



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Influencia en la difusión de campos vectoriales
longitudinales y transversales, estocásticos

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
FÍSICO

PRESENTA:
FRANCISCO JAVIER REYES MORA

DIRECTOR DE TESIS:
DR GERARDO CARMONA RUIZ



2014



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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.

Sinodales

1. Datos del alumno

Reyes Mora Francisco Javier

Universidad Nacional Autónoma de México

México

Facultad de Ciencias

Física

302036886

2. Datos del tutor

Dr. Gerardo Carmona Ruiz

3. Datos del sinodal 1

Dr. Marcos Ley Koo

4. Datos del sinodal 2

Dr. Luis Felipe del Castillo Dávila

5. Datos del sinodal 3

Dra. Patricia Goldstein Menache

6. Datos del sinodal 4

Dr. Miguel Ángel Solís Atala

7. Datos del trabajo escrito

Influencia en la difusión de campos vectoriales longitudinales y transversales, estocásticos

p. 82

2014

In memoriam

A mi padre quien me enseñó a ser el mejor hombre en el que podría convertirme.

Agradecimientos

A la UNAM, la universidad en la que me forjé como un libre pensador y un defensor de la verdad. A mi madre, quien me ha enseñado el valor de un milagro. A mi familia por apoyarme aún en las épocas más sombrías. A mis amigos, hermanas y hermanos, sin los cuáles no habría encontrado la fuerza y quienes me enseñaron a ser tenaz. A mis profesores quienes me dieron la oportunidad de retarme a mi mismo y quienes ampliaron mi visión del mundo y el universo.

Resumen

En este trabajo se aborda el tema de la difusión de un fluido a través de un medio amorfo, un tópico de interés en la ciencia y la industria. Un medio amorfo es un sólido con una distribución aleatoria de cavidades interconectadas de diferentes formas y tamaños, que presenta oposición al flujo de masa a través de sí en ciertas regiones y en otras no. Existen numerosas formas de describir a un medio amorfo, aquí se describirá a través de un campo vectorial estocástico. Al estudiar la difusión de un fluido en presencia de este campo se presentan divergencias logarítmicas que no concuerdan con las observaciones fenomenológicas. Es a través del uso de la técnica conocida como Grupo de Renormalización Dinámica como se elude estas anomalías y se pueden hacer predicciones sobre el fluido difundiéndose a través del medio amorfo.

En el Capítulo 1 se estudia la difusión en ausencia de medios, se modelarán y se resolverán las ecuaciones diferenciales que rigen el comportamiento difusivo. En el Capítulo 2 se estudiará la ecuación de Langevin, una ecuación diferencial que describe un sistema mecánico que depende de la interacción con un campo que introduce fluctuaciones estocásticas del medio por el que atraviesa una mesopartícula. Incluyo este capítulo en virtud de introducir ideas y técnicas que serán usadas en el Capítulo 3 para modelar un material amorfo por el que se difunde un fluido como un campo vectorial estocástico. En este mismo capítulo se presenta el problema que da paso al uso de la técnica del Grupo de Renormalización que abarcará el Capítulo 4. En el Capítulo 5 se resolverán un grupo de ecuaciones diferenciales que describen al sistema, consecuencia directa de la implementación del Grupo de Renormalización Dinámica. Su estudio aporta información valiosa sobre la evolución del sistema. Por último en el capítulo seis se presentan las conclusiones de esta tesis.

Por último se le advierte al lector que la mayoría de los cálculos y el desarrollo de éstos se les puede encontrar de manera explícita en la sección de apéndices.

Índice general

1. Difusión normal	12
1.1. Difusión	12
1.2. Movimiento Browniano	13
1.3. Ecuación de Difusión	14
1.3.1. Solución libre	15
1.4. Caminata aleatoria	19
2. Ecuación de Langevin	22
2.1. Ecuación diferencial de Langevin	22
2.2. El mar de fluctuaciones estocásticas	24
2.3. Correlaciones en la ecuación de Langevin	25
3. Difusión anómala	27
3.1. El medio amorfo	28
3.1.1. Operadores de proyección	30
3.1.2. Componente longitudinal	31
3.1.3. Componente transversal	32
3.2. Difusión en un medio amorfo	33
3.2.1. Análisis dimensional	37
4. Grupo de renormalización	41
4.1. Renormalización	43
4.1.1. Cáscara de momentos	43
4.1.2. Coeficiente de Difusión renormalizado	46
4.1.3. Teorema de fluctuación disipación	49
4.1.4. Coeficiente de correlación renormalizado	49
4.1.5. Vértice de interacción renormalizado	52
4.2. Reescalamiento	53
4.2.1. Coeficiente de difusión reescalado	54
4.2.2. Coeficiente de correlación de fuerzas reescalado	55
4.2.3. Vértice de interacción reescalado	55
5. Evolución de los parámetros	57
5.1. Superficie de parámetros	57
5.2. Verdadero parámetro de interacción $\Lambda(\ell)$	61
5.2.1. Estabilidad de los puntos fijos de $\Lambda(\ell)$	61
5.3. Función de reescalamiento de las frecuencias	62
5.4. Distribución de densidad de masa	63

5.5. Desplazamiento cuadrático medio	66
6. Conclusiones	68
7. Apéndices	71
7.1. Apéndice 1	71
7.1.1. Transformada de Fourier	71
7.1.2. Convolución	72
7.2. Apéndice 2	72
7.2.1. Ecuación de Dyson	72
7.3. Apéndice 3	74
7.3.1. Cálculo de coeficientes intermedios	74

Índice de figuras

1.1. Solución para la distribución de masa $\delta\rho(t/\tau)$ para una k arbitraria a diferentes tiempos.	16
1.2. Solución (truncada), para la distribución de masa $\delta\rho(x, t)$	18
1.3. Trayectoria de un caminante aleatorio en 3 dimensiones.	19
1.4. Segmentación del eje x en celdas de tamaño h	20
3.1. Caricatura de las aportaciones longitudinales y transversales de $\mathbf{F}(\mathbf{x})$	34
4.1. Espectro de momentos. En rojo; cáscara de momentos ($\{e^{-\ell}q_c < q < q_c\}$). En verde; momentos debajo de la cáscara.	44
4.2. Inclusión de los momentos de la cáscara en los momentos por debajo de ésta.	44
4.3. Diagrama de conservación de momento.	45
4.4. Promedio sobre dos fuerzas $\langle F_i(q_1)F_j(q_2) \rangle$	46
5.1. Representación de las transformaciones del Grupo de Renormalización Dinámico.	58
5.2. Solución para $\Lambda(\ell)$ para valores de $\epsilon > 0$ ($d = 1,5$), en fucsia, para valores de $\epsilon \simeq 0$ ($d = 2,0001$), azul y oro, y para valores de $\epsilon < 0$ ($d = 2,9$), verde.	62
5.3. Superficie generada para $\Lambda(\ell, d)$. El parámetro ℓ es el número de veces que se aplica el grupo, mientras que d es la dimensión.	63
5.4. Función $\alpha(\ell)$ a primeras contribuciones, para $d = 1,5$ (marrón), $d = 2$ (fucsia), $d = 3$ (azul).	64
5.5. Solución de $\langle x^2(t) \rangle$, para $\alpha(\ell) < 0$ (amarillo), $\alpha(\ell) = 0$ (azul), $\alpha(\ell) > 0$ (fucsia).	67
7.1. Diagrama de conservación de momento.	72

Introducción

Basta observar una tormenta, un poco de crema revolviéndose en café caliente, el humo de un cigarrillo, por mencionar algunos ejemplos, para darse cuenta de que existen numerosos fenómenos físicos cuyo comportamiento había escapado a ser desentrañado y modelado bajo los regímenes convencionales: la linealidad y el equilibrio. A pesar de que los fenómenos en equilibrio han aportado valiosa información para nuestro entendimiento de las leyes de la naturaleza, son una fracción muy pequeña de los fenómenos presentes en la naturaleza: fenómenos complejos, fuera de equilibrio, cercano o lejano y fenómenos críticos. Son más abundantes que los primeros, sin mencionar que son de gran interés. Estos fenómenos no han sido tan bien entendidos como sus homólogos en equilibrio, en el ámbito teórico el progreso en su comprensión se ralentiza debido a la ausencia de un marco sencillo. Simular las condiciones de dichos fenómenos plantea muchos obstáculos experimentales. Se han desarrollado numerosas técnicas teóricas para abordar estos problemas.

Los primeros intentos de formular una descripción matemática de los fenómenos críticos fueron teorías de una clase que se llaman ahora *teorías de campo medio*. La primera de ellas fue introducida en 1873 por J. D. van der Waals como una explicación de los cambios de fase en los fluidos. En 1937 L.D. Landau, de la Academia de Ciencias de la Unión Soviética, propuso una formulación más general de la teoría de campo medio[1] proporcionando así una base en la que podían discutirse muchos sistemas físicos. En todas estas teorías el estado de una partícula cualquiera viene determinado por las propiedades medias del material como un todo. De hecho todas las partículas del sistema contribuyen por igual a la correlación de fuerzas entre dos puntos. Lo que equivale a pensar que las correlaciones de fuerzas tienen alcance infinito. Las teorías de campo medio son satisfactorias cualitativamente. Dan cuenta de importantes características de los diagramas de fase de los fluidos, la más importante de las cuales es la existencia de un punto crítico. Sin embargo las predicciones cuantitativas son menos satisfactorias.

No es difícil dar con la razón del fallo cuantitativo de las teorías de campo medio. El alcance infinito que se asigna a las fuerzas no significa siquiera una buena aproximación a la verdad, tampoco son capaces de exhibir las fluctuaciones en la densidad de un fluido, más tarde se verá que no todas las densidades contribuyen de igual manera. Otras técnicas, sin embargo, han probado ser más efectivas tanto a nivel cualitativo como a nivel cuantitativo. Tal es el caso del *Grupo de renormalización*. La aplicación de esta técnica a problemas tales como la dinámica de fenómenos críticos ha demostrado su efectividad, además,

un incentivo atractivo para su estudio, es que conjunta diversas áreas de la física teórica. Esta técnica tiene sus orígenes en la Teoría Cuántica de Campos, la mecánica estadística de transiciones de fase, sistemas que no evolucionan en el tiempo, sin embargo también se puede aplicar esta técnica al estudio de sistemas que si evolucionan en el tiempo, esta herramienta es conocida como *Grupo de Renormalización Dinámica* o (RGD) tal es el caso de los fenómenos de transporte fuera de equilibrio.

El objetivo de esta tesis es estudiar a través del RGD un fenómeno fuera de equilibrio en el cuál las técnicas convencionales fallan al momento de hacer correcciones y predicciones, es el caso de la difusión de un fluido a través de un material cuya estructura no es periódica ni ordenada, un material al cuál se le da la nomenclatura de amorfo, un material con una distribución aleatoria, por ejemplo, de poros y canales, una roca porosa, una patata o una esponja son ejemplos que nos llegan a la mente. El flujo y la difusión a través de un material poroso es un campo vasto de estudio con múltiples aplicaciones científicas e ingenieriles, incluyendo catálisis, purificación de agua, ingeniería petrolera, etc. El entendimiento detallado de los flujos y la difusión en un medio poroso es esencial para el diseño, desarrollo y optimización de métodos de catálisis y adsorción. Sin embargo en el ámbito teórico recavar información sobre cómo evolucionan procesos como éste es invaluable sin contar la belleza inherente a la matemática involucrada en el proceso. Se estudiarán algunos efectos de la influencia que ejerce un material amorfo sobre la distribución de densidades de masa de un fluido que se difunde en este. La inclusión de obstáculos en la difusión normal genera interacciones no lineales que hacen al problema difícil de estudiar con herramientas convencionales, es por ello que se recurre a la técnica del grupo de renormalización. Se ha recurrido a esta técnica en problemas como la evolución de sistemas magnéticos discutida por Mazenko[3], también en problemas como flujo turbulento discutido por Foster[2].

En el Capítulo 1 se abordará el tema de la difusión normal, es decir, la difusión de un fluido en un medio homogéneo e isotrópico, se modelará y se resolverán las ecuaciones diferenciales que rigen su evolución. A continuación, en el Capítulo 2, se estudiará un sistema mecánico cuya evolución depende de la interacción con un “ruido”, un campo estocástico. Entender el efecto y las consecuencias de la inclusión de un factor externo como este campo, ayudará a modelar la estructura que se usará para incluir en las ecuaciones de evolución, la presencia de un medio amorfo en el Capítulo 3. Si bien la forma de modelarlo será simple no carece de elegancia. La forma en la que aquí se modela el medio amorfo introduce características vectoriales que exhibirán después influencias longitudinales y transversales al acoplarse con la distribución de densidades de masa del fluido que se difunde a través de la red de canales y poros. En el Capítulo 4 se construirán las transformaciones del RGD y se aplicarán sobre el sistema encontrando correcciones al coeficiente de difusión que no diverjan para en el Capítulo 5 estudiar el impacto que tuvo aplicar las transformaciones del RGD y encontrar una corrección al desplazamiento cuadrático medio de las partículas del fluido difundiéndose por el material amorfo. En el Capítulo 6 se discuten las conclusiones.

Englobadas en esta tesis se tratan de manera didáctica algunas de las ideas con las que uno puede irse topando en la literatura al respecto del grupo de renor-

malización, aquí aplicadas al sistema de un fluido difundiéndose por un medio poroso, fenómenos críticos e incluso cuestiones de universalidad. Los temas se presentan de forma clara de manera que cualquiera que los lea, de menos satisfaga su curiosidad al respecto, en el caso más ambicioso se presentan resultados sumamente interesantes alrededor del comportamiento difusivo en una red de poros y canales en, lo que espero sea una agradable sorpresa, dos dimensiones, a manera de ejemplo: las calles de una metrópoli con tránsito abundante. Un problema similar y el cual también es abordado por el RGD es el problema de la percolación, un tema que puede ser abordado en trabajos futuros.

Capítulo 1

Difusión normal

1.1. Difusión

Quizás haya tenido la oportunidad de ver como se disipa una multitud de gente al salir de un concierto o quizás se haya quedado maravillado por la belleza de las intrincadas formas que deja una gota de un líquido al ser introducida en otro, ¿quién no se ha percatado de la presencia de una dama al entrar a una habitación sólo por percibir el aroma de su perfume? Si uno es observador puede darse cuenta de que todos estos fenómenos guardan una estrecha relación entre ellos, la física involucrada es básicamente la misma.

Los mecanismos que están presentes en el movimiento de una gota de tinta en un vaso de agua son los mismos mecanismos que frecuentemente aparecen en diversos procesos físicos, biológicos, económicos, etc. En el caso de la gota de tinta en el vaso de agua ocurre una redistribución del contenido de la gota (una colección de partículas cuyo movimiento es azaroso), en todo el volumen del vaso, este proceso ocurre debido a la diferencia de concentración y es conocido como *difusión*. Con este ejemplo uno podría quedarse con la idea de que la difusión es un fenómeno que solo atañe a los fluidos, sin embargo, tome por ejemplo el caso de una población, un grupo de individuos de la misma especie que están aislados reproductivamente de otros grupos afines, conforme pasa el tiempo y debido a factores de estrés asociados a esta población, los individuos de este grupo tenderán a migrar a otras regiones menos pobladas, estas migraciones en escalas de tiempo muy grandes serán muy similares a las trayectorias seguidas por un grano de polen inmersa en un fluido y su distribución final tenderá a parecerse a la distribución de las gotas en el vaso. Como ese hay muchos ejemplos donde intervienen procesos difusivos, cómo se esparce una enfermedad en una población o cómo se esparce la información a través de un grupo de individuos, etc. La difusión es el más sencillo de los procesos irreversibles descritos por la termodinámica fuera de equilibrio. Y es un fenómeno que se manifiesta en un gran espectro de escalas.

Analizando el caso del grano de polen en un fluido vemos que su movimiento es errático. A comienzos del siglo XIX el botánico escocés Robert Brown descubrió,

atrapada en un trozo de cuarzo, una gota de agua en la cual se encontraban suspendidas pequeñas partículas que oscilaban de manera anómala. Al estudiar estas partículas concluyó que su movimiento no podía deberse a atributos de vitalidad de los granos encerrados como originalmente lo pensó estudiando los granos de polen en un fluido, sino que la fuente de su movimiento debía ser puramente físico. Ahora sabemos que el mecanismo por el cual se mueve el grano de polen es debido a la transferencia de momento entre el grano e innumerables moléculas de agua al colisionar con este. Uno de los resultados más importantes de la Física Estadística nos dice que la temperatura T de un gas puede ser determinada como el promedio de la energía cinética de sus componentes moleculares:

$$3k_B T = m \langle v^2 \rangle \quad (1.1)$$

Donde $k_B = 1,381 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ es la constante de Boltzmann y m es la masa de la molécula. En este sentido la temperatura de un sistema está conectada con el movimiento molecular medio. Las moléculas de un sistema en equilibrio a temperatura T se mueven de manera continua y espontánea, con una velocidad promedio $\sqrt{3k_B T/m}$ llamada *velocidad térmica*, generalmente en un sistema en equilibrio térmico cada grado de libertad mostrará fluctuaciones con energía promedio $k_B T/2$. En resumen la energía térmica es el origen de todos los movimientos microscópicos en ausencia de campos externos.

1.2. Movimiento Browniano

Desde que Brown estudió el movimiento de las partículas suspendidas en un fluido, debido a esto se le conoce como movimiento browniano, hasta que se dio una explicación física satisfactoria de éste, pasó casi un siglo. Fue el físico alemán Albert Einstein quien en 1905 ofreció dicha explicación que luego fue confirmada por un riguroso trabajo experimental realizado por el físico francés Jean Baptiste Perrin. Ambos estudios concluyeron que el origen del movimiento Browniano era debido a las colisiones del grano con las moléculas del agua en movimiento térmico. Después de verificar que el movimiento no era debido a la convección del fluido realizó un exhaustivo análisis variando el tamaño de los granos, su masa, la viscosidad del fluido en el que se encontraban inmersos y la temperatura. Descubrió que el movimiento era más activo al incrementar la temperatura, disminuir la viscosidad y hacer más pequeño el grano. También mostró que el carácter aleatorio de las trayectorias estaba presente a todas las escalas, esto implicaba que dado que el grano experimentaba constantes cambios en su velocidad también experimentaría cambios constantes en su dirección, este comportamiento persistía al aumentar la resolución de las mediciones en el tiempo incluso hasta la escala molecular.

Perrin y sus estudiantes siguieron el movimiento de partículas brownianas individuales y documentaron sus posiciones en intervalos de tiempo iguales. El análisis de las trayectorias de las partículas mostró que el desplazamiento promedio $\langle r(t) - r(0) \rangle$ es cero dado la isotropía del movimiento errático de los granos. Después de repetir este experimento muchas veces, graficaron el desplazamiento

cuadrático medio de las partículas $R(t) = \langle (r(t) - r(0))^2 \rangle^{1/2}$ con respecto al tiempo, encontrando que a tiempos largos las partículas obedecen la siguiente ley estadística:

$$R^2(t) \sim D_0 t \quad (1.2)$$

Donde D_0 la constante de proporcionalidad, define el *coeficiente de Difusión* de la partícula. El desplazamiento cuadrático medio de las partículas se vuelve relevante, pues es un observable cuantitativo del movimiento de éstas. Se habla de *difusión normal* cuando el comportamiento asintótico del desplazamiento cuadrático medio $R(t)$ de la partícula que se difunde es proporcional a \sqrt{t} .

1.3. Ecuación de Difusión

La forma más simple de abordar el fenómeno de difusión y el que más se acerca a las observaciones experimentales es mediante la formulación de una ecuación diferencial que describa la evolución de un sistema que tiende al equilibrio, a este tipo de ecuaciones diferenciales se les conoce como *ecuaciones diferenciales parabólicas*. Esta ecuación debe describir la evolución de la concentración local de masa de una sola componente química.

Considérese este sistema de una sola componente química, en el que localmente se puede asociar un valor escalar de la densidad de masa a cada punto, $\rho \equiv \Delta m / \Delta V$, la ecuación de conservación de masa es:

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (1.3)$$

donde \mathbf{J} es un campo vectorial asociado al flujo de masa. La termodinámica de procesos fuera de equilibrio dice que si existen gradientes de densidad, de masa en este caso, entonces se genera una corriente de masa que depende del coeficiente fenomenológico, en este caso el llamado coeficiente de difusión D_0 definido como la razón:

$$D_0 \equiv \frac{|\mathbf{J}(\mathbf{x}, t)|}{|\nabla \rho(\mathbf{x}, t)|}$$

El flujo de masa en un fluido es directamente proporcional al gradiente de concentración de la distribución de masa.

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = -D_0 \nabla \rho(\mathbf{x}, t) \quad (1.4)$$

Esta expresión es conocida como *Ley de Fick*. Sustituyendo (1.4) en (1.3) se tiene:

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) - \nabla \cdot (D_0 \nabla \rho(\mathbf{x}, t)) = 0 \quad (1.5)$$

Si además se supone que D_0 no depende de las coordenadas se tiene:

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) - D_0 \nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (1.6)$$

Esta es la ecuación de difusión para una distribución de densidades de masa. Ahora considérese el estado de equilibrio donde se tiene una densidad constante en todo punto del espacio y en todo tiempo, denotada como ρ_0 y cuando en este medio uniforme se provoca una pequeña perturbación $\delta\rho$ cuya evolución al estado de equilibrio es gobernada por una ecuación similar:

$$\partial_t \delta\rho(\mathbf{x}, t) - D_0 \nabla^2 \delta\rho(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (1.7)$$

1.3.1. Solución libre

Hasta ahora se ha considerado un modelo de distribución de densidad que es continuo, esta hipótesis es necesaria al momento de descomponer la distribución en sus modos de Fourier, sin embargo hay un punto en el que no es posible seguir considerando a la distribución como continua pues se llega del dominio de lo macroscópico y mesoscópico a lo microscópico. Es por esto que en el dominio de la distribución se debe incluir un momento de corte a partir del cual es posible permitir como válido este análisis. Dicho momento de corte es:

$$k_c \equiv \frac{2\pi}{(V_0)^{1/3}}$$

Donde V_0 es el volumen límite por debajo del cual se pierde la validez del continuo y es necesario describir al sistema de manera discreta.

