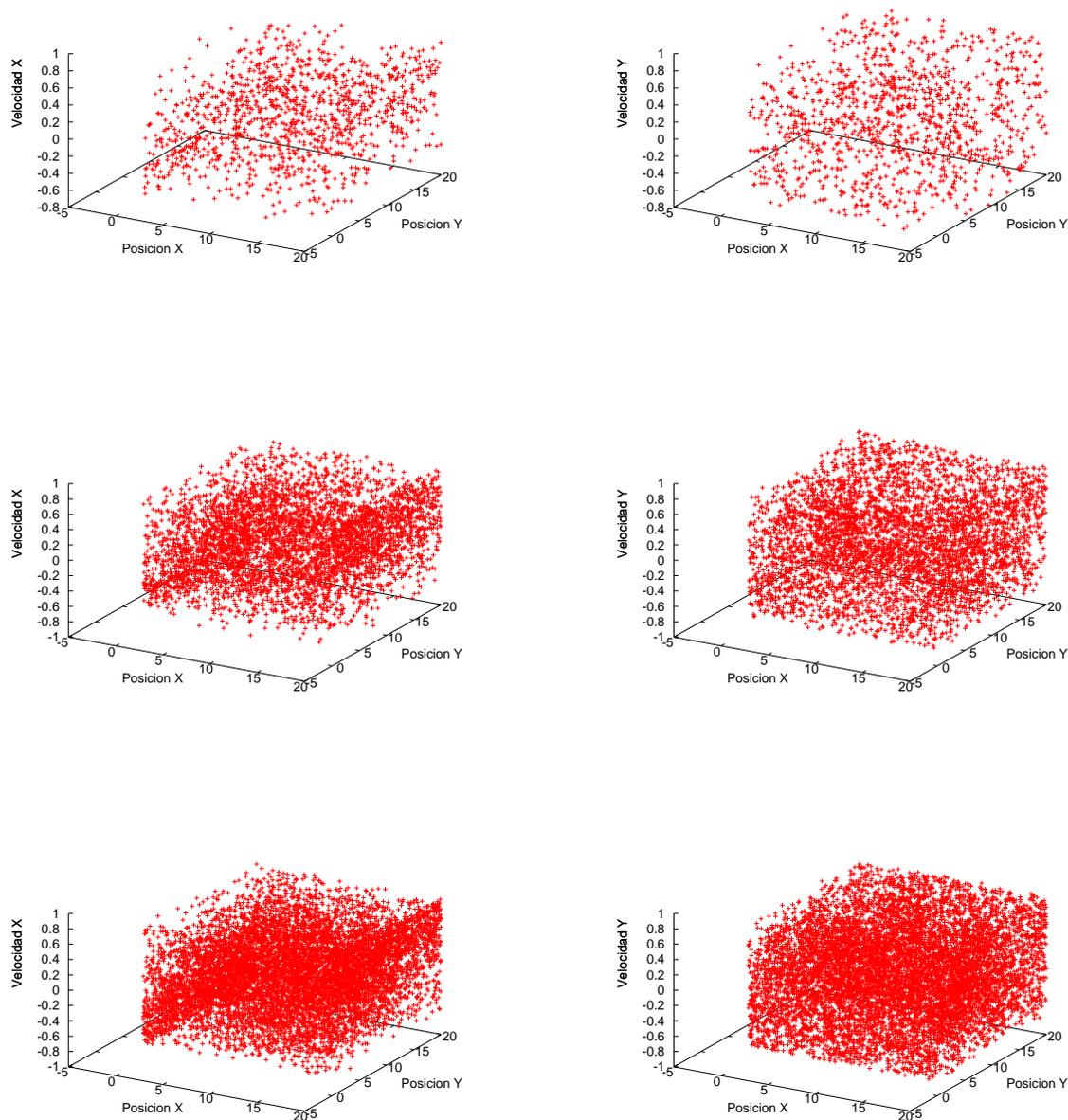


Figura 5.4: Dinámica de un disco de radio 0.1 en el tiempo en una caja unitaria con condiciones periódicas. La figura a) corresponde a 2000 colisiones la b) a 8000 y por último la c) a 16000.

Al graficar lo mismo para los otros dos discos en los mismos tiempos, obtenemos que en conjunto los tres discos eventualmente visitan todas sus posibles posiciones y velocidades. De manera informal, esto muestra que el sistema es ergódico como fue demostrado por Krámli, Simanyi y Százs [24].

5.2. Distribuciones de probabilidad de la posición y la velocidad

La distribución de probabilidad de una variable es una función que asigna a cada suceso o estado permitido de la variable una probabilidad. Es decir, nos dice con qué frecuencia aparece cada posible estado de una variable.

En este trabajo se utilizaron histogramas para determinar la distribución de probabilidad de la posición, el módulo de la velocidad y las componentes de la velocidad. Los histogramas se pueden utilizar para determinar la distribución de probabilidad de una variable, ya que de acuerdo con la ley de grandes números después de muchas mediciones la frecuencia relativa se aproxima al valor límite que es justamente la probabilidad de que un determinado evento ocurra.

5.2.1. Posición

Dado que en los fluidos de esferas duras el potencial se hace cero en todas las configuraciones permitidas y por tanto el hamiltoniano no depende de las posiciones, debería cumplirse que cualquier configuración de posiciones permitidas tenga la misma probabilidad y por tanto la probabilidad de un disco de estar en cualquier posición debería ser la misma.

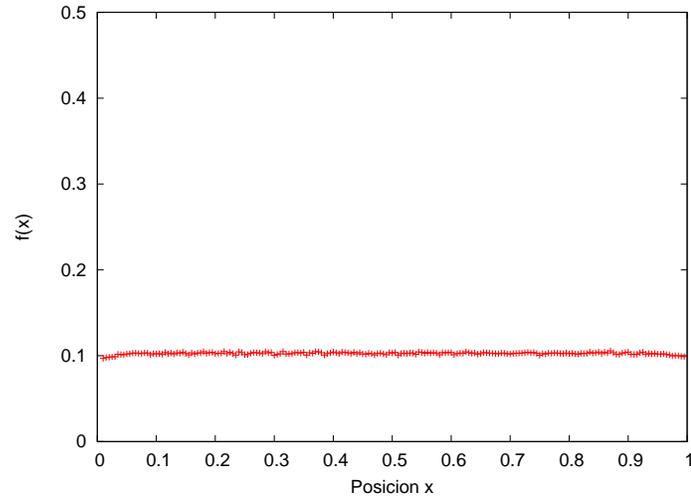


Figura 5.5: Histograma de la componente x de la posición para un sistema de tres discos de radio 0.1 en una caja unitaria con condiciones de frontera periódicas, 10000 simulaciones cada una de 2000 colisiones.

En la figura (5.5) podemos notar que la distribución de probabilidad de una de las componentes de la posición es uniforme. El disco visita los valores $x \in [0, 1]$ con la misma frecuencia. Como al graficar la otra componente de la posición obtenemos una gráfica igual, podemos decir que la distribución de probabilidad de la posición, como se esperaba, es uniforme e isotrópica.

Al cerrar las fronteras de la caja, como en términos de las fronteras los discos son puntuales, obtenemos exactamente la misma distribución uniforme. En ambos casos la distribución uniforme es consecuencia de que en los estados posibles el hamiltoniano no depende de la posición y por lo tanto se cumple el principio de equiprobabilidad de estados.

5.2.2. Velocidad

Debido a que cada partícula tiene diferente velocidad y con cada colision las velocidades cambian, entender las propiedades de un sistema de esferas o discos duros implica entender la distribución de velocidades de los mismo. En general, para sistemas en el ensamble microcanónico o de dinámica

molecular las distribuciones de probabilidad de la velocidad que se esperan son distribuciones que, por el teorema de equivalencia entre ensambles, tiendan a una distribución maxweliana en el límite termodinámico. Esto se espera debido a que, como se demuestra a continuación, en el ensamble canónico la distribución de probabilidad de las componentes de la velocidad y del módulo de la velocidad son distribuciones maxwelianas.

Deducción distribución maxweliana

Debido a la relación entre la velocidad cuadrática media y la energía interna del sistema, $\frac{1}{2}\langle \mathbf{v}^2 \rangle = \langle E \rangle = U$, si tenemos un sistema en el cual U está fijo entonces los valores que pueden tomar los módulos de las velocidades están restringidos. Si en este sistema $N \rightarrow \infty$, las fluctuaciones de la energía tienden a cero y por lo tanto los únicos estados con probabilidad no nula son aquellos en los que $E = U$. Cuando esto sucede, por el principio de equiprobabilidad, todos los conjuntos de velocidades permitidas tiene la misma probabilidad y por lo tanto los podemos imaginar como puntos aleatorios en la superficie de una esfera de dimensión kN (k el número de componentes de cada velocidad) con radio $r = \frac{\sqrt{2E}}{m}$. De acuerdo con [23] cuando esto sucede, podemos representar al conjunto de los conjuntos de velocidades permitidas como un conjunto de kN números gaussianos, que por el teorema del límite central [36] sabemos tiene una distribución gaussiana.

