

41
20j



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

**"Difusión mesoscópica unidimensional en la
recta infinita y semi-infinita
(medios isotrópicos)"**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE
F I S I C O
P R E S E N T A

ROBERTO SALAS CORRALES

Director de Tesis:

DR. SALVADOR GODOY SALAS

FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR
MEXICO, D. E.

1996

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL
AVENIDA DE
MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS
División de Estudios
Profesionales

DR. SALVADOR GODDY SALAS
P R E S E N T E

Me permito comunicar a Usted, que la División de Estudios Profesionales de esta Facultad ha dado su aprobación para que el(la) pasante **SALAS CORRALES ROBERTO** con número de cuenta **8955412-B** de la Carrera de **Físico**, realice el trabajo de tesis bajo su dirección con el título:

"Difusión mesocospica unidimensional en la recta infinita y semi-infinita (medios isotrópicos)"

Doy las gracias por su atención y le reitero las seguridades de mi atenta y distinguida consideración.

A t e n t a m e n t e
Ciudad Universitaria, D.F. a 10 de Junio de 1976
JEFE DE LA DIVISION DE
ESTUDIOS PROFESIONALES

Virginia Abrián Batule
M. EN C. FACULTAD DE CIENCIAS, BATULE
SECCION ESCOLAR

Elaboró svg



UNIVERSIDAD NACIONAL
AVENIDA DE
MEXICO

M. en C. Virginia Abrín Batule
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: "DIFUSION MESOSCOPICA UNIDIMENSIONAL EN LA RECTA INFINITA Y SEMI-INFINITA (MEDIOS ISOTROPICOS)

realizado por ROBERTO SALAS CORRALES

con número de cuenta 8955412-8 , pasante de la carrera de FISICA

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis
Propietario DR. SALVADOR GODDY SALAS
Propietario DR. GERARDO CARMONA RUIZ
Propietario DR. ROSALIO FERNANDO RODRIGUEZ ZEPEDA
Suplente M. EN C. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE
Suplente M. EN C. VIVIANNE MARQUINA FABREGA

S. Godoy
Gerardo Carmona Ruiz
Rosalio Fernando Rodriguez Zepeda
Patricia Goldstein Menache
Vivianne Marquina Fabrega

Consejo Departamental de Física

DR. ROBERTO ALEJANDRO RUELAS MAYORGA

FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FISICA

*DIFUSION MESOSCÓPICA UNIDIMENSIONAL EN LA RECTA
INFINITA Y SEMI-INFINITA.
(MEDIOS ISOTRÓPICOS.)*

por: Roberto Salas Corrales.

*Wehe dir, Zerstörer, selbst
unzerstört, Räuber, den man
noch nicht beraubt. Wenn du das
Ziel erreicht, Zerstörer, wirst du
zerstört, wenn du den Gipfel
erstiegen mit Rauben, beraubt
man dich.*

*Ewiger, sei uns gnädig!
Dein harren wir! Sei ihr Beistand
jeglinchen Morgen, und unsere
Hilfe zur Zeit der Noth.*

*Vor Donnerstimmen fliehen
die Völker, vor deiner Erhebung
zerstieben die Nationen.*

*Und aufgerafft wird eure
Beute, gleich wie man Grillen
aufrafft, wie Heuschrecken daher
ziehen, zieht man dagegen.*

*Erhaben ist der Ewige, denn
er, in der Höhe thronend, hat
Zijon erfüllt mit Recht und
Gerechtigkeit.*

*Und es ist die Sicherheit
deines Geschickes, die Dauer des
Heils, Weisheit und Erkenntnis;
die Furcht des Ewigen, das ist
sein Schatz.*

*Siehe, löwenstark schreien sie
draußen, die Friedensboten,
weinen bitterlich.*

*Verödet sind die Straßen, es
feiert der Wanderer. Er bricht
den Bund, hält gering die Städte,
achtet nicht des Menschen.*

*Es trauert, verschmachtet die
Erde, schambedeckt ist Lebanon,
abgewelkt. Scharon ist einer
Steppe gleich, entblättert ist
Baschan und Karmel.*

Iesaja 33.

Dedicado a mis padres, con infinita gratitud por sus incontables sacrificios y esfuerzos, y también de manera muy especial a la memoria de mi amigo, el Físico Robert Adenauer (17/10/1895 - 18/07/1996), a quien prometí escribir en este trabajo sus últimas palabras, tal como líneas arriba están expuestas.

DIFUSIÓN MESOSCÓPICA UNIDIMENSIONAL EN LA RECTA INFINITA Y SEMI-INFINITA.

INDICE:

1.1 INTRODUCCIÓN.....	1
1.2 ALGUNAS CONSECUENCIAS IMPORTANTES DEL SISTEMA DE ECS. DINÁMICAS (S.E.D.) EN ESPACIO DE CONFIGURACION.....	20
1.3 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA EN EL ESPACIO DE CONFIGURACIÓN.....	27
2.1 SOLUCION DEL S.E.D. PARA $-\infty < X < \infty$	31
3.1 SOLUCIONES EN EL ESPACIO DE CONFIGURACIÓN.....	42
4.1 SOLUCIÓN EN EL ESPACIO FASE PARA $X > 0$ CON PARED ABSORBENTE EN EL ORIGEN.....	53
5.1 SOLUCIÓN EN EL ESPACIO FASE PARA $X > 0$ CON PARED REFLEJANTE EN EL ORIGEN.....	64
CONCLUSIONES.....	75
APÉNDICES:	
APÉNDICE 1: SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE LOS TELEGRAFISTAS EN $-\infty < X < \infty$	77
APÉNDICE 2: SOLUCIÓN DEL S.E.D. EN $-\infty < X < \infty$	90
APÉNDICE 3: SOLUCIÓN DEL MODELO DE FICK EN $-\infty < X < \infty$	95
APÉNDICE 4: SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE LOS TELEGRAFISTAS EN LA RECTA SEMI-INFINITA CON CONDICIÓN DE FRONTERA FUNCIÓN NULA Y DERIVADA RESPECTO A LA POSICIÓN NULA.....	97
APÉNDICE 5: DEL MODELO MESOSCÓPICO AL MODELO DE FICK.....	105
APÉNDICE 6: SOLUCIÓN DEL MODELO DE FICK EN LA RECTA SEMI-INFINITA.....	109
APÉNDICE 7: DERIVADA DE $P_+(X, T)$ PARA LA RECTA SEMI-INFINITA CON PARED ABSORBENTE EN EL ORIGEN.....	111
APÉNDICE 8: UN RESULTADO DE LA MATEMÁTICA FINITA IMPORTANTE.....	114
BIBLIOGRAFIA.....	115

PREÁMBULO:

En los últimos años el desarrollo de la Física Estadística ha sido extendido considerablemente. Mi intento es ofrecer al lector un tratamiento del problema de difusión a partir de un modelo estocástico muy simplificado en una dimensión.

No es la pretensión de este trabajo llegar al modelo exacto de difusión, más bien se llegó a una aproximación distinta, que sea al menos más congruente con el hecho de que la velocidad de propagación de las partículas es finita. Desde luego que el concepto de velocidad de partículas en difusión en muchos casos es inalcanzable. Supongamos que en un vaso con agua dejamos difundir tinta, es evidente que "velocidad de partículas" puede resultar un concepto inútil si pensamos en establecer una relación para saber cuál es la velocidad de cada partícula en el tiempo, peor aún si el número de partículas en difusión es del orden del número de Avogadro. Pero lo que sí es cierto es que lo rápido que ocurre la difusión o lo lento que ocurre la difusión tiene que ver mucho con el medio. Supongamos que en vez de agua simple tomamos un aceite. Obviamente la difusión de la tinta es más lenta. Aclaro esto porque es absolutamente imposible que si realizamos un experimento de difusión, todo el medio se entere instantáneamente de que existen partículas que van buscando una forma de distribución en equilibrio empleando como única causa una diferencia de concentraciones (y además estamos ante un proceso irreversible.) En consideración a lo anterior se realizará la totalidad del trabajo.

En la sección 1.1, que se llama "Introducción", se propone el sistema del cual depende el modelo matemático. Se hacen también las suposiciones básicas, se establecen las posibilidades que existen dentro de la dinámica del sistema y la definición de la terminología que se empleará a lo largo de todo el trabajo. Se hace una propuesta de modelo discreto y termina aproximando el modelo al continuo. Es necesario hacer hincapié en el hecho de que esta aproximación tiene un precio, el cual es, según

se verá en su momento, la pérdida de la estructura granular del modelo discreto. Tanto en el caso discreto como en el caso del modelo continuo las dos relaciones matemáticas básicas se llaman sistema de ecuaciones dinámicas, algunas de cuyas propiedades se tratan en la sección 1.2. Desde luego que se asume que el lector conoce las propiedades de los sistemas de ecuaciones diferenciales parciales simultáneas y en diferencias finitas. Se llega posteriormente a una formulación alternativa del problema en términos de otras dos propiedades fundamentales: la función densidad de partículas y la función densidad de corrientes. Se llega a una ecuación diferencial parcial de segundo orden: la ecuación de los telegrafistas, que es hiperbólica de segundo orden, en lugar de la ecuación diferencial parcial parabólica que nos servirá para resolver el problema de difusión en base a la ley de Fick. Después de resolver el sistema de ecuaciones dinámicas discreto y plantear generalidades acerca de la solución del sistema en el continuo, se dedica el resto del trabajo a casos particulares del mismo. En la sección 2.1 resolvemos el sistema de ecuaciones dinámicas en la recta infinita, a partir de funciones de densidad de movimiento propuestas de antemano. En la sección 3.1 se aborda el mismo problema desde el punto de vista de proponer distribuciones de partículas y analizar el comportamiento posterior del sistema en una recta infinita. Posteriormente, las secciones 4.1 y 5.1 se dedican a la solución del sistema de ecuaciones dinámicas en el continuo en la semi-recta $x > 0$, primero colocando una pared absorbente en el origen y posteriormente colocando una pared reflejante, también en el origen.

Intencionalmente se han dejado los apéndices para proporcionar al lector los indicios necesarios acerca de técnicas matemáticas que no son muy frecuentes de encontrar en la literatura, como es la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales y de la ecuación de los telegrafistas por medio de las transformaciones integrales de Laplace, de Fourier discreta, de Fourier continua, de Fourier seno, de Fourier coseno. En el apéndice 1 resolvemos la ecuación de los telegrafistas en la recta infinita por el método de Riemann; en el apéndice 2 se presentan los cálculos a detalle para resolver el sistema de ecuaciones dinámicas en el continuo por medio de transformaciones integrales, combinando las transformaciones de Laplace y de Fourier continua. Para

la solución de la ecuación de los telegrafistas en la recta $x > 0$ se escribió el apéndice 4. Los apéndices 3 y 6 tratan de las soluciones de la ecuación de difusión derivada de la Ley de Flick y se dejaron para comparación. El apéndice 5 muestra la relación entre la formulación mesoscópica y la de Flick, la cual evidentemente debe existir. Los otros dos apéndices son resultados matemáticos auxiliares simplemente, en el texto se hace oportuna referencia a ellos.

R. Salas C.

18 de agosto de 1996.

1.1: INTRODUCCIÓN.

OBJETIVOS:

1.-Definir las variables y parámetros necesarios para la descripción de la Difusión Mesoscópica Unidimensional Clásica (D.M.U.)

2.-Exponer, a través de un modelo simple, el desarrollo de una distribución inicial dada de partículas sometida a D.M.U.