Al aplicar la transformada de Fourier a (1.7) se tiene:

$$\partial_t \delta\rho(k, t) + D_0 k^2 \delta\rho(k, t) = 0, \quad (1.8)$$

que se puede escribir de la siguiente manera:

$$\int_{\delta\rho(\vec{k}, 0)}^{\delta\rho(\vec{k}, t)} \frac{d\delta\rho}{\delta\rho} = -D_0 k^2 \int_0^t dt$$

Integrando

$$\delta\rho(k, t) = \delta\rho(k, 0) e^{-D_0 k^2 t} \quad (1.9)$$

de manera que se puede definir para cada k un tiempo de relajamiento $\tau(k)$

$$\tau(k) = \frac{1}{D_0 k^2} \quad (1.10)$$

Es un tiempo de relajamiento que depende del valor de los momentos k . Se puede ver que para momentos cercanos a cero el tiempo de relajamiento se vuelve muy grande, esto se debe a que están involucradas longitudes de onda muy grandes cuya masa asociada nos da mucha inercia. Por el otro lado,

longitudes de onda pequeñas implican tiempos de relajamiento breves, pues describen rugosidades muy pequeñas que rápidamente decaen. Sustituyendo (1.10) en (1.9) se obtiene:

$$\delta\rho(k, t) = \delta\rho(k, 0)e^{-t/\tau} \quad (1.11)$$

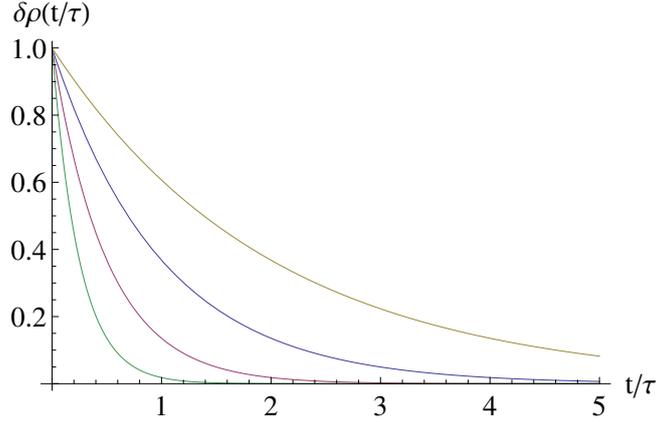


Figura 1.1: Solución para la distribución de masa $\delta\rho(t/\tau)$ para una k arbitraria a diferentes tiempos.

Supóngase que $\delta\rho(x, t)$ es una colección de partículas marcadas que evoluciona en el tiempo a partir de un punto de inicio en $(x, t = 0)$, sería conveniente conocer también cómo estará distribuida la colección de partículas marcadas, es decir su evolución espacial. Al introducir (1.9) en la definición de la transformada de Fourier de $\delta\rho(x, t)$ se obtiene¹:

$$\delta\rho(x, t) = \int_k \delta\rho(k, t)e^{ikx} = \int_k \delta\rho(k, 0)e^{-D_0k^2t+ikx} \quad (1.12)$$

Se debe imponer además la condición de que el número de partículas marcadas N_0 :

$$\int_x \delta\rho(x, t) = N_0 \quad (1.13)$$

Introduciendo (1.12) en (1.13) se tiene:

$$N_0 = \int_x \int_k \delta\rho(k, 0)e^{-D_0k^2t+ikx}$$

¹En el apéndice 7.1.1. Se presenta la siguiente notación:

$$\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \equiv \int_k, \quad \int d^d x \equiv \int_x$$

Donde $d^d k$ es un elemento de volumen en d dimensiones en el espacio de momentos, y $d^d x$ es un elemento de volumen en d dimensiones en el espacio de configuraciones.

$$N_0 = \int_k \delta\rho(k, 0) e^{-D_0 k^2 t} \int_x e^{ikx} = \int_k \delta\rho(k, 0) e^{-D_0 k^2 t} (2\pi)^d \delta^d(k) \quad (1.14)$$

donde $\delta^d(k)$ es una delta de Dirac. Es fácil ver que

$$N_0 = \delta\rho(k = 0, 0)$$

Entonces (1.12) puede ser reescrita en términos de un estado inicial $\delta\rho(0, 0)$.

$$\begin{aligned} \delta\rho(x, t) &= \frac{N_0}{(2\pi)^d} \int d^d k \ e^{-D_0 k^2 t + ikx} \\ \delta\rho(x, t) &= N_0 \left[\frac{1}{(2\pi)^d} \int dk \ e^{-D_0 k^2 t + ikx} \right]^d \end{aligned}$$

Ya que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ax^2 + bx} = \left(\frac{\pi}{-a} \right)^{1/2} e^{-b^2/4a}$$

Donde $x^2 = x_j x_j$. La distribución de densidades de masa entonces evolucionará de acuerdo con:

$$\delta\rho(x, t) = \frac{N_0}{(4\pi D_0 t)^{d/2}} e^{-x^2/4D_0 t} \quad (1.15)$$

$$\delta\rho(x, t) = \left(\frac{1}{(4\pi D_0 t)^{d/2}} e^{-x^2/4D_0 t} \right) \delta\rho(0, 0) \quad (1.16)$$

Donde la expresión encerrada en paréntesis es una función que “empuja” al estado inicial hasta cualquier valor de (x, t) , a esta función se le conoce como función de Green o propagador y será denotado como G_0 .

$$G_0(x, t|0, 0) = \frac{1}{(4\pi D_0 t)^{d/2}} e^{-x^2/4D_0 t} \quad (1.17)$$

Para toda x y toda $t > 0$ el propagador G_0 es solución de la ecuación de difusión, esta solución es llamada también la solución fundamental. Para una condición inicial en la que a tiempo cero todas las partículas que se difundirán se encuentran sobre una delta de Dirac.

La solución es la distribución de densidad de masa de las partículas difundidas en cualquier punto del espacio en cualquier momento. Sin embargo hay otra interpretación de esta solución. Cada punto sobre la curva puede ser considerado como la densidad de probabilidad para la difusión de una sola partícula browniana alrededor de las condiciones iniciales. La elección de una densidad de probabilidad como analogía es en este punto apropiada pues la densidad de masa multiplicadas por el volumen que ocupan es la cantidad total de masa, o la cantidad total de partículas. De manera similar la densidad de probabilidad multiplicada por la función de peso adecuada (la medida adecuada), da lugar a la probabilidad de encontrar a una sola partícula del ensemble en un intervalo

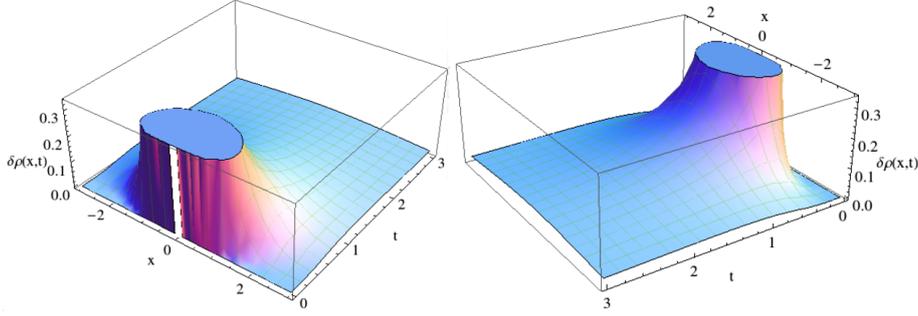


Figura 1.2: Solución (truncada), para la distribución de masa $\delta\rho(x, t)$.

de posición. Para la solución de la ecuación de difusión la medida adecuada es una distancia en lugar del volumen, es la distancia entre dos puntos a lo largo del eje horizontal de la gráfica. De acuerdo a esta interpretación la solución de la ecuación de difusión no es una expresión de la distribución de masas, es sin embargo, la distribución de probabilidad para una partícula de moverse en una dirección u otra.

Una cantidad conveniente para estudiar el desplazamiento de una partícula browniana es el desplazamiento cuadrático medio $R(t)^2 = \langle (x(t) - \langle x(t) \rangle)^2 \rangle = \langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2$. Dado que tenemos la densidad de probabilidad según la segunda interpretación solo tenemos que calcular $\langle x(t)^2 \rangle$ dado que $\langle x(t) \rangle$ es cero. Definimos el promedio de $x(t)^2$ como $\langle x(t)^2 \rangle \equiv \int_x x^2 \delta\rho(x, t)$. Entonces calculamos:

$$\langle x(t)^2 \rangle = \frac{N_0}{(4\pi D_0 t)^{d/2}} \int d^d x \left(e^{-x^2/4D_0 t} \right) x^2 \quad (1.18)$$

Integrando con el cambio de variable $\xi^2 = x^2/4D_0 t$, entonces (1.18) se convierte en

$$\langle x(t)^2 \rangle = \frac{N_0}{(4\pi D_0 t)^{d/2}} \int d^d \xi (4D_0 t) \xi^2 e^{-\xi^2} (4D_0 t)^{d/2} \quad (1.19)$$

que resulta en

$$\langle x(t)^2 \rangle = 4D_0 \left(\frac{N_0 \phi(d)}{\pi^{d/2}} \right) t \quad (1.20)$$

Es decir que $\langle x(t)^2 \rangle$ es proporcional a t , y este comportamiento se dice que es la difusión normal, el término $\phi(d)$ es un factor de forma. Este resultado es congruente con los trabajos de Einstein [8] y Perrin [12].

1.4. Caminata aleatoria

Para profundizar en el estudio del comportamiento difusivo, es necesario notar que se ha presentado una solución a la ecuación de difusión tomando en cuenta que la difusión es un mecanismo termodinámico por el cual se va de un estado de equilibrio a otro. Y se ha obtenido una solución de distribución de densidades de masa que puede ser reinterpretada como la densidad de probabilidad de encontrar a una partícula, que se difunde, en algún punto del espacio a un tiempo dado. Estas partículas, como se ha señalado anteriormente, son partículas cuyo comportamiento es aleatorio, como un caminante que no controla la dirección de sus pasos.

Imagine que se encuentra en una concurrida sala de conciertos escuchando el scherzo número 4 de Chopin, al finalizar el concierto todos los presentes salen en todas direcciones, (asumiendo que todos llegaron a pie y que no hay estacionamiento), estas personas buscarán una vez fuera del recinto dejar de estar aglutinados para tener más espacio entre unos y otros. Si alguien observase desde un punto elevado este comportamiento notaría que se parece mucho al caso que se ha estado estudiando, si se considera a cada persona como una de las partículas marcadas dentro de un fluido, entonces tiene más sentido pues cada partícula buscará ir de una zona de mayor concentración a una de menor concentración, como en el caso del proceso difusivo. Dado que desde la perspectiva del observador es imposible adivinar como o a donde se moverá cada persona individualmente su comportamiento será aleatorio.

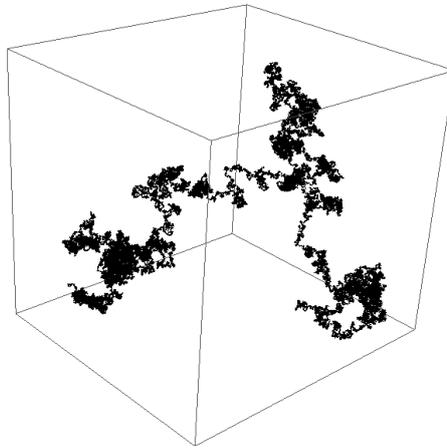


Figura 1.3: Trayectoria de un caminante aleatorio en 3 dimensiones.

Se mostrará a continuación cómo el modelo de difusión anterior en su escenario más simple y en una dimensión, surge del comportamiento estocástico de las moléculas que se comportan como caminantes aleatorios. Se derivará entonces la ecuación de difusión a partir de un enfoque microscópico. La primera formulación de este tipo fue presentada por el físico alemán Albert Einstein en [8]. Sería lógico pensar que ambos comportamientos están relacionados pues la solu-

ción fundamental para la ecuación de difusión dada por (1.17) luce de manera muy similar a una distribución de probabilidad normal. Una variable aleatoria en una dimensión tiene la siguiente función de densidad de probabilidad:

$$N(x, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-x^2/2\sigma^2} \quad (1.21)$$

Que es una distribución de probabilidad gaussiana centrada en cero con desviación estándar σ . Se puede notar que al tomar σ como

$$\sigma = \sqrt{2Dt},$$

se recupera el propagador G_0 en una dimensión. Sin embargo para probarlo es necesario especificar aún más. Sea x un punto cualquiera sobre el eje x y dividamos el eje x en celdas de igual tamaño h de manera que el eje está ahora segmentado en una rejilla de puntos discretos ($\dots x - 2h, x - h, x, x + h, x + 2h \dots$).

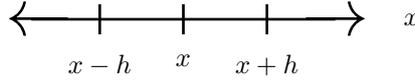


Figura 1.4: Segmentación del eje x en celdas de tamaño h .

Ahora es momento de imaginar a un caminante aleatorio moviéndose en esta rejilla unidimensional de tal manera que si se encuentra ubicado en uno de estos puntos de la red en el momento t , al desplazarse en un tiempo Δt solo tiene dos posibilidades para dar un paso, izquierda o derecha, a las que les podemos asignar una probabilidad $q = 1 - p$ y p respectivamente, a este proceso se le conoce como caminata aleatoria en una dirección. Sea $\rho(x, t)$ la probabilidad de que el caminante se encuentre en una posición x al tiempo t . Es claro que hay dos formas de llegar a una posición x al tiempo $t + \Delta t$; el caminante puede estar en $x - h$ al tiempo t y saltar a la derecha, o estar en $x + h$ al tiempo t y saltar a la izquierda. La probabilidad total es entonces:

$$\rho(x, t + \Delta t) = \rho(x - h, t)p + \rho(x + h, t)q \quad (1.22)$$

Ahora será conveniente expandir ambos lados de la ecuación en sus series de Taylor alrededor de (x, t) y se obtiene

$$\begin{aligned} & \rho(x, t) + \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} \Delta t + O((\Delta t)^2) \\ &= p \left(\rho(x, t) - \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} h + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} h^2 + O(h^3) \right) \\ &+ q \left(\rho(x, t) + \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} h + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} h^2 + O(h^3) \right) \end{aligned}$$

Donde $O((\Delta t)^2)$ denota términos de orden superior que tienen un factor de al menos $(\Delta t)^2$ y $O(h^3)$ denota términos que tienen al menos un factor de h^3 . Al simplificar esta ecuación se tiene

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = -(p - q) \frac{h}{\Delta t} \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} + \frac{h^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} + O(\Delta t) + \frac{O(h^3)}{\Delta t} \quad (1.23)$$

Si pedimos que en este caso que se tenga la misma probabilidad de ir a la izquierda o a la derecha entonces $p = q = 1/2$, y la ecuación anterior la podemos reescribir como

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{h^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} + O(\Delta t) + \frac{O(h^3)}{\Delta t} \quad (1.24)$$

Al despreciar órdenes superiores el resultado final es

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{h^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \quad (1.25)$$

Se puede redefinir el coeficiente fenomenológico como $D_0 = h^2/2\Delta t$ y entonces (1.25) puede ser reescrita como

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} - D_0 \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} = 0 \quad (1.26)$$

Que es la ecuación de difusión (1.6), para $d = 1$, cuya solución es:

$$\rho(x, t) = \frac{e^{-x^2/2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \rho(0, 0) = \frac{e^{-x^2/4D_0t}}{\sqrt{4\pi D_0t}} \rho(0, 0)$$

con $\sigma = \sqrt{2D_0t}$. Donde (1.21) coincide con $G_0(x, t)$. Es decir

$$\rho(x, t) = G_0(x, t)\rho(0, 0)$$

Capítulo 2

Ecuación de Langevin

Para expresar la difusión de una partícula en el lenguaje matemático de la mecánica clásica generalmente se deben conocer dos cosas: la velocidad inicial de la partícula y el valor del impulso que generó el movimiento. Dado que una sola partícula browniana¹ sufre alrededor de 10^{21} colisiones por segundo, cualquier efecto que su velocidad inicial pueda tener en su movimiento es opacado por un sin número de otras colisiones moleculares que nos es imposible conocer, lo cual hace inútil poder predecir el movimiento individual de una de estas partículas. Einstein introdujo una visión nueva para abordar este problema, introdujo una visión estadística del problema. Se estudiará a continuación el caso de una partícula moviéndose en un medio que exhibe fluctuaciones estocásticas, estas fluctuaciones modelarán los impactos que recibe una mesopartícula como un grano de polen.

2.1. Ecuación diferencial de Langevin

Imagínese a algún caminante aleatorio desplazándose por entre un grupo concurrido de otros caminantes, sigamos el movimiento de uno que vaya comparativamente más lento al del resto, a medida de que avance es posible que se enfrente con un camino lleno de codazos y empujones que alterarán su trayectoria. Esta será la historia de una partícula inmersa en un burbujeante medio termodinámico que exhibe fluctuaciones. Para describir el movimiento de una partícula considérese que su dinámica dependerá de dos contribuciones: una lenta y una rápida. El efecto lento es la resistencia al avance en el medio que experimenta la partícula, esta resistencia será equivalente a la fuerza de fricción que depende linealmente de la velocidad de la partícula, esto es $-\gamma v(x, t)$. Para simular la contribución rápida será introducida una fuerza $f(x, t)$ actuando de manera estocástica sobre la partícula. Entonces se puede describir la dinámica con la siguiente ecuación:

¹Aquí partícula browniana se refiere al tipo de partícula y movimiento del que se habló en la sección 1.2.

$$m \frac{dv(x,t)}{dt} = -\gamma v(x,t) + f(x,t), \quad (2.1)$$

ésta es la ecuación de Langevin. Para resolver esta ecuación se propone una solución que será el producto de los dos efectos mencionados: la acción lenta y la rápida. Esta solución se escribe como:

$$v(x,t) = \phi(x,t)\psi(x,t) \quad (2.2)$$

Al introducir esta solución en (2.1) y olvidándose momentáneamente de los argumentos para hacer más ligera la notación², se obtiene

$$\dot{\psi}\phi + \psi\dot{\phi} + \frac{\gamma}{m}\psi\phi = \frac{f}{m} \quad (2.3a)$$

Que también se puede escribir como

$$\frac{\dot{\psi}}{\psi}\phi + \dot{\phi} + \frac{\gamma}{m}\phi = \frac{f}{m\psi} \quad (2.3b)$$

En este punto la ecuación de Langevin es completamente simétrica y a partir de ahora se pueden tomar algunas decisiones sobre qué efecto será el correspondiente a qué acción. Se puede reescribir de la siguiente manera:

$$\left(\dot{\psi} + \frac{\gamma}{m}\psi\right)\phi + \dot{\phi}\psi = \frac{f}{m} \quad (2.3c)$$

y pide que la dinámica lenta solo sea determinada por la acción lenta entonces la ecuación diferencial para la evolución de ψ es

$$\dot{\psi} + \frac{\gamma}{m}\psi = 0$$

Si se pide que $\psi(x,t)$ sea la contribución lenta, que se puede reescribir de una manera más apropiada como:

$$\dot{\psi} = -\frac{\gamma}{m}\psi \quad (2.4a)$$

Esta ecuación diferencial tiene solución inmediata. Haciendo cumplir esta condición, la ecuación (2.3c) se convierte en:

$$\dot{\phi} = \frac{f}{m\psi}, \quad (2.4b)$$

que es la evolución de la contribución rápida. Es fácil obtener las soluciones de la ecuaciones (2.4a) y (2.4b), integrando con respecto al tiempo la primera se obtiene:

$$\psi(x,t) = \psi(x,0)e^{-\gamma t/m} \quad (2.5)$$

²Donde $\dot{x} = dx/dt$, la evolución temporal de la variable x .

que es la solución para la contribución lenta, es decir, el efecto sistemático del medio a oponerse al movimiento de la partícula haciendo que la velocidad de ésta decaiga a cero mientras mayor sea el valor de la fricción. Sustituyendo esta última en la ecuación (2.4b) se obtiene:

$$\frac{d\phi(x,t)}{dt} = \frac{1}{\psi(x,0)} e^{\gamma t/m} \frac{f(x,t)}{m} \quad (2.6)$$

e integrando con respecto al tiempo la solución para la contribución rápida es

$$\phi(x,t) = \phi(x,0) + \frac{1}{\psi(x,0)} \int_0^t dt' \frac{f(x,t')}{m} e^{\gamma t'/m} \quad (2.7)$$

Ésta es la solución para la contribución rápida, que depende directamente de las fluctuaciones del medio representadas por $f(x,t')$. Al sustituir en $v(x,t) = \psi(x,t)\phi(x,t)$, se tiene:

$$v(x,t) = v(x,0)e^{-\gamma t/m} + \int_0^t dt' e^{-\gamma(t-t')/m} \frac{f(x,t')}{m} \quad (2.8)$$

donde $v(x,0) = \psi(x,0)\phi(x,0)$. Se aprecia que la solución puede ser descompuesta en dos pedazos, el primero es una acción lenta que hace decaer la velocidad inicial de la partícula de manera exponencial, sin embargo la rápida propaga las fluctuaciones en el tiempo con $G(t,t') = e^{-\gamma(t-t')/m}$, así la solución, escrita en términos de este propagador luce como:

$$v(x,t) = v(x,0)e^{-\gamma t/m} + \frac{1}{m} \int_0^t dt' G(t,t') f(x,t') \quad (2.9)$$

2.2. El mar de fluctuaciones estocásticas

Ahora es tiempo de hablar un poco sobre las propiedades estadísticas de f , la fuerza sobre una partícula que determina la trayectoria de ésta y su velocidad, ello significa que si la fuerza que se aplica sobre ésta es de carácter estocástico tanto las posiciones como las velocidades también serán estocásticas. La hipótesis más sencilla es que la distribución de las fuerzas sea gaussiana, por lo tanto su determinación se reduce a conocer su promedio y su desviación estándar. Supondremos que tenemos un *ensemble* de sistemas similarmente preparados, el promedio es sobre un solo sistema, el sistema del laboratorio, consiste en la observación de la evolución en el tiempo de f durante mucho tiempo y los promedios que resultan son los promedios en el tiempo. El promedio, al promediar sobre el ensemble del laboratorio de la fuerza fluctuante es cero:

$$\langle f(t) \rangle = 0 \quad (2.10)$$

Al promediar sobre el ensemble el producto de la fuerza fluctuante y la velocidad de la partícula, la correlación de éstas debe ser nula dado que $f(t)$ fluctúa más rápido que $v(t')$.

$$\langle f(t)v(x, t') \rangle = 0 \quad (2.11)$$

Sin embargo al promediar f sobre el ensemble a tiempos distintos existe una correlación entre las fuerzas ejercidas por el medio que es de la siguiente forma

$$\langle f(t)f(t') \rangle = C\delta(t - t') \quad (2.12)$$

donde la magnitud de C es la intensidad de la correlación instantánea de las fuerzas y C no es una constante ya que puede depender de la temperatura, además puede ser un tensor.