De manera que, utilizando el teorema de equipartición de la energía $\langle E \rangle = \frac{Nd}{2}k_B T$, donde N es el número de discos y d los grados de libertad que contribuyen cuadráticamente al hamiltoniano por partícula, la distribución de la componente de la velocidad de un disco esta definida por:

$$f(v_x) = \sqrt{\frac{2}{\pi} \left(\frac{m}{K_B T} \right)} e^{-\frac{mv_x^2}{2K_B T}}, \quad (5.1)$$

y por lo tanto, la distribución del módulo de la velocidad está dada por:

$$f(v) = \frac{m}{K_B T} v e^{-\frac{mv^2}{2K_B T}}. \quad (5.2)$$

la segunda ecuación se puede deducir de la primera si tomamos la distribución del módulo $f(v) = f(v_x)f(v_y)$ y tomamos en cuenta que el volumen de integración $dv_x dv_y$ es igual a $d\phi v dv = 2\pi v dv$. Tanto la ecuación

(5.1) como la ecuación (5.2), llamadas distribuciones de velocidad de Maxwell, o maxwelianas, representan distribuciones en el ensemble canónico.

Ensamble de dinámica molecular

Al tener condiciones de frontera periódicas se conserva el momento lineal, de manera que el ensamble en el que se trabaja es el ensemble de dinámica molecular.

De acuerdo con [14] la distribución del módulo de la velocidad en el ensemble de dinámica molecular es la llamada distribución de *Schlüter*[32], dada por

$$f(v) = \frac{N(N-2)v}{(N-1)E^{N-2}} \left[E - \frac{Nmv^2}{2(N-1)} \right]^{N-3} \Theta \left[E - \frac{Nmv^2}{2(N-1)} \right], \quad (5.3)$$

donde E es la energía del sistema, N el número de partículas, m la masa de las partículas y Θ la función de Heaviside.

Se puede ver que dicha distribución tiende a una distribución maxweliana

$$f(v) = \frac{Nmv}{E} e^{-Nmv^2/2E} \quad (5.4)$$

si tomamos $N \rightarrow \infty$ y recordamos que $\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{x}{a}\right)^n = e^{-nx/a}$ y utilizamos nuevamente que $\langle E \rangle = \frac{Nd}{2} k_B T$.

Al graficar la distribución de Schlüter contra los resultados simulacionales de un sistema de tres discos para diferentes energías obtenemos:

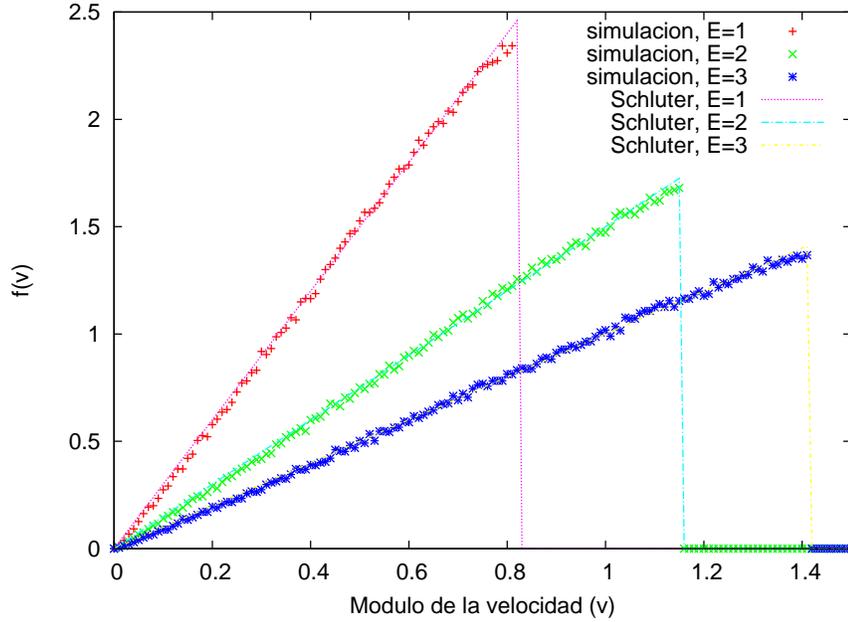


Figura 5.6: Histograma del módulo de la velocidad para un sistema de tres discos de radio 0.1 en una caja unitaria periódica, 100000 simulaciones cada una de 10000 colisiones, $E=1,2,3$. La distribución teórica corresponde a la ecuación (5.3).

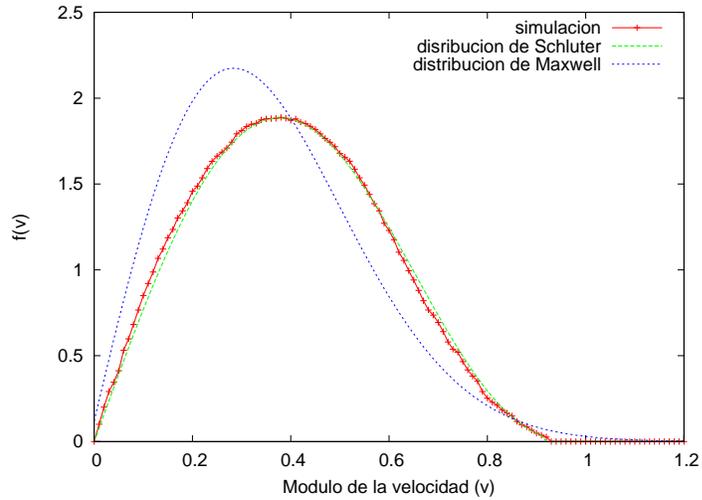
En la figura (5.6) podemos notar que la distribución de probabilidad del módulo de la velocidad varía linealmente con el módulo de la velocidad, y la pendiente de la distribución es inversamente proporcional a la energía. Esto es de esperarse ya que al tomar el caso $N = 3$, la ecuación (5.3) se reduce a

$$f(v) = \frac{N(N-2)v}{(N-1)E}. \quad (5.5)$$

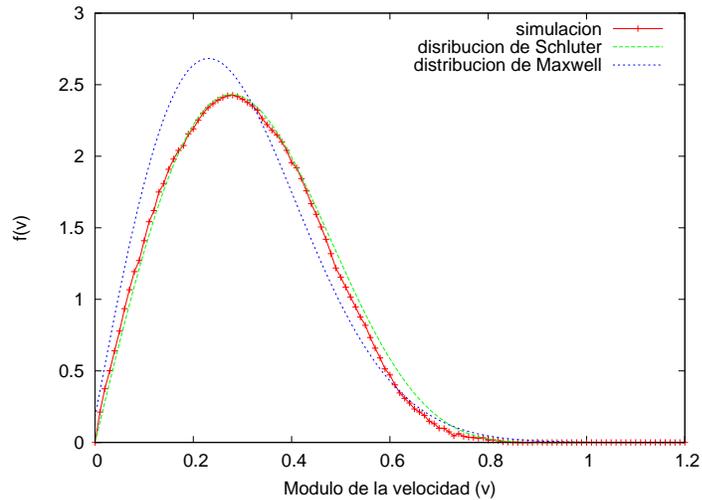
Los valores permitidos del módulo de la velocidad están determinados por la función de Heaviside en la ecuación (5.3) y son valores menores a $\sqrt{2E/m}$ ya que al estar el sistema en el ensamble de dinámica molecular, y por lo tanto haber conservación del momento, no puede suceder que todos los discos excepto uno estén en reposo.

Para verificar que dicha distribución tiende a una maxweliana en el límite termodinámico se hicieron simulaciones para sistemas con seis y nueve discos.

5.2. DISTRIBUCIONES DE PROBABILIDAD DE LA POSICIÓN Y LA VELOCIDAD 59



a)



b)

Figura 5.7: Histograma del módulo de la velocidad para un sistema de a) seis discos de radio 0.05 y b) nueve discos de radio 0.333 en una caja periódica unitaria, 100000 simulaciones cada una de 15000 colisiones, $E=1$. La distribución maxwelliana corresponde a la ecuación (5.4) y la distribución de Schlüter a la (5.3).

En las figura (5.7) podemos ver que las distribuciones obtenidas mediante simulación numérica coinciden con la distribución esperada de acuerdo con la ecuación (5.3) para seis y nueve discos y además podemos también notar que para nueve discos la distribución maxweliana asociada se asemeja más a la distribución de Schluter.

Para el caso de la distribución de las componentes, dado que no se encontró en las referencias una expresión analítica, se integró la distribución conjunta propuesta en la ecuación (24) del artículo de Roman, White, Velasco [14],

$$f(\mathbf{v}) = \frac{N(N-2)}{(N-1)2m\pi E^{N-2}} \left[E - \frac{Nm\mathbf{v}^2}{2(N-1)} \right]^{N-3} \Theta \left[E - \frac{Nm\mathbf{v}^2}{2m(N-1)} \right]. \quad (5.6)$$

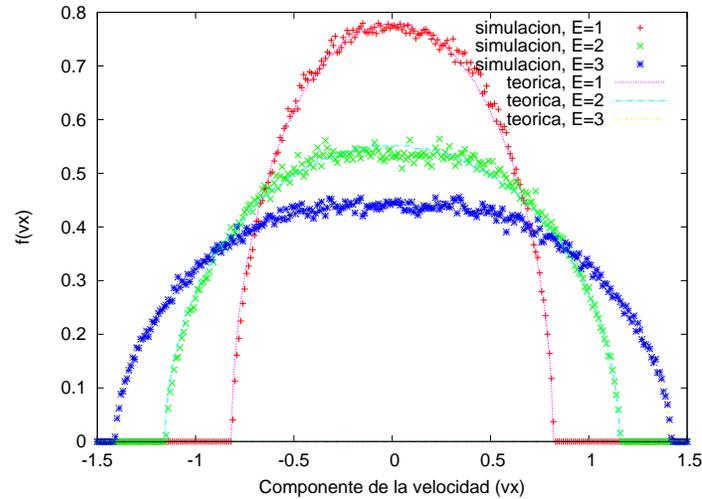


Figura 5.8: Histograma de la componente de la velocidad para un sistema de 3 discos de radio 0.1 en una caja unitaria con condiciones periódicas, 100000 simulaciones cada una de 15000 colisiones $E=1,2,3$. La distribución teórica corresponde a la distribución marginal de la ecuación (5.6).