3.-Calcular el valor esperado y la varianza para la posición en el caso especial de difusión de partículas con gran capacidad de transmisión.

4.-Proponer y resolver el sistema de ecuaciones dinámicas, en términos de variables discretas.

5.-A partir del sistema anterior, deducir una versión del sistema de ecuaciones dinámicas, pero para variables continuas.

El origen de esta tesis fue un cuestionamiento que surgió al resolver el siguiente problema en unidades del sistema MKS (ver *Heat, Mass & Momentum Transfer* por Warren M. Rohsenow, Prentice Hall):

Una distribución de partículas $f(x)$ Kg/m^3 de hidrógeno al tiempo t seg. se va a difundir en agua. A partir de esta distribución inicial en $t=0$. ¿Cuál será el valor de la densidad $\rho(x,t)$ en cualquier tiempo posterior?

Empleando la ley de Fick y la ecuación de continuidad, resulta que tenemos que resolver el siguiente problema de condiciones iniciales, con un coeficiente de difusión que, en este caso, es de $D = 46.97 \text{ m}^2/\text{s}$, como lo reporta el autor referido en el apéndice E a 290 Kelvin:

$$D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

sujeta a: $\rho(x,t=0)=f(x)$ Kg/m^3 arbitraria, $\frac{\partial \rho(x,t=0)}{\partial t} = 0$. Estas condiciones

iniciales corresponden a una distribución inicial arbitraria y unidimensional de partículas, la cual no sufre cambio temporal al tiempo $t=0$. Sucede como cuando tenemos una distribución $f(x)$ de partículas envueltas en una membrana y al tiempo $t=0$ retiramos instantáneamente dicha membrana. No está por demás recalcar que muy aparte del modelo que empleemos para resolver este problema estamos ante un fenómeno irreversible, causado por una diferencia de concentraciones.

Nos es bien conocido que la solución es (ver apéndice 3 para una deducción):

Tabla 1.1

El problema de Camino Aleatorio para una partícula.

Condición inicial: $P_1(x,0)=P_2(x,0)=\delta(x,0)/2$; en la celda $x=0$ en $N=0$.

δ es delta de Kronecker.

T =probabilidad de dispersión continuando el movimiento en la misma dirección.

R =probabilidad de dispersión cambiando a la dirección contraria.

x : coordenadas horizontales para las celdas, en cuyos extremos hay barreras de potencial; N : Número de evento.

$x=-4$	$x=-3$	$x=-2$	$x=-1$	$x=0$	$x=1$	$x=2$	$x=3$	$x=4$	
				1/2 > 1/2 <					N=0
			T/2 <	R/2 < R/2 >	T/2 >				N=1
		TT/2 <	TR/2 > RT/2 <	RR/2 > RR/2 <	TR/2 < RT/2 >	TT/2 >			N=2
	TTT/2 <	TTR/2 > RTT/2 <	TTR/2 < RTR/2 > RRT/2 <	RRR/2 < RRR/2 > TRT/2 < TRT/2 >	TTR/2 > RTR/2 < RRT/2 >	TTR/2 < RTT/2 >	TTT/2 >		N=3
TTTT/2 <	TTRR/2 > RTTT/2 <	TTRR/2 < RTTR/2 > TRRT/2 < RRTT/2 <	TRRR/2 > RTRR/2 < RRTR/2 > RRRT/2 < TRTT/2 < TRTT/2 >	RRRR/2 > RRRR/2 < TRTR/2 > TRTR/2 < RTRT/2 < RTRT/2 >	TRRR/2 < RTRR/2 > RRTR/2 < TTRT/2 < RRRT/2 > TRTT/2 >	TTRR/2 > RTTR/2 < TRRT/2 > RRTT/2 >	TTTR/2 < RTTT/2 >	TTTT/2 >	N=4

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{D\pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) \exp\left[-\frac{(x-\xi)^2}{4Dt}\right] d\xi \text{ Kg/m}^3.$$

Si, en particular, $f(x) = \delta(x)$ (delta de Dirac), tenemos un conjunto de partículas concentrado en el origen; sustituyendo en la última ecuación:

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{D\pi t}} \exp\left[-\frac{x^2}{4Dt}\right] \text{ Kg/m}^3.$$

Por ejemplo, si $x=60$ m, y $t=0.1$ seg. tendremos que el correspondiente valor de la densidad es $\rho(60 \text{ m}, 0.1 \text{ seg.}) = 7.84 \times 10^{-85} \text{ Kg/m}^3$.

¿Es posible que en una décima de segundo, en un punto tan alejado del origen como puede ser el que está a 60 metros, o a cualquier otra distancia (ya que tenemos una relación matemática válida para cualquier valor de x), ya podamos detectar partículas en difusión? Si esto es así ¿será que las partículas se desplazan a velocidad infinita?. La respuesta es obviamente no. Este es el punto más importante del cuestionamiento que hizo posible esta tesis.

1.-Definiciones Preliminares y Propiedades Fundamentales del Modelo.

Difusión Mesoscópica Unidimensional es un modelo físico para establecer una descripción aproximada de la situación de una partícula o conjunto de partículas, a lo largo de una recta o una semi-recta bajo las siguientes suposiciones:

Suposición 1: A lo largo de la recta infinita o semi-infinita (que denominaremos el medio) existe una estructura periódica que vamos a suponer como un alineamiento de celdas separadas por barreras idénticas de potencial. La distancia entre dos valles sucesivos (representados con V en la figura 1) es δ . El ancho de la barrera de potencial es despreciable comparado con δ .

Esta suposición es importante porque nos dará la diferencia entre la visión macroscópica (en la cual esta estructura de celdas, también llamada granular, no existe) y la microscópica (en la cual la interacción con las barreras de potencial se debe estudiar con los métodos de la Mecánica Cuántica.) De hecho, se trata del modelo de Kronig-Penney. Desde el punto de vista de la Mecánica Cuántica, podríamos escribir de inmediato la ecuación de Schrödinger para funciones de onda de electrones (por ejemplo.) Un tratamiento bastante ameno de este tema lo presenta David L. Goodstein en *States of Matter*, Prentice Hall, capítulo 3.

El modelo es mesoscópico precisamente porque realizaremos la descripción desde un punto de vista "intermedio" en escalas de tiempo y longitud, entre la consideración no granular de la formulación macroscópica que presentamos al inicio de este trabajo y una descripción cuántica como la que ya comentamos.

Suposición 2: La partícula (o las partículas) en el medio, pueden realizar saltos de tamaño δ en forma aleatoria, siempre a partir de un valle, a la derecha o a la izquierda. Puede ser posible, además, que la partícula o partículas atraviesen una barrera (fenómeno de transmisión que ocurre con probabilidad T) o bien, pueden rebotar al llegar a ella (fenómeno de reflexión que ocurre con probabilidad R .) Estos saltos tienen una duración τ . El carácter estocástico del fenómeno radica justamente en esto: no podemos decir de antemano qué tipo de interacción con las barreras de potencial tendrá lugar, reflexión o transmisión. Para abundar más: nuestra variable aleatoria será la posición de las partículas, las funciones de distribución de probabilidades se irán formulando sobre la marcha, y quedarán entonces descritos los correspondientes procesos estocásticos.

Suposición 3: Ninguna partícula puede permanecer en reposo, además la única interacción permitida es con las paredes que se encuentren en la celda correspondiente, lo que significa que sólo puede haber reflexión o transmisión con barreras, de modo que se cumple que: $T + R = 1$.

Las coordenadas x (números enteros entre $-\infty$ y $+\infty$, fig. 1) corresponden a la ubicación de los valles de potencial, y representan la posición de la partícula, sirven también como etiqueta para cada celda.

Si una partícula partiera de la celda x_0 y diera N saltos a la derecha siempre pasando de manera transparente las barreras de potencial, la celda en la que se encontraría finalmente sería $x_0 + N = x$, y para todos los saltos que efectuó es $x_l = +\delta$, $l = 1, \dots, N$.

Suposición 4: La transmisión o reflexión en una pared no altera la rapidez del salto de la partícula, que definiremos como $c = \delta/\tau$ (o las partículas, cuando tomemos un conjunto), esto es: las colisiones que resultan en reflexiones son elásticas, y las colisiones que resultan en transmisiones se efectúan de manera totalmente transparente, así que no hay cambio en la energía de la partícula.

Suposición 5: La razón $c = \delta/\tau$ es constante, le hemos llamado la rapidez de saltos, y nada tiene que ver con la velocidad de la partícula. Para cuantificar la velocidad de partícula nos tendríamos que atener a los principios fundamentales de la Cinemática: la razón de cambio de posición con

respecto al tiempo sería la velocidad ($\Delta x/\Delta t$). Esta constante, δ/τ , la rapidez de saltos, se refiere a la razón entre la distancia recorrida durante un salto y la duración del mismo.

Obviamente para un tipo particular de medio o estructura cristalina, y para determinado valor de la energía de las partículas, la rapidez de saltos puede cambiar, c es una característica de cada situación particular de difusión.

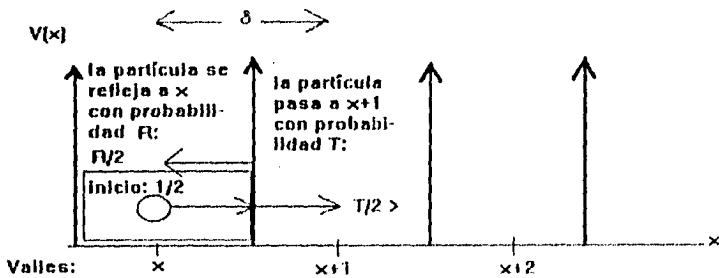


Figura 1.

Suposición 6: El resultado de un salto, que puede tener como consecuencia que la partícula vaya hacia la derecha o hacia la izquierda, dependerá exclusivamente del resultado del salto anterior. Dicho de otro modo, el proceso correspondiente a que una partícula en la posición x en el salto número N , vaya a la derecha o a la izquierda, es un proceso markoviano. Esta suposición es la diferencia fundamental que distingue la formulación que presentamos de la que realiza Chandrasekhar en Rev. of Modern Physics (Vol. 15, No.1) donde asume que los saltos son absolutamente independientes.

Lo que sucede en el tiempo $t = N\tau$ (N entero) se llama evento N .

Supongamos que una partícula está en el valle x y que se mueve hacia la derecha en el evento $N=0$; vemos de inmediato que puede haber dos posibilidades:

Possibilidad 1: que interactúe con la pared de la derecha y se transmita al valle $x+1$.

Posibilidad 2: que interactúe con la pared a la derecha y se refleje al mismo valle x de donde partió.

Pero si fuera el movimiento a la izquierda, en la celda x , puede suceder que:

Posibilidad 3: que interactúe con la pared a su izquierda y se transmita al valle $x-1$.

Posibilidad 4: que interactúe con la pared a su izquierda y se refleje al valle x .

Hagamos ahora las siguientes definiciones:

Definición 1: $P_1(x,N)$ (o P_+) es la probabilidad de que la partícula esté en el valle x (posición x) en el evento N (o tiempo $t=N\tau$) y se mueva a la derecha. Si se trata de muchas partículas le llamaremos densidad de probabilidad de partículas con movimiento a la derecha.

Definición 2: $P_2(x,N)$ (o P_-) como en la anterior definición, pero para movimiento a la izquierda.

Definición 3: $P_1+P_2 \equiv \rho(x,N)$ es la función de densidad de probabilidad total de que la partícula esté en x , al evento N . Nótese que en lo sucesivo no emplearemos el concepto de densidad como masa por unidad de volumen, sino como fracción total de partículas. La fracción de todas las partículas que van a la derecha más la fracción de las que van a la izquierda suman la unidad (100%).