2.3. Correlaciones en la ecuación de Langevin

Para dar con la solución completa del problema estocástico será necesario imponer una nueva condición, la condición de estado estacionario. Se espera que el medio sea el mismo siempre, como lo es un baño térmico, así, la mesopartícula exhibirá esta característica a través de la siguiente condición:

$$\langle v(x, t)^2 \rangle = \langle v(x, 0)^2 \rangle \quad (2.13)$$

De la ecuación (2.8) y con esta nueva condición se puede evaluar el cuadrado de la velocidad y promediar en el tiempo, para obtener:

$$\begin{aligned} \langle v(x, t)^2 \rangle &= \langle v(x, 0)^2 \rangle e^{-2\gamma t/m} + \\ &+ 2e^{-2\gamma t/m} \int_0^t dt' e^{\gamma t'/m} \left\langle v(x, 0) \cdot \frac{f(x, t')}{m} \right\rangle + \\ &+ \int_0^t \int_0^t dt' dt'' e^{\gamma(t'-t'')/m} \left\langle \frac{f(x, t')}{m} \cdot \frac{f(x, t'')}{m} \right\rangle \end{aligned}$$

Y al poner en marcha la hipótesis sobre las f' s, dadas por (2.11) y (2.12) e integrando, esta última expresión se convierte en:

$$\langle v(x, t)^2 \rangle = \langle v(x, 0)^2 \rangle e^{-2\gamma t/m} + \frac{C}{2\gamma m} e^{-2\gamma t/m} (e^{2\gamma t/m} - 1)$$

Agrupando términos se reescribe como:

$$\langle v(x, t)^2 \rangle = \frac{C}{2\gamma m} + \left(\langle v(x, 0)^2 \rangle - \frac{C}{2\gamma m} \right) e^{-2\gamma t/m}$$

Para una partícula inmersa en un fluido en una situación estacionaria ó más bien, en una situación de equilibrio termodinámico en la que se cumpla (2.13) implica que:

$$\langle v(x, 0)^2 \rangle = \frac{C}{2\gamma m} \quad (2.14)$$

Esta condición es la que establece el teorema de fluctuación-disipación, que relaciona la intensidad C de las fluctuaciones con la disipación γ en el equilibrio térmico. Ahora, bien se sabe del teorema de equipartición de la energía que:

$$\langle H \rangle = \frac{d}{2} k_B T \quad (2.15)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann y d es la dimensión del espacio en el que trabajamos. Entonces sabiendo que $E = p^2/2m$ (para una partícula libre).

$$\langle v^2 \rangle = \frac{d}{m} k_B T \quad (2.16)$$

$$\langle v(x, 0)^2 \rangle = \frac{C}{2\gamma m} = \frac{d}{m} k_B T$$

Asi la intensidad de C es:

$$C = 2dk_B T \gamma \quad (2.17)$$

Sustituyendo el valor de C en (2.12) se tiene:

$$\langle f(t)f(t') \rangle = 2dk_B T \gamma \delta_{ij} \delta(t - t') \quad (2.18)$$

que establece cómo están relacionadas las fluctuaciones y la disipación. También se puede calcular cuál es la correlación entre las velocidades de la partícula:

$$\langle v(x, 0)v(x, t') \rangle = \frac{d}{m} k_B T \left(e^{-\gamma|t|/m} \right) \quad (2.19)$$

La ecuación de Langevin es sumamente útil para modelar un sin número de fenómenos físicos, entre ellos la difusión en fluidos cuya propagación se ve obstaculizada por estructuras o campos que pueden ser descritos como fluctuantes de manera estocástica, estos casos de difusión pueden ser considerados anormales.

Capítulo 3

Difusión anómala

Una de las características principales y quizás la más útil para decir que un proceso difusivo es normal, es el desplazamiento cuadrático medio de las partículas difundidas en un medio, que debe ser lineal en el tiempo para que la difusión sea normal, es decir que la solución del proceso sea una distribución Gaussiana. En otras palabras el desplazamiento cuadrático medio, que es un observable físico que puede ser estudiado en un laboratorio, debe ser proporcional al tiempo elevado a la potencia $\nu = 1$:

$$\langle r(t)^2 \rangle \sim t$$

Sin embargo existen procesos difusivos en los cuales esta ley de escalamiento se cumple de una manera ligeramente distinta, circunstancias en las que las partículas difundidas son incapaces de moverse libremente debido a obstáculos, fuerzas e interacciones que pueden influenciar sus trayectorias, en esos casos el desplazamiento cuadrático medio deja de ser lineal con el tiempo y es de esperar que la distribución también cambie y deje de ser una distribución normal. Lo que se observa es que esta ley de escalamiento adquiere la siguiente forma:

$$\langle r(t)^2 \rangle \sim t^\nu$$

Nótese que cuando $\nu = 1$ se vuelve precisamente el caso de la difusión normal, mientras que para $\nu \neq 1$, se habla de difusión anómala. Cuando $\nu < 1$ se dice que es un proceso *sub-difusivo*, mientras que si $\nu > 1$ se tiene un comportamiento *súper-difusivo*. En [7] James F. Lutsko y Jean Pierre Boon hacen una descripción precisa sobre comportamientos subdifusivos y súperdifusivos. En esta tesis se considerará que el comportamiento difusivo se verá afectado por la inclusión de un campo vectorial estocástico que hará el papel de modelar un medio poroso. Uno puede imaginarse una colección de partículas marcadas difundidas en un fluido, que al encontrarse con un medio poroso se redistribuirán debido a la porosidad del medio, alterando su dinámica.

3.1. El medio amorfo

A inicios del siglo XX con la aparición de la mecánica cuántica se logró un mayor entendimiento de la estructura de los materiales, la introducción de las nociones: estructura ordenada y periodicidad a orden lejano permitieron explicar muchas características de los sólidos cristalinos. Sin embargo la inmensa mayoría de los materiales presentan estructuras que no son ordenadas, es decir, en las cuales no existe orden lejano, pero sí orden próximo en las distribuciones de átomos. Estos materiales se llaman *amorfos*, *no cristalinos* o *no ordenados*. Entre estos materiales hay algunos que poseen propiedades mecánicas semejantes a los ordenados. Los materiales no cristalinos en los cuales el coeficiente de viscosidad de corte es mayor que 10^{13} o $10^{14} \text{ N} \cdot \text{s}/\text{m}^2$ suelen llamarse *sólidos amorfos* (en comparación el valor típico de la viscosidad para los líquidos, cerca de la temperatura de fusión es de $10^{-3} \text{ N} \cdot \text{s}/\text{m}^2$). Los sólidos amorfos, de manera semejante a los cristalinos, pueden ser dieléctricos semiconductores y metales, la existencia de éstos se explica por la teoría de bandas, sin embargo para los amorfos, dado que no comparten la característica de orden lejano, requieren de otros métodos para su estudio. En [9] Pavlov y Jojlov hacen un estudio más detallado de este tipo de materiales a diferentes escalas.

Aquí sin embargo se modelará un medio amorfo de una manera simple, sencilla y elegante, incluso quizás de la manera más sencilla posible, es decir con un campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{x})$, cuya escala esta por encima de la escala microscópica y que sólo depende de las coordenadas espaciales. Es a través de este campo que se introducirán las irregularidades presentes en el medio que fluctúa alterando la difusión normal en dirección y en intensidad a pequeña o gran escala. Como en la ecuación de Langevin, este campo tendrá propiedades estadísticas. Se toma un ensemble de regiones del material amorfo, que es uniformemente desordenado, y se promedia sobre el ensemble del laboratorio¹, al observar el valor que toma $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ en cada punto y promediar sobre las coordenadas. Como es uniformemente desordenado se cuenta con homogeneidad e isotropía. Homogeneidad significa que los valores medios (incluyendo las correlaciones), son invariantes bajo traslaciones, esto implica que las correlaciones entre dos puntos solo pueden depender de la distancia. Isotropía significa que los valores medios son invariantes ante rotaciones, por lo tanto la correlación entre dos puntos no puede depender de la dirección del vector que conecta ambos puntos, esto implica que:

$$\langle F_i(x) \rangle = 0 \quad (3.1)$$

con $i = 1, 2, \dots, n$, siendo n un número entero. Existirá también una correlación espacial para valores del campo evaluados en puntos distintos:

$$\langle F_i(x) F_j(x') \rangle \equiv \Phi_{ij}(x - x') \quad (3.2)$$

con $i, j = 1, 2, \dots, n$. Es de interés calcular el valor de esta correlación en el espacio de los momentos k . Para este fin se recurrirá nuevamente a la transformada de Fourier, al expresar a $F_i(x)$ ² como:

¹Una región cuyas dimensiones determinamos arbitrariamente

²En el apéndice 7.1.1. Se presenta la siguiente notación:

$$F_i(x) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} F_i(k) e^{ikx} \equiv \int_k F_i(k) e^{ikx}$$

y la inversa:

$$F_i(k) = \int d^d x F_i(x) e^{-ikx} \equiv \int_x F_i(x) e^{-ikx}$$

Sustituyendo esto en (3.2), se tiene por completos:

$$\langle F_i(k) F_j(k') \rangle = \int_{x,x'} \langle F_i(x) F_j(x') \rangle e^{-ikx - ik'x'} = \int_{x,x'} \Phi_{ij}(x - x') e^{-ikx - ik'x'}$$

Será conveniente expresar la integral utilizando un cambio de variables adecuado, en este caso las coordenadas del centro de masa y coordenadas relativas (r, R):

$$r = x - x', \quad R = \frac{1}{2}(x + x')$$

De aquí se puede expresar a x y x' en términos de r y R :

$$x = R + \frac{r}{2}, \quad x' = R - \frac{r}{2}$$

El Jacobiano de la transformación es igual a la unidad, es decir $d^d x d^d x' = d^d r d^d R$, con estos elementos la integral se convierte en:

$$\langle F_i(k) F_j(k') \rangle = \int_{r,R} \Phi_{ij}(r) e^{-ik(R+r/2) - ik'(R-r/2)}$$

que puede ser reescrita como:

$$\langle F_i(k) F_j(k') \rangle = \int_r \Phi_{ij}(r) e^{-i/2(k-k')r} \int_R e^{-i(k+k')R}$$

Cuando $k + k' = 0$ se tiene que:

$$\langle F_i(k) F_j(k') \rangle = \Phi_{ij}(k) (2\pi)^d \delta^d(k + k') \quad (3.3)$$

$$\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \equiv \int_k, \quad \int d^d x \equiv \int_x$$

Esta es la expresión más general para describir la correlación espacial para distintos puntos del medio amorfo. Sin embargo se puede, dado que $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ es de carácter vectorial, descomponerlo gracias al Teorema de Helmholtz en sus contribuciones selenoidales y rotacionales. Se puede proponer entonces que la función de correlación tenga la siguiente estructura:

$$\Phi_{ij}(k) = \gamma_l Q_{ij}(k) + \gamma_t P_{ij}(k) \quad (3.4)$$

donde γ_l y γ_t son constantes asociados a la intensidad de las componentes longitudinales y transversales que representan las rugosidades del medio con Q_{ij} y P_{ij} operadores de proyección. Como se verá más adelante existen escalares asociados al campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ asociados a sus componentes solenoidales y transversales. A continuación se analizarán más a fondo.

3.1.1. Operadores de proyección

El operador de proyección $\Phi_{ij}(k)$ debe de ser un tensor isotrópico debido a la isotropía e homogeneidad del campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{x})$. Para encontrar la estructura de un tensor isotrópico es necesario notar que $\Phi_{ij}(k)$ no es constante sino que depende de k y por ello permite generar otros tensores que son isotrópicos: P_{ij} y Q_{ij} . Para construirlos recordemos que un vector arbitrario \mathbf{a} en el espacio de configuración puede descomponerse en dos contribuciones: una longitudinal y otra transversal a la dirección en del flujo de la densidad de masa.

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}^l + \mathbf{a}^t$$

La componente longitudinal posee un rotacional cero $\nabla \times \mathbf{a}^l = 0$, y la componente transversal posee una divergencia igual a cero, $\nabla \cdot \mathbf{a}^t = 0$. Es decir:

$$\mathbf{a} = (\mathbf{a} \cdot \hat{e}) \hat{e} + \hat{e} \times (\mathbf{a} \times \hat{e})$$

Donde \hat{e} es cualquier vector unitario y \mathbf{a} es un vector arbitrario. $\mathbf{a}^l = (\mathbf{a} \cdot \hat{e}) \hat{e}$ y $\mathbf{a}^t = \hat{e} \times (\mathbf{a} \times \hat{e})$. En notación tensorial $a_j^l = e_i e_j a_i$. Para conocer la forma la componente transversal es necesario hacer un poco de álgebra:

$$\hat{e} \times (\mathbf{a} \times \hat{e}) = \varepsilon_{ijk} e_j \varepsilon_{klm} a_l e_m = (\delta_{il} \delta_{pm} - \delta_{im} \delta_{jl}) e_j e_m a_l$$

Donde ε_{ijk} es el tensor de Levi-Civita³. Se sigue que:

$$a_i^t = (\delta_{ij} - e_i e_j) a_j$$

En el espacio de Fourier pueden escribirse como:

³En matemáticas, y en particular en cálculo tensorial, se define el símbolo de Levi-Civita, también llamado el símbolo de permutación o tensor de Levi-Civita, como sigue:

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{si es una permutación par de índices.} \\ -1 & \text{si es una permutación impar de índices.} \\ 0 & \text{si dos índices se repiten.} \end{cases}$$

$$a_i^l(k) = \frac{k_i k_j}{k^2} a_j(k), \quad a_i^t(k) = P_{ij}(k) a_j(k)$$

Donde $\hat{e} = \mathbf{k}/|k|$, así es claro que:

$$Q_{ij}(k) = \frac{k_i k_j}{k^2}, \quad (3.5)$$

Este operador de proyección Q_{ij} es idempotente. Note que

$$k_i a_i^l = k_j a_j, \quad k_i a_i^t = 0$$

esto es, la parte longitudinal de $\mathbf{a}(\mathbf{k})$ esta a lo largo de k y la parte transversal es obtenida por medio del proyector P_{ij} . Y por último definamos ahora el operador de proyección transversal e idempotente:

$$P_{ij}(k) = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \quad (3.6)$$

Transversal porque $k_i P_{ij} = 0$, o equivalentemente $div(rot) = 0$, e idempotente porque $P_{im} P_{mj} = P_{ij}$. De esta manera (3.4) se puede escribir como:

$$\Phi_{ij}(k) = \gamma_l \left(\frac{k_i k_j}{k^2} \right) + \gamma_t \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \quad (3.7)$$

3.1.2. Componente longitudinal

El escalar asociado a los campos longitudinales, asociado al campo $F(x)$ se denotarán como $g(x)$ y está definido como:

$$g(x) = \nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}) = \int_k k_i F_i(k) e^{ikx} = \int_k g(k) e^{ikx}$$

Es decir que:

$$g(k) = ik_i F_i(k),$$

para conocer cuál es el valor de la correlación de estas componentes se sustituye este último valor de la siguiente manera:

$$\langle g(k)g(k') \rangle = ik_i \langle F_i(k)F_j(k') \rangle ik'_j = (ik_i \Phi_{ij}(k) ik'_j) (2\pi)^d \delta^d(k + k')$$

Dado que se conoce el valor de $\langle F_i(k)F_j(k') \rangle$ la expresión anterior se convierte en:

$$\begin{aligned} & (ik_i \Phi_{ij}(k) ik'_j) (2\pi)^d \delta^d(k + k') = \\ & = ik_i \left[\gamma_l \frac{k_i k_j}{k^2} + \gamma_t \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \right] ik'_j (2\pi)^d \delta^d(k + k') \end{aligned}$$

Entonces el escalar $g(x)$ son las fuentes longitudinales y el valor de la correlación de fuentes es:

$$\langle g(k)g(k') \rangle = \gamma_l k^2 (2\pi)^d \delta^d(k + k') \quad (3.8)$$

El valor de la correlación para las fuentes es cuadrática en k y es únicamente de carácter longitudinal.

3.1.3. Componente transversal

¿Que ocurre con la contribución asociada a las circulaciones transversales del campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{x})$? Definamos una cantidad $\omega_i(x)$ como:

$$\omega_i(\mathbf{x}) \equiv \nabla \times \mathbf{F}(\mathbf{x})$$

Es decir que $\omega_i(x)$ es un vector que se obtiene de aplicar el rotacional sobre el campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{x})$. El rotacional de un campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ puede ser escrito en notación tensorial, con el tensor de Levi-Civita, $\omega_i(x)$ se puede reescribir ahora de la siguiente manera:

$$\omega_i(x) = \varepsilon_{ijk} \partial_j F_k(x) = \int_k \omega_i(k) e^{ikx} = \int_k i\varepsilon_{ijk} k_j F_k(k) e^{ikx}$$

Ahora es claro que en el espacio de momentos k :

$$\omega_i(k) = i\varepsilon_{ijk} k_j F_k(k),$$

dado que se quiere conocer el valor de $\langle \omega_i(k) \omega_j(k') \rangle$ se sustituye el valor de $\omega(k)$ y se obtiene:

$$\langle \omega_i(k) \omega_j(k') \rangle = i\varepsilon_{lmi} k_m \langle F_l(k) F_j(k') \rangle i\varepsilon_{l'm'j} k'_{m'},$$

como se sabe el valor de $\langle F_i(k) F_j(k') \rangle$, la correlación de ω 's se puede escribir como:

$$\langle \omega_i(k) \omega_j(k') \rangle = i\varepsilon_{lmi} k_m \Phi_{ij}(k) i\varepsilon_{l'm'j} k'_{m'} (2\pi^d) \delta^d(k + k')$$

Haciendo actuar las propiedades del tensor de Levi-Civita se tiene que:

$$\begin{aligned}\langle \omega_l(k)\omega_{l'}(k') \rangle &= (i\varepsilon_{lmi}k_m)\Phi_{ij}(k)(-i\varepsilon_{l'm'j}k_{m'}) (2\pi^d)\delta^d(k+k') \\ &= \varepsilon_{lmi}k_m\Phi_{ij}(k)\varepsilon_{l'm'j}k_{m'}(2\pi^d)\delta^d(k+k')\end{aligned}$$

Tomemos de la expresión anterior solamente $\Phi_{ij}(k)\varepsilon_{lmi}k_m\varepsilon_{l'm'j}k_j$ y sustituyamos el valor de $\Phi_{ij}(k)$ definido en (3.7), desarrollándolo se tiene:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{lmi}k_m\Phi_{ij}(k)\varepsilon_{l'm'j}k_{m'} &= \varepsilon_{lmi}k_m \left[\gamma_l \frac{k_i k_j}{k^2} + \gamma_t \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) \right] \varepsilon_{l'm'j}k_{m'} \\ &= \gamma_t \varepsilon_{lmi}k_m \delta_{ij} \varepsilon_{l'm'j}k_{m'} = \gamma_t k_m k_{m'} \varepsilon_{lmi} \varepsilon_{l'm'i}\end{aligned}$$

Es prudente notar que la componente longitudinal desaparece porque el producto vectorial de un vector consigo mismo es cero. Por otro lado dos tensores de Levy-Civita al contraerse llevan a la siguiente definición:

$$\varepsilon_{lmi}\varepsilon_{l'm'i} = \delta_{ll'}\delta_{mm'} - \delta_{lm'}\delta_{ml'}$$

Sustituyendo esta expresión se llega a que la correlación para las fuentes transversales es:

$$\langle \omega_l(k)\omega_{l'}(k') \rangle = \gamma_t k^2 \left(\delta_{ll'} - \frac{k_l k_{l'}}{k^2} \right) (2\pi^d)\delta^d(k+k') \quad (3.9)$$

Que es cuadrático en k y tiene la forma característica del proyector transversal $P_{ij}(k)$ pero su intensidad esta dada puramente por la intensidad de correlación transversal.

3.2. Difusión en un medio amorfo

Ya se ha estudiado la solución analítica del problema de la difusión en un medio homogéneo e isotrópico libre de acoplamientos y se ha hablado de la naturaleza del movimiento de estas partículas marcadas del fluido en el caso en el que se comportan como caminantes aleatorios, también se ha introducido con ello la idea de aleatoriedad y se ha determinado las velocidades de dichas partículas o caminantes aleatorios. Se puede enriquecer mucho este problema al introducir ahora la influencia de un medio con estructura que obstaculice la libre difusión de las partículas. Se podrá modelar, con la ayuda de la ecuación de Langevin, la contribución aleatoria del medio a la corriente del flujo de masa.

En un medio poroso real las partículas se encontrarán con capilares y poros distribuidos a lo largo y a lo ancho de todo el volumen del medio de manera aleatoria, un fluido inmerso en un medio como ese al difundirse deberá hacerlo por entre esta red de canales y poros, es decir que la nueva dinámica de estas partículas estará fuertemente condicionada por el medio, los caminantes

aleatorios deberán abrirse paso a través de una serie de obstáculos, este nuevo comportamiento dista de parecerse a la difusión normal.