En la figura (5.8) podemos notar que los valores permitidos de las componentes de las velocidades corresponden a los mismos valores que los

5.2. DISTRIBUCIONES DE PROBABILIDAD DE LA POSICIÓN Y LA VELOCIDAD 61

del módulo de la velocidad (figura (5.6)). Podemos también notar que la distribución es simétrica respecto al cero.

Haciendo simulaciones para sistemas de seis y nueve discos para verificar la tendencia de la distribución de probabilidad de la componente de la velocidad en el ensamble de dinámica molecular a una distribución maxweliana se obtuvo

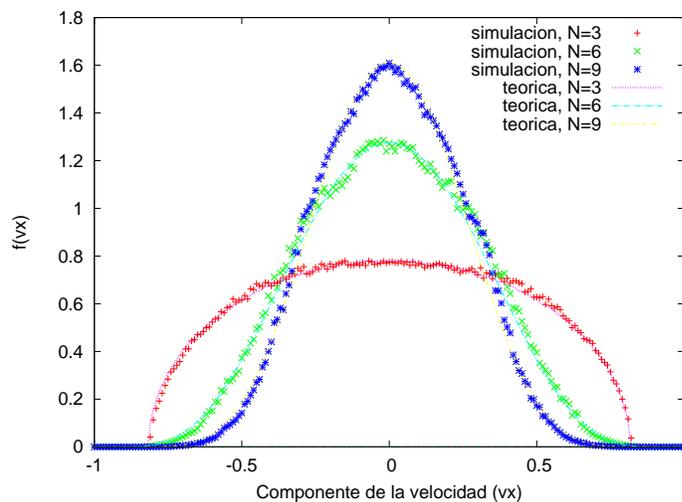


Figura 5.9: Histograma de la componente de la velocidad para un sistema de 3 discos de radio 0.1, 6 discos de radio 0.05 y 9 discos de radio 0.033 en una caja unitaria con condiciones de frontera periódicas, 100000 simulaciones cada una de 15000 colisiones, $E=1$.

Podemos notar en la figura (5.9) que la forma de las distribuciones al tomar el límite termodinámico se asemeja cada vez más a una maxweliana. Sin embargo, a diferencia de las maxwelianas, es decir del caso del ensamble canónico, en el ensamble microcanónico y por tanto en el de dinámica molecular los valores posibles de la velocidad están acotados, en éste caso por $\sqrt{\frac{2(N-1)E}{Nm}}$.

Ensamble microcanónico

Al cerrar las fronteras del sistema y pasar entonces al ensamble microcanónico, la distribución del módulo de la velocidad, de acuerdo con el artículo [19] obedece la ecuación:

$$f(v) = \frac{(N-1)mv}{E} \left[1 - \frac{mv^2}{2E}\right]^{N-2} \Theta\left[1 - \frac{mv^2}{2E}\right]. \quad (5.7)$$

Esta distribución también se puede deducir de la ecuación (5.4) al tomar $N \rightarrow \infty$ y $\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{x}{a}\right)^n = e^{-nx/a}$.

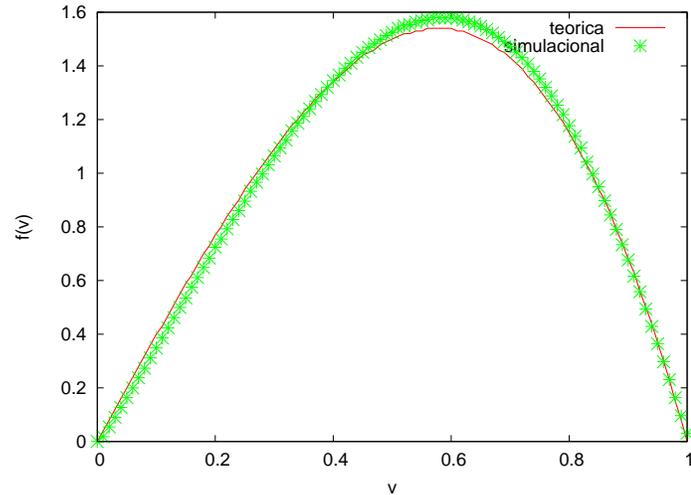


Figura 5.10: Histograma del módulo de la velocidad de un disco de radio 0.1 en una caja unitaria con frontera cerrada, 100000 simulaciones cada una de 15000 colisiones, $E=1$. La distribución teórica corresponde a la ecuación (5.7).

Es interesante ver que al cerrar las fronteras, la distribución del módulo de la velocidad para tres discos cambia completamente de comportamiento. A diferencia del caso con fronteras abiertas, en éste caso los valores permitidos del módulo de la velocidad según la gráfica (5.10) van de cero hasta uno. Esto

5.2. DISTRIBUCIONES DE PROBABILIDAD DE LA POSICIÓN Y LA VELOCIDAD 63

se debe a que nuevamente las velocidades permitidas están determinadas por la energía del sistema, pero en éste caso el valor máximo que puede tomar el módulo de la velocidad es $v^2 = |\mathbf{v}| = 2E/m$ y dado que $m = 2$ para todos los discos, entonces para una energía $E = 1$ el valor máximo permitido del módulo de la velocidad es 1.

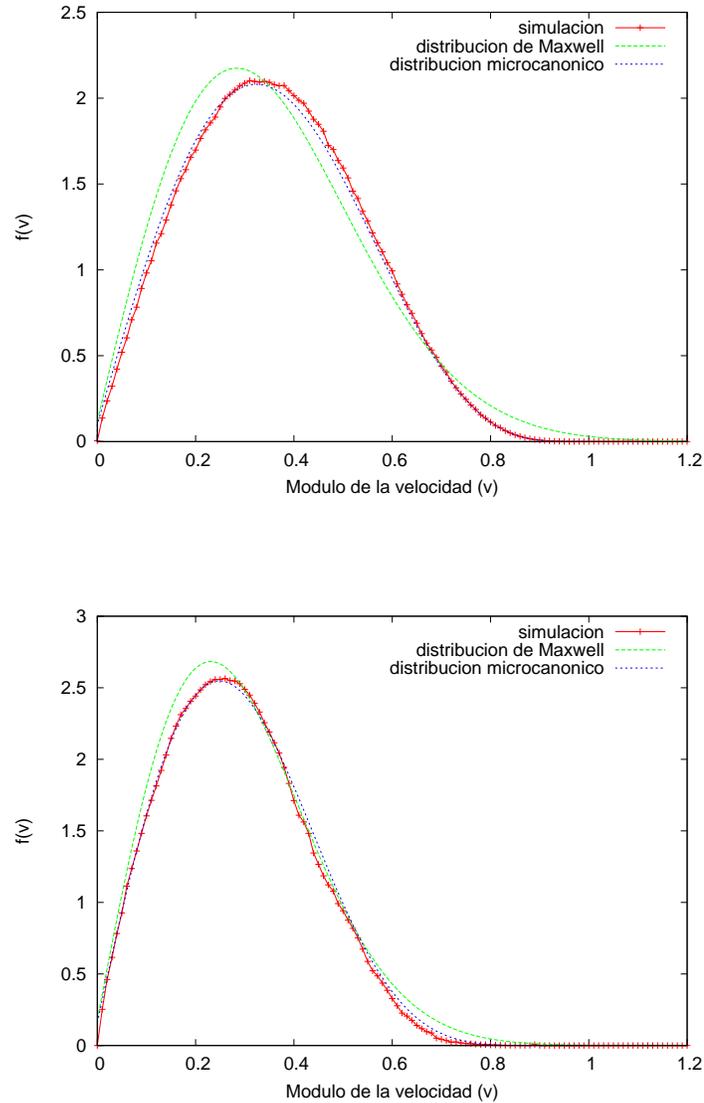


Figura 5.11: Histograma de componente de la velocidad de un disco en sistema de 3 discos de radio 0.1, de 6 discos de radio 0.05 y de 9 discos de radio 0.0333 en una caja unitaria con condiciones de frontera cerradas, 100000 simulaciones cada una con 15000 colisiones, $E=1$. La distribución de Maxwell corresponde a la ecuación (5.4) y la distribución microcanónica a la ecuación (5.7).

5.2. DISTRIBUCIONES DE PROBABILIDAD DE LA POSICIÓN Y LA VELOCIDAD 65

De acuerdo con la gráfica (5.11), la distribución del módulo de la velocidad de un sistema con fronteras cerradas se asemeja más a una maxweliana cuando $N \rightarrow \infty$.