Definición 4: $(P_1-P_2)c \equiv J(x,N)$ es la densidad total de corriente. Esta cantidad representa una medida de la tendencia global de movimiento de las partículas, que será hacia la derecha si es positiva y hacia la izquierda si es negativa.

Definición 5: Espacio fase es aquel al cual le asignaremos como coordenadas los valores de P_1 y P_2 .

Definición 6: Espacio de configuración es aquel al cual le asignamos como coordenadas los valores de ρ y de J .

Así pues, debemos tener:

$$0 \leq P_1, P_2, \rho, |J| \leq 1$$

$$y: \sum_{x=-\infty}^{\infty} \rho(x,N) = 1.$$

2.-Desarrollo del Proceso Difusivo.

Supongamos que colocamos una partícula en la celda $N=0$ y que le asignamos la misma probabilidad de ir a la izquierda o a la derecha. Simbólicamente

representaremos este estado inicial como:

$$\begin{aligned} & 1/2 \rangle \text{ (si va a la derecha), o} \\ & 1/2 \langle \text{ (si va la izquierda), respectivamente.} \end{aligned}$$

Si esta partícula comienza su movimiento a la derecha y realiza tres saltos de la siguiente manera, por ejemplo: una transmisión, una reflexión y otra transmisión, el movimiento resultante será evidentemente a la izquierda, y simbólicamente representaremos esto como TRT/2<; numéricamente la probabilidad de que esto ocurra es $T^2R/2$, sustituimos cada letra por su valor numérico simplemente.

Por otro lado, al ver la notación "TRRT/2 >" (por ejemplo) en una celda, representamos la opción de que una partícula inicie su movimiento con igual probabilidad a izquierda o derecha y sufra en este orden: transmisión, reflexión, reflexión, transmisión, quedando finalmente moviéndose a la derecha. Por supuesto que si cae finalmente en una celda cualquiera, existen otras opciones aparte de "TRRT/2 >" que podrían llevarla a esa celda, la suma de todas ellas nos da la probabilidad total de que la partícula esté en esa celda determinada, en un momento N dado, el número del evento se puede deducir por el número de factores del tipo T y R: en el último ejemplo TRRT/2 > nos dice de inmediato que estamos tratando con una posibilidad del evento N=4 (cuatro factores). En la tabla 1.1 generamos para los primeros 4 eventos todas las posibilidades para una partícula que inicia su movimiento de camino aleatorio en N=0 y le asignamos la misma probabilidad de ir a izquierda o derecha inicialmente, esto se expresa así:

$$P_1(x,0) = P_2(x,0) = \frac{1}{2} \delta(x,0) \quad (1.1.1)$$

donde δ es la delta de Kronecker.

Ahora bien, en N=1, si la partícula se fue por la derecha, pudo transmitirse hacia $x=1$, con movimiento resultante a la derecha, o reflejarse y regresar al valle $x=0$, pero moviéndose a la izquierda. Simbólicamente representamos la transmisión como T/2> en $x=1$ y la reflexión como R/2< en $x=0$. Matemáticamente se pueden evaluar las probabilidades simplemente fijando el valor de T, entonces calculamos

$$R=1-T \quad (1.1.2)$$

y sustituimos los números correspondientes para calcular T/2 y R/2.

Si, por el contrario, la partícula se va por la izquierda, puede transmitirse a $x=-1$ con movimiento a la izquierda, o reflejarse y regresar al valle $x=0$, pero moviéndose ahora a la derecha. Simbólicamente esto se pone

$T/2 <$ en $x=-1$ y $R/2 >$ en $x=0$.

En la tabla 1.1 vemos que para $N=1$ ahora hay tres posibles celdas ocupadas:

$x=-1$ con $T/2 <$ totalizando $P_1(-1,1)=0$ y $P_2(-1,1)=T/2$.

$x=0$ con $R/2 <$ y $R/2 >$ totalizando $P_1(0,1)=R/2$, $P_2(0,1)=R/2$.

$x=1$ con $T/2 >$ totalizando $P_1(1,1)=T/2$, $P_2(1,1)=0$.

La suma de todos los posibles valores nos da: $T/2+R/2+R/2+T/2=1$.

En $N=2$ nos damos cuenta en la tabla 1.1 de que hay 5 posibles celdas ocupadas. Procediendo como antes, buscamos en cada celda las opciones que traigan " $>$ " y las sumamos para calcular P_1 , y las que traen " $<$ " para calcular P_2 . La suma total de todos los valores de todas las celdas se reduce a la unidad, como vemos: $T^2/2+RT+R^2+RT+T^2/2=1$. Así podríamos seguir indefinidamente.

3.-Cálculo del Valor Esperado y de la Varianza para la Posición.

Consideremos $N=2$: podemos calcular, por ejemplo, el valor esperado de la posición para la fracción de partículas que van a la derecha, que llamaremos

$$E_+(x, N=2) = \sum_{x=-2}^2 x P_1(x, N=2), \text{ cuyo valor es:}$$

$$E_+(x, N=2) = -1(RT/2) + 1(RT/2) + 2(T^2/2) = T^2.$$

Ahora podemos calcular por el mismo procedimiento el valor esperado para la posición de las partículas que van a la izquierda, obteniendo: $E_-(x, N=2) = -2(T^2/2) - 1(RT/2) + 1(RT/2) = -T^2$, de modo que el valor esperado para la posición es, cuando $N=2$:

$$E(x, N=2) = E_+(x, N=2) + E_-(x, N=2) = 0.$$

Por otro lado, cuando $T=1/2$, tenemos que dos eventos sucesivos serían completamente independientes, las barreras de potencial de la tabla 1.1 son tales que indistintamente dejan pasar partículas o que las repelen. La situación cambia si hiciéramos que T tienda a la unidad, pues el efecto es hacer que la pared sea cada vez más débil, por lo cual la transmisión es más segura, por lo tanto, existe una gran tendencia a mantener la dirección del movimiento de las partículas en este caso: $T \rightarrow 1$. Como $E(x)=0$ de cualquier modo, la forma de distribuirse que tienen las partículas es simétrica respecto al origen, las partículas se van tendiendo a difundir en igual proporción a izquierda y derecha.

Pasemos ahora, dentro de nuestro caso especial de $N=2$, a evaluar la Varianza, que como sabemos está dada por la relación:

$$V(x) = E(x^2) - [E(x)]^2 \quad (1.1.3)$$

según esto debemos obtener primeramente el segundo momento $E(x^2)$, en $N=2$:

$$E(x^2) = 2T^2 - RT + RT + 2T^2 = 4T^2,$$

si $T=1/2$, $V(x)=1$; si T tiende a la unidad $V(x)$ tiende a 4 (que es igual a 2^2 , que no es coincidencia como vamos a demostrar.) Estos valores nos dicen que entre mayor sea T , mayor es también la separación de la media, lo cual es de esperarse tomando en consideración que siendo T una medida de la transmisibilidad de las barreras, estamos debilitando la capacidad de dichas barreras de potencial y, siendo mayor la tendencia a conservar la dirección de movimiento sin repulsiones, es mayor el alejamiento que debemos esperar de las partículas respecto a la media. T es una medida, por lo tanto, de la permeabilidad de nuestras barreras de potencial, y en todos los casos en que lleguemos a necesitar que su valor se aproxime a la unidad, debemos estar conscientes de que estamos debilitando la pared y aumentando la tendencia a la conservación de la dirección de movimiento de las partículas.

Generalicemos ahora los cálculos para $E(x)$ y $V(x)$ para un caso extremo, T tendiendo a la unidad. Tomemos el evento N , por supuesto que entonces R tiende a cero. Viendo la tabla de la tabla 1.1, nos damos cuenta de que, como en todos los casos aparecen productos por R , sólo tenderá a un valor no nulo el correspondiente a la barrera colocada en $x=-N$ y $x=+N$, para cada N :

$$E(x) \rightarrow \frac{1}{2} T^N (N) + \frac{1}{2} T^N (-N) = 0 \text{ cuando } T \rightarrow 1. \quad (1.1.4)$$

Análogamente, para $E(x^2)$ tenemos que:

$$E(x^2) \rightarrow \frac{1}{2} T^N (N)^2 + \frac{1}{2} T^N (-N)^2 = N^2 \text{ cuando } T \rightarrow 1. \quad (1.1.5)$$

Por lo tanto, en nuestro caso especial en que T tiende a uno:

$$V(x) = N^2 \quad (1.1.6)$$

4.-El Sistema de Ecuaciones Dinámicas de Dominio Discreto.

Relacionemos ahora las funciones P_1 y P_2 , mediante una ecuación del tipo:

$$P(x, N) = A P(x, N-1) \quad (1.1.7)$$

donde P es el vector formado por $\begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \end{pmatrix}$ y A una matriz 2 por 2. Antes de eso,

construyamos un Sistema de Ecuaciones en Diferencias para las P_i como sigue:

De acuerdo a la Información de la tabla 1.1:

$$P_1(x, N) = TP_1(x-1, N-1) + RP_2(x, N-1) \quad (1.1.8)$$

esto es: la probabilidad de que una partícula esté en el valle x al evento N tiene dos componentes: una debida a una transmisión anterior procedente de la celda $x-1$ y una reflexión anterior desde x para regresar a la misma celda x .

Análogamente:

$$P_2(x, N) = RP_1(x, N-1) + TP_2(x+1, N-1). \quad (1.1.9)$$

Al sistema formado por (1.1.8) y (1.1.9) le llamamos sistema de ecuaciones dinámicas, obviamente en el dominio discreto.

Una forma matricial para este sistema es:

$$P(x, N) = \begin{bmatrix} P_1(x, N) \\ P_2(x, N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_1(x-1, N-1) & P_2(x, N-1) \\ P_2(x+1, N-1) & P_1(x, N-1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T \\ R \end{bmatrix}$$

Empleemos esta formulación para comprobar en $N=2$, por ejemplo, lo que llevamos hecho, sustituyendo $x=0$ y $N=4$ se tiene:

$$P(0, 4) = \begin{bmatrix} P_1(0, 4) \\ P_2(0, 4) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_1(-1, 3) & P_2(0, 3) \\ P_2(1, 3) & P_1(0, 3) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T \\ R \end{bmatrix} \\ = \begin{bmatrix} TR^2/2 & T^2R/2 + R^3/2 \\ TR^2/2 & T^2R/2 + R^3/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T \\ R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T^2R^2 + R^4/2 \\ T^2R^2 + R^4/2 \end{bmatrix}$$

Este es precisamente el valor que esperábamos.