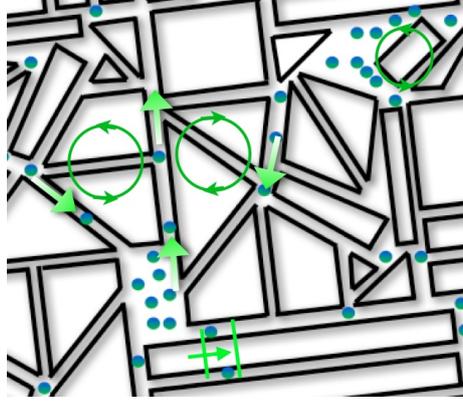


Figura 3.1: Caricatura de las aportaciones longitudinales y transversales de $\mathbf{F}(\mathbf{x})$.

Al incluir un nuevo término estocástico a la relación constitutiva (1.4) tenemos que la nueva corriente es:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = -D_0 \nabla \rho(\mathbf{x}, t) + \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{F}(\mathbf{x}) \quad (3.10)$$

Donde ahora aparece un término que acopla la distribución de masa $\rho(x, t)$, con el medio $\mathbf{F}(\mathbf{x})$. De manera análoga a lo que se hizo antes en el caso de difusión normal, incluyendo esta nueva corriente en la relación constitutiva (1.3) se obtiene la siguiente ecuación de evolución para la distribución de densidades de masa $\rho(x, t)$:

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) - D_0 \nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t) = -\nabla \cdot \rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{F}(\mathbf{x}) \quad (3.11)$$

Al mapear (3.11) al espacio de los momentos k a través de la transformada de Fourier, y adoptando la conveniente notación tensorial, ésta se transforma en:

$$\partial_t \rho(k, t) + k^2 D_0 \rho(k, t) = -i k_i \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \rho(q, t) F_i(k - q) \quad (3.12)$$

En el caso de la difusión normal al mapear (1.3) al espacio de los momentos mediante la transformada de Fourier y resolver la ecuación de evolución se hace claro que las k evolucionan de manera independiente, sin embargo al incluir el campo $F(k)$ existe ahora un acoplamiento entre las k de $\rho(k, t)$ y las q de $F(q)$, este acoplamiento se da por la convolución, que es el término de la derecha en (3.12).

Considérese una distribución de densidades de masa ρ_0 que ha alcanzado el equilibrio, entonces en ese momento se “conecta” el campo $F(k)$, causando

una redistribución de las densidades de masa, pues la nueva distribución, ahora evolucionando en presencia de $F(k)$, busca alisar las rugosidades introducidas por este campo, la nueva distribución generada se puede modelar como la distribución en equilibrio más una perturbación debida a la presencia de $F(k)$, es decir:

$$\rho(k, t) = \rho_0(k, t) + \delta\rho(k, t) \quad (3.13)$$

Como ρ_0 ha alcanzado el equilibrio se cumple que:

$$\partial_t \rho_0 + k^2 D_0 \rho_0 = 0,$$

esto implica que la ecuación de evolución para la perturbación en la distribución de densidades de masa debida a $F(k)$ obedece a:

$$\partial_t \delta\rho(k, t) + k^2 D_0 \delta\rho(k, t) = -ik_i \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \rho(q, t) F_i(k - q)$$

Considerando $\rho(k, t)$ de acuerdo a (3.13), sustituyéndolo en este último resultado y sintetizando un poco la notación de acuerdo con el Apéndice 7.1.1, se obtiene

$$\partial_t \delta\rho(k, t) + k^2 D_0 \delta\rho(k, t) = -ik_i \left[\int_q \rho_0(q, t) F_i(k - q) + \int_q \delta\rho(q, t) F_i(k - q) \right] \quad (3.14)$$

Como $\rho_0(x, t)$ ya ha alcanzado el equilibrio entonces se considera una densidad uniformemente distribuida, es decir que es una distribución constante. Con esta aclaración la ecuación de evolución para la perturbación se escribe a continuación de la siguiente manera:

$$\partial_t \delta\rho(k, t) + k^2 D_0 \delta\rho(k, t) = -ik_i \left[\rho_0 F_i(k) + \int_q \delta\rho(q, t) F_i(k - q) \right] \quad (3.15)$$

La elección de ρ_0 como una distribución en equilibrio ha simplificado significativamente el problema.

Como se ha dicho anteriormente al introducir la influencia de $F(k)$ se generan fuertes acoplamientos entre $F(k)$ y la distribución que evoluciona para alisar las pequeñas rugosidades generadas por este. Estos acoplamientos son de carácter no lineal como se aprecia en (3.15). En ausencia de $F(k)$ (3.15) tiene la forma

$$\partial_t \delta\rho^{(0)} + D_0 k^2 \delta\rho^{(0)} = 0,$$

y se recupera la forma de la difusión libre. En ausencia de contribuciones no lineales diremos que:

$$\partial_t \delta\rho^{(1)}(k, t) + D_0 k^2 \delta\rho^{(1)}(k, t) = -ik_i \rho_0^{(0)} F_i(k)$$

Sin embargo al aparecer contribuciones no lineales estas pueden ser parametrizadas como parte de un desarrollo perturbativo⁴. la relación anterior puede ser reescrita de la siguiente manera

$$(\partial_t + D_0 k^2) \delta\rho^{(1)}(k, t) = -ik_i \rho_0^{(0)} F_i(k)$$

Donde $L_0 = (\partial_t + D_0 k^2)$. Hasta este punto el problema es lineal, al hacer actuar el operador L_0 sobre $\delta\rho^{(1)}$ se obtiene una función $G_0(k, t)$ que propaga el valor dado por la fuente, es decir la distribución en equilibrio redistribuyéndose al accionar el campo de las rugosidades. Volvamos de nuevo a la ecuación (3.15), pero ahora parametrizando los órdenes superiores como perturbaciones de un parámetro λ , en (3.15) $\lambda = 1$. Para resolver esta ecuación será útil nuevamente aplicar la transformada de Fourier para mapear esta ecuación al espacio de las frecuencias ω con el fin de manejar una ecuación algebraica. Al hacer esto se obtiene

$$-i\omega \delta\rho(k, \omega) + D_0 k^2 \delta\rho(k, \omega) = -ik_i \left[2\pi \rho_0 \delta(\omega) F_i(k) + \lambda \int_q \delta\rho(q, \omega) F_i(k - q) \right]$$

De esta expresión se puede despejar la distribución $\delta\rho(k, \omega)$, también se observa que ahora sobre ella actúa un operador expresado en función de momentos y frecuencias $L_0 = (-i\omega + D_0 k^2)$

$$(-i\omega + D_0 k^2) \delta\rho(k, \omega) = -ik_i \left[2\pi \rho_0 \delta(\omega) F_i(k) + \lambda \int_q \delta\rho(q, \omega) F_i(k - q) \right]$$

Sabemos que $L_0^{-1} = (-i\omega + D_0 k^2)^{-1} = G_0(k, \omega)$, actuando sobre la ecuación a orden (0), es decir libre de interacciones no lineales, se tiene:

$$\delta\rho^{(0)}(k, \omega) = -2\pi i G_0 \rho_0^{(0)} \delta(\omega) k_i F_i(k) \quad (3.16)$$

A primer orden la solución para $\delta\rho(k, \omega)$ es:

$$\delta\rho(k, \omega) = -2\pi i G_0 \rho_0^{(0)} \delta(\omega) k_i F_i(k) - \lambda i G_0 k_i \int_q \delta\rho(q, \omega) F_i(k - q) \quad (3.17)$$

Y se observa que la solución $\delta\rho(k, \omega)$ depende de ella misma, así, como con las matrioskas¹, la solución se encapsula en si misma iterativamente de manera

⁴Consultar Apéndice 7.2.1

¹La matrioska o muñeca rusa son unas muñecas tradicionales rusas creadas en 1890, cuya originalidad consiste en que se encuentran huecas por dentro, de tal manera que en su interior albergan una nueva muñeca, y ésta a su vez a otra, y ésta a su vez otra

infinita. La solución a un desarrollo perturbativo como este se ha estudiado siendo la solución de la forma:

$$\phi(x) = [G_0 - \lambda G_0 L_I G] F$$

Donde G se le conoce como el *Propagador de Dyson*. al identificar el segundo término de la ecuación $\lambda i G_0 k_i \int_q \delta \rho F_i(k - q)$ con $\lambda G_0 L_I G F$ se puede escribir la solución a todos los órdenes de acuerdo con el desarrollo perturbativo según el Apéndice 7.2.1.

3.2.1. Análisis dimensional

En la distribución de densidades de masa (3.17) aparecen una serie de parámetros que son: el coeficiente de difusión (D_0), las intensidades de correlación de fuerzas (γ_l, γ_t) y λ que parametriza el orden de la perturbación $\mathbf{F}(\mathbf{k})$. Sin embargo no todos ellos influyen en el sistema individualmente sino que lo hacen agrupados a través de un verdadero parámetro de interacción Λ . Para conseguir el verdadero parámetro de interacción hay que llevar (3.17) a una forma adimensional. El objetivo de adimensionalizar la ecuación de distribución es conseguir que los parámetros aparezcan en la ecuación formando esos grupos, logrando así reducir el número de parámetros significativos del problema.

Considérese de la ecuación (3.14) en su forma diferencial en el espacio de coordenadas y tiempo y parametrizado por λ :

$$\partial_t \delta \rho(x, t) - D_0 \nabla^2 \delta \rho(x, t) = -(\rho_0 \nabla \cdot \mathbf{F}(x) + \lambda \nabla \cdot \delta \rho(x, t) \mathbf{F}(x))$$

Hagamos el siguiente cambio de variables (donde las variables primadas son por construcción adimensionales), adimensionalizan (3.14): $t' = at$, $\delta \rho(t') = b \delta \rho'(t')$ y $F = c F'$. Es importante notar que el cambio de variables no incluye a las dimensiones espaciales. Al aplicar este cambio de variables la ecuación adquiere la siguiente forma:

$$(b/a) \partial_{t'} \delta \rho'(x, t') - b D_0 \nabla^2 \delta \rho'(x, t') = -(c \rho_0 \nabla \cdot \mathbf{F}'(x) + \lambda b c \nabla \cdot \delta \rho'(x, t') \mathbf{F}'(x))$$

Multiplicando toda la expresión por a/b y considerando que $a = 1/D_0$, se convierte en:

$$\partial_{t'} \delta \rho'(x, t') - \nabla^2 \delta \rho'(x, t') = -(c/D_0 b) \rho_0 \nabla \cdot \mathbf{F}'(x) + \lambda (c/D_0) \nabla \cdot \delta \rho'(x, t') \mathbf{F}'(x)$$

Ahora se puede fijar alguna de las dos constantes restantes y entonces la otra quedaría inmediatamente condicionada. Para poder determinar el valor de la constante restante considérese que $\langle F_i(x_1) F_j(x_2) \rangle = \Phi_{ij}(x_2 - x_1)$, y al aplicar

el cambio de variable propuesto y al proyectar esta expresión sobre el espacio de los momentos k se obtiene:

$$c^2 \langle F'_i(k_1) F'_j(k_2) \rangle = \gamma_{ij} (2\pi)^d \delta^d(k_1 + k_2)$$

A partir de ahora llamaremos $\gamma_{ij}(k)$ a la función $\Phi_{ij}(k)$. Tomando esto en consideración, se determina el valor de c , siendo así $c = \gamma^{1/2}$, donde γ puede ser $(\gamma_l \gamma_t)$. Entonces:

$$\partial_t \delta \rho'(x, t) - \nabla^2 \delta \rho'(x, t) = - \left(\nabla \cdot \mathbf{F}'(x) + \frac{\lambda \gamma^{1/2}}{D_0} \nabla \cdot \delta \rho'(x, t) \mathbf{F}'(x) \right)$$

Para que se cumpla que todas las constantes sean absorbidas en un solo parámetro de interacción se debe de tomar $b = \rho_0 \gamma^{1/2} / D_0$, para que el coeficiente que acompaña al primer término del lado derecho de la ecuación sea igual a uno. Se consigue así agrupar a todas las constantes en el verdadero parámetro de interacción y se define como:

$$\Lambda = \frac{\lambda \gamma^{1/2}}{D_0} \quad (3.18)$$

Su valor depende de la intensidad de la correlación de fuerzas (γ_l, γ_t) , de λ y del coeficiente de (D_0) . El parámetro Λ generará un nuevo conjunto de coeficientes que caracterizarán, después de aplicar ciertas transformaciones que de hecho definen las transformaciones del Grupo de renormalización: $\{\lambda, D_0, \gamma_l, \gamma_t\} \rightarrow \{\lambda', D', \gamma'_l, \gamma'_t\}$, que hará correcciones al comportamiento difusivo a todos los órdenes perturbativos.

Estamos interesados en conocer como se corrige el comportamiento del coeficiente de difusión, por ejemplo, a través de Λ y ahora se exhibirá cómo.

La razón D/D_0 es a orden cero igual a uno, pero a órdenes superiores se deben generar correcciones debidas a los efectos no lineales. Es decir

$$\frac{D}{D_0} = 1 + \Lambda^2 \int_q \psi(q) + \dots \quad (3.19)$$

Es necesario conocer las dimensiones de Λ para poder determinar las dimensiones y el valor de $\psi(k)$ y poder tener un desarrollo perturbativo adecuado para generar las correcciones de difusividad. Dado que (3.17) depende de $(D_0, \gamma_l, \gamma_t, \lambda)$ al conocer las dimensiones de éstas se podrá determinar las dimensiones de (3.18). Para determinar las dimensiones del coeficiente de difusión de (1.6) se puede inferir que

$$[D_0] = \left[\frac{\partial}{\partial t} \right] \left[\frac{d^2}{dx^2} \right]^{-1} = L^2 T^{-1}$$

Las dimensiones de γ se obtienen de la correlación de fuerzas $\langle F_i(x_1)F_j(x_2) \rangle$, se sabe también que las dimensiones de la transformada de Fourier de $F(k)$ son $[F(k)] = L^d[F(x)]$, donde las dimensiones del campo vectorial $F(x)$ son $[F(x)] = LT^{-1}$, ahora de (3.2) se puede hacer un análisis dimensional para determinar sus dimensiones

$$\langle [F_i(k_1)] [F_j(k_2)] \rangle = [\gamma_{ij}] [\delta^d(k_1 + k_2)]$$

Donde

$$[\delta^d(k_1 + k_2)] = L^d$$

Al sustituirla en la relación de dimensiones para la correlación de fuerzas se tiene:

$$L^{2d+2}T^{-2} = [\gamma_{ij}]L^d$$

Despejando $[\gamma_{ij}]$ sus dimensiones son

$$[\gamma_{ij}] = L^{d+2}T^{-2}$$

Ahora ya podemos conocer las dimensiones del verdadero parámetro de interacción Λ definido en (3.18), sus dimensiones son

$$[\Lambda] = \left[\lambda \frac{\gamma^{1/2}}{D_0} \right] = L^{(d-2)/2}$$

Ahora que se conocen las dimensiones de Λ^2 se puede determinar las dimensiones de $\psi(k)$, que serán, debido a que la razón es adimensional, dimensiones inversas a las de Λ^2 , es decir $L^{-d}L^2$, esto implica que la forma de $\psi(k)$ es:

$$\int_q \psi(q) = \int \frac{d^d q}{q^2} \quad (3.20)$$

Las correcciones al nuevo coeficiente de difusión estarán dadas por:

$$\frac{D}{D_0} = 1 + \Lambda^2 \int \frac{d^d q}{q^2} + \dots$$

que también se puede escribir convenientemente como:

$$\frac{D}{D_0} = 1 + \Lambda^2 a_d \int q^{d-3} dq + \dots \quad (3.21)$$

donde a_d es una constante de la que se hablará en el futuro. Se puede notar que para la dimensión $d = 2$, el valor de la integral diverge logarítmicamente, a esto se le conoce como “divergencia en el infrarrojo”. Una corrección de este estilo no resulta muy útil a menos que pueda evadirse este comportamiento asintótico. Usando la técnica conocida como Grupo de Renormalización (RG), se evade este comportamiento asintótico evaluando el efecto que tienen los momentos altos localizados en una cáscara sobre el resto de los momentos bajos, del desarrollo de Fourier de los campos escalares y vectoriales. De esta manera se obtienen las ecuaciones de recurrencia que corrigen el valor de las constantes que caracterizan al sistema y la evolución de éste.

En el siguiente capítulo se explora esta técnica y su aplicación al problema de la difusión a través de nuestro medio amorfo.

Capítulo 4

Grupo de renormalización

La cuestión principal concerniente a los fenómenos críticos se concentra en explicar cómo los acoplamientos físicos en escalas pequeñas (espaciales ó temporales), generan fenómenos perceptibles a escalas mayores. La respuesta recae en la existencia de un comportamiento colectivo organizado jerárquicamente desde lo microscópico hasta las escalas macroscópicas observables.

El mecanismo descrito anteriormente se denomina el “efecto dominó”, por analogía con el caso de una larga hilera de fichas de dominó, cuando uno de ellas cae causa un efecto en cadena en el que las demás caerán sobre una distancia muy larga. El término “efecto bola de nieve”, expresa una noción similar, que da una idea del efecto de una pequeña perturbación localizada inicialmente en el conjunto del sistema que se va acrecentando después de un largo tiempo.

El análisis de los sistemas críticos debe ser global y no lidiar con los detalles microscópicos, pero si con la forma en que éstos cooperan; las diferentes escalas deben estar relacionadas entre sí de tal manera que puedan hacerse explícitos los invariantes de escala.

En general, los sucesos que se diferencian por una gran disparidad de tamaños tienen poca influencia mutua; no hay nada en común entre ellos y por tanto los fenómenos asociados a cada escala pueden tratarse de manera independiente, el éxito que han tenido casi todas las teorías usuales de la física ha consistido en centrarse en un intervalo limitado de escalas de longitud. Pero existe una clase de fenómenos en cuya explicación concurren, con igual importancia, sucesos de muchas escalas de magnitud. Considere por ejemplo el caso en el que se calienta agua hasta el punto de ebullición a una presión de 217 atmósferas. A esta presión el agua solo empieza a coexistir en dos fases (líquida y gaseosa), cuando la temperatura alcanza los 647 grados Kelvin. Esta combinación de presión y temperatura define el punto crítico del agua, donde desaparece la distinción entre líquido y gas; a presiones mayores hay una única fase fluida indiferenciada, y el agua no puede hacerse hervir por mucho que se eleve la temperatura. Cerca del punto crítico el agua genera fluctuaciones de su densidad a todas las escalas.

La fluctuaciones toman la forma de gotas de líquido completamente mezcladas con burbujas de gas, y hay tanto gotas como burbujas de todos los tamaños, desde simples moléculas hasta el volumen de la muestra. En el punto crítico, precisamente, la escala de las mayores fluctuaciones se hace infinita, sin que disminuyan las fluctuaciones menores.

El método conocido como *Grupo de Renormalización* (RG), es usado para abordar problemas en los que concurren muchas escalas de magnitud. El Grupo de Renormalización no es una teoría descriptiva de la naturaleza, sino un método general de calcular teorías. Se aplica no solo a un fluido en el punto crítico sino también a un material ferromagnético cerca de la Temperatura de Curie, o a una mezcla de líquidos a la temperatura en la que se hacen totalmente miscibles, etc. Otros problemas apropiados incluyen el flujo turbulento, el establecimiento de la superconductividad y superfluidez, la formación de polímeros y enlace de quarks. La esencia del Grupo de Renormalización consiste en desglosar un problema sumamente complejo en una serie de pasos menores y más manejables. Un grupo en matemática es un conjunto de transformaciones que cumple con un requerimiento especial: el producto de cualquier par de transformaciones debe también ser miembro del conjunto, por ejemplo las rotaciones. Ello significa, en el caso del Grupo de Renormalización, que el procedimiento puede iterarse indefinidamente, ya que aplicar el procedimiento dos veces es equivalente a aplicar el producto de las transformaciones. Hablando con propiedad, el Grupo de Renormalización no es más que un semigrupo, porque el inverso de la transformación no está definido.

Esta técnica tiene sus orígenes en la teoría cuántica de campos y la mecánica estadística de transiciones de fase, sistemas que no evolucionan en el tiempo, sin embargo también se puede aplicar esta técnica al estudio de sistemas que si evolucionan en el tiempo, esta herramienta es conocida como *Grupo de Renormalización Dinámica* o (RGD) tal es el caso de los fenómenos de transporte fuera de equilibrio. Esencialmente aplicar sobre un sistema el grupo de renormalización consiste en aplicar sobre éste dos transformaciones: la primera consiste en borrar detalles del sistema original y el segundo consiste en reescalar el sistema para que este luzca idéntico al sistema del que partió. Las transformaciones del grupo de Renormalización no son únicas y dependen enteramente del sistema de estudio.

Mientras que Maris y Kadanoff, en un ejemplo muy ilustrativo del uso del RG para un sistema de espines, trabajan en el espacio real en el trabajo de 1978 [19], el problema de la difusión corresponde a una descripción física muy diferente, en el sentido que parte de una ecuación dinámica del tipo de una ecuación de Langevin no lineal. No hay hamiltoniano, no hay función de partición, y se realiza en el espacio de momentos. Los antecedentes del grupo de renormalización dinámico (GRD) se pueden citar con los trabajos de Mazenko [11] al describir la evolución dinámica de sistemas magnéticos.

Resulta más claro ver con estas gráficas el carácter iterativo de la solución $\delta\rho(k, \omega)$ y resulta más fácil trabajar con ellas. Al sustituir la solución dentro de ella misma se obtiene la siguiente ecuación:

$$\Rightarrow = \text{---}\circ + \text{---}\bullet\text{---}\circ + \text{---}\bullet\text{---}\bullet\text{---}\circ + \dots \quad (4.2)$$

En esta última gráfica se muestra la solución general iterada solo hasta el segundo orden. En general no se sabe como resolver ecuaciones de movimiento no lineales, lo mejor que se puede hacer, en la mayoría de los casos, es construir soluciones perturbativas como potencias de las interacciones no lineales (potencias de λ). Existen métodos bastante sofisticados para ello, tal como lo hace Halley en [10] y McComb en [6].