Al comparar la distribución de las componentes de la velocidad con la distribución marginal de la distribución propuesta en el artículo [14] para la velocidad:

$$f(\mathbf{v}) = \frac{N-1}{2\pi mE} \left[1 - \frac{m\mathbf{v}^2}{2E}\right]^{N-2} \Theta\left[1 - \frac{m\mathbf{v}^2}{2E}\right], \quad (5.8)$$

se obtuvo lo siguiente:

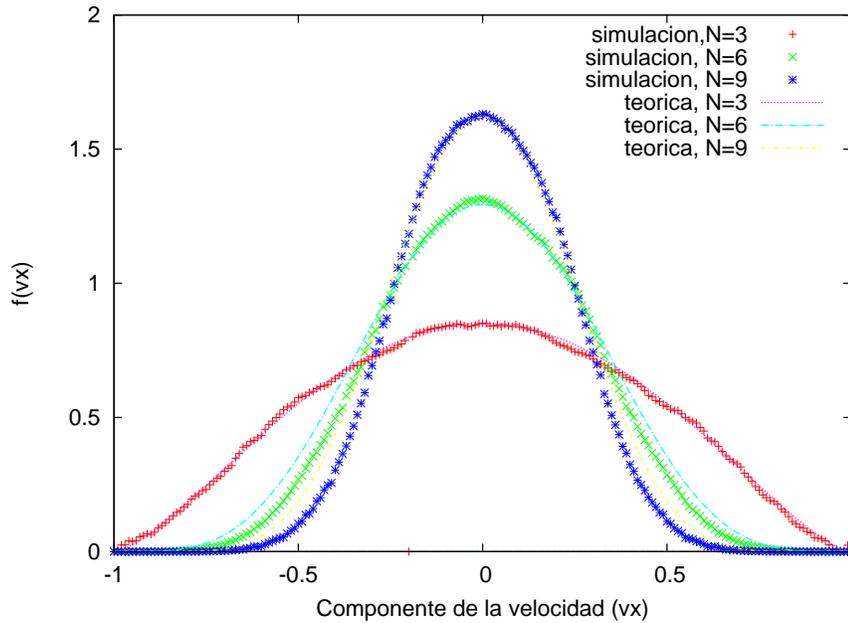


Figura 5.12: Histogramas de la componente de la velocidad de un disco en un sistema de 3 discos de radio 0.1, 6 discos de radio 0.05 y 9 discos de radio 0.0333 en una caja unitaria con condiciones de frontera cerradas, $E=1$.

Si bien, en general en todas las gráficas anteriores podría haber un mejor ajuste de los datos obtenidos mediante la simulación numérica y las curvas

teóricas, la discrepancia puede deberse a la necesidad de promediar sobre un mayor número de simulaciones o bien puede ser consecuencia del intervalo del histograma.

5.3. Desplazamiento cuadrático medio

El desplazamiento cuadrático medio (DCM) es una cantidad importante ya que contiene información sobre las propiedades difusivas del sistema. Si el sistema es sólido entonces el DCM se satura a un valor constante, mientras que si el sistema es un fluido el DCM crece con el tiempo.

El DCM depende de la velocidad de los discos y de la cantidad de colisiones entre los discos. La cantidad de colisiones entre los discos o partículas del sistema depende a su vez del tiempo medio transcurrido entre colisiones, τ , y de la distancia media recorrida entre colisiones, llamada trayectoria libre media l . Para el caso de un sistema difusivo se espera que $\langle \mathbf{x}^2 \rangle \sim t$

Para analizar la relación entre la energía del sistema y el DCM, se dejaron fijos el volumen del recipiente o caja y los radios de los discos.

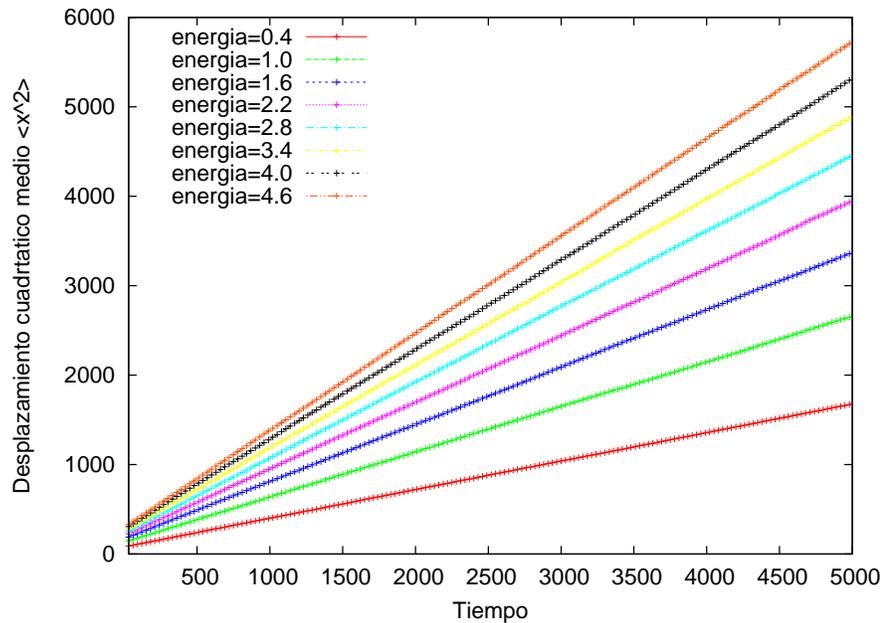


Figura 5.13: Desplazamiento cuadrático medio de un disco de radio 0.1 en una caja unitaria con condiciones periódicas para diferentes energías, promediado sobre 100000 simulaciones cada una con 15000 colisiones.

La siguiente relación que se analizó fue la dependencia del DCM con el radio de los discos. Para ello se dejó fijo el volumen de la caja y la energía del sistema.

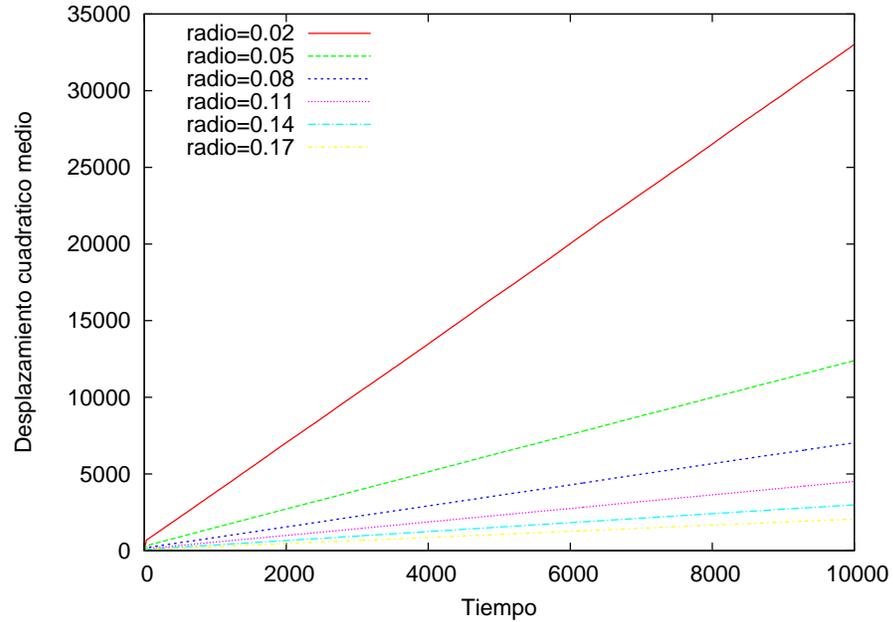


Figura 5.14: Desplazamiento cuadrático medio de un disco con diferentes radios en una caja unitaria con condiciones periódicas, $E=1$, promediado sobre 100000 simulaciones cada una de 15000 colisiones

Debido a que en ambos casos el DCM crece linealmente con el tiempo podemos concluir que el sistema que se está estudiando simula un fluido y por lo tanto lo podemos caracterizar utilizando el coeficiente de difusión definido según la ecuación (2.35).

5.4. Coeficiente de difusión

Teniendo $\langle r^2 \rangle$ como función de t , podemos sacar el coeficiente de difusión D según la ecuación (2.35) como $D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \langle r^2 \rangle$.

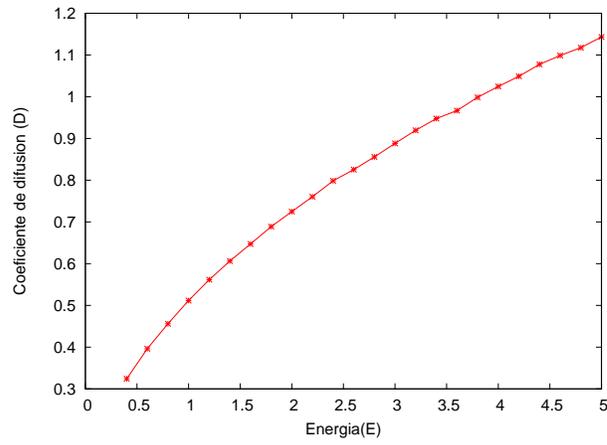


Figura 5.15: Relación entre el coeficiente de difusión y la energía de una sistema de 3 discos de radio 0.1 en una caja unitaria con condiciones periódicas

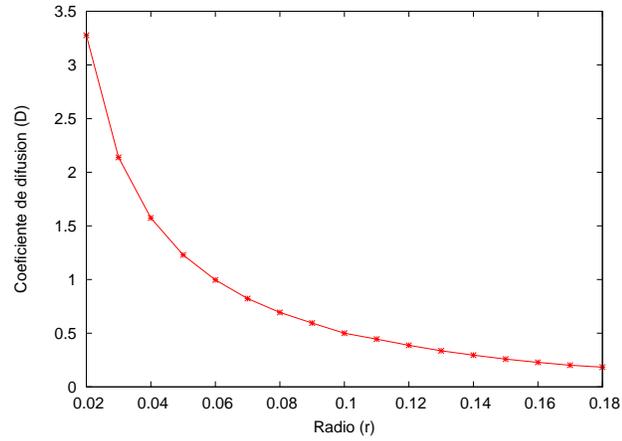


Figura 5.16: Relación entre el coeficiente de difusión y el radio de los discos de una sistema de 3 discos en una caja unitaria con condiciones periódicas. Energía del sistema $E=1$

El coeficiente de difusión aumenta al aumentar la energía y disminuye al aumentar el tamaño de los radios de los discos.