Nos interesa ahora hallar una solución completamente general del sistema de ecuaciones dinámicas, para lo cual tomaremos la transformación de Fourier de (1.1.8) y (1.1.9), el sistema de ecuaciones dinámicas en otra forma matricial se lee entonces:

$$P_F(k, N+1) = \begin{bmatrix} P_{1F}(k, N+1) \\ P_{2F}(k, N+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T \exp(ik) & R \\ R & T \exp(-ik) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{1F}(k, N) \\ P_{2F}(k, N) \end{bmatrix} = P_F(k, N), \quad (1.1.10)$$

donde hemos empleado la notación:

$$P_F(k, N) = \sum_{x=-\infty}^{+\infty} \exp(ikx) P(x, N) = \exp(\mp ik) \sum_{x \pm 1 = -\infty}^{\infty} \exp[ik(x \pm 1)] P(x \pm 1, N) \\ = \exp(\mp ik) \sum_{z=-\infty}^{+\infty} \exp(ikz) P(z, N).$$

la forma (1.1.10) es la Cadena de Markov correspondiente al sistema de ecuaciones dinámicas en el Espacio de Fourier, porque describe un proceso estocástico en el cual los valores de las funciones de distribución de probabilidad P_1 o P_{1F} , dependen sólo del valor previo y afectan sólo al valor subsecuente. Desde luego que en la forma (1.1.10) el espacio x se sustituye por el espacio k . Si la matriz 2 por 2 en (1.1.10) le llamamos T :

$$P_F(k, N+1) = T P_F(k, N).$$

Esta fórmula recursiva nos dice de inmediato que:

$$P_F(k, N) = T^N P_F(k, 0).$$

Para calcular la N potencia de la Matriz T , evaluemos primero sus valores propios:

$$\lambda_{1/2} = T \cos k \pm \sqrt{R^2 - T^2 \sin^2 k} = r \exp(\pm i\mu),$$

$$\text{donde tomamos: } r = \sqrt{T^2 - R^2} \text{ y } \mu = \cos^{-1}(T \cos k / r).$$

Se puede demostrar, como lo hace T. C. Bradbury en *Theoretical Mechanics*, Wiley, en el capítulo 3, sobre matrices:

$$T^N = \frac{\lambda_1^N - \lambda_2^N}{\lambda_1 - \lambda_2} T + \frac{\lambda_1 \lambda_2^N - \lambda_2 \lambda_1^N}{\lambda_1 - \lambda_2} I,$$

I: matriz unitaria.

Tenemos, por lo tanto, que escribir lo siguiente:

$$\frac{\lambda_1^N - \lambda_2^N}{\lambda_1 - \lambda_2} = r^{N-1} \frac{\operatorname{sen} \mu N}{\operatorname{sen} \mu} = r^{N-1} \frac{\operatorname{sen}\{N[\cos^{-1}(T \cos k / r)]\}}{\operatorname{sen}\{\cos^{-1}(T \cos k / r)\}} = r^{N-1} U_{N-1}\left(\frac{T \cos k}{r}\right),$$

donde U_{n-1} es el polinomio de Chebyshev de segunda especie y orden N , tal como lo presenta Abramowitz en *Handbook of Mathematical Functions*. Análogamente

$$\text{tenemos que: } \frac{\lambda_1 \lambda_2^N - \lambda_2 \lambda_1^N}{\lambda_1 - \lambda_2} = r^N U_{N-2}\left(\frac{T \cos k}{r}\right).$$

Finalmente:

$$T^N = r^{N-1} U_{N-1}\left(\frac{T \cos k}{r}\right) T - r^N U_{N-2}\left(\frac{T \cos k}{r}\right) I,$$

donde, por definición (como en *Handbook...* de Abramowitz):

$$U_n(B) = \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^m \frac{(n-m)!}{m!(n-2m)!} (2B)^{n-2m},$$

y adicionalmente podemos demostrar (Apéndice 8) que la fórmula de inversión para $\cos^{\sigma} k \exp(i\beta k)$ es:

$$G(x, N) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos^{\sigma} k \exp(i\beta k) \exp(-ikx) dk = \frac{1}{2\sigma} \frac{\sigma!}{\{(\sigma+\beta-x)/2\}! \{(\sigma-\beta-x)/2\}!},$$

donde $(\sigma \pm \beta \mp x)/2$ debe ser un entero positivo, de lo contrario $G(x, N) = 0$, finalmente se obtiene:

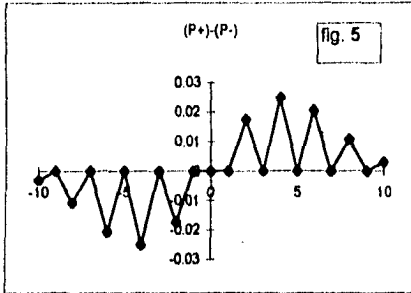
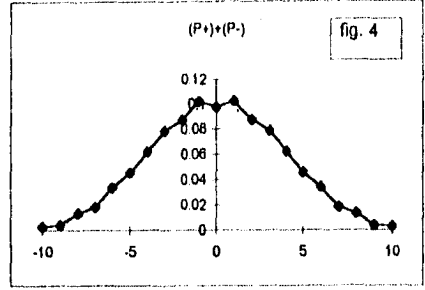
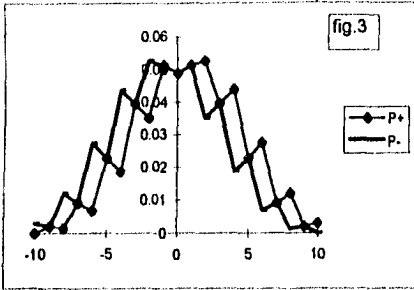
$$\begin{aligned} P_{1/2}(k, N) = & \frac{T}{2} r^{N-1} \sum_{m=0}^{\lfloor (N-1)/2 \rfloor} (-1)^m \frac{(N-1-m)!}{m! \{ (N-1-2m \pm 1-x)/2 \}! \{ (N-1-2m \mp 1+x)/2 \}!} \left(\frac{T}{r}\right)^{N-1-2m} \\ & + \frac{R}{2} r^{N-1} \sum_{m=0}^{\lfloor (N-1)/2 \rfloor} (-1)^m \frac{(N-1-m)!}{m! \{ (N-1-2m-x)/2 \}! \{ (N-1-2m+x)/2 \}!} \left(\frac{T}{r}\right)^{N-1-2m} \\ & - \frac{1}{2} r^N \sum_{m=0}^{\lfloor (N-2)/2 \rfloor} (-1)^m \frac{(N-2-m)!}{m! \{ (N-2-2m-x)/2 \}! \{ (N-2-2m+x)/2 \}!} \left(\frac{T}{r}\right)^{N-2-2m}. \quad (1.1.11) \end{aligned}$$

En las figuras 3 a 26 podemos ver las gráficas correspondientes a diversos valores de T y de N.

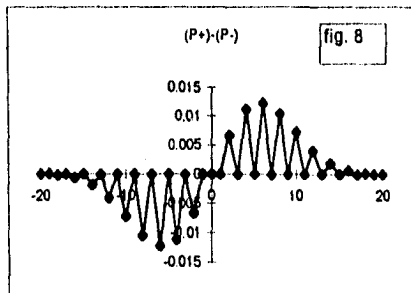
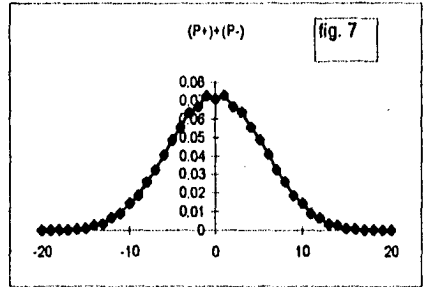
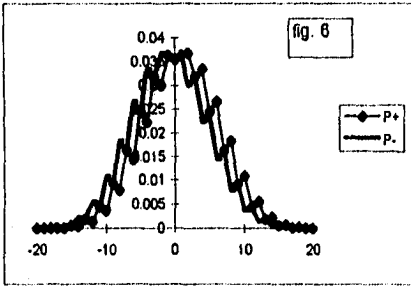
Podemos observar que si T es cercana a 1/2 (Grupos 1, 2 y 7) el comportamiento de las gráficas es similar al de una Gaussiana. Si, por el contrario, T es cercana a la unidad (Grupos 5 y 6), el debilitamiento de las barreras de potencial y el consecuente aumento de la tendencia a la conservación de la dirección del movimiento conducen a que exista una mayoría de partículas en $x=N$ y $x=-N$, que llamaremos balísticas, correspondientes a transmisiones en forma ininterrumpida, con velocidad $c=1$.

En lo sucesivo usaremos la convención de llamar partículas balísticas a aquellas que se mueven como si efectuasen movimiento rectilíneo uniforme.

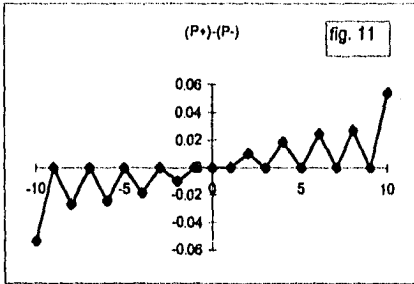
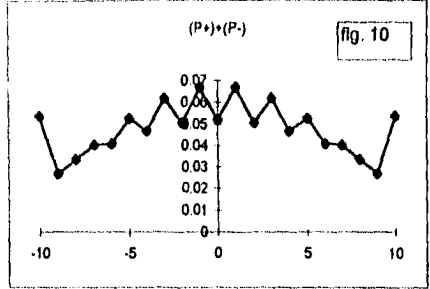
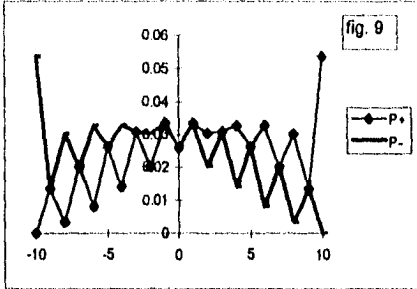
Esta conclusión es válida en general, y veremos que en cualquier caso, la D.M.U. tiene como característica una cantidad de partículas desplazándose simétricamente como balísticas, y el resto queda como cauda que se aproxima a



Solución del Sistema de Ecuaciones Dinámicas:
 $P_1(x,N)=P_1(x-1,N-1)T+P_2(x,N-1)R$
 $P_2(x,N)=P_2(x+1,N-1)T+P_1(x,N-1)R$
 sujeto a:
 $P_1(x,0)=\delta(x,0)/2$
 $P_2(x,0)=\delta(x,0)/2$
 δ es delta de Kronecker.
 Grupo 1: $N=10, T=0.60$



Grupo 2: $N=20, T=0.80$



Solución del Sistema de Ecuaciones Dinámicas:

$$P_1(x, N) = P_1(x-1, N-1)T + P_2(x, N-1)R$$

$$P_2(x, N) = P_2(x+1, N-1)T + P_1(x, N-1)R$$

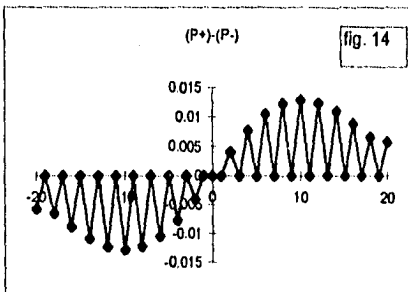
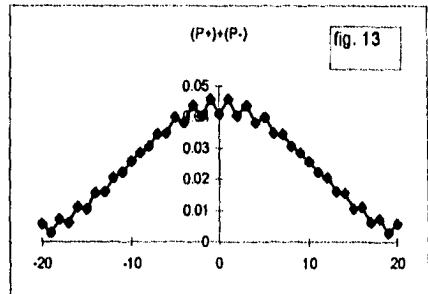
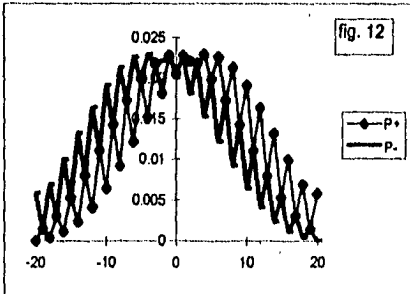
sujeito a:

$$P_1(x, 0) = \delta(x, 0)/2$$

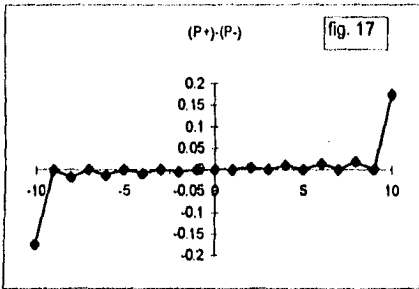
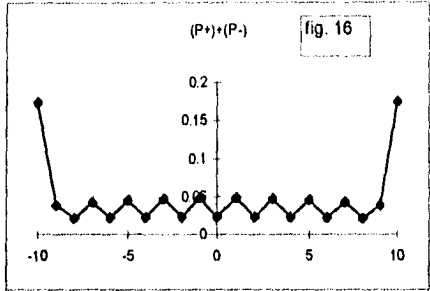
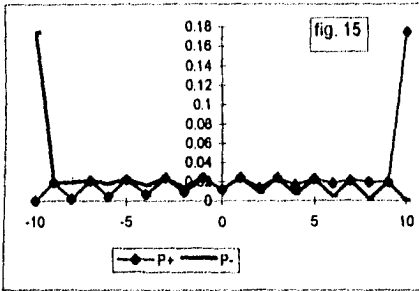
$$P_2(x, 0) = \delta(x, 0)/2$$

δ es delta de Kronecker.