La primera transformación del grupo de renormalización consistirá en incluir el efecto que tienen los momentos sobre una cáscara, en los momentos por debajo de ésta, renormalizando así el problema, al promediar sobre este nuevo sistema y resolver las integrales se logrará borrar detalles. Esto dará paso a nuevos coeficientes intermedios característicos de este proceso difusivo ($D^I, \gamma_t^I, \gamma_t^I, \lambda^I$). Los momentos altos se localizan en una cáscara cuya frontera se encuentra en el momento de corte k_c , los momentos por debajo del momento de corte tendrán el valor $e^{-\ell}k_c$, mientras que los momentos al interior de la cáscara tienen sus valores en el intervalo: $e^{-\ell}k_c < k < k_c$, donde $\ell > 1$, como se muestra en la figura (4.1).

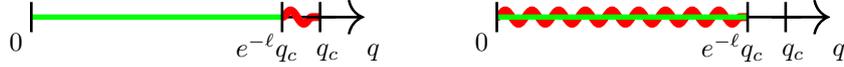


Figura 4.1: Espectro de momentos. En Figura 4.2: Inclusión de los momentos rojo; cáscara de momentos ($\{e^{-\ell}q_c < q < q_c\}$). En verde; momentos debajo de ésta. de la cáscara.

Debido al carácter no lineal de la solución introducido por la convolución, que a pesar de que $\delta\rho(k, \omega)$ pueda estar evaluada en un momento determinado k (alto ó bajo), involucra una integral sobre todos los posibles momentos, esto hace posible que los momentos bajos influyan en los altos y viceversa, haciendo este un problema de muchas escalas de magnitud. La convolución es un proceso en el que se conserva el momento (como se muestra en la siguiente imagen), es decir que si por la izquierda entra un momento bajo por la derecha hay dos posibilidades: que los momentos salientes sean ambos momentos bajos ó ambos momentos altos, si por el contrario entra un momento alto las posibilidades en la salida son dos momentos altos o un momento alto y un momento bajo. Se señalará con una marca los momentos altos.

Sabiendo esto se puede dividir la solución en una parte que solo dependa de los momentos bajos y otra que dependa de los momentos sobre la cáscara. Para los momentos bajos, momentos por debajo de la cáscara se tiene:

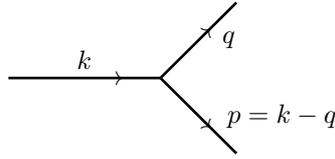


Figura 4.3: Diagrama de conservación de momento.

$$\Rightarrow = \text{---}\circ + \text{---}\bullet\Rightarrow + \text{---}\bullet\Rightarrow\text{---} \quad (4.3)$$

La solución que depende de los momentos altos se expresa, considerando la conservación de los momentos, como:

$$\Rightarrow\text{---} = \text{---}\text{---} + \text{---}\bullet\Rightarrow\text{---} + \text{---}\bullet\Rightarrow\text{---} + \text{---}\bullet\Rightarrow\text{---} \quad (4.4)$$

La diagonal que corta a las gráficas anteriores sirve para etiquetarlas como soluciones con argumentos en los momentos altos. Para introducir la influencia de los momentos altos sobre los bajos, sustituyendo la solución para altos momentos en la solución para bajos momentos (que depende también de los altos momentos como se ve en (4.3)), y se generará una serie de gráficas que al ser promediadas en los momentos altos, es decir sobre las rugosidades muy finas localizadas en la cáscara, obtenemos correcciones que vestirán a las soluciones. Mientras más alto sea el orden de λ , estas correcciones se vestirán con nuevas interacciones. Al hacer esto se obtiene:

$$\Rightarrow = \text{---}\circ + \text{---}\bullet\Rightarrow + \text{---}\bullet\Rightarrow\text{---} + \text{---}\bullet\Rightarrow\text{---}\bullet\Rightarrow + \text{---}\bullet\Rightarrow\text{---}\bullet\Rightarrow\text{---} + \text{---}\bullet\Rightarrow\text{---}\bullet\Rightarrow\text{---}\bullet\Rightarrow \quad (4.5)$$

Esta última gráfica resulta de colocar la solución a la primera iteración ($\lambda = 2$). Se puede ver que aún dependen de (4.4).

Al promediar (4.5) sobre las fuerzas que involucran momentos de entrada altos $\langle F_i(k_1)F_j(k_2) \rangle$, y se logra borrar detalles que fluctúan espacialmente de manera rápida, las rugosidades finas contenidas en la cáscara. Es como si se mirase al sistema a través de una lente desenfocada, en que los detalles pequeños se debilitan pero los mayores no quedan afectados. Hay nuevos elementos cuya representación gráfica tenemos que inventar. El siguiente cambio de forma no compromete en forma alguna la información retenida en las gráficas, será de gran ayuda al realizar cálculos.

De manera esquemática así es como queremos que luzca el promedio de dos fuerzas:

Al aplicar esta última condición a (4.7) adquiere la siguiente representación gráfica:

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \dots \quad (4.10)$$

donde la línea más oscura representa al nuevo propagador $G(k, \omega)$. De esta gráfica se observa que:

$$G = G_0 + G_0 \Sigma G \quad (4.11)$$

La ec. (4.11) se utiliza para calcular el propagador de Dyson (ver Apéndice 7.2.1.), donde Σ es la gráfica que está comprendida entre los dos propagadores G_0 y G en el segundo término. Se puede conocer el valor de Σ si se multiplica de un lado por $(G_0)^{-1}$ y por el otro por $(G)^{-1}$ y despejando, es decir:

$$\Sigma = G_0^{-1} - G^{-1} \quad (4.12)$$

Si se considera la forma del propagador $G(k, \omega) = (-i\omega + D(k)k^2)^{-1}$, el valor de Σ es:

$$\Sigma = (-i\omega + D_0 k^2) - (-i\omega + D(k)k^2) = (D_0 - D(k))k^2,$$

es decir:

$$\Sigma = \delta D k^2 \quad (4.13)$$

La representación del segundo miembro de (4.10), el término que incluye a la gráfica de interés, en un lenguaje formal es la siguiente:

$$G_0 \Sigma G = -i k_i \lambda G_0(k, \omega) \int_q \int_p G(k-q) \langle F_i(q) F_j(p) \rangle \{-i(k-q)_j \lambda\} G(k-q-p, \omega)$$

Recuerde que esta integral en p y en q se realizan sobre la cáscara. Al imponer la condición de que $p = -q$, consecuencia de la conservación de momento dentro de la gráfica y al “amputar” los propagadores que entran y salen a ambos lados de la gráfica se puede escribir a Σ de la siguiente manera:

$$\text{---} \text{---} \text{---} = -\lambda^2 \int_{e^{-\ell} k_c}^{k_c} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} k_i G_0(k-q) \langle F_i(q) F_j(-q) \rangle (k-q)_j \quad (4.14)$$

donde $G_0(k, \omega) = (-i\omega + D_0 k^2)^{-1}$, un propagador, cuyo dependencia es en (k, ω) , está dentro de los altos momentos, está representado como una línea que une dos vértices, de esta manera (4.14) se transforma en:

$$\begin{aligned} \text{Diagrama} &= -\lambda^2 \int_{e^{-\ell k_c}}^{k_c} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} k_i (-i\omega + D_0(k-q)^2)^{-1} \langle F_i(q) F_j(-q) \rangle (k-q)_j \\ & \quad (4.15) \end{aligned}$$

Integrando esta última expresión se obtiene¹:

$$\text{Diagrama} = \left\{ C_d \left[-\frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0} \frac{1}{d} + \frac{\lambda^2 \gamma_t}{D_0} \frac{d-1}{d} \right] \int_{e^{-\ell k_c}}^{k_c} q^{d-3} dq \right\} k^2 \quad (4.16)$$

Por lo tanto se tiene que $\delta D(k)$ es:

$$\delta D = C_d \left[-\frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0} \frac{1}{d} + \frac{\lambda^2 \gamma_t}{D_0} \frac{d-1}{d} \right] \int_{e^{-\ell k_c}}^{k_c} q^{d-3} dq \quad (4.17)$$

Como se ha señalado, gracias al análisis dimensional, la razón entre estos coeficientes de difusión deberá ser de la forma:

$$\frac{D^I}{D_0} = 1 + \frac{\delta D}{D_0} \quad (4.18)$$

Es decir, las correcciones generadas para los coeficientes de difusión intermedios (longitudinales y transversales), son:

$$D_l^I = D_0 \left\{ 1 - \frac{1}{d} \frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} C_d \int_{e^{-\ell k_c}}^{k_c} q^{d-3} dq \right\} \quad (4.19a)$$

$$D_t^I = D_0 \left\{ 1 + \frac{(d-1)}{d} \frac{\lambda^2 \gamma_t}{D_0^2} C_d \int_{e^{-\ell k_c}}^{k_c} q^{d-3} dq \right\} \quad (4.19b)$$

Nótese que la inclusión de la influencia de la cáscara en los momentos bajos y el borrado de detalles ha generado dos nuevos parámetros asociados al coeficiente de difusión, dichos coeficientes incluyen información sobre las fuerzas de deriva longitudinales y transversales debidas al campo vectorial $F(x)$.

¹El cálculo formal y explícito del coeficiente de difusión intermedio se detalla en el apéndice (5.3.2).

4.1.3. Teorema de fluctuación disipación

Queremos obtener otra propiedad y sus correcciones. ¿Que ocurre al promediar dos soluciones sin interacciones no lineales, con la forma de (3.16), confrontadas, es decir con argumentos opuestos: una en k y otra en $-k$?

$$\langle \text{---} \circ \circ \text{---} \rangle$$

Basándonos en las reglas ya establecidas:

$$\text{---} \textcircled{\circ} \text{---} = -4\pi^2 \rho_0^2 k_i G_0(k, \omega) (\delta(\omega)) \langle F_i(k) F_j(k') \rangle (\delta(-\omega)) G_0(k', -\omega) k_j \quad (4.20)$$

Al introducir la correlación de fuerzas, se tiene:

$$\text{---} \textcircled{\circ} \text{---} = -\rho_0^2 (2\pi)^{d+2} \frac{\delta(\omega) \delta(-\omega)}{(-i\omega + D_0 k^2)} \frac{k_i \gamma_{ij} \delta^d(k + k') k'_j}{(i\omega + D_0 k'^2)} \quad (4.21)$$

Considerando la forma de los operadores de proyección longitudinales y transversales (3.7), y que los argumentos de las soluciones que entran son opuestos esta ecuación se reduce a:

$$\text{---} \textcircled{\circ} \text{---} = \rho_0^2 (2\pi)^{d+2} \delta(\omega) \delta(-\omega) \left(\frac{\gamma_l k^2}{\omega^2 + D_0^2 k^4} \right) \delta^d(k + k') \quad (4.22)$$

De la cuál hay que resaltar un par de cosas, la primera es que a orden cero no aparecen contribuciones transversales debidas al campo $F(k)$, la segunda es que se establece una relación entre la intensidad de la correlación de fuerzas y el coeficiente de difusión, que es de hecho el teorema de fluctuación-disipación que se estudió en el problema de Langevin. Establece la relación que existe entre la disipación y la influencia que el medio, un medio que introduce irregularidades, tiene sobre ésta.

Sin embargo al “amputar” las “patas” del dibujo (término grotesco pero ilustrativo), con lo que a patas se refiere la estructura con forma: $-i2\pi\rho_0 G_0(k)\delta(\omega)k_i$. Se recupera la forma que debe tener la correlación de fuerzas:

$$\textcircled{\circ} = (2\pi)^d \delta^d(k + k') \gamma_{ij}(k) \quad (4.23)$$

Haber recuperado este resultado será útil en la siguiente sección donde se procederá a calcular las correcciones a la correlación de fuerzas debidas al proceso de renormalización.

4.1.4. Coeficiente de correlación renormalizado

Existen otras cantidades físicas que caracterizan al comportamiento difusivo que también son revestidas por $F(k)$. En esta sección se estudiará como se

revisten las intensidades de correlación de fuerzas y las consecuencias que esto conlleva. La correlación a bajos momentos corregida por la influencia de los altos momentos se obtiene enfrentando, como se hizo en (4.2.3.), dos distribuciones, revestidas por las interacciones, con argumentos opuestos y promediándolas en la cáscara ($\langle \Rightarrow \Leftarrow \rangle$). Al hacer esto se recupera la forma de la correlación revestida por las interacciones, y veremos que esta toma la siguiente forma:

$$\langle F_i(k)F_j(k') \rangle = (2\pi)^d \delta^d(k+k') \left(\gamma_{ij}^{(0)}(k) + \delta\gamma_{ij}^{(1)}(k) + \delta\gamma_{ij}^{(2)}(k) \right) \quad (4.24)$$

El término entre paréntesis aporta correcciones al tensor $\gamma_{ij}(k)$, que contiene a los proyectores longitudinales y transversales. Resultó del producto de los diagramas y se integrará sobre la cáscara quedando esquemáticamente:

$$\langle F_i F_j \rangle = \odot + \text{diagrama 1} + \text{diagrama 2} + \dots$$

Donde el segundo y tercer término de la ecuación están relacionados con las contribuciones de promedios de cuatro fuerzas correlacionadas, según el Teorema de Wick², una descripción más precisa se puede leer en [6].

Las expresiones que se calcularon para el segundo y tercer diagrama de esta última ecuación son³:

$$\text{diagrama 1} = (2\pi)^d \delta^d(k+k') \left\{ \frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \left[\frac{\gamma_l}{d} + \gamma_t \frac{d-1}{d} \right] \int \frac{d^d q}{q^2} \right\} \delta_{ij} \quad (4.25)$$

$$\text{diagrama 2} = (2\pi)^d \delta^d(k+k') \left\{ -\frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \left[\frac{\gamma_l}{d} \right] \int \frac{d^d q}{q^2} \right\} \delta_{ij} \quad (4.26)$$

Al sumar (4.25) y (4.26) a la correlación inicial, la correlación corregida (4.24) se escribe entonces de la siguiente manera:

$$\langle F_i(k)F_j(k') \rangle = (2\pi)^d \delta^d(k+k') \left\{ \gamma_{ij}(k) + \left[\frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \left(\gamma_t \frac{d-1}{d} \right) \int \frac{d^d q}{q^2} \right] \delta_{ij} \right\} \quad (4.27)$$

² El Teorema de Isserli o Teorema de Wick es una fórmula que permite calcular los momentos de altos ordenes de una distribución normal multivariada en términos de su matriz covariante. Este teorema es particularmente importante en física de partículas donde se la conoce como Teorema de Wick después del trabajo de Wick de 1950. A grosso modo el teorema dice que si $\{F_1, F_2, \dots, F_{2n}\}$ es un vector de variables aleatorias entonces: $\langle F_1 F_2 \dots F_{2n} \rangle = \sum_{ij} \langle F_i F_j \rangle$,

$\langle F_1 F_2 \dots F_{2n-1} \rangle = 0$

³En el apéndice 5.3.2. se hace un desglose detallado de como se llegó a estos resultados.

El término entre las llaves es el tensor de intensidad de fuerzas de deriva intermedio, también se puede escribir como:

$$\gamma_{ij}^I(k) = \gamma_l \left\{ \frac{k_i k_j}{k^2} \right\} + \gamma_t \left\{ \left(1 + \Lambda_l^2 \frac{d-1}{d} \int_q \frac{d^d q}{q^2} \right) \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right\} \quad (4.28)$$

Donde Λ_l tiene la estructura (3.18). El tensor $\gamma_{ij}(k)$ también se puede escribir convenientemente como:

$$\gamma_{ij}(k) = (\gamma_l - \gamma_t) \frac{k_i k_j}{k^2} + \gamma_t \delta_{ij} \quad (4.29)$$

Es de esperarse que la corrección $\gamma_{ij}^I(k)$ conserve esta forma al sumarse las correcciones a las intensidades de correlaciones de fuerzas, es decir:

$$\gamma_{ij}^I(k) = (\gamma_l - \gamma_t + \delta\gamma_l - \delta\gamma_t) \frac{k_i k_j}{k^2} + (\gamma_t + \delta\gamma_t) \delta_{ij} \quad (4.30)$$

Sin embargo el tensor intermedio que se obtiene de estudiar las gráficas (4.28), se puede escribir convenientemente como:

$$\gamma_{ij}^I(k) = (\gamma_l - \gamma_t) \frac{k_i k_j}{k^2} + \gamma_t \left\{ 1 + \Lambda_l^2 \frac{d-1}{d} \int \frac{d^d q}{q^2} \right\} \delta_{ij} \quad (4.31)$$

Al comparar las ecuaciones (4.30) y (4.31), resulta notorio que:

$$\delta\gamma_l - \delta\gamma_t = 0 \quad (4.32)$$

Sin embargo la corrección transversal que se obtiene de las gráficas es:

$$\delta\gamma_t = \gamma_t \left(\frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \frac{d-1}{d} \right) \int \frac{d^d q}{q^2} \quad (4.33)$$

Es evidente ahora que al despejar $\delta\gamma_l$ de (4.32), se obtiene:

$$\delta\gamma_l = \gamma_l \left(\frac{\lambda^2 \gamma_t}{D_0^2} \frac{d-1}{d} \right) \int \frac{d^d q}{q^2} \quad (4.34)$$

Esto significa que tanto $\gamma_l^I(k)$ como $\gamma_t^I(k)$ evolucionan de la misma manera. Pueden ser escritos de la siguiente manera:

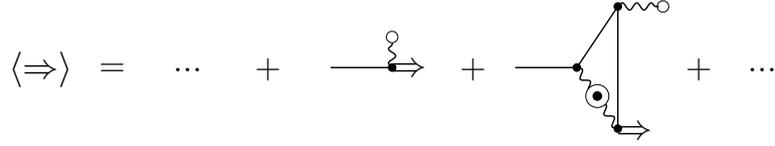
$$\gamma_t^I = \gamma_t \left\{ 1 + \frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \frac{d-1}{d} \int \frac{d^d q}{q^2} \right\} \quad (4.35a)$$

$$\gamma_l^I = \gamma_l \left\{ 1 + \frac{\lambda^2 \gamma_t}{D_0^2} \frac{d-1}{d} \int \frac{d^d q}{q^2} \right\} \quad (4.35b)$$

Sin embargo para estas últimas constantes intermedias se nota que hay un entrecruzamiento de efectos longitudinales y transversales.

4.1.5. Vértice de interacción renormalizado

Del promedio de la solución de bajos momentos se puede ver que el vértice, la estructura ligada al parámetro perturbativo λ , también es revestida como se muestra a continuación:



Al observar la expresión anterior es fácil ver que al vértice que acopla la fuerza $F(k)$ con la solución $\delta\rho(k, \omega)$, a través de la convolución, se le suma una estructura que generará correcciones a éste.

$$(4.36)$$

Esta ecuación (4.36) es completamente equivalente a.

$$-ik_i \lambda^I = -ik_i \lambda + (-ik_i) \delta\lambda \quad (4.37)$$

El objetivo de esta sección es calcular la corrección $\delta\lambda$, para ello se escribe la representación formal de la gráfica ligada a la corrección, y al evaluarla⁴ se tiene:

$$(4.38)$$

En esta expresión se aprecia la forma usual del vértice $(-ik_j \lambda)$, modificada por las correcciones debidas al campo $F(k)$, estas correcciones son las encerradas entre paréntesis cuadrados, es decir:

$$\delta\lambda = \int \frac{1}{d} \left(-\frac{\lambda^3 \gamma_l}{D_0^2} \right) \frac{d^d q}{q^2} \quad (4.39)$$

El parámetro perturbativo intermedio es entonces:

⁴Al igual que para el coeficiente de difusión y el de correlación intermedios un desglose se hace en el apéndice 5.3.2. Para obtener este cálculo.

$$\lambda_l^I = \lambda \left\{ 1 + \frac{1}{d} \left(-\frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \right) \int \frac{d^d q}{q^2} \right\} \quad (4.40)$$

La corrección del vértice debido a la influencia de los altos momentos es solo de carácter longitudinal, lo cual no sería de sorprender si se considera que a orden cero y sin la influencia de la cáscara la forma de la solución es de la forma $k_i F_i$.

En resumen el nuevo conjunto, cuyos elementos son los coeficientes intermedios que caracterizan al sistema, es:

$$\begin{aligned} D_l^I &= D_0 \left\{ 1 - \frac{1}{d} \frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \int_{e^{-\ell} k_c}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2} \right\} \\ D_t^I &= D_0 \left\{ 1 + \frac{\lambda^2 \gamma_t}{D_0^2} \frac{d-1}{d} \int_{e^{-\ell} k_c}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2} \right\} \\ \gamma_l^I &= \gamma_l \left\{ 1 + \frac{\lambda^2 \gamma_t}{D_0^2} \frac{d-1}{d} \int_{e^{-\ell} k_c}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2} \right\} \\ \gamma_t^I &= \gamma_t \left\{ 1 + \frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \frac{d-1}{d} \int_{e^{-\ell} k_c}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2} \right\} \\ \lambda_l^I &= \lambda \left\{ 1 + \frac{1}{d} \left(-\frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \right) \int_{e^{-\ell} k_c}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2} \right\} \end{aligned}$$

Hasta este punto se ha concluido una etapa del proceso que fue renormalizar el sistema a uno nuevo donde los momentos bajos sufren la influencia de los altos, el siguiente paso consiste en reescalar este sistema intermedio, por ende los coeficientes que lo caracterizan, para recuperar uno idéntico e indistinguible en estructura al sistema del que se partió, con la ventaja de haber recuperado información sobre la influencia de la cáscara de momentos.