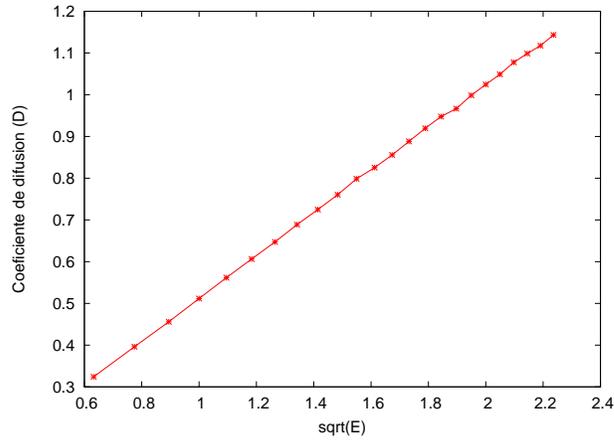


Figura 5.17: Relación entre el coeficiente de difusión y \sqrt{E} .

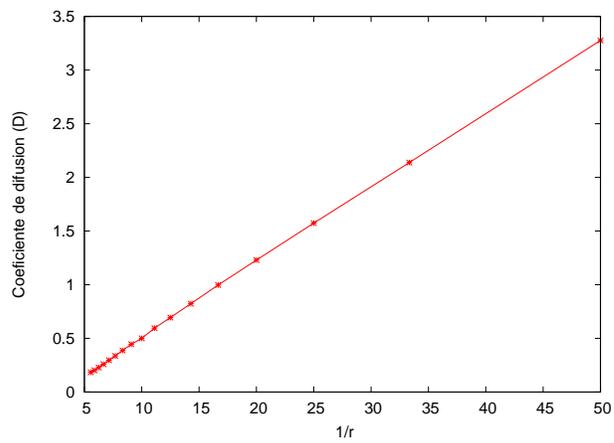


Figura 5.18: Relación entre el coeficiente de difusión y $1/r$.

De acuerdo con las figuras (5.17) y (5.18) podemos concluir que el coeficiente de difusión crece proporcional a \sqrt{E} y decrece aproximadamente

como $1/r$.

Esto se puede explicar recordando la relación $D = \frac{\delta^2}{2\tau}$. Dado que en éste caso δ corresponde a la trayectoria libre media entre colisiones l y además la trayectoria libre media y el tiempo medio de colisión están relacionados por $\bar{v} = l/\tau$, donde \bar{v} es la velocidad media de los discos, resulta que:

$$D = l\bar{v}. \quad (5.9)$$

Como, de acuerdo con la ecuación (5.9), el coeficiente de difusión es proporcional a la velocidad media y $v \sim \sqrt{E}$, el coeficiente de difusión debe de ser proporcional a la raíz cuadrada de la energía, como se encontró numericamente.

Para analizar la relación del coeficiente de difusión con el radio es necesario obtener una expresión de la trayectoria libre media en términos del radio o radios de las discos involucrados en las colisiones.

Una colisión entre dos discos i, j sucede si $|x_i - x_j| \leq r_i + r_j$, lo cual es análogo a que un disco puntual k se encuentra en el área barrida por un disco m de radio $r_i + r_j$ que se mueve con una velocidad igual a la velocidad relativa entre los discos i y j , figura (5.19).

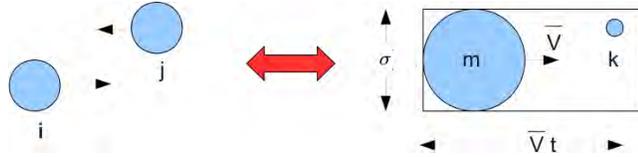


Figura 5.19: Sección eficaz en dos dimensiones.

A dicha área se le conoce como *sección eficaz total* (σ) y caracteriza las colisiones entre los discos. Para un sistema en dos dimensiones $\sigma = (r_i + r_j)$.

Es decir en un tiempo t habrá una colisión, $t = \tau$, si $\sigma(\bar{V}\tau)n = 1$ donde n es el número de partículas por unidad de volumen, es decir el número de partículas puntuales en el área barrida. Por lo tanto, $\tau = \frac{1}{n\sigma\bar{V}}$.

Es decir, el tiempo libre medio de un disco será pequeño si el número de discos por unidad de volumen es grande, si el diámetro molecular (σ) es grande o si la velocidad media relativa de la moléculas es grande.

El tiempo libre medio y la trayectoria libre media están relacionados por $l = \tau\bar{v}$, por lo tanto sustituyendo la expresión para τ obtenemos que

$l = \frac{\bar{v}}{\bar{V}n\tau}$ donde \bar{v} es simplemente la velocidad media del disco i o j .

Dado que ambos discos chocan, la velocidad relativa media \bar{V} es ligeramente diferente a \bar{v} , la velocidad media de un disco individual, por lo tanto $\frac{\bar{v}}{\bar{V}}$ es ligeramente diferente a la unidad. De hecho se puede demostrar que $\bar{V} \approx \sqrt{2}\bar{v}$ [15], de manera que

$$l \approx \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma}. \quad (5.10)$$

Introduciendo la ecuación (5.10) en la ecuación (5.9) obtenemos finalmente que:

$$D = \frac{\bar{v}}{\sqrt{2}n\sigma}. \quad (5.11)$$

Como $\sigma \sim r$, esto implica que el coeficiente de difusión varía inversamente proporcional con el radio de las partículas o discos duros, $D \sim \frac{1}{r}$, que es justamente la relación obtenida de acuerdo con la figura (5.4) mediante la simulación numérica.

5.5. Exponentes de Lyapunov

Utilizando el algoritmo propuesto en el capítulo anterior se pudo encontrar el espectro completo de los exponentes de Lyapunov para un sistema de tres discos en una caja unitaria con condiciones de frontera periódicas.

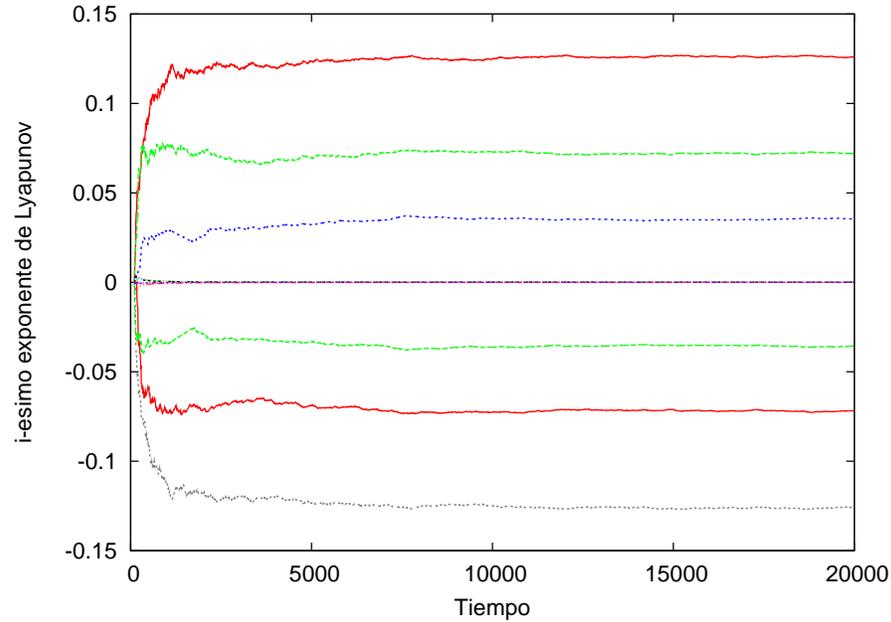


Figura 5.20: Exponentes de Lyapunov de un sistema de tres discos de radio 0.1 con tiempo finito en una caja unitaria con condiciones periódicas, con $E=1$ como función del tiempo.

Lo primero que podemos notar en la figura (5.20) es que el sistema posee exponentes de Lyapunov positivos. La existencia de estos exponentes implica que existen direcciones en el espacio fase en las cuales hay divergencia exponencial de trayectorias inicialmente cercanas. Al haber divergencia exponencial el sistema es caótico, ya que cumple con tener sensibilidad a las condiciones iniciales. La caoticidad del sistema proviene de la superficie convexa de los discos y por tanto los obstáculos cilíndricos en el espacio fase.