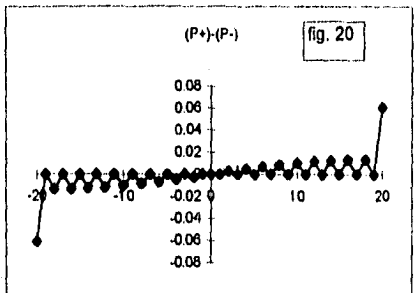
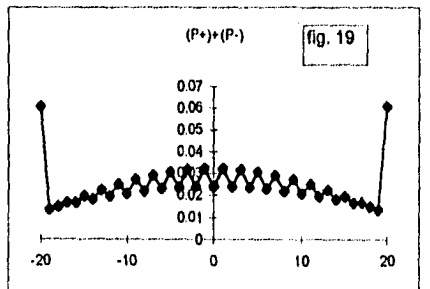
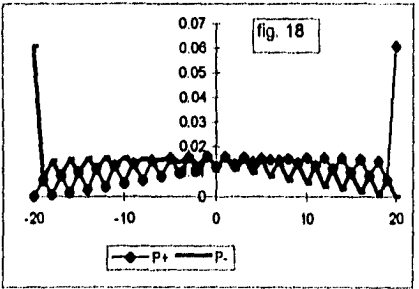
Grupo 3: $N=10$, $T=0.80$



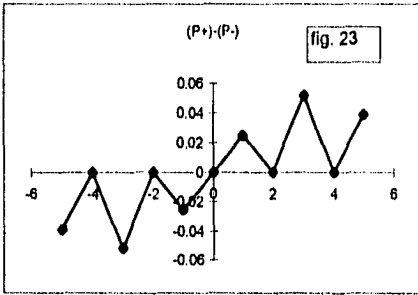
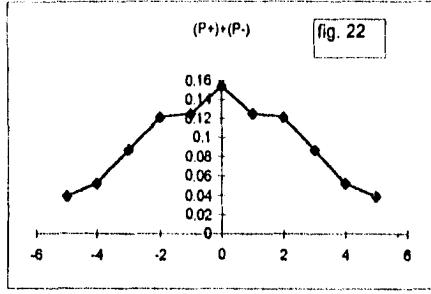
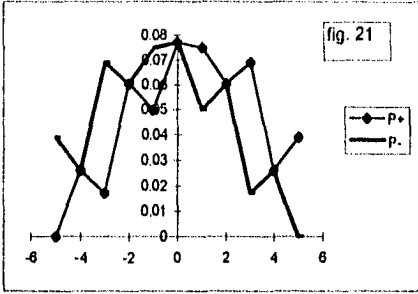
Grupo 4: $N=20$, $T=0.80$



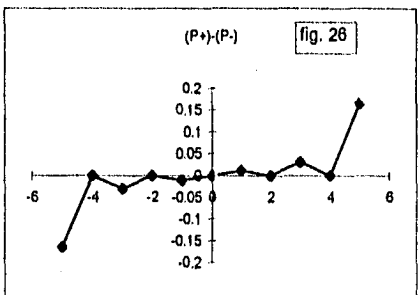
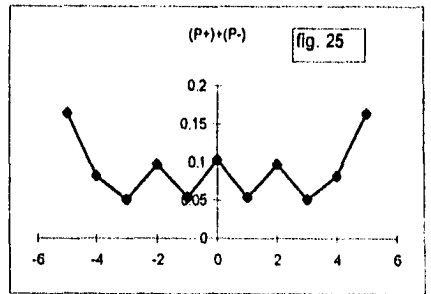
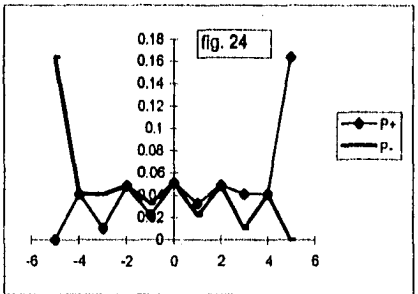
Solución del Sistema de ecuaciones dinámicas:
 $P_1(x,N)=P_1(x-1,N-1)T+P_2(x,N-1)R$
 $P_2(x,N)=P_2(x+1,N-1)T+P_1(x,N-1)R$
 sujeto a:
 $P_1(x,0)=\delta(x,0)/2$
 $P_2(x,0)=\delta(x,0)/2$
 δ es delta de Kronecker.
 Grupo 5: $N=10, T=0.90$



Grupo 6: $N=20, T=0.90$

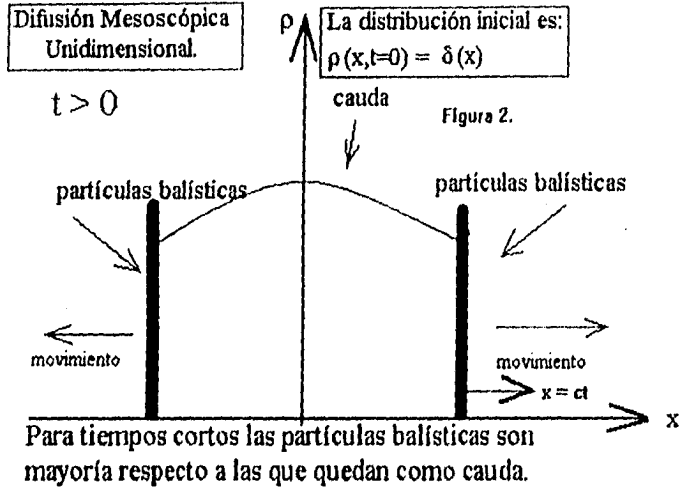


Solución del Sistema de ecuaciones dinámicas:
 $P_1(x,N)=P_1(x-1,N-1)T+P_2(x,N-1)R$
 $P_2(x,N)=P_2(x+1,N-1)T+P_1(x,N-1)R$
 sujeto a:
 $P_1(x,0)=\delta(x,0)/2$
 $P_2(x,0)=\delta(x,0)/2$
 δ es delta de Kronecker.
 Grupo 7: N=5, T=0.60



Grupo 8: N=5, T=0.80

una forma gaussiana:



En esta figura las distribuciones que llamamos partículas balísticas estarán afectadas, como demostraremos en el caso continuo, de un factor de decaimiento temporal, y para una distribución inicial $\delta(x)$ se comportarán como $\delta(ct \pm x) \exp(-\frac{t}{2\theta})$ donde θ es una constante característica del medio.

5.-Aproximación al Continuo.

Pasaremos ahora a realizar una aproximación continua (en la cual perderemos la estructura de celdas, como primera consecuencia). Para ello debemos hacer que tanto δ como τ tiendan a cero simultáneamente, lo cual se logra modificando nuestra escala de tiempos y de distancias a la vez: si medimos difusión en segundos y milímetros, ahora lo hacemos en nanosegundos y Angstroms, pero la razón δ/τ debe tender a un valor constante, de modo que los saltos más pequeños en longitud deberán ser más cortos en duración. Bajo estas circunstancias la ecuación (1.1.8) nos da:

$$P_1(x,t) + \tau \frac{\partial P_1}{\partial t} \cong T(P_1(x,t) - \delta \frac{\partial P_1}{\partial x}) + RP_2(x,t) \quad (1.1.12)$$

dividiendo entre τ y haciendo tender T a la unidad:

$$\left(\frac{\partial P_1}{\partial t} + \frac{\delta}{\tau} \frac{\partial P_1}{\partial x} \right) \cong + \frac{R}{\tau} [P_2(x,t) - P_1(x,t)]$$

pero para que podamos tomar el límite cuando τ y δ tienden a cero, con T

tendiendo a la unidad (y obviamente R a cero), es preciso postular que no sólo δ/τ tienda a una constante, sino también: $\frac{R}{\tau} \equiv \frac{1}{2\theta} = \lambda$

Este resultado es una forma de expresar el Límite de Dispersión Débil (Weak Scattering Limit).

θ (que escribiremos también como $\frac{1}{2\lambda}$) se llama tiempo característico, propio de cada medio, λ es el coeficiente de amortiguamiento y también es propio de cada medio. Aplicando esto en (1.1.12) y procediendo igual con (1.1.9) el sistema de ecuaciones dinámicas es ahora, en el continuo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_1}{\partial t} &= -c \frac{\partial P_1}{\partial x} + \frac{1}{2\theta} P_2(x, t) - \frac{1}{2\theta} P_1(x, t) \\ \frac{\partial P_2}{\partial t} &= +c \frac{\partial P_2}{\partial x} + \frac{1}{2\theta} P_1(x, t) - \frac{1}{2\theta} P_2(x, t). \end{aligned} \quad (1.1.13)$$

Adicionalmente, la cantidad $D=c^2\theta$ se llama coeficiente de Difusión. Este coeficiente D , por definición es:

$$D = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\delta^2}{\tau} \frac{V(x)}{2N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\delta^2}{\tau} \frac{1}{2} N\tau = \lim_{N \rightarrow \infty} c^2 \left(\frac{1}{2} N\tau\right) = c^2 \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2} N\tau\right)$$

de donde el tiempo característico es entonces: $\theta = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2} N\tau\right)$.

$N \rightarrow \infty$

La aproximación continua es válida para tiempos largos y saltos muy cortos, comparados con τ , porque como eliminamos la estructura granular, en completa semejanza con lo que hacemos en los procesos de cálculo infinitesimal, ya no podemos volver a ella, de modo que lo que empezó como un proceso estocástico, se vuelve ahora un sistema de ecuaciones en forma determinista. Esta modificación introducida por el proceso de límite para emplear variables deterministas es comentado de modo muy interesante por Kellog en *Foundations of Potential Theory* Springer, capítulo 1, sección 3, en relación con el cálculo de potenciales gravitatorios de geometrías planas y tridimensionales.

Una restricción obligada es ahora:

$$0 \leq P_1, P_2, |J|, \rho \leq 0 \quad \int_{x=-\infty}^{\infty} \rho(x, t) dx = 1.$$

Aquí:

$$\rho(x, t) = P_1(x, t) + P_2(x, t).$$

es la función de densidad total de partículas, nuevamente:

$$J(x,t) = c[P_1(x,t) - P_2(x,t)] \\ = \sqrt{D/\theta} [P_1(x,t) - P_2(x,t)]$$

es la función de densidad de corriente. Usamos D y θ que son constantes físicas en las que no se detecta ya necesariamente estructura granular, pero esto es por congruencia de lenguaje, después de todo c , que lleva implícito el planteamiento por medio del uso de estructura granular, se puede expresar en términos de ellas.