4.2. Reescalamiento

La influencia de los momentos de la cáscara viste las constantes del sistema al borrar las rugosidades introducidas por $F(k)$. Esta fue la primera transformación del grupo de renormalización, en este proceso se redujeron los grados de libertad del sistema, los nuevos momentos de este sistema renormalizado están definidos en un intervalo reducido ($0 < k < e^{-\ell} k_c$). Es por esta razón que se debe reescalar los nuevos momentos y frecuencias del sistema, este reescalamiento es el segundo paso que define al grupo de renormalización, la intención es recuperar el sistema original, que será virtualmente idéntico al que se partió en un principio, con la ventaja de se ha encontrado la manera en la que las cáscaras influyen en

las constantes del problema. Estas constantes son el coeficiente de difusión, las intensidades de correlaciones de fuerzas (longitudinales y transversales) y la constante de acoplamiento con el medio. Así la segunda parte del grupo de renormalización que escala al sistema lo hace introduciendo los nuevos momentos con la siguiente transformación:

$$k' = e^\ell k \quad (4.41)$$

donde ℓ es un parámetro asociado al “espesor” de la cáscara. Las frecuencias también serán “reescaladas” al ser aplicadas sobre ellas la siguiente transformación:

$$\omega' = e^{\alpha(\ell)} \omega \quad (4.42)$$

Aplicando estos reescalamientos la forma de la distribución de densidades de masa se ve alterada de la siguiente manera:

$$\delta\rho(k, \omega) = \mathcal{L}(\ell) \delta\rho(k', \omega') \quad (4.43)$$

donde los momentos y frecuencias primadas son las nuevas variables reescaladas, las funciones que dependen del parámetro ℓ , es decir $\alpha(\ell)$ y $\mathcal{L}(\ell)$, son funciones aún por determinar. Estudiando estas transformaciones se puede conocer como se reescalan las nuevas constantes intermedias que caracterizarán al nuevo sistema primado.

4.2.1. Coeficiente de difusión reescalado

Es de esperarse que el nuevo propagador conserve su estructura ante estos nuevos cambios de variable, lo que dará luz sobre como se reescala el coeficiente D^I . El propagador intermedio que depende de las variables renormalizadas tiene la forma $G_0^I(k, \omega) = (-i\omega + D^I k^2)^{-1}$. Considerando (4.41), (4.42), y (4.43) aplicados al propagador intermedio se obtiene:

$$G_0^I(k', \omega') = e^{\alpha(\ell)} \left(-i\omega' + \left[e^{\alpha(\ell) - 2\ell} D^I \right] k'^2 \right)^{-1} \quad (4.44)$$

El propagador intermedio y el propagador primado se relacionan de la siguiente manera:

$$G'_0(k', \omega') = e^{-\alpha(\ell)} G_0^I(k, \omega) \quad (4.45)$$

Como el propagador primado conserva su estructura esta debe ser de la forma:

$$G'_0(k, \omega) = (-i\omega' + D' k'^2)^{-1} \quad (4.46)$$

Es decir que el nuevo coeficiente de difusión D' , se reescala como:

$$D' = e^{\alpha(\ell)-2\ell} D^I \quad (4.47)$$

donde D' incluye las correcciones longitudinales y transversales.

4.2.2. Coeficiente de correlación de fuerzas reescalado

Para continuar con el reescalamiento de las demás constantes que caracterizan al sistema será necesario estudiar como se reescalan las fuerzas de deriva, para ello es conveniente aplicar las transformaciones (4.41) y (4.42) a (3.16) y considerar (4.43), las fuerzas se reescalan de la siguiente manera:

$$F'(k') = e^{2\alpha(\ell)-\ell} \frac{F(k)}{\mathcal{L}(\ell)} \quad (4.48)$$

Al incluir este resultado en la definición de correlación de fuerzas (3.3), y tomando en cuenta que una función Delta de Dirac se reescala como:

$$\delta^d(k_1 + k_2) = e^{\ell d} \delta^d(k'_1 + k'_2)$$

La forma reescalada de la correlación de fuerzas es:

$$\langle F'_i(k'_1) F'_j(k'_2) \rangle = (2\pi)^d \left[\frac{\gamma_{ij}}{\mathcal{L}(\ell)^2} e^{4\alpha(\ell)-2\ell+\ell d} \right] \delta^d(k'_1 + k'_2) \quad (4.49)$$

donde el término entre los paréntesis cuadrados corresponde a la nueva intensidad de correlación en el sistema primado, es decir:

$$\gamma' = e^{4\alpha(\ell)+(d-2)\ell} \frac{\gamma^I}{\mathcal{L}(\ell)^2} \quad (4.50)$$

4.2.3. Vértice de interacción reescalado

Por último al aplicar estas transformaciones al miembro de la distribución que carga con las interacciones a órdenes superiores se obtiene la forma en la que se reescala el parámetro perturbativo λ' , es decir:

$$\delta\rho'(k', \omega') = \delta\rho'^{(0)} - i \left[\lambda^I e^{-\alpha(\ell)-\ell d} \mathcal{L}(\ell) \right] G'_0(k', \omega') k'_i \int_{q'} \delta\rho'(k', \omega') F'(k' - q') \quad (4.51)$$

donde $\delta\rho'^{(0)} = -2\pi i \rho_0 \delta(\omega') e^{-\alpha(\ell)+\ell} G'_0(k', \omega') k'_i F'_i(k')$. Se puede ver en el segundo miembro de la ecuación que el nuevo parámetro perturbativo primado es:

$$\lambda' = \lambda^I e^{-\alpha(\ell)-\ell d} \mathcal{L}(\ell) \quad (4.52)$$

Capítulo 5

Evolución de los parámetros

En un cálculo del grupo de renormalización se puede obtener información importante a partir de la pendiente de la superficie de parámetros en la vecindad del punto fijo, es decir donde todas las primeras derivadas con respecto a ℓ de los coeficientes que la definen son iguales a cero, esta información esta relacionada con los exponentes críticos.

En este caso los exponentes del sistema nos hablan de cómo evolucionan las propiedades macroscópicas del sistema según se varía la dimensión, cómo al cambiar de dimensión la distribución de densidades de masa pasa de difundirse de una fase normal a una subdifusiva o súperdifusiva, el cálculo de los exponentes críticos nos aporta este tipo de información. Un cálculo de estos exponentes con las teorías de campo medio (en este caso una teoría de campo medio esta representada por la difusión normal en ausencia de acoplamiento de modos), ignoraría las fluctuaciones que se introdujeron con la cáscara. Usando la técnica del grupo no se ignoran estas fluctuaciones. En las teorías del campo medio, la dimensionalidad del espacio no entra en estos cálculos, y así los exponentes críticos tienen los mismos valores en cualquier espacio. El grupo de renormalización nos permite saber cuando las fluctuaciones son importantes.

5.1. Superficie de parámetros

Al renormalizar y reescalar el sistema se aplican las transformaciones del Grupo de Renormalización obteniéndose un sistema estructuralmente idéntico al del que se partió, es decir que este sistema es un invariante de escala ante estas transformaciones particulares del grupo. Sin embargo con la teoría del GRD se ha obtenido información valiosa de como responde el sistema bajo la influencia de muchas escalas de magnitud, generadas por el acoplamiento no lineal, un comportamiento difusivo caracterizado por el nuevo conjunto de nuevas constantes renormalizadas y reescaladas:

$$\{D'_l, D'_t, \gamma'_l, \gamma'_t, \lambda'_l\}$$

Los elementos de esta colección dependen del parámetro ℓ , el espesor de la cáscara, es decir el número de iteraciones que son los diferentes pasos del grupo. Estos coeficientes a su vez aportan información sobre el acoplamiento de la distribución de densidad de masa con el campo vectorial $F(x)$, a través de sus componentes longitudinales y transversales.

Después de la primera transformación se han eliminado las fluctuaciones de menor escala, k grandes, pero pueden verse más claramente las ligeramente mayores. Con cada iteración se van eliminando detalles que no se recuperan. Esta operación se puede repetir reiterativamente dadas las características del grupo, hay que recalcar que en cada paso se crea un nuevo sistema caracterizado por un conjunto distinto de coeficientes. El comportamiento a gran escala o largo alcance del nuevo sistema equivale al comportamiento que se observaría en el sistema original con valores distintos de estos coeficientes, de estas constantes.

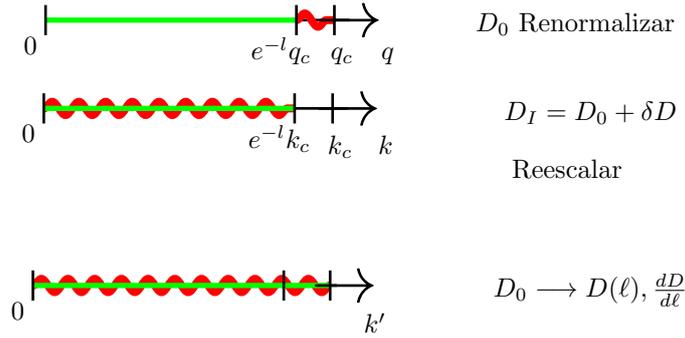


Figura 5.1: Representación de las transformaciones del Grupo de Renormalización Dinámico.

Todas las posibles combinaciones de estos coeficientes pueden ser representados geoméricamente construyendo un espacio multidimensional en el que la distancia medida a lo largo de cada dimensión corresponde a una variación en uno de los parámetros. Cada estado inicial seguido de las transformaciones a lo largo de un paso puede representarse como un punto en una superficie contenida en este espacio de los parámetros. Esta superficie es la llamada *superficie de parámetros*. Las trayectorias sobre esta superficie nos dirán la evolución de las constantes al aplicar las transformaciones del grupo. Un ejemplo similar para un solo parámetro K equivalente a un cambio de temperatura para un sistema de bloques de espines lo ejemplifica Kenneth Wilson de manera concisa en [18] y Kadanoff y Maris en [19].

La transformación del sistema de un estado al siguiente puede representarse por el movimiento de una canica que corre sobre la superficie. Uno puede imaginarse

una secuencia de imágenes que recojan la posición de la canica en un intervalo de tiempo; cada toma mostraría el efecto de una iteración de la transformación del sistema. La transformación permite que la canica se mueva, pero la “velocidad” y la “dirección” de la canica se determinan por la pendiente de la superficie en cada punto que cruza. Mediante el análisis de estas trayectorias puede representarse la “topografía” de la superficie en una pequeña región alrededor del punto fijo, El punto fijo es el punto en el que se cumple que $dA(\ell)/d\ell = 0$, donde $A(\ell)$ es alguna de las constantes que definen la superficie de parámetros. La pendiente de la superficie es lo que determina cómo el sistema se aproxima al punto fijo o cómo se aleja de él.

Para describir la evolución de las constantes que definen esta superficie se considera que la cáscara incluida en el proceso de renormalización-reescalamiento es infinitesimal, es decir que los coeficientes resultantes son de la forma:

$$\{D'_i(\ell + \delta\ell), D'_t(\ell + \delta\ell), \lambda'_i(\ell + \delta\ell)\dots\}$$

Tal que cuando el desplazamiento $\delta\ell$ tienda a cero se recuperen los coeficientes del problema original, en otras palabras, en el caso del coeficiente de difusión, $D_0 = D(\ell) = D(\ell + \delta\ell)$ con $\delta\ell = 0$. Así como expresiones equivalentes para las demás constantes.

Al comparar los valores de las constantes iniciales con el de las nuevas constantes surgidas del proceso de renormalización-reescalamiento y tomando el límite cuando $\delta\ell$ tiende a cero se obtiene la tasa de cambio de este coeficiente con respecto al parámetro ℓ , o dicho de otra manera se tiene la ecuación diferencial para la evolución del nuevo coeficiente con respecto a la anchura de la cáscara momental. Para el caso del ya, familiar, coeficiente de difusión:

$$\frac{dD(\ell)}{d\ell} = \lim_{\delta\ell \rightarrow 0} \frac{D(\ell + \delta\ell) - D(\ell)}{\delta\ell}$$

Aplicando esta filosofía a la ecuación (4.47), considerado un desarrollo a bajas contribuciones de los términos $\exp\{\alpha(\delta\ell) - 2\delta\ell\}$ y $\exp\{-\delta\ell(d-2)\}$, y definiendo la función $z(\ell)$ tal que:

$$\alpha(\ell) = \int_0^\ell z(\ell') d\ell' \quad (5.1)$$

Es decir que $\alpha(\ell) \simeq z(\ell)\delta\ell$, esta función $z(\ell)$ aún está por ser determinada, pero determinarla supondrá resolver un sistema de ecuaciones diferenciales. Al introducir todas estas consideraciones la tasa de cambio del coeficiente de difusión con respecto a ℓ es:

$$\frac{dD(\ell)}{d\ell} = D(\ell) \left[z(\ell) - 2 + a_d \left(\Lambda^2_t \frac{d-1}{d} - \Lambda^2_i \frac{1}{d} \right) \right] \quad (5.2)$$

Donde $a_d = C_d k_c^{d-2}$. Esta ecuación aporta información importante sobre la dinámica del proceso. Este proceso ha de repetirse para $\lambda'(\ell)$ y $\gamma'(\ell)$ en virtud

de esbozar la curva de parámetros. Antes de obtener la evolución del coeficiente asociado al vértice es necesario determinar la identidad de la función $\mathcal{L}(\ell)$. Hay que considerar algunos aspectos de la evolución de los coeficientes de intensidad de correlación de fuerzas y es que el ruido debe verse igual para todas las escalas de magnitud. Es decir que debe de cumplirse para (4.50) que:

$$\exp\{4\alpha(\ell) + (d-2)\ell\}/\mathcal{L}(\ell)^2 = 1,$$

para que esto se cumpla es necesario que:

$$\mathcal{L}(\ell) = e^{2\alpha(\ell) + \ell(d-2)/2} \quad (5.3)$$

Con ayuda del valor de $\mathcal{L}(\ell)$, se pueden calcular el resto de las ecuaciones diferenciales. El parámetro de interacción asociado a los términos no lineales del desarrollo perturbativo es:

$$\frac{d\lambda(\ell)}{d\ell} = \lambda(\ell) \left[z(\ell) - \frac{d+2}{2} - a_d \Lambda^2 l \frac{1}{d} \right] \quad (5.4)$$

Las ecuaciones diferenciales para los coeficientes de intensidades de correlación de fuerzas se transforman en:

$$\frac{d\gamma_t(\ell)}{d\ell} = \gamma_t(\ell) \left(\frac{d-1}{d} \right) a_d \Lambda_t^2 \quad (5.5a)$$

$$\frac{d\gamma_l(\ell)}{d\ell} = \gamma_l(\ell) \left(\frac{d-1}{d} \right) a_d \Lambda_l^2 \quad (5.5b)$$

Las soluciones de las ecuaciones diferenciales (5.2), (5.4), (5.5a), (5.5b), esbozan la superficie de parámetros.

Con el fin de resolver estas ecuaciones diferenciales hay que considerar un factor importante, y es como se comporta la diferencia $\Delta\gamma$ siendo esta la diferencia entre la intensidades de correlación de fuerzas longitudinales o transversales. Su diferencia es igual a la diferencia de los coeficientes renormalizados y esta diferencia es igual a una constante, de hecho pedimos que esta constante sea igual a cero, es decir:

$$\gamma_l - \gamma_t = \gamma_l^I(k) - \gamma_t^I(k) = 0$$

Lo que implica que Λ_t y Λ_l son iguales, ver (4.32). Ahora bien, con este conjunto de ecuaciones diferenciales se puede construir una ecuación que gobierne la evolución del verdadero parámetro de interacción, que es el parámetro que gobierna sobre las contribuciones no lineales del comportamiento difusivo. Así que vale la pena estudiarlo mas a detalle.

Con esta última expresión para el parámetro de interacción reescalado se tiene el conjunto de los coeficientes renormalizados y reescalados que caracterizan al sistema, idéntico en forma y estructura, al original, que es del que se partió.

$$\begin{aligned}
D'_l &= D_0 \left\{ 1 - \frac{1}{d} \frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \int_{e^{-\ell k_c}}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2} \right\} e^{\alpha(\ell) - 2\ell} \\
D'_t &= D_0 \left\{ 1 + \frac{d-1}{d} \frac{\lambda^2 \gamma_t}{D_0^2} \int_{e^{-\ell k_c}}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2} \right\} e^{\alpha(\ell) - 2\ell} \\
\gamma'_l &= \frac{\gamma_l}{\mathcal{L}(\ell)^2} \left\{ 1 + \frac{\lambda^2 \gamma_t}{D_0^2} \frac{d-1}{d} \int_{e^{-\ell k_c}}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2} \right\} e^{4\alpha(\ell) + (d-2)\ell} \\
\gamma'_t &= \frac{\gamma_t}{\mathcal{L}(\ell)^2} \left\{ 1 + \frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \frac{d-1}{d} \int_{e^{-\ell k_c}}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2} \right\} e^{4\alpha(\ell) + (d-2)\ell} \\
\lambda' &= \lambda \mathcal{L}(\ell) \left\{ 1 + \frac{1}{d} \left(-\frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \right) \int_{e^{-\ell k_c}}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2} \right\} e^{-\alpha(\ell) - \ell d}
\end{aligned}$$

Una vez se tiene este conjunto de ecuaciones reescaladas se puede construir el verdadero parámetro de interacción reescalado, este parámetro es:

$$\Lambda' = e^{-\ell(d-2)/2} \Lambda^I \quad (4.53)$$

Hay que señalar que este coeficiente no depende de $\mathcal{L}(\ell)$ ni de $\alpha(\ell)$, las transformaciones con las que se reescalaron las fuerzas y frecuencias. Solo depende de la dimensionalidad del sistema y de el espesor de la cáscara, el número de pasos del grupo.

5.2. Verdadero parámetro de interacción $\Lambda(\ell)$

Al considerar que las contribuciones longitudinales y transversales contribuyen de la misma manera la evolución del parámetro de interacción se puede escribir como:

$$\frac{d\Lambda(\ell)}{d\ell} = \Lambda(\ell) \left[-\frac{d-2}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{d-1}{d} \right) a_d \Lambda^2(\ell) \right] \quad (5.6)$$

No es difícil ver que el primer término dentro de los paréntesis cuadrados lleva a la solución de la parte homogénea de la ecuación diferencial, una solución de la forma $\exp\{-\ell(d-2)/2\}$. La solución completa será el producto de la solución homogénea y la inhomogénea, es decir:

$$\Lambda(\ell) = B(\ell)e^{\ell(d-2)/2} \quad (5.7)$$

En donde $B(\ell)$ es la solución a la parte inhomogénea de la ecuación diferencial. Al derivarla e igualarla con (5.6), integrando sobre ℓ se obtiene el valor de $B(\ell)$:

$$B(\ell) = \Lambda(0) \left[1 + \Lambda(0)^2 a_d \frac{d-1}{d(d-2)} \left(1 - e^{-\ell(d-2)} \right) \right]^{-1/2} \quad (5.8)$$

donde $\Lambda(0) = B(0)$. Por tanto la solución de (5.6) puede ser escrita como:

$$\Lambda(\ell) = \frac{\Lambda(0)e^{-\ell(d-2)/2}}{\left[1 + \Lambda(0)^2 a_d \frac{d-1}{d(d-2)} \left(1 - e^{-\ell(d-2)} \right) \right]^{1/2}} \quad (5.9)$$

Se hace evidente que existe una asíntota en el valor $d = 2$, la dimensión crítica. Para valores de dimensiones mayores que 2 el verdadero parámetro de interacción decae rápidamente a cero mientras que para valores menores que 2 el valor de la función crece exponencialmente.

5.2.1. Estabilidad de los puntos fijos de $\Lambda(\ell)$

Es en los puntos fijos donde la aplicación de las transformaciones del grupo de renormalización mantienen invariante al sistema. Se puede expresar la solución para el verdadero parámetro de interacción en función de una nueva variable $\epsilon = 2 - d$ que exprese el comportamiento de las interacciones al pasar por la dimensión crítica.

$$\Lambda(\ell, \epsilon) = \frac{\Lambda(0)e^{\ell\epsilon/2}}{\left[1 + \Lambda(0)^2 a_d \frac{d-1}{\epsilon d} \left(e^{\ell\epsilon} - 1 \right) \right]^{1/2}} \quad (5.10)$$

Sin embargo será de utilidad conocer el comportamiento de la función $\Lambda(\ell)$, alrededor de sus puntos fijos, es decir en donde se cumple que $d\Lambda(\ell)/d\ell = 0$,

que es exactamente cuando (5.6) se iguala a cero, se puede ver que esta función tiene tres raíces. Una de estas raíces es la trivial en cero, las otras dos raíces son:

$$\Lambda(\ell) = \pm \left[\frac{\epsilon d}{a_d(d-1)} \right]^{1/2} \quad (5.11)$$

Se puede evaluar la estabilidad de la solución al incluir una pequeña perturbación en $\Lambda(\ell + \delta\ell)$ y evaluarla en (5.6) alrededor de los puntos fijos. Para valores de $\epsilon = 0$, es decir para dimensión $d = 2$, el valor de la función regresa al punto fijo, siendo éste un punto estable, sin embargo para $d = 1$ el valor de la función se aleja rápidamente del punto fijo, haciéndolo un punto inestable.

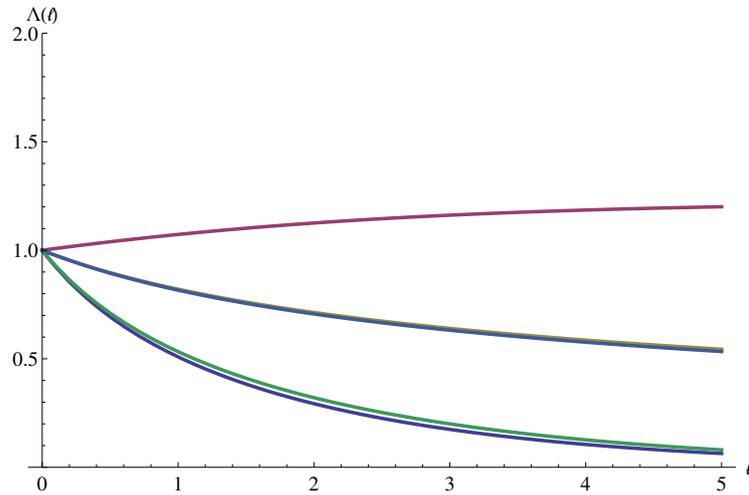


Figura 5.2: Solución para $\Lambda(\ell)$ para valores de $\epsilon > 0$ ($d = 1,5$), en fucsia, para valores de $\epsilon \simeq 0$ ($d = 2,0001$), azul y oro, y para valores de $\epsilon < 0$ ($d = 2,9$), verde.