Lo siguiente que se puede notar en la gráfica es que el espectro de Lyapunov es simétrico. Esta propiedad de simetría o apareamiento de los exponentes de Lyapunov, $\lambda_l = -\lambda_{4N+1-l}$, es una característica propia de sistemas hamiltonianos y está asociada a la reversibilidad temporal de las

ecuaciones hamiltonianas [11]. Cada vez que se tiene un exponente de Lyapunov positivo, debe existir un exponente de Lyapunov negativo que corresponde a evolucionar el sistema hacia atrás, $t \rightarrow -\infty$. Es decir, para cada vector de Lyapunov que crece exponencialmente en el tiempo existe uno que decrece exponencialmente.

Dado que seis de los doce exponentes de Lyapunov del sistema convergen a cero, podemos concluir que el sistema no sólo posee reversibilidad temporal, sino que debe poseer otras simetrías.

De acuerdo con el teorema de Nöther [17, 28], por cada cantidad conservada, el sistema posee una simetría. Por ejemplo, la conservación de la energía tiene como consecuencia la simetría temporal; la conservación del momento lineal tiene como consecuencia la simetría espacial; la conservación del momento angular tiene como consecuencia la isotropía del espacio, etc.

En general, dos de los exponentes de Lyapunov nulos están asociados con la simetría temporal. Uno de ellos corresponde a una perturbación a lo largo de la evolución del flujo, que sería lo equivalente a hacer un corrimiento temporal en la trayectoria, $t + c$, y el otro está asociado a una perturbación en la dirección de crecimiento de la energía.

De manera que en el sistema de tres discos en una caja periódica, podemos concluir que los restantes cuatro exponentes de Lyapunov corresponden a otras simetrías.

Al ponerle fronteras fijas al sistema y romper la conservación del momento, se puede observar que dos de los exponentes dejan de ser nulos.

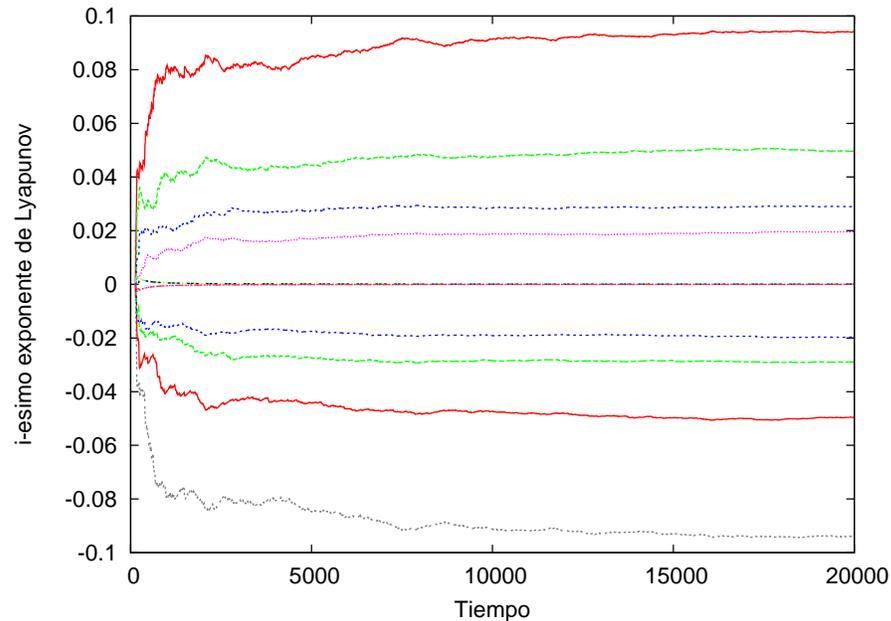


Figura 5.21: Espectro de los exponentes de Lyapunov de un sistema de tres discos de radio 0.1 en una caja unitaria cerrada.

De acuerdo con la figura (5.21) podemos concluir que dos de los exponentes de Lyapunov nulos son consecuencia de la simetría espacial del sistema.

El hecho de que sólo dos exponentes dejen de ser nulos y no cuatro, sugiere que los restantes exponentes de Lyapunov nulos están asociados con algo más.

Dado que el espectro de Lyapunov geoméricamente describe la contracción y elongación en direcciones linealmente independientes en el espacio fase de una hiperesferita que se mueve con el flujo y la suma de los exponentes de Lyapunov es cero, por el teorema de Liouville sabemos que el volumen de dicha esfera se debe conservar.

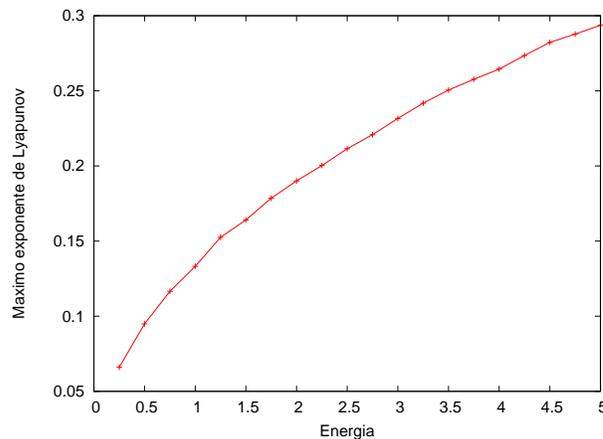
Debido a que en sistemas hamiltonianos puede haber regiones estables y regiones caóticas y por tanto esperaríamos que los exponentes de Lyapunov dependieran de las condiciones iniciales y esto no sucede podemos concluir que

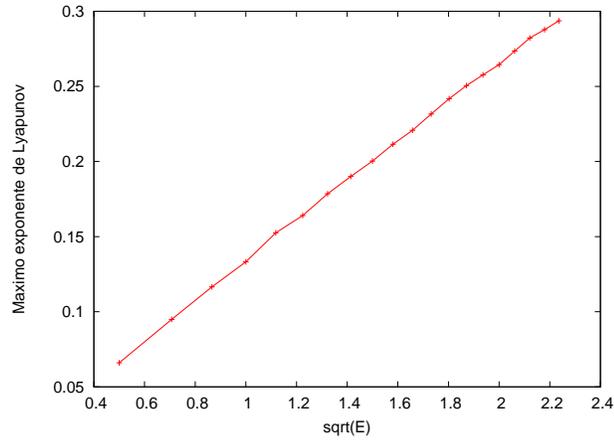
el sistema es ergódico, como fue probado por Smanyi y Sasz para 3 discos .

Existen trayectorias donde los exponentes de Lyapunov debieran ser todos cero, las que en el espacio fase no colisionan con los hipercilindros, sin embargo dichas trayectorias son un conjunto de medida cero.

5.5.1. Exponentes de Lyapunov y variación de parámetros

Para determinar si existe alguna relación entre los exponentes de Lyapunov y el coeficiente de difusión se determinó la relación entre los exponentes de Lyapunov y el radio, y entre los exponentes de Lyapunov y la energía del sistema, con la finalidad de ver si la variación de los exponentes de Lyapunov era semejante a la variación encontrada para el coeficiente de difusión.





Los exponentes de Lyapunov máximos crecen proporcionalmente a la raíz cuadrada de la energía del sistema.

La relación proporcional a la raíz cuadrada de la energía se puede entender recordando que de acuerdo con la definición de exponentes de Lyapunov (2.10), $\lambda \sim \frac{1}{t}$, de manera que deben de ser proporcionales a la velocidad $\lambda \sim v$ y por lo tanto deben ser proporcionales a la raíz cuadrada de la energía.

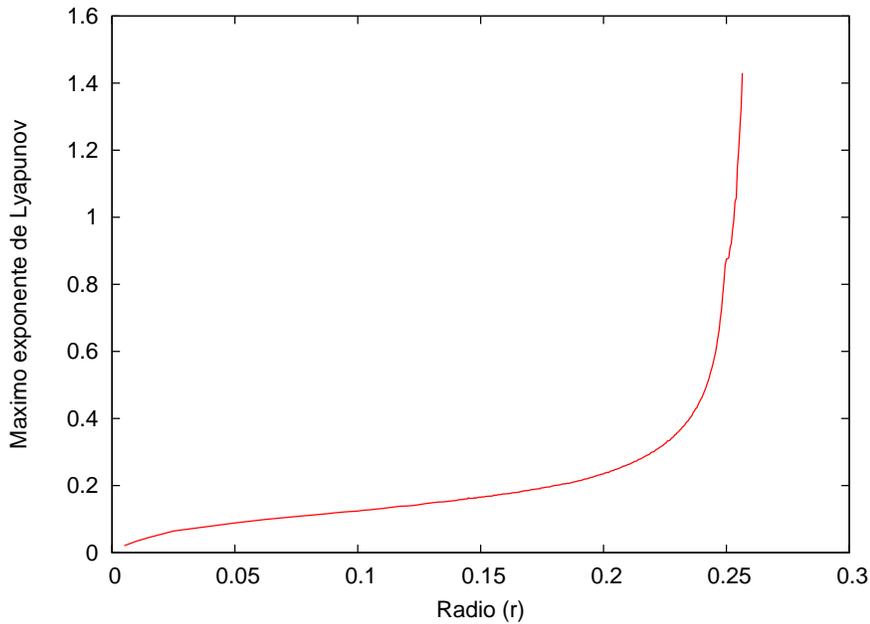


Figura 5.22: Relación entre el exponente de Lyapunov máximo y el radio de los discos que componen el sistema.