Finalizaremos esta sección comentando el paso del modelo discreto al continuo desde el punto de vista de un caso límite del coeficiente de correlación de la variable aleatoria x_1 , cuyo dominio será el conjunto $\{+\delta, -\delta\}$ y que caracteriza cada salto por su tamaño y su dirección, izquierda (menos) y derecha (más.) Definimos la siguiente función de distribución de probabilidad:

$$P(x_1=+\delta) = \begin{cases} T & x_{1-1} = +\delta \\ R & x_{1-1} = -\delta \end{cases} \quad P(x_1=-\delta) = \begin{cases} R & x_{1-1} = +\delta \\ T & x_{1-1} = -\delta \end{cases}$$

Por definición el coeficiente de correlación para dos saltos sucesivos es (ver :Keeping, E.S. *Mathematics of Statistics*, Van Nostrand.):

$$\Omega(1,1-1) = \frac{E(x_1 x_{1-1}) - E(x_1)E(x_{1-1})}{\sqrt{E(x_1^2) E(x_{1-1}^2)}}$$

podemos calcular fácilmente los momentos requeridos como sigue:

$$E(x_1) = T(+\delta) + R(+\delta) + T(-\delta) + R(-\delta) = 0, \text{ por lo tanto: } E(x_{1-1}) = 0 \\ E(x_1 x_{1-1}) = T(+\delta)(+\delta) + R(+\delta)(-\delta) + R(-\delta)(+\delta) + T(-\delta)(-\delta) = 2(T-R)\delta^2 \\ E(x_1^2) = T\delta^2 + R\delta^2 + R\delta^2 + T\delta^2 = 2\delta^2$$

por lo tanto:

$$\Omega(1,1-1) = T - R = 2T - 1$$

de modo que si eliminamos sucesivamente el carácter estocástico, aceptando una formulación determinista, Ω debe tender a la unidad, conforme a la Teoría de Probabilidades, y esto implica como resultado en nuestro modelo, que el coeficiente de transmisión T también tenga por valor límite la unidad. Hay completa congruencia con lo que hemos dicho con anterioridad.

1.2: ALGUNAS CONSECUENCIAS IMPORTANTES DEL SISTEMA DE ECUACIONES DINÁMICAS EN EL ESPACIO DE CONFIGURACIÓN.

OBJETIVOS:

1.-Ejemplificar condiciones iniciales para el estudio de difusión mesoscópica unidimensional que sean físicamente aceptables.

2.-Individualizar, del sistema de ecuaciones dinámicas en el continuo a una ecuación diferencial parcial para cada una de las funciones de distribución: $P_i (i=1,2.)$

3.-Establecer propiedades generales de la solución y las condiciones iniciales y de frontera de las ecuaciones obtenidas anteriormente.

¿Por qué un capítulo dedicado a este tema? Usando las palabras de Garabedian en *Partial Differential Equations*, Wiley: "...una ecuación diferencial parcial por sí misma es un ente matemático excesivamente complejo como para tratar de darle significado en lo general, es la labor de cada estudiante formular correctamente cómo quiere condicionar semejante objeto para obtener resultados que puedan ser corroborados con el experimento, ... o por lo menos con el sentido común". Esta es una valiosa observación.

1.-Ejemplos de Condiciones Iniciales para el Estudio de Difusión Mesoscópica Unidimensional.

Para resolver el sistema de ecuaciones dinámicas en el continuo, debemos proponer dos condiciones iniciales; de modo que si damos un valor de las P_i , al tiempo $t=0$, podríamos obtener (por lo menos en principio) una solución en un medio unidimensional infinito. La pregunta que debemos hacernos, por lo tanto, antes de intentar resolver el sistema de ecuaciones dinámicas es ¿cuál es la función de distribución inicial de partículas que van a la derecha y a la izquierda?

Físicamente debemos tener cuidado en algunos puntos importantes, en relación a las condiciones que vamos a plantear, como son el hecho de que la suma de las P_i deben cumplir la condición de integrar a la unidad con respecto a x , como lo exige la normalización que establecimos al final de la sección anterior, y que sean ambas, P_1 y P_2 positivas.

Con mucha frecuencia emplearemos condiciones iniciales del tipo de la

función delta de Dirac: $P_1(x, t=0) = P_2(x, t=0) = \frac{1}{2} \delta(x-x_0)$, aceptables porque se cumple que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P_1(x, t=0) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} \delta(x-x_0) dx = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-x_0) dx = \frac{1}{2}, \quad 1=1, 2,$$

y la suma de ambas es la unidad. La función delta empleada como condición inicial de la función de distribución total de partículas, que es la suma: P_1+P_2 , nos representa precisamente una distribución concentrada en un punto: x_0 . $\rho(x, t=0) = \delta(x)$ sería el caso en que tuviésemos una distribución inicial de partículas concentradas en el origen.

En algún momento también emplearemos una función gaussiana con centro en el origen como condición inicial:

$$\rho(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2),$$

en este caso tenemos un conjunto de partículas sujeta a una distribución inicial normal. O podríamos poner una función rectangular centrada en el origen del tipo:

$$\rho(x, t=0) = \begin{cases} 1/2, & |x| < 1 \\ 0 & \text{de otro modo} \end{cases}$$

o escrita con la terminología de los textos de matemática operacional como

$$\rho(x, t=0) = \frac{1}{2} H(1-|x|),$$

donde H es la función escalón unitario de Heaviside que es igual a uno cuando su argumento es positivo y cero en caso contrario. Claramente la diferencia entre las dos últimas condiciones iniciales de funciones de distribución total de partículas radica en que en el caso de la gaussiana tenemos un conjunto que se extiende desde $t=0$ a lo largo de toda la recta $-\infty < x < \infty$, y en el caso de la función cuadrada el conjunto se extiende inicialmente sólo a lo largo de un dominio finito de valores de x .

En principio las dos últimas son condiciones iniciales válidas para la densidad de partículas; para las P_1 podríamos proponer que cada una de sus condiciones iniciales sea simplemente la mitad de estas funciones de distribución, de modo que obviamente su suma es una función físicamente

aceptable para la densidad. Si recordamos que: $J=c(P_1-P_2)$, con las P_i iguales al tiempo $t=0$, la corriente inicial es nula.

Debemos cuidar, por tanto, que al proponer una condición inicial sobre la P_1 , digamos, la otra condición inicial sobre la P_2 , no se puede proponer arbitrariamente.

2.-Particularización del Sistema de Ecuaciones Dinámicas a Ecuaciones Diferenciales Separadas para cada Distribución.

Ahora eliminaremos P_1 y P_2 del sistema de ecuaciones dinámicas obtenido en el artículo anterior. Lo reescribimos:

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} + c \frac{\partial P_1}{\partial x} = -\frac{1}{2\theta} P_1 + \frac{1}{2\theta} P_2; \quad \frac{\partial P_2}{\partial t} - c \frac{\partial P_2}{\partial x} = \frac{1}{2\theta} P_1 - \frac{1}{2\theta} P_2. \quad (1.2.1)$$

Tratando las derivadas y productos como operadores, suponiendo que las funciones y sus derivadas cumplen con las condiciones necesarias de continuidad:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2\theta}\right) P_1 - \left(\frac{1}{2\theta}\right) P_2 = 0, \quad (1.2.2)$$

para la primera ecuación, y para la segunda:

$$-\left(\frac{1}{2\theta}\right) P_1 + \left(\frac{\partial}{\partial t} - c \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2\theta}\right) P_2 = 0. \quad (1.2.3)$$

Aplicando a (1.2.3) el operador que afecta a P_1 en (1.2.2) y luego multiplicando la (1.2.2) por $\frac{1}{2\theta}$ y sumando tenemos:

$$c^2 P_2 + \left(\frac{\partial}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2\theta}\right) \left(\frac{\partial}{\partial t} - c \frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2\theta}\right) P_2 = 0$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 P_2}{\partial t^2} + \frac{1}{D} \frac{\partial P_2}{\partial t} - \frac{\partial^2 P_2}{\partial x^2} = 0. \quad (1.2.4)$$

Por un procedimiento semejante vemos que P_1 y P_2 verifican la misma

ecuación diferencial, y además, tanto P_1+P_2 como P_1-P_2 verifican esta ecuación diferencial (esto por el principio de superposición de las soluciones de las ecuaciones diferenciales parciales lineales.) A (1.2.4) se le conoce como ecuación de los telegrafistas.

Puede resultar extraño el hecho de que a partir de un modelo que empezó con un proceso estocástico de carácter Markoviano ahora se presente cada función de distribución en una ecuación diferencial con una derivada segunda en el tiempo, la cual implica una referencia a dos etapas distintas de movimiento, y no a una como el Markoviano. Pero no olvidemos que en la aproximación continua ya no existe carácter aleatorio, todo está puesto en términos de variables deterministas, y en ese contexto, no debe resultar sorprendente encontrar la mencionada derivada segunda.

La ecuación diferencial parcial hiperbólica de los telegrafistas reemplaza, por lo tanto, a la ecuación diferencial parcial parabólica que hubiéramos tenido que resolver en el modelo que se basaba en la Ley de Fick. El término adicional que ha surgido en este caso, y que distingue ambas ecuaciones diferenciales parciales es el que contiene una segunda derivada temporal.

Esta formulación nos ha resuelto el problema original que propusimos al inicio de este trabajo, porque la ecuación diferencial parcial hiperbólica es precisamente la ecuación de onda amortiguada, que surge en Electrodinámica y toma en cuenta el hecho de que las señales se propagan a velocidad finita. Para una discusión mucho más detallada de este punto puede analizarse la presentación de Stratton en *Electromagnetic Theory*. Mc. Graw Hill. (Es sorprendente, desde mi muy particular forma de ver las cosas que ya desde este momento se vislumbra una salida favorable al inconveniente de preguntar sobre velocidades de propagación de partículas infinita.)

3.-Propiedades Generales de las Soluciones y de las Condiciones Iniciales y de Frontera.

La solución de la ecuación (1.2.4) requiere dos condiciones iniciales: una sobre la función y otra sobre la derivada de la función que pretende calcularse, para un medio infinito.

Si vemos la ecuación de los telegrafistas como la ecuación de onda amortiguada y pensamos, digamos, en una cuerda elástica ¿qué hacemos para seguir la observación de Garabedian, de dejar al estudiante el proponer

condiciones iniciales lo más cercanas posible al sentido común?, tendríamos que pensar en el papel que juegan las constantes físicas del contexto como para dar los coeficientes de la ecuación diferencial, y también en la forma geométrica de la cuerda al tiempo $t=0$. Igualmente tendríamos que pensar si se imprime alguna velocidad inicial al sistema. Si la variable de decisión (esto es, la variable dependiente de la ecuación diferencial parcial) es la separación ξ respecto a la recta de los puntos de la cuerda, el valor inicial de ξ y de su derivada temporal bastan para resolver nuestro problema completamente.

En perfecta analogía podríamos pensar en la ecuación de los telegrafistas en el contexto de la difusión mesoscópica unidimensional. Si la variable de decisión es la función de distribución de partículas tenemos que decir cuál era la distribución de partículas inicial y cómo variaba con el tiempo en $t=0$.