5.3. Función de reescalamiento de las frecuencias

Se puede hacer un desarrollo de la exponencial a primeras contribuciones del verdadero parámetro perturbativo (5.10):

$$\Lambda(\ell, d) \simeq \frac{1 + \ell\epsilon/2}{\sqrt{1 + \Lambda^2(0)a_d\ell(d-1)/d}} \quad (5.12)$$

Ahora ϵ ya no aparece en ninguna parte como denominador. Como recordará el lector, es a través de la función $\alpha(\ell)$ como se reescalan las frecuencias y por ende

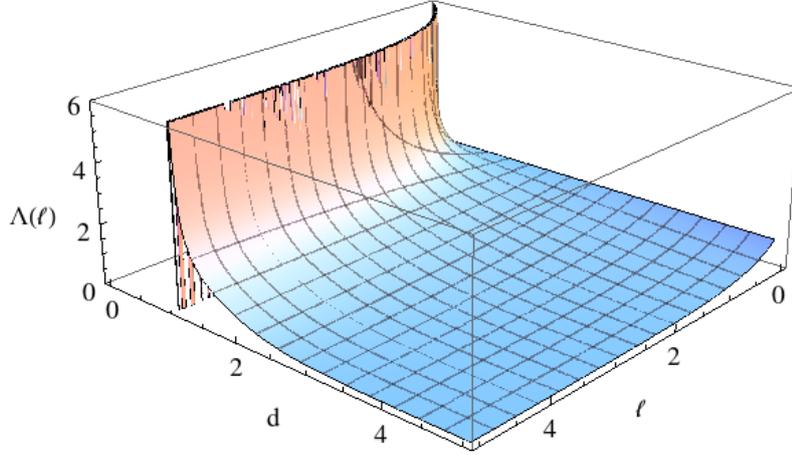


Figura 5.3: Superficie generada para $\Lambda(\ell, d)$. El parámetro ℓ es el número de veces que se aplica el grupo, mientras que d es la dimensión.

los tiempos a los que se difunden las partículas en el proceso difusivo. Es por ello que toma importancia conocer como es la evolución de ésta. En el punto fijo, es decir donde $D(\ell)/d\ell = 0$, el grupo de transformaciones mantiene invariante al sistema. En el punto fijo la función $z(\ell)$, presente en la evolución del coeficiente de difusión, toma la forma:

$$z(\ell) = 2 + a_d \left(\Lambda_t^2 \frac{d-1}{d} - \Lambda_l^2 \frac{1}{d} \right) \quad (5.13)$$

Como recordará de la sección (5.1.), Λ_l y Λ_t son iguales, tomando esto en consideración y recordando que $z(\ell)$ se definió de acuerdo a (5.1), la función $\alpha(\ell)$ toma la siguiente forma considerando el desarrollo de $\Lambda(\ell)$:

$$\alpha(\ell) \simeq 2\ell + a_d \frac{\epsilon}{d} \int_0^\ell \frac{(1 + \ell\epsilon/2)^2}{1 + \Lambda^2(0)a_d\ell(d-1)/d} d\ell' \quad (5.14)$$

Se puede ver que, cerca del punto fijo, existe un cambio abrupto al pasar por la dimensión crítica en $\epsilon = 0$.

5.4. Distribución de densidad de masa

Habiendo desarrollado todos estos instrumentos para estudiar como evoluciona la distribución de densidades de masa es ahora tiempo de ponerlos en marcha. Aplicando las transformadas de Fourier inversas al propagador renormalizado y reescalado se proyectará al espacio de coordenadas y tiempos:

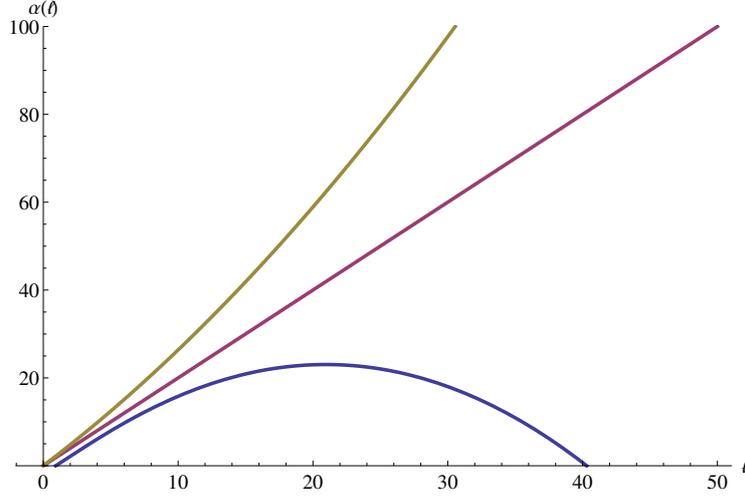


Figura 5.4: Función $\alpha(\ell)$ a primeras contribuciones, para $d = 1,5$ (marrón), $d = 2$ (fucsia), $d = 3$ (azul).

$$G(x, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^d \omega}{(2\pi)^d} G(k, \omega) e^{ikx - i\omega t'}$$

Resulta más fácil obtener la transformada de Fourier inversa de las frecuencias ω' s, es decir:

$$G(k, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^d \omega}{(2\pi)^d} \frac{e^{-i\omega t'}}{-i\omega + D(\ell)k^2}$$

Dado que el propagador es una función analítica salvo por el polo simple en el punto $z = -iD(\ell)k^2$, se puede hacer una continuación analítica de ella, siendo esta:

$$G(k, t') = \oint_{\Gamma} \frac{dz}{-2\pi i} \frac{e^{-izt'}}{(z + iD(\ell)k^2)}$$

Recordando como están relacionados los tiempos y las frecuencias, es decir $\omega = 2\pi/t$, los tiempos reescalados y renormalizados son:

$$t' = e^{-\alpha(\ell)t}$$

Así la proyección del propagador sobre el espacio de los tiempos, usando el teorema de la integral de Cauchy¹, es:

¹Suponga U es un conjunto abierto en el plano complejo C , $f : U \rightarrow C$ es una función holomorfa en un disco cerrado $D = \{z : |z - z_0| \leq r\}$ esta completamente contenido en U . Y sea Γ un círculo formando la frontera de D . Entonces para todo punto interior de D :

$$f(a) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{f(z)}{z - a} dz$$

donde el sentido del contorno Γ es el de las manecillas del reloj.

$$G(k, t) = e^{-D(\ell)e^{-\alpha(\ell)}k^2t}$$

Para toda $t > 0$ habiendo tomado un contorno Γ con dirección de las manecillas del reloj. La otra integral de trayectoria correspondiente al contorno en dirección contraria para $t < 0$, es solución que físicamente no nos compete. Para concluir la proyección del propagador en el espacio de coordenadas y tiempos se aplica sobre esta la transformada inversa con respecto a los momentos, es decir:

$$G(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{-D(\ell)k^2 e^{-\alpha(\ell)}t + ikx}$$

Uno se puede dar cuenta de que:

$$G(x, t) = \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-D(\ell)k^2 e^{-\alpha(\ell)}t + ikx} \right]^d$$

ya que

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ax^2 + bx} dx = \left(\frac{\pi}{-a} \right)^{1/2} e^{-b^2/4a}$$

El propagador $G(x, t)$ espacio de coordenadas y tiempos tiene la siguiente forma:

$$G(x, t) = \frac{e^{-x^2/(4D(\ell)e^{-\alpha(\ell)}t)}}{(4\pi D(\ell)e^{-\alpha(\ell)}t)^{d/2}} \quad (5.15)$$

Donde $D(\ell)$ es:

$$D(\ell) = D(0) \exp \left\{ \alpha(\ell) - 2\ell + a_d \frac{\epsilon}{d} \int_0^\ell \Lambda^2(\ell') d\ell' \right\}$$

Sustituyendo el coeficiente de difusión en el propagador se tiene:

$$G(x, t) = \frac{e^{-x^2/(4D(0)e^{-\alpha(\ell)}t)}}{(4\pi D(0)e^{-\alpha(\ell)}t)^{d/2}} \quad (5.16)$$

La función $G(x, t|0, 0)$ propaga las condiciones iniciales del sistema hasta un valor (x, t) , para saber cuáles son las condiciones iniciales del sistema usaremos la transformada de Fourier aplicada a $\delta\rho(x, t)$, como se hizo en la sección (1.3.1), es decir:

$$\delta\rho(x, t) = \int_k \delta\rho(k, t) e^{ikx} = \int_k \delta\rho(k, t=0) e^{-D(0)k^2 e^{-\alpha(\ell)}t + ikx}$$

donde además se debe imponer la condición de que el total de partículas marcadas es N_0 , es decir:

$$\int_x \delta\rho(x, t) = N_0$$

$$N_0 = \int_k \delta\rho(k, 0) e^{-D(0)k^2 e^{-\alpha(\ell)t}} \int_x e^{ikx} = \int_k \delta\rho(k, 0) e^{-D(0)k^2 e^{-\alpha(\ell)t}} (2\pi)^d \delta^{(d)}(k)$$

De donde se puede decir que:

$$N_0 = \delta\rho(k=0, 0)$$

Es decir que la distribución de densidades se expresa en términos de su función de Green y sus condiciones iniciales como:

$$\delta\rho(x, t) = G(x, t|0, 0) \delta\rho(0, 0)$$

Dado que ahora se conoce cómo es la distribución de densidades se pueden estudiar otras cantidades de interés, como el desplazamiento cuadrático medio de las “partículas” difundidas, una cantidad que, dado que es un observable físico, puede determinarse experimentalmente. A continuación se deducirá el valor del desplazamiento cuadrático medio.

5.5. Desplazamiento cuadrático medio

Ahora que se cuenta con la forma de la función de Green correspondiente a este proceso difusivo y cómo evoluciona la distribución de densidades se puede proceder a calcular el desplazamiento cuadrático medio $\langle x(t)^2 \rangle = \int_x x^2 \delta\rho(x, t)$:

$$\langle x(t)^2 \rangle = \frac{N_0}{(4\pi D(0) e^{-\alpha(\ell)t})^{d/2}} \int d^d x \left(e^{-x^2/(4D(0)e^{-\alpha(\ell)t})} \right) x^2 \quad (5.17)$$

Escrito así por conveniencia. Para resolver esta integral será necesario aplicar un cambio de variable $\xi^2 = x^2/(4D(0)e^{-\alpha(\ell)t})$, entonces se tiene:

$$\langle x^2(t) \rangle = N_0 (2)^{d+2} D(0) \frac{d}{(\pi)^{d/2}} \left(t e^{-\alpha(\ell)t} \right) \quad (5.18)$$

que depende fuertemente del valor de $\alpha(\ell)$. Donde $\phi(d)$, depende solamente de la dimensión, N_0 es el número de partículas marcadas y $D(0)$, es el coeficiente de difusión “desnudo”.

Se puede hacer un desarrollo a primeros términos de la función $\exp\{-\alpha(\ell)t\} t \simeq t - t\alpha(\ell)$, considérese ahora la función $\exp\{-\alpha(\ell)t\} + t - 1 \simeq t - t\alpha(\ell)$ y su

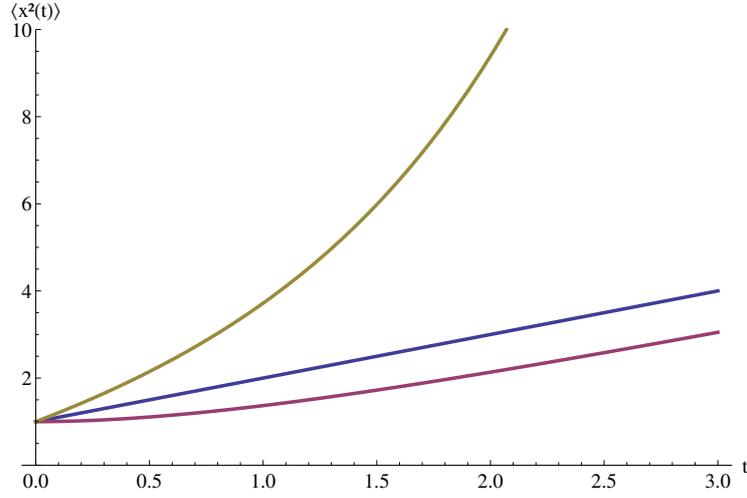


Figura 5.5: Solución de $\langle x^2(t) \rangle$, para $\alpha(\ell) < 0$ (amarillo), $\alpha(\ell) = 0$ (azul), $\alpha(\ell) > 0$ (fucsia).

desarrollo a primeros términos. Es decir que a primeros términos la siguiente aproximación es una buena aproximación solo si hacemos adimensionales las cantidades \hat{k} , $\hat{\omega}$ y \hat{t} :

$$\hat{t}e^{-\alpha(\ell)} \simeq e^{-\alpha(\ell)\hat{t}} + \hat{t} - 1$$

Bajo esta aproximación se exhibe como cambian los tiempos de difusión de las partículas marcadas al incluir las correcciones debidas a aplicar las transformaciones del grupo de renormalización.

Se puede representar al desplazamiento cuadrático medio como una función que solo dependa del tiempo elevado a cierta potencia, es decir una representación en donde se cumple que: $\hat{t}e^{-\alpha(\ell)} = \hat{t}^\nu$, para los tiempos adimensionales. Así (5.18) se convierte en:

$$\langle x^2(t) \rangle = N_0(2)^{d+2}D(0)\frac{d}{(\pi)^{d/2}}(\hat{t})^\nu \quad (5.19)$$

Donde el valor de ν se puede determinar siendo este:

$$\nu = \frac{\ln(\hat{t}e^{-\alpha(\ell)})}{\ln \hat{t}} \quad (5.20)$$

Este exponente depende de los valores de la anchura de la cáscara momental y de la dimensión del sistema, exhibiendo los comportamientos críticos para $\epsilon = 0$.

Capítulo 6

Conclusiones

Algunos de los modelos que se usan para describir la difusión a través de un material amorfo se centran en describir detalladamente el medio y su estructura [13, 14, 15, 16, 17], sin embargo la distribución de obstáculos presentada en esta tesis y las suposiciones hechas acerca de la descomposición vectorial del medio en sus contribuciones longitudinales y transversales permiten simplificar el problema. Aquí se modeló un medio amorfo con un campo vectorial estocástico vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{x})$. La inclusión de este campo genera modificaciones en la distribución de densidades respecto al equilibrio, es decir, en presencia de $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ el sistema evoluciona en busca de “ajustarse” a las rugosidades. Es más sencillo estudiar la evolución de la distribución en el espacio de frecuencias y momentos ya que resulta mas sencillo trabajar con un número infinito de ecuaciones algebraicas acopladas que con ecuaciones diferenciales acopladas. Hemos visto que al incluir la interacción con el campo la distribución se describe de la siguiente manera:

$$\delta\rho(k, \omega) = -2\pi i G_0 \rho_0^{(0)} \delta(\omega) k_i F_i(k) - \lambda i G_0 k_i \int_q \delta\rho(q, \omega) F_i(k - q)$$

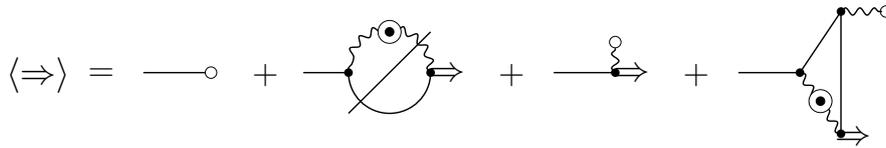
Donde las potencias de λ parametrizan a los términos no lineales del desarrollo perturbativo. Existen constantes asociadas al problema que lo caracterizan y al llevar a cabo un análisis dimensional de esta ecuación, podemos determinar la forma de las correcciones que se generan y que modifican a estas constantes, se ve que las correcciones divergen logarítmicamente para la dimensión crítica $d_c = 2$. Para el caso del coeficiente de difusión, por ejemplo, las correcciones deben ser de la forma:

$$\frac{D}{D_0} = 1 + \Lambda^2 cte \int q^{d-3} dq + \dots$$

El parámetro Λ es el verdadero parámetro que reviste a las interacciones

$$\Lambda = \frac{\lambda \gamma^{1/2}}{D_0}$$

Para tratar convenientemente el comportamiento asintótico mencionado anteriormente, se aplican sobre el sistema las dos transformaciones del Grupo de Renormalización Dinámica, herramienta empleada para estudiar fenómenos físicos no lineales. Al aplicar sobre el sistema la primera transformación del grupo se obtiene un conjunto de constantes renormalizadas que caracterizan el problema. Al aplicar la primera transformación al sistema que estudiamos (la difusión en un medio amorfo), puede ser escrito bajo la siguiente representación gráfica:



La segunda transformación del grupo consiste en reescalar este sistema renormalizado a fin de recuperar un sistema estructuralmente idéntico al sistema original.

El primer gran resultado es sobre la predominancia de la componente longitudinal en la influencia de la difusión. Es claro que la influencia longitudinal que ejerce el campo vectorial $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ es predominante, en el sentido de que siempre está presente, como en el caso de la ausencia de interacciones no lineales, las primeras aportaciones del campo son solo de carácter longitudinal.

$$\langle \Rightarrow \rangle = \text{---}\circ$$

Uno podría ver esto como que al difundirse el fluido por entre las redes de poros y canales al borrar las “rugosidades” asociadas a los altos momentos, el fluido experimenta menos resistencia a difundirse sobre regiones en la misma dirección de su desplazamiento, en otras el fluido permanecerá arremanzado y la contribución a la difusión sobre estas regiones será mínima, un resultado que coincide con los resultados de E.K. Lenzi [17]. Por otro lado al haber parametrizado todas las contribuciones no lineales con el verdadero parámetro de interacción y a su vez haber descrito la superficie de parámetros, se pueden también describir estas interacciones en función del número de iteraciones del grupo, representado por la magnitud de ℓ , y de la variable $\epsilon = 2 - d$. La evolución de este verdadero parámetro de interacción está regido por:

$$\frac{\Lambda(\ell)}{d\ell} = \Lambda(\ell) \left[\frac{\epsilon}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{d-1}{d} a_d \Lambda^2(\ell) \right) \right]$$

Haciendo notar que al obtener la solución para el punto fijo $d\Lambda(\ell)/d\ell = 0$, tiene tres raíces: una la trivial y las demás son estables para valores de $\epsilon = 0$, la dimensión crítica en $d = 2$. Sin embargo en dimensión $d = 1$, el comportamiento de las interacciones se vuelve sumamente inestable. De este parámetro dependen las demás soluciones y su influencia se verá reflejada a lo largo de los demás procesos.

Al aplicar las transformaciones del grupo de renormalización reiterativamente obtenemos información sobre las constantes que caracterizan al sistema difusivo, sin embargo el sistema al mantenerse estructuralmente idéntico se dice que es un invariante de escala, es decir que no importa desde que escala se observe seguirá viéndose de la misma manera y solo cerca de los puntos fijos. A esta propiedad se le conoce como *Autosimilaridad*, propiedad que comporta con estructuras geométricas como los fractales.

Se ha mostrado cómo el tiempo en el que se difunde la distribución depende de la dimensión del sistema y dado que es una corrección, del número de iteraciones que sobre el sistema se aplica. Un resultado que se espera de estos tipos de sistemas, debido a las grandes longitudes de correlación. Al introducir las correcciones debidas al grupo de renormalización se ha exhibido que la relación entre el desplazamiento de estas partículas y el tiempo en el que lo hacen no es lineal en el tiempo sino que puede ser expresado como el tiempo elevado a una potencia $\nu(\alpha(\ell))$:

$$\langle x^2(t) \rangle \propto t^\nu$$

En donde ν tiene la forma:

$$\nu = \frac{\ln(\hat{t}e^{-\alpha(\ell)})}{\ln \hat{t}}$$

La función $\alpha(\ell)$ es una función de escalamiento en el tiempo, determinada en el punto fijo $dD(\ell)/d\ell = 0$ y depende únicamente de la dimensión del sistema físico y del número de iteraciones del grupo de renormalización. La constante de proporcionalidad es $N_0(2)^{d+2}D(0)d/(\pi)^{-d/2}$, donde $D(0)$ es el coeficiente de difusión desnudo, es decir el coeficiente de difusión libre de cualquier interacción. Esta forma de expresar el desplazamiento cuadrático medio es característico de la difusión anómala. Es posible una comprobación experimental de este resultado (tanto para comprobarlo o refutarlo), dado que es un observable físico y existen múltiples técnicas para medir el desplazamiento de una partícula a través de un fluido y un medio con las características mencionadas.

Capítulo 7

Apéndices

7.1. Apéndice 1

7.1.1. Transformada de Fourier

Aplicar una transformada de Fourier a una función $A(x, t)$ se interpreta como expandir esta función en un espacio continuo cuyas eigenfunciones son frentes de onda planos. Sean las transformadas:

$$A(x, t) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} A(k, t) e^{ikx} = \int_k A(k, t) e^{ikx} \quad (7.1)$$

$$A(k, t) = \int d^d x A(x, t) e^{-ikx} = \int_x A(x, t) e^{-ikx} \quad (7.2)$$

y las condiciones de completos resultan de introducir la ecuación (7.1) en (7.2)

$$\begin{aligned} A(k, t) &= \int d^d x \left(\int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} A(q, t) e^{iqx} \right) e^{-ikx} = \\ &= \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} A(q, t) \int d^d x e^{i(q-k)x} = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} A(q, t) (2\pi)^d \delta^d(q - k) = A(k, t) \end{aligned}$$

y viceversa:

$$\int_x e^{(q-k)x} = (2\pi)^d \delta^d(q - k) \quad (7.3)$$

$$\int_k e^{k(x-x')} = (2\pi)^d \delta^d(x - x') \quad (7.4)$$

7.1.2. Convolución

Otra propiedad de mucha utilidad es la convolución, es decir la transformada de un producto. Sean dos funciones $A(x)$ y $B(x)$, la transformada del producto $A(x)B(x)$, es

$$A(k)B(k) = \int_x A(x)B(x)e^{-ikx}$$

sustituyendo la transformada de A y B , dada por (7.1), tenemos

$$\begin{aligned} A(k)B(k) &= \int_p \int_q A(q)B(p) \int_x e^{i(p+q-k)x} \\ &= \int_p \int_q A(q)B(p)(2\pi)^d \delta^d(k - q - p) = \int_q A(q)B(k - q) \end{aligned} \quad (7.5a)$$

y por simetría también resulta:

$$A(k)B(k) = \int_q A(k - q)B(k) \quad (7.5b)$$

En la convolución está presente la conservación del momento que puede ilustrarse estableciendo la correspondencia entre cualquiera de las ecuaciones anteriores, que representan a la convolución a través de la figura

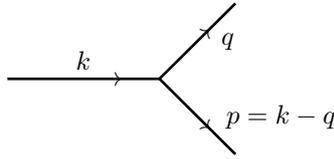


Figura 7.1: Diagrama de conservación de momento.