A pesar de que uno podría pensar que a menor curvatura de los discos, es decir menor radio, mayor es la divergencia de las trayectorias y por lo tanto mayor deberían de ser los exponentes de Lyapunov, de acuerdo con la figura (5.22) el exponente de Lyapunov máximo aumenta con el radio.

Esto puede deberse a que al incrementar los radios de los discos y dejar el volumen de la caja fijo, el número de colisiones aumenta, lo cual también ocasiona mayor divergencia de trayectorias en el espacio fase. El comportamiento que se encontró se debe a un balance entre la caoticidad producida por la curvatura de los discos y la caoticidad producida por el número de discos.

Si analizamos la variación del espectro completo respecto al radio y la energía obtenemos lo siguiente:

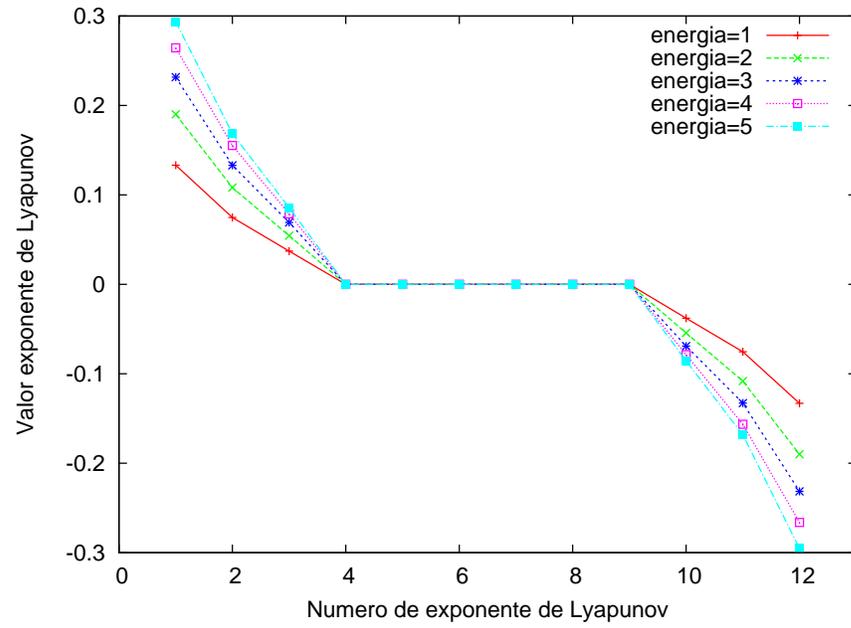


Figura 5.23: Variación del espectro de Lyapunov al modificar la energía.

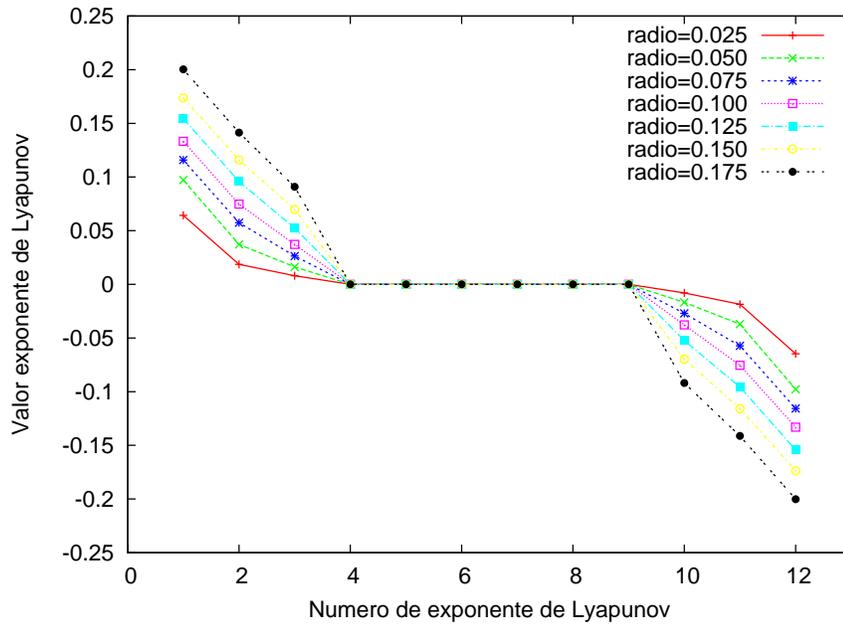


Figura 5.24: Variación del espectro de Lyapunov al modificar los radios de los discos.

En la figura (5.23) podemos notar que la distancia entre los exponentes de Lyapunov no crece al aumentar la energía. Es monótona creciente. En la figura (5.24) podemos notar que la variación de el espectro de Lyapunov con el radio cambia cualitativamente. En ambos caso podemos observar claramente como el espectro de Lyapunov para diferentes radios y energías es simétrico.

Como se mencionó en la sección 5.1, al variar el tamaño de los discos y dejar fijo el volumen de la caja habrá un radio para el cual la dinámica cambie cualitativamente. Se ha encontrado [7] que cuando esto sucede los exponentes de Lyapunov tienen un brinco. Para el caso del sistema de tres discos en una caja periódica unitaria, como se puede observar en la figura (5.25), se encontró un brinco en $r = 0,249$.

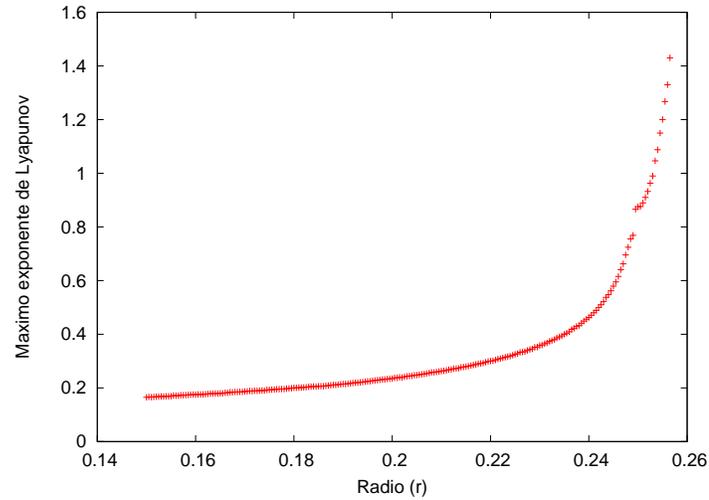


Figura 5.25: Brinco en el valor del exponente de Lyapunov máximo debido al cambio cualitativo de la dinámica en el sistema como consecuencia de un fenómeno de atascamiento de los discos en la caja.

Sin embargo, cómo se puede observar en la figura (5.26), no pareciera realmente haber un atascamiento para este radio, al menos no cómo el que se da para el caso de dos discos duros (figura (5.27)).

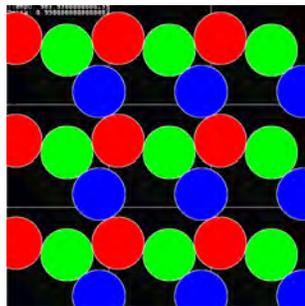


Figura 5.26: Imágen de la red de cajas unitarias para discos con radio 0.249

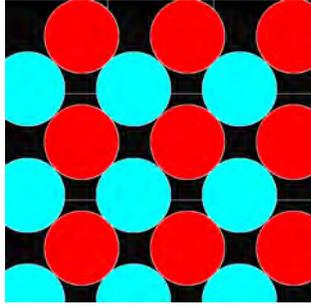


Figura 5.27: Imágen de la red de cajas unitarias para dos discos con radio

En la figura (5.26) parece que todavía hay cierta movilidad de los discos a los espacios vacíos. No se pudo ver qué pasaba para radios mayores por limitaciones del programa.

Capítulo 6

Conclusiones

Se estudió un sistema de tres discos duros en una caja con condiciones periódicas y no periódicas. Se encontró que la distribución de probabilidad de la posición y de la velocidad obedecen las distribuciones esperadas para el ensamble de dinámica molecular y el ensamble microcanónico respectivamente. Al ser las distribuciones de la velocidad distribuciones de Schlüter, las cuales tienden a maxwelianas en el límite termodinámico, podemos decir que el sistema inicialmente fuera de equilibrio tiende al equilibrio como consecuencia de las colisiones entre los discos.

Se encontró que el sistema de tres discos duros en una caja con condiciones de frontera periódicas es un sistema ergódico, caótico y difusivo.

Es ergódico, ya que los exponentes de Lyapunov no dependen de la condición inicial, lo cual implica que cualquier condición inicial es un determinada iteración de todas las demás, es decir cualquier trayectoria eventualmente visita todo el espacio fase. Es caótico, ya que existe al menos un exponente de Lyapunov positivo, y por lo tanto existe una dirección en el espacio fase en la cual dos trayectorias inicialmente cercanas divergen exponencialmente con el tiempo, es decir el sistema tiene sensibilidad a las condiciones iniciales. Y es difusivo, ya que el desplazamiento cuadrático medio varía proporcionalmente respecto al tiempo.

Los exponentes de Lyapunov del sistema, y por lo tanto el grado de caoticidad del mismo, aumentan al aumentar la energía de sistema y al aumentar los radios del sistema. Por el comportamiento del espectro completo de exponentes de Lyapunov, se pudo también concluir que el sistema posee simetría temporal y traslacional.