En relación con otro punto importante: debemos exigir que cuando x tiende a infinito positivo o negativo, P_1 (que denotaremos también como P_+) y P_2 (que denotaremos también P_-) se anulen, esto es, las soluciones que vamos a obtener deben ser acotadas. En la recta semi-infinita: $x>0$, debemos exigir, aparte de las condiciones iniciales, que P_2 tienda a cero cuando x tiende a infinito positivo, y debemos asignar valores a las P_1 o $\partial P_1/\partial x$ en el origen al tiempo cero (condiciones de frontera.) Será en el origen donde colocaremos siempre la frontera del problema, en este trabajo. Tales condiciones a la frontera las llamaremos paredes, porque físicamente es lo que representan. Existe una gran cantidad de paredes: pensemos en una pared consistente en una placa cargada positivamente, y que las partículas en difusión son electrones, en este caso mientras más electrones lleguen a la pared, es claro que la diferencia de potencial irá disminuyendo hasta que el efecto de la pared deje de ser atractivo, para un número suficientemente elevado de electrones. En este trabajo nos ocuparemos de dos tipos de pared: la pared reflejante y la absorbente. Una pared reflejante es aquella tal que en el punto en que se encuentra, la corriente se anula, esta es la mejor forma que se me ocurre para describir un rebote: $J(x=0,t)=0$. Una pared absorbente es aquella tal que cuando una partícula llega a ella, esta partícula no se puede reincorporar al medio en que se movía. En su momento insistiremos y detallaremos en este interesante punto. No perdamos de vista: la forma de identificar una pared es a través de condiciones a la frontera, y, siguiendo la observación de

Garabedian, nuestra comprensión del fenómeno asociado a la presencia de paredes se asocia íntimamente a nuestra facilidad de proponer la formulación matemática correspondiente.

Tomemos ahora $\rho = P_1 + P_2$ y $J = c(P_1 - P_2)$, definimos como $\text{Tel}(\rho)$ al operador siguiente:

$$\text{Tel}(\rho) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial t} \right) \rho$$

Veamos varios casos:

Caso 1: $\text{Tel}(\rho) = 0$ $-\infty < x < \infty$; entonces se debe exigir que $\rho(\pm\infty, t) = 0$. $\rho(x, 0)$ debe proponerse previamente. Igualmente: $\partial\rho/\partial t$ en $(x, t=0)$ debe proponerse previamente.

Caso 2: $\text{Tel}(\rho) = 0$ $x > 0$; entonces se debe exigir que $\rho(+\infty, t) = 0$. $\rho(0, t)$ ó $\partial\rho(x=0, t)/\partial x$ debe proponerse previamente, al igual que $\rho(x, 0)$ y $\partial\rho/\partial t$ en $(x, t=0)$.

En la medida que nos es posible plantear el problema de Difusión Mesoscópica Unidimensional y caracterizar sus condiciones iniciales y de frontera, podremos interpretar adecuadamente el fenómeno a través de las representaciones gráficas de las P_1 y de ρ , J ; el problema se reduce a poder resolver las ecuaciones diferenciales parciales correspondientes por los métodos típicos.

Estamos analizando el problema en dos espacios, el espacio fase y el espacio de configuración. Dijimos que dos condiciones iniciales bastan para resolver el sistema de ecuaciones dinámicas, y que la ecuación diferencial parcial de los telegrafistas requiere una condición inicial sobre función y sobre la derivada, pero es obvio cuestionarse ¿estamos diciendo lo mismo?. La respuesta afortunadamente es ¡sí!, pero claro, debemos tomar en cuenta que el paso de un espacio a otro significa una operación intermedia. en el espacio fase nuestras coordenadas son P_1 y P_2 , en el de configuración son la suma y la resta multiplicada por $c = \sqrt{D/\vartheta}$. Si, recordamos el sistema de ecuaciones dinámicas en $-\infty < x < \infty$:

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} + c \frac{\partial P_1}{\partial x} = - \frac{1}{2\vartheta} (P_1 - P_2)$$

$$\frac{\partial P_2}{\partial t} - c \frac{\partial P_2}{\partial x} = - \frac{1}{2\vartheta} (P_2 - P_1) \quad (1.2.5)$$

como es válido en todo tiempo, lo es en particular para $t=0$, de modo que si $P_1(x, t=0)=F_1(x)$ y $P_2(x, t=0)=F_2(x)$ son propuestas (evidentemente exigiendo que su suma, densidad de partículas al tiempo cero, tenga un valor de uno para la integral respecto a la posición):

$$\frac{\partial P_1(x, t=0)}{\partial t} + c \frac{dF_1}{dx} = -\frac{1}{2\sigma} [F_1(x) - F_2(x)]$$

$$\frac{\partial P_2(x, t=0)}{\partial t} - c \frac{dF_2}{dx} = -\frac{1}{2\sigma} [F_2(x) - F_1(x)] \quad (1.2.6)$$

sumando las dos últimas ecuaciones:

$$\partial \rho(x, t=0) / \partial t = -c(dF_1/dx - dF_2/dx); \quad (1.2.7)$$

¡la condición inicial para la derivada temporal de ρ !. Además es importante insistir en que $\rho(x, t=0)=F_1(x)+F_2(x)$, ¡la condición inicial para ρ !, y como esta suma: F_1+F_2 debe integrar a la unidad, resulta claro de (1.2.7) que la proposición de $\partial \rho(x, t=0) / \partial t$ no puede ser arbitraria.

1.3: PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA EN EL ESPACIO DE CONFIGURACIÓN.

OBJETIVOS:

1.-Obtener la ecuación de Maxwell-Cattaneo a partir de la descripción en espacio fase.

2.-Relacionar la ecuación de Maxwell-Cattaneo con la ecuación de continuidad, para obtener las ecuaciones de difusión mesoscópica para la función de distribución de densidad de partículas independientemente del resultado en espacio fase y mostrar la equivalencia de ambos puntos de vista.

3.-Realizar cambios de variable adecuados para trabajar con cantidades adimensionales.

1. Ecuación de Maxwell Cattaneo.

Consideremos el movimiento difusivo de una cierta cantidad de materia en una dimensión. Llamemos ρ a la densidad de partículas. La ecuación de Maxwell-Cattaneo permite relacionar la función de distribución de densidad de corriente con la de partículas como sigue: *restemos las ecuaciones (1.2.5) del sistema de ecuaciones dinámicas*, tendremos así (x_1 es la coordenada cartesiana horizontal, t el tiempo):

$$\frac{1}{c} \frac{\partial J}{\partial t} + c \frac{\partial \rho}{\partial x_1} = - \frac{1}{c\vartheta} J,$$

pero como $c^2\vartheta = D$, multiplicando ésta última igualdad por $c\vartheta$ tenemos la denominada ecuación de Maxwell-Cattaneo:

$$J = - D \frac{\partial \rho}{\partial x_1} - \vartheta \frac{\partial J}{\partial t}. \quad (1.3.1)$$

donde J es la densidad de corriente, ρ es la densidad de partículas, t es el tiempo, D es el coeficiente de difusión y ϑ un tiempo característico de relajación para cada medio, cuyo valor se supondrá constante. El llamarle "tiempo de relajación" se debe al hecho de que debido a la existencia del término en ϑ se tendrá un factor exponencial negativo en la solución.

Veamos la ecuación de Maxwell-Cattaneo, la función de distribución de corrientes tiene dos componentes:

La primera de ellas es proporcional al negativo del cambio de la densidad con respecto a la posición: $-D \frac{\partial \rho}{\partial x_1}$; a medida que los posibles valores de x_1 aumentan, es decir, a medida que vemos desde más lejos el fenómeno difusivo, dado que la difusión es un proceso que eminentemente tiende hacia el equilibrio, esta componente irá disminuyendo. Las corrientes decrecen a medida que "vemos más lejos", aclaramos: para posiciones permitidas, porque ya estamos conscientes de que el efecto difusivo no se transmite por todo el medio instantáneamente.

La segunda componente corresponde a la evolución de la propia corriente: $-\theta \frac{\partial J}{\partial t}$ a medida que pasa el tiempo, el propio cambio temporal de la corriente hace que las misma decrezca. Este término es una corrección a la Ley de Fick, y de acuerdo a nuestra experiencia con este tipo de términos, el modelo deberá incorporar un decrecimiento exponencial temporal: $\exp(-t \times \text{const.})$. Un poco más adelante veremos que en efecto, así sucede (todos sabemos que un tipo de componente como éste aparece cuando resolvemos un circuito eléctrico simple que contiene un inductor L, un resistor R y una fuente de potencial eléctrico E(t), en notación típica: $i = -\frac{L}{R} \frac{di}{dt} + \frac{E(t)}{R}$; i tiene un factor exponencial temporal decreciente.)

Por otro lado tomemos en cuenta lo siguiente, hablando de dimensiones:

$$[c] = Lt^{-1}; [J] = Lt^{-1}; [D] = L^2t^{-1}; [\rho] = 1; [\theta] = t. \quad (1.3.2)$$

En unidades del sistema MKS, por ejemplo, t se mide en segundos, L en metros.

Tanto D como θ son constantes características del medio en que sucede el proceso de difusión y las definimos en nuestro nuevo contexto en la sección 1.1, apartado 5.

Ya establecimos, pues, que la relación (1.3.1) es una variación de la Ley de Fick:

$$J = -D \nabla \rho, \quad (1.3.3)$$

La relación (1.3.1) comenzará a aproximarse al régimen fickeano a medida que la cantidad $\frac{\partial J}{\partial t}$ se haga más y más pequeña, esto es, a medida que el tiempo

es muy grande comparado con el tiempo de relajación θ :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} J(t) \approx -D \nabla \rho,$$

2.-Relación entre la Ecuación de Maxwell- Cattaneo y la Ecuación de Continuidad.

La conservación de la masa (ecuación de continuidad), se puede obtener sumando el sistema de ecuaciones dinámicas y nos da:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla J. \quad (1.3.4)$$

Por consiguiente, la sustitución de la función de distribución de densidad de corriente (1.3.1) en la ecuación de continuidad (1.3.4) nos da:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla(-D \nabla \rho - \theta \frac{\partial J}{\partial t}) = D \nabla^2 \rho + \theta \frac{\partial}{\partial t} \nabla J = D \nabla^2 \rho - \theta \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2}. \quad (1.3.5)$$

O bien, en una dimensión del espacio x_1, x_2, x_3 :

$$\theta \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x_1^2}. \quad (1.3.6)$$

Llegamos de nuevo a la ecuación de los telegrafistas. Si nunca hubiésemos hecho uso del espacio fase, esto es, si ni siquiera hubiésemos partido del método estadístico, y hubiésemos preferido partir de la ecuación de Maxwell-Cattaneo y la de continuidad, hubiéramos llegado al modelo de difusión mesoscópica, todo en el espacio de configuración y desde el punto de vista fenomenológico.

3.-Cambios de Variable a Variables Adimensionales.

Para facilitarnos el trabajo hagamos ahora el cambio adimensional de variables:

$$t = \theta t', \quad x = \frac{x_1}{\sqrt{D\theta}}. \quad (1.3.7)$$

Este cambio de variables imprime una corrección en la escala de tiempos y

de distancias.

Aplicando este cambio de variable a (1.3.6), que es la ecuación de los telegrafistas obtenemos:

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}, \quad (1.3.8)$$

que es el caso de (1.2.4), como debía ser, por el Principio de Superposición de las soluciones de las ecuaciones diferenciales lineales, y que fue obtenida en el espacio fase con:

$$c = \gamma = 1, \lambda = 1/2 \text{ (o bien } \theta=1). \quad (1.3.9)$$

En lo sucesivo podemos seguir trabajando sólo con la ecuación (1.3.8) para ρ , J , P_1 o P_2 (empleando la condición (1.3.9)), ya que la información referente a las constantes físicas no se ha perdido por el cambio de variables y se puede recuperar en cuanto se desee, mediante (1.3.7) en donde han quedado los valores de las constantes físicas del problema.

2.1: SOLUCIÓN DEL SISTEMA DE ECUACIONES DINÁMICAS PARA $-\infty < X < \infty$.

OBJETIVOS:

1.-Resolver el sistema de ecuaciones dinámicas en el continuo a partir de dos condiciones iniciales simples.

2.-Comparar gráficamente el resultado mesoscópico contra el de Fick.

3.-Comparar en forma tabular evaluando los porcentajes de error de los modelos mesoscópico y de Fick (macroscópico) para tiempos largos.

4.-Representar gráficamente el resultado obtenido en el objetivo 1 de esta sección.

1.-Solución del S.E.D. con Condiciones Iniciales Simples.

Ya que hemos propuesto que la difusión mesoscópica puede ser descrita en términos de probabilidades P_1 y P_2 , sería interesante obtener las soluciones explícitas tanto de P_1 y P_2 : su suma sería la densidad de partículas y su resta la densidad de corriente para una rapidez de salto unitaria. Escribamos nuevamente el sistema de ecuaciones dinámicas para P_1 y P_2 dado por (1.2.1) con $c=1$, $\theta=1$ ($\gamma=1$ y $\lambda=1/2$.)

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} + \frac{\partial P_1}{\partial x} = -\frac{1}{2}(P_1 - P_2)$$

$$\frac{\partial P_2}{\partial t} - \frac{\partial P_2}{\partial x} = +\frac{1}{2}(P_1 - P_2). \quad (2.1.1)$$

Propongamos como condiciones iniciales de nuestro sistema:

$$P_1(x,0) = f_1(x) = \frac{1}{2} \delta(x); \quad P_2(x,0) = f_2(x) = \frac{1}{2} \delta(x), \quad (2.1.2)$$

las cuales son aceptables de acuerdo a lo expuesto al final de la sección 1.2, y corresponden a un conjunto de partículas tales que la mitad se mueven inicialmente a la derecha y la mitad a la izquierda. Además su suma corresponde a una distribución $\rho(x,t=0) = \delta(x)$.

En el apéndice 2, ecuación (A.2.17) y (A.2.18) se obtiene la solución analítica del sistema (2.1.1.)

Las relaciones explícitas de P_1 y P_2 son:

$$\begin{aligned}
 P_1(x, t) &= \frac{1}{4} \exp\left(-\frac{t}{2}\right) (\delta(x-t) + \delta(x+t)) \\
 &+ \frac{1}{2} I_0\left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - x^2}\right) H(t-x) + \frac{(t+x)}{2} \frac{I_1\left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - x^2}\right)}{\sqrt{t^2 - x^2}} H(t-x) \\
 P_2(x, t) &= \frac{1}{4} \exp\left(-\frac{t}{2}\right) (\delta(x-t) + \delta(x+t)) \\
 &+ \frac{1}{2} I_0\left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - x^2}\right) H(t-x) + \frac{(t-x)}{2} \frac{I_1\left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - x^2}\right)}{\sqrt{t^2 - x^2}} H(t-x) \quad (2.1.3)
 \end{aligned}$$

donde se debe tomar: $t=l/\theta$ $x=x_1/\sqrt{D\theta}$ para regresar a las variables originales.

Nos damos cuenta, por simple inspección, de que el alcance de las partículas no puede superar el valor: $x \geq t$ o bien $\frac{\theta x_1}{\sqrt{D\theta}} = \frac{x_1}{c} \geq t$, donde los argumentos de las funciones escalón de Heaviside se vuelven negativos. Nos percatamos de la existencia del factor $\exp(-t/2)$, que ya esperábamos, como consecuencia del término de corrección de la ecuación de Maxwell-Cattaneo, que discutimos en su oportunidad. Observemos la presencia de dos fragmentos del tipo funcional $\delta(x \pm t)$ que corresponden al efecto de partículas balísticas, desde luego que la cantidad de las mismas queda amortiguado por el mismo factor exponencial negativo en el tiempo. ¡Todo va de acuerdo con lo que se esperaba!

2.-Comparación Gráfica entre el Modelo Mesoscópico y de Fick.

Como referencia, presentamos las relaciones de las densidades de partículas y de corrientes, así como la solución Fickiana para efectos de comparación:

Densidad mesoscópica de partículas:

$$\begin{aligned}
 \rho(x, t) &= P_1(x, t) + P_2(x, t) \\
 &= \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{t}{2}\right) (\delta(t+x) + \delta(t-x)) + \frac{1}{2} I_0\left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - x^2}\right) + \frac{t}{2} \frac{I_1\left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - x^2}\right)}{\sqrt{t^2 - x^2}} H(t-x).
 \end{aligned}$$

Densidad Mesoscópica de Corrientes:

$$J(x, t) = P_1(x, t) - P_2(x, t) = \frac{1}{4} \exp\left(-\frac{t}{2}\right) \left\{ x \frac{I_1\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-x^2}\right)}{\sqrt{t^2-x^2}} \right\} H(t-x).$$

Para comparar esto con la solución del Modelo Macroscópico, usemos el resultado del apéndice 3, en el cual se resuelve el problema:

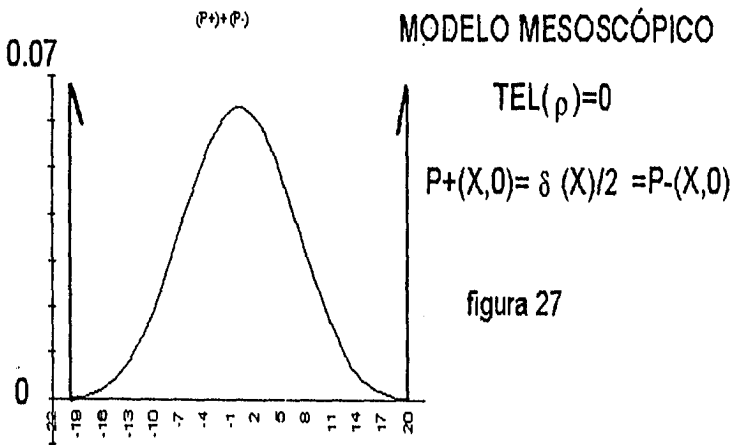
$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

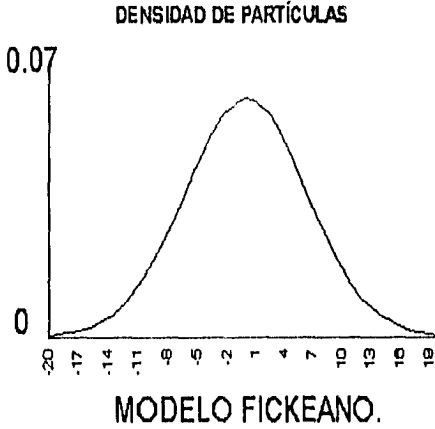
sujeo a: $\rho(x, t=0) = f(x)$; $\partial \rho(x, t=0) / \partial t = 0$.

Esta solución es, tomando $f(x) = \delta(x)$:

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4t}\right).$$

La comparación gráfica se presenta a continuación, para $t=20.00$:





$$\rho_{xx} = \rho_t$$

sujeta a:

$$\rho(x,0) = \delta(x)$$

$$\rho_t(x,0) = 0$$

figura 28

3.-Comparación Tabular.

El modelo Fickeano tiene una muy buena aproximación para tiempos largos en comparación con el tiempo de duración de un salto y distancias comparativamente menores a la distancia de alcance balístico, siendo el error menor al 10% en la medición de densidades de partículas.

Esta es una tabla comparativa de ambos modelos:

X	ρ Modelo Mesoscópico	ρ Modelo Macroscópico	ERROR Porcentual.
-20	0.00000	0.000425	--
-19	0.00024	0.000692	188.3
-18	0.00057	0.001099	92.8
-17	0.00116	0.001702	46.7
-16	0.00210	0.002571	22.4
-15	0.00350	0.003788	8.2
-14	0.00546	0.005443	0.3
-13	0.00806	0.007628	5.4
-12	0.01137	0.010427	8.3
-11	0.01538	0.013900	9.6
-10	0.02006	0.018072	9.9
-9	0.02529	0.022917	9.4
-8	0.03093	0.028343	8.4
-7	0.03678	0.034188	7
-6	0.04259	0.040220	5.6
-5	0.04811	0.046149	4.1
-4	0.05307	0.051644	2.7
-3	0.05722	0.056367	1.5
-2	0.06036	0.060002	0.6

X	ρ Modelo Mesoscópico	ρ Modelo Macroscópico	ERROR Porcentual.
-1	0.06231	0.062295	0
0	0.06297	0.063078	0.2
1	0.06231	0.062295	0
3	0.05722	0.056367	1.5
4	0.05307	0.051644	2.7
5	0.04811	0.046149	4.1
6	0.04259	0.040220	5.6
7	0.03678	0.034188	7
8	0.03093	0.028343	8.4
9	0.02529	0.022917	9.4
10	0.02006	0.018072	9.9
11	0.01538	0.013900	9.6
12	0.01137	0.010427	8.3
13	0.00806	0.007628	5.4
14	0.00546	0.005443	0.3
15	0.00350	0.003788	8.2
16	0.00210	0.002571	22.4
17	0.00116	0.001702	46.7
18	0.00057	0.001099	92.8
19	0.00024	0.000692	188.3
20	0 00000	0.000425	--

4.-Representación Gráfica de la Solución.

En las figuras 29 a 56 tenemos la representación gráfica de la solución de nuestro sistema de ecuaciones dinámicas:

$$\frac{\partial P_+}{\partial t} + \frac{\partial P_+}{\partial x} = -\frac{1}{2}(P_+ - P_-); \quad \frac{\partial P_-}{\partial t} - \frac{\partial P_-}{\partial x} = +\frac{1}{2}(P_+ - P_-)$$

sujeto a:

$$P_+(x, t=0) = P_-(x, t=0) = \frac{1}{2} \delta(x),$$

representando P_+ y P_- ; luego $P_+ + P_- = \rho(x, t)$; luego $P_+ - P_- = J(x, t)$ en grupos de tres gráficas, un grupo por cada valor de tiempo.

Figs. 29 a 34: grupos 1 y 2: P_+ y P_- , ρ y J para $t=0.25$ y $t=0.50$.

Figs. 35 a 40: grupos 3 y 4: como la anterior para $t=1.00$ y 5.00 .

Figs. 41 a 46: grupos 5 y 6: como la anterior para $t=7.00$ y 10.00 .

Figs. 47 a 51: resumen, gráficas de densidades de partículas.

Figs. 52 a 56: resumen, gráficas de densidades de corrientes.

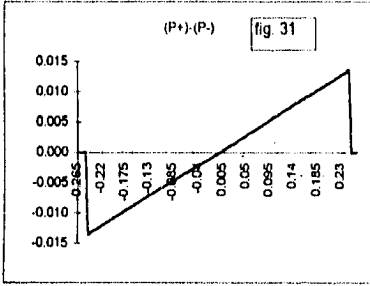
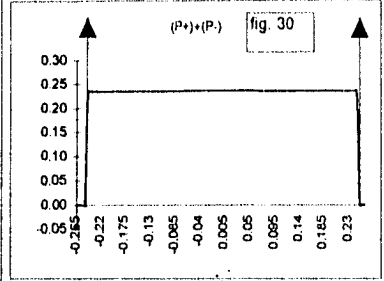