Se puede mostrar de igual manera pero desde el espacio de momentos, que si tenemos un producto de dos funciones $A(k)$ y $B(k)$ la transformada de Fourier al espacio de configuración, es

$$A(x)B(x) = \int_{x'} A(x')B(x' - x)$$

A través de términos cuadráticos como este se acoplan diferentes modos de Fourier.

7.2. Apéndice 2

7.2.1. Ecuación de Dyson

Consideremos el problema de la difusión libre de medio que hemos estudiado previamente y tiene una forma similar a:

$$L_0\phi(x) = F \quad (7.6)$$

Donde $L_0 = (\partial_t + k^2 D_0)$. Para el caso en el que introducimos un medio podemos usar la teoría de perturbaciones en el caso en el que las alteraciones que introduzca el medio se consideren razonablemente modificaciones mas o menos pequeñas del problema ya resuelto. Podemos introducir un nuevo operador perturbado L_I siempre y cuando su interacción no sea excesivamente elevada y su efecto se reduzca a modificar un poco el comportamiento de L_0 . Entonces podemos escribir el problema de la siguiente manera:

$$[L_0 + \lambda L_I] \phi(x) = F \quad (7.7)$$

En el que cabría esperarse que sus eigenfunciones se aproximen a las de L_0 con correcciones pequeñas debidas a la perturbación. Podemos partir de aquí y hagamos un desarrollo perturbativo de la solución $\phi(x)$, es decir:

$$\phi(x) = \phi_0(x) + \lambda\phi_1(x) + \lambda^2\phi_2(x) + \lambda^3\phi_3(x) + \sum_{n=4}^{\infty} \lambda^n \phi_n(x) \quad (7.8)$$

Sustituyendo en (7.7), tenemos:

$$[L_0 + \lambda L_I] \left(\phi_0(x) + \lambda\phi_1(x) + \lambda^2\phi_2(x) + \lambda^3\phi_3(x) + \sum_{n=4}^{\infty} \lambda^n \phi_n(x) \right) = F$$

Aplicando este operador a $\phi(x)$ y con la condición de que $L_0\phi_0 = F$, para que este sistema se satisfaga a todos los órdenes de la teoría de perturbaciones el coeficiente de cada potencia de λ debe anularse por separado, esto implica las siguientes relaciones de recurrencia:

$$\begin{aligned} \phi_0 &= L_0^{-1}F \\ \phi_1 &= -(L_0^{-1}L_I L_0^{-1})F \\ \phi_2 &= (L_0^{-1}L_I L_0^{-1}L_I L_0^{-1})F \\ \phi_3 &= -(L_0^{-1}L_I L_0^{-1}L_I L_0^{-1}L_I L_0^{-1})F \\ &\dots \end{aligned}$$

Al sustituir estas relaciones de recurrencia en (7.8) y considerando que $L_0^{-1} = G_0$, una función que propaga el valor de F , obtendremos

$$\phi(x) = G_0 F - \lambda(G_0 L_I G_0)F + \lambda^2(G_0 L_I G_0 L_I G_0)F + \dots$$

Donde podemos factorizar F , siendo:

$$\phi(x) = [G_0 - \lambda(G_0 L_I G_0) + \lambda^2(G_0 L_I G_0 L_I G_0) + \dots]F \quad (7.9)$$

La expresión entre paréntesis cuadrados también propaga a F , pero aquí ya se propaga en función al operador perturbado L_I . Llamemos G a esta expresión.

$$G = G_0 - \lambda(G_0 L_I G_0) + \lambda^2(G_0 L_I G_0 L_I G_0) + \dots \quad (7.10)$$

Podemos factorizar a partir del segundo término de la expresión en paréntesis cuadrados el factor $\lambda G_0 L_I$ y reescribimos a $\phi(x)$ como:

$$\phi(x) = [G_0 - \lambda G_0 L_I \{G_0 - \lambda(G_0 L_I G_0) + \dots\}] F$$

De donde es fácil ver que la expresión entre los corchetes es de hecho G . Por lo tanto la ecuación (7.9) se convierte en:

$$\phi(x) = [G_0 - \lambda G_0 L_I G] F \quad (7.11)$$

Donde $G = [G_0 - \lambda G_0 L_I G]$. A esta función se le conoce como ecuación de Dyson. Y es sumamente útil porque nos permite resolver un problema basándonos solo en parámetros que conocemos como la solución libre de perturbaciones y el nuevo operador perturbado, de esta última expresión para el propagador perturbado se puede recuperar la siguiente expresión:

$$G^{-1} - G_0^{-1} = \lambda L_I \quad (7.12)$$

que dice que la comparación entre el propagador a orden cero y el propagador perturbado es precisamente el operador perturbado revestido por el parámetro perturbativo.

7.3. Apéndice 3

7.3.1. Cálculo de coeficientes intermedios

Cálculo de coeficiente de difusión intermedio

Para calcular el coeficiente de difusión intermedio será necesario resolver la integral representada por la siguiente gráfica:



$$= -\lambda^2 \int_{e^{-\ell_{k_c}}}^{k_c} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} k_i (D_0(k-q)^2 - i\omega)^{-1} \langle F_i(q) F_j(-q) \rangle (k-q)_j$$

Esta gráfica surge de las nuevas topologías surgidas en la ecuación de distribución de densidades de masa al darle una representación gráfica y sobre ésta haciendo actuar la primera transformación del grupo de renormalización, para

éste caso en particular,¹ esta transformación consistió en la inclusión de una cáscara de momentos altos por debajo de ésta y promediar sobre los altos momentos. La correlación de fuerzas es $\langle F_i(q_1)F_j(q_2) \rangle = (2\pi)^d \Phi_{ij}(q) \delta^d(q_1 + q_2)$, recordando esto y sustituyéndolo en (4.15), se obtiene:

$$\text{Diagrama} = -\lambda^2 \int_{e^{-\ell} k_c}^{k_c} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} k_i \frac{(2\pi)^d \Phi_{ij}(q) \delta^d(q - q)}{D_0(k - q)^2 - i\omega} (k - q)_j \quad (7.13)$$

Al considerar tiempos largos, tal que $\omega \rightarrow 0$, que es el régimen que se desea estudiar, y considerando también $\Phi_{ij}(k) = \gamma_{ij}(k)$, la integral se simplifica de la siguiente manera:

$$\text{Diagrama} = -\frac{\lambda^2}{D_0} \int_{e^{-\ell} k_c}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2 (1 - k/q)^2} k_i \gamma_{ij}(k - q)_j \quad (7.14)$$

Tomando en cuenta que los momentos sobre la cáscara son comparativamente mayores a los momentos de entrada tal que $k \ll q$, la integral se simplifica significativamente:

$$\text{Diagrama} = -\frac{\lambda^2}{D_0} \int_{e^{-\ell} k_c}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2} k_i \gamma_{ij}(k - q)_j \quad (7.15)$$

De esta expresión se desprenden dos integrales:

$$\text{Diagrama} = -\frac{\lambda^2}{D_0} \left[k_i \int_{e^{-\ell} k_c}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2} \gamma_{ij} k_j - k_i \int_{e^{-\ell} q_c}^{q_c} \frac{d^d q}{q^2} \gamma_{ij} q_j \right] \quad (7.16)$$

Y a su vez $\gamma_{ij}(q)$ puede ser reescrita según (3.4). Se tendrán dos integrales que contribuirán una con una parte longitudinal y otra con una parte transversal:

$$\text{Diagrama} = k^2 \left[-\frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0} \frac{1}{d} + \frac{\lambda^2 \gamma_t}{D_0} \frac{d-1}{d} \right] \int_{e^{-\ell} k_c}^{k_c} \frac{d^d q}{q^2} \quad (7.17)$$

Lo cual es congruente con la forma que deberá adquirir la corrección derivada del análisis dimensional (3.20). Ahora considérese el elemento de volúmen en d

¹Las transformaciones del grupo de renormalización son extensas y depende del sistema que se este estudiando.

dimensiones $d^d q = dV_d(q)$, al integrarse sobre todas las contribuciones angulares se tiene:

$$\int_q f(q)q_i q_j \dots q_n = \int f(q) \dots dV_d(q) = C_d \int_q f(q) \dots q^{d-1} dq \quad (7.18)$$

Integrando de acuerdo a:

$$\int_q f(q)q_i q_j = \int_q f(q) \delta_{ij} \frac{q^2}{d} \quad (7.19)$$

pues existe isotropía. La constante C_d es el elemento de volumen en d dimensiones:

$$C_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \quad (7.20)$$

Al incluir esta consideración en la ecuación (7.17), se obtiene la ecuación (4.16), de donde se desprende la expresión para $\delta D(k)$.



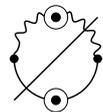
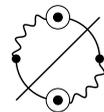
$$= k^2 C_d \left[-\frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0} \frac{1}{d} + \frac{\lambda^2 \gamma_t}{D_0} \frac{d-1}{d} \right] \int_{e^{-\ell_{k_c}}}^{k_c} q^{d-3} dq$$

tal que:

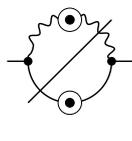
$$\delta D(k) = C_d \left[-\frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0} \frac{1}{d} + \frac{\lambda^2 \gamma_t}{D_0} \frac{d-1}{d} \right] \int_{e^{-\ell_{k_c}}}^{k_c} q^{d-3} dq$$

Cálculo de coeficiente de correlación de fuerzas intermedio

Al enfrentar dos soluciones con argumentos opuestos se puede llegar a calcular como es la correlación de cuatro fuerzas, de manera esquemática se representa de la siguiente manera:

$$\langle F_i F_j \rangle = \odot + \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \dots$$



La segunda gráfica tiene la siguiente representación formal:



$$= -G_0(k, \omega) i \lambda k_i \int_{pq} G_0(k-q, \omega) \langle F_i(q) F_j(p) \rangle (-i \rho_0 2\pi \delta(\omega)) (k-q)_k$$

$$\times (-i\lambda(k_j))G_0(k' - p, \omega') \langle F_k(k - q)F_l(k' - p) \rangle (-i\rho_0 2\pi\delta(\omega'))(k' - p)_i G_0(k', \omega') \quad (7.21)$$

Agrupando constantes y reacomodando términos se puede reescribir la ecuación anterior como:

$$\begin{aligned} \text{Diagrama} &= -\lambda^2 i^2 \rho_0^2 (2\pi)^2 \delta(\omega) \delta(\omega') G_0(k, \omega) k_i \int_{pq} G_0(k - q, \omega) \langle F_i(q)F_j(p) \rangle \times \\ &\times G_0(k' - p, \omega') \langle F_k(k - q)F_l(k' - p) \rangle (k - q)_k (k' - p)_l G_0(k', \omega') k'_j \quad (7.22) \end{aligned}$$

donde $(-1)^2 i^2 \rho_0^2 (2\pi)^2 \delta(\omega) \delta(\omega') k_i k'_j$ es removido como en el caso de las estructuras “amputadas” del diagrama de la sección anterior. Como se muestra a continuación:

$$\text{Diagrama} = (-2\pi i \rho_0 \delta(\omega)) k_i [\text{Correccion}] (-2\pi i \rho_0 \delta(\omega')) k'_j$$

La meta a continuación es calcular el término entre los paréntesis cuadrados “Corrección”. Al sustituir la definición de la correlación inicial de fuerzas la integral anterior se simplifica en:

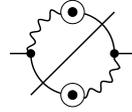
$$\begin{aligned} \text{Diagrama} &= -\lambda^2 \delta^d(k + k') \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} G_0(k - q, \omega) G_0(k' + q, \omega') \times \\ &\times \gamma_{ij}(q)(k - q)_k \gamma_{kl}(k - q)(k' + q)_l \quad (7.23) \end{aligned}$$

Y al considerar la aproximación de momentos altos tal que $k \ll q$, y tiempos largos, así como al proyectar los vectores sobre $\gamma_{ij}(q)$ y $\gamma_{kl}(k - q)$ y al hacer un poco de álgebra, se obtiene:

$$\text{Diagrama} = (2\pi)^d \delta^d(k + k') \left\{ \frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \left[\frac{\gamma_l}{d} + \gamma_t \frac{d-1}{d} \right] \int_q \frac{d^d q}{q^2} \right\} \delta_{ij}$$

En el paréntesis cuadrado se aprecia las contribuciones longitudinales y transversales debidas al campo, sin embargo están siendo moduladas por el verdadero parámetro perturbativo.

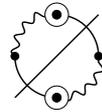
Pero aún falta resolver el tercer miembro de la ecuación, este se representa de la siguiente manera:



$$= G_0(k, \omega)(-i\lambda k_i) \int_{pq} \langle F_i(q) F_j(p) \rangle G(p, \omega') (-i\rho_0 2\pi \delta(\omega') p_j) \times$$

$$\times G(k - q, \omega) (-i\rho_0 2\pi \delta(\omega) (k - q)_k) \langle F_k(k - q) F_l(k' - p) \rangle (-i\lambda k_l) G_0(k', \omega')$$
(7.24)

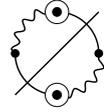
Como en el diagrama anterior se pueden amputar los términos concernientes al ruido, haciendo esto la ecuación anterior adquiere una forma más compacta:



$$= -\lambda^2 \int_{qp} \langle F_i(q) F_j(p) \rangle G(p, \omega') G(k - q, \omega) p_j (k - q)_k \times$$

$$\times \langle F_k(k - q) F_l(k' - p) \rangle$$
(7.25)

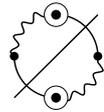
Ahora al sustituir el valor de la correlación de fuerzas inicial se tiene:



$$= -\lambda^2 \delta^d(k + k') \int_q \gamma_{ij}(q) (k - q)_k G(q, \omega') \times$$

$$\times G(k - q, \omega) \gamma_{kl}(k - q) (-q)_j$$
(7.26)

que al ser contraído por los operadores de proyecciones longitudinales y transversales, considerando tiempos largos y para los momentos debajo de la cáscara ($k \ll q$), se tiene:

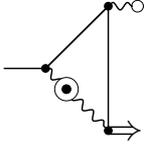


$$= (2\pi)^d \delta^d(k + k') \left\{ -\frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \left[\frac{\gamma_l}{d} \right] \int \frac{d^d q}{q^2} \right\} \delta_{ij}$$

Con esto se tiene el cálculo de las contribuciones de los las cuatro fuerzas correlacionadas.

Cálculo del parámetro perturbativo intermedio

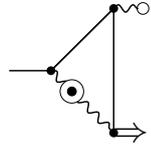
Al renormalizar el sistema el vértice también se viste con las interacciones surgidas a partir del borrado de detalles, se puede ver en la ecuación (4.7), como aparece una gráfica cuya estructura es, en esencia, la de un vértice revestido. Esta estructura es, descrita en una representación más formal:



$$= G_0(k, \omega)(-ik_i \lambda) \int_{pqr} \langle F_i(q) F_k(p) \rangle G_0(k - q, \omega) \times$$

$$\times (-i\lambda(k - q)_j) F_j(r) G_0(k - s) (-i\lambda(k - s - r)_k) \delta\rho(k - s - r) \quad (7.27)$$

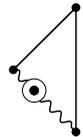
Donde para aligerar la notación $s = q + p$, al imponer la condición dictada por la Delta de Dirac ($r = -q$), se tiene:



$$= G_0(k, \omega)(-ik_i \lambda) \int_p (-\lambda^2) \int_q \gamma_{ik}(q) G_0(k - q, \omega) (k - q)_j \times$$

$$\times G_0(k - q - p, \omega') (k - p)_k F_j(p) \delta\rho(k - p) \quad (7.28)$$

Se aprecia que salvo el término encerrado en la integral sobre los altos momentos, (7.28) tiene la forma usual de una convolución empujada por un propagador, entonces la corrección al vértice estará dada por la siguiente gráfica:



$$= -ik_i \lambda (-\lambda^2) \int d^d q G_0(k - q, \omega) G_0(k - s, \omega') (k - q)_j \gamma_{ik}(q) (k - s)_k$$

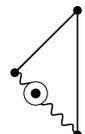
$$(7.29)$$

Considerando que a tiempos largos ($\omega, \omega' \rightarrow 0$) y para momentos debajo de la cáscara ($k, p \ll q$), se tendrá:



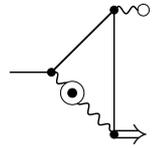
$$= -ik_i \lambda \left(-\frac{\lambda^2}{D_0^2} \right) \int \frac{d^d q}{q^4} (k - q)_j \gamma_{ik}(q) (k - s)_k \quad (7.30)$$

Lo que se reduce a calcular la contracción entre los proyectores longitudinales y transversales con los vectores dentro de la integral e integrar sobre todos los momentos, aprovechando las simetrías existentes, al hacer esto se tiene:



$$= -ik_j \int \frac{1}{d} \left(-\frac{\lambda^3 \gamma_l}{D_0^2} \right) \frac{d^d q}{q^2} \quad (7.31)$$

Se está considerando que los términos que dependen de momentos cuárticos no contribuyen significativamente y son despreciables. Al incorporar este último resultado a la expresión original de la vestidura del vértice se tiene:



$$= G_0(k, \omega)(-i\lambda k_j) \int_p \left[\int \frac{1}{d} \left(-\frac{\lambda^2 \gamma_l}{D_0^2} \right) \frac{d^d q}{q^2} \right] \delta\rho(k-p) F_j(p)$$

En la que ya se vislumbra la forma de la corrección $\delta\lambda$.

Bibliografía

- [1] L.D. Landau, On the theory of phase transitions, Phys. Z. Sow.**11**, 26 545 (1937).
- [2] D. R. Nelson, M. J. Stephen, D. Forster, Large-distance and long-time properties of a randomly stirred fluid. Phys. Rev. A **3**, 16(2):732-749 (1977).
- [3] G. Mazenko, “Renormalization Group Approach to Dynamic Critical Phenomena” en *Correlation Functions and Quasiparticle Interactions in Condensed Matter*, Ed. J. Woods Halley, Plenum Press, N.Y. (1978).
- [4] A. Lesne, M Lagnès, *Scale invariance from phase transitions to turbulence*, (Berlin, Paris, 2008).
- [5] B. H. Lavenda, Brownian motion, Scientific American, **252**, Feb. 1985, p. 70-72, 77-81, 84, 85.
- [6] W. D. McComb, *Renormalization methods, a guide for beginners*, (Oxford University press 2004), ISBN 978-0-19-850694-2, p.p 239-243.
- [7] J. F. Lutsko, J. P. Boon, Microscopic theory of anomalous diffusion based on particle interactions, Phys Rev E **88** 022108 (2013).
- [8] A. Einstein, liquids required by the molecular-kinetic theory of heat, Ann. Phys. **17** 549-560, (1905).
- [9] P. V. Pavlov, A. F. Jojlov, *Física del estado sólido*,(Mir, Moscú, 1992).
- [10] J. W. Halley, “Perturbation theory of response functions” en *Correlation Functions and Quasiparticle Interactions in Condensed Matter*, Plenum press, (Nueva York, Londres, 1978), pp 45 – 98, DOI: 10.1007/978-1-4684-3360-9-2.
- [11] G. F. Mazenko, “Perturbation theory and the dynamic renormalization group” en *Correlation Functions and Quasiparticle Interactions in Condensed Matter*, Plenum press, (Nueva York, Londres, 1978), pp 185 – 234, DOI: 10.1007/978-1-4684-3360-9-2.
- [12] J. Perrin, Atoms. 4th ed. (Constable & Company LTD. 211, London 1916).
- [13] V. Démery, Diffusion of a particle quadratically coupled to a thermally fluctuating field, Phys. Rev. E **87**, 052105, (2013), DOI: 10.1103/PhysRevE.87.052105.

-
- [14] H. S. Wiklund, T. Uesaka, Microfluidics of imbibition in random porous media, *Phys. Rev. E* **87**, 023006, (2013), DOI: 10.1103/PhysRevE.87.023006.
- [15] F. Turci, A. Parmeggiani, E. Pitard, M. C. Romano, L. Ciandrini, Transport on a lattice with dynamical defects, *Phys. Rev. E* **87**, 012705, (2013), DOI: 10.1103/PhysRevE.87.012705.
- [16] M. A. C. Rojo, R. J. Maldonado, M. M. Noyola, Diffusion of colloidal fluids in random porous media, *Phys. Rev. E* **77**, 040401(R), (2008), DOI: 10.1103/PhysRevE.77.040401.
- [17] E. K. Lenzi, L. R. da Silva, A. A. Tateishi, M. K. Lenzi, H. V. Ribeiro, Diffusive process on a backbone structure with drift terms, *Phys. Rev. E* **87**.012121, (2013), DOI: 10.1103/PhysRevE.87.012121.
- [18] K. G. Wilson, “*Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture*”. *Phys. Rev. B* **4** **9**: 3174 (1971).
- [19] H.J. Maris, L.P. Kadanoff, Teaching the renormalization group. *American Journal of Physics*, **46** pp. 652-657 (1978).
- [20] K. G. Wilson, The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773, 10.1103/RevModPhys.47.773 (1975).
- [21] Victor Yakhot, Steven A. Orszag, Renormalization group analysis of turbulence. I. Basic theory, *Journal of Scientific Computing*, **1** pp 3-51 (1986).
- [22] Ernesto Medina, Terence Hwa, Mehran Kardar, Yi-Cheng Zhang, Burgers equation with correlated noise: Renormalization-group analysis and applications to directed polymers and interface growth, *Phys. Rev. A* **39**, 3053 (1989).