El proceso de difusión depende de varias cantidades: la energía, las

dimensiones de la partículas y el número de partículas. Al aumentar la energía del sistema, la difusividad del mismo aumenta ya que al tener mayor velocidad las partículas se desplazan más rápido y por lo tanto el desplazamiento cuadrático medio en el tiempo aumenta. la relación que se encontró es que el coeficiente de difusión varía proporcionalmente a la raíz cuadrada de la energía. Al ir aumentando el tamaño de los discos la difusividad del sistema disminuye debido a que el desplazamiento cuadrático medio de los discos se hace casi nulo a medida que los discos van quedando atrapados por ellos mismos, hasta quedar prácticamente inmovilizados. El coeficiente de difusión varía inversamente proporcional al radio. Al dejar fijo el radio de los discos y el volumen que los contiene, el efecto de ir aumentando el número de discos es semejante al de aumentar el radio, ya que mientras más discos haya, más atrapados están y por lo tanto el desplazamiento cuadrático medio disminuye.

Si bien no se determinó explícitamente una relación entre los exponentes de Lyapunov y el coeficiente de difusión, se cree que existe una relación estrecha entre ambas cantidades debido a que ambas se comportan de manera semejante ante la variación de ciertos parámetros.

Se encontró un cambio cualitativo en el comportamiento del sistema para el radio $r = 0,249$.

6.0.2. Trabajo futuro

Si bien el sistema de estudio de esta tesis comenzó a caracterizarse, todavía hay varias propiedades que sería interesante e importante estudiar para una caracterización más completa.

Relacionado con el transporte del sistema, sería interesante estudiar el comportamiento de la viscosidad y la conductividad térmica al variar parámetros como el tamaño de los discos o la energía del sistema. Ambas cantidades podrían obtenerse utilizando las relaciones de Green–Kubo para los coeficientes de transporte y/o a partir de leyes de conservación.

Sería igualmente interesante observar el comportamiento del sistema, sobre todo las distribuciones de probabilidad de la velocidad, en el ensamble canónico para tener un mejor análisis comparativo entre los diferentes ensembles.

Dado que ya sabemos que el sistema es ergódico, sería bueno determinar si es mezclante, propiedad más fuerte que la ergodicidad.

Por ultimo sería interesante estudiar las diferencias y semejanzas de éste

sistema con sistemas de iguales pero de mayor dimensión, o de la misma dimensión pero con diferente número de discos. Es decir, por ejemplo un sistema constituido por una caja 3-dimensional con condiciones de frontera periódicas con tres esferas duras o bien sistemas dos dimensionales con cuatro, cinco y seis discos duros.

En términos del programa, para trabajos futuros sería de suma importancia intentar optimizar el código para poder agilizar la obtención de cálculos numéricos.

Bibliografía

- [1] Alder and Wainwright, *Phase transitions in elastic disks*, Phys.Rev. **127** (1962), 359–361.
- [2] Ludwig Arnold, *Random Dynamical Systems*, Springer, 2003.
- [3] Howard C. Berg, *Random Walks in Biology*, Princeton University Press, USA, 1983.
- [4] Felix Bloch, *Fundamentals of Statistical Mechanics: Manuscript and Notes of Felix Bloch*, 3 ed., Imperial College Press, 1989.
- [5] Eleonora Castigeras, *Teoría ergódica*, Apuntes para el curso de maestría en matemáticas.
- [6] David Chandler, *Introduction to Modern Statistical Mechanics*, Oxford University Press, 1997.
- [7] C.H.Dellago and H.A.Posch, *Lyapunov instability in a system of hard disks in equilibrium and nonequilibrium steady state*, Phys.Rev.E **53** (1996), 1485–1501.
- [8] Nikolai Chernov and Roberto Markarian, *Introducción al estudio de billares caóticos*, XVIII Escuela Venezolana de Matemáticas, 2007.
- [9] David Cowan, *A Billiard Model for Gas of Particles with Rotation*, Ph.D. thesis, Tufts University, 2004.
- [10] Astrid S. de Wijn, *Lyapunov spectra of billiards with cylindrical scatterers: Comparison with many-particle systems*, Phys.Rev.E **72** (2005).

- [11] C. P. Dettmann and G. P. Morriss, *Proof of lyapunov exponent pairing for systems at constant kinetic energy*, Phys.Rev.E **53** (1996).
- [12] Robert. L. Devaney, *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems*, 2ed ed., Addison-Wesley, USA, 1989.
- [13] Denis J. Evans and Gary P. Morriss, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids*, Academic Press, London, 1990.
- [14] S. Velasco F. L. Roman, J. A. White, *Single particle distributions for small hard particle systems in the microcanonical and molecular dynamics ensembles*, Phys.Rev.E **51** (1995), 6271–74.
- [15] F.Reif, *Física Estadística*, Editorial Reverté, España.
- [16] P. Gaspard and F.L. Baras., *Chaotic scattering and diffusion in the lorentz gas*, Phys.Rev.E **51** (1995), 5332–5352.
- [17] Josef Hanc, Slavomir Tuleja, and Martina Hancova, *Symmetries and conservation laws: Consequences of Noether's theorem*.
- [18] Kerson Huang, *Introduction to Statistical Physics*, Taylor and Francis, 2002.
- [19] H.W. Graben John R. Ray, *Small systems have non-maxwellian momentum distribution in the microcanonical ensemble*, Phys.Rev.A **44** (1991), 6905–6908.
- [20] James A. Yorke Kathleen T. Alligood, Tim Sauer, *Chaos: An Introduction to Dynamical Systems*, Springer-Verlag, New York, 1996.
- [21] Anatole Katok and Boris Hasselblatt, *Introduction to the Modern Theory of Dynamical Systems*, Cambridge University Press, 1999.
- [22] Rainer Klages, *Applied Dynamical Systems*, School of Mathematical Science, Queen Mary University of London, 2008.
- [23] Werner Krauth, *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations*, Oxford Press, 2006.
- [24] A. Krámli, N.Simanyi, and D.Szász, *The K-property of three billiard balls*, Ann.Math. **133** (1991).

- [25] A. Krámli, N. Simanyi, and D.Szász, *The K-property of four billiard balls*, Commun.Math.Phys. **144** (1992), 107–148.
- [26] Hector Mendéz Lango, *Introducción a sistemas dinámicos discretos*, Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias UNAM, Notas.
- [27] Roberto Markarian, *Billares. modelos con dinámicas caóticas*, www.emis.de/journals/BAMV/conten/vol9/markarian.pdf.
- [28] David Martin, *Simetría y sistemas dinámicos*, divulgamat.ehu.es/weborriak/.../99-00/PG99-00-martin.pdf.
- [29] Robert L. Devaney Morris W. Hirsch, Stephen Smale, *Diferencial equations, dyanamical systems and introduction to chaos*, Elsevier Academic Press, 2004.
- [30] N.Simanyi, *Conditional proof of the boltzmann-sinai ergodic hypothesis*, Inventiones Mathematicae **177** (2009), 381–413.
- [31] Gaspard P. and Nicolis G., Phys. Rev. Lett. **65** (1990).
- [32] J.C. Martinez P.M.E. Schluter, S.V Springham, *The schluter distribution: theory and simulation*, Physica Scripta (2007), 466–469.
- [33] Harald A. Posch and Ch.Forster, *Lyapunov inestability and collective tangent space dynamics of fluids*, Institut für Experimentalphysik, Universität Wien.
- [34] Klages Rainer, *Introduction to Dynamical Systems*, School of Mathematical Science, Queen Mary University of London, <http://www.maths.qmw.ac.uk/klages/teaching/index.html>, 2009.
- [35] Denny C. Rappaport, *The event driven algorithm*, Progress of Theoretical Physics Supplement (2009), no. 178, 5–14.
- [36] L.E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, Wiley Interscience publication, Canada, 1998.
- [37] Masoud Sabbagan and Payam Nasertayoob, *Ergodic Theory and Dynamical Systems from a Physical point of view*, The Arabian Journal for Science and Engineering **33** (2008), 373–387.

- [38] David P. Sanders, *Deterministic diffusion in periodic billiard models*, Ph.D. thesis, University of Warwick.
- [39] Ya. G. Sinai, *On the Foundation of the Ergodic Hypothesis for a Dynamical System of Statistical Mechanics*, Dokl. Akad. Nauk SSSR **153** (1963).
- [40] Hee Moon Soong-Hyuck Suh, Jae-Wook Lee and James M. D. MacElroy, *Molecular dynamics studies of two hard-disk particles in a rectangular box: Thermodynamic properties and position autocorrelation functions*, Korean Journal of Chemical Engineering **21** (2004), 504–510.
- [41] D. Szász, *Boltzmann's Ergodic Hypothesis, a Conjecture for Centuries?*, Studia Sci.Math.Hung. **31** (1996), 299–322.
- [42] Horst Stöcker Walter Greiner, Ludwig Neise, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*, Springer, New York, 1995.
- [43] Sinai Ya. G, *Dynamical systems with elastic reflections. ergodic properties of dispersing billiards*, Russ.Math.Surv **25** (1970), 141–192.
- [44] Ya.G.Sinai and N.I.Chernov, *Ergodic properties of some systems of 2-dimensional disks and 3-dimensional spheres*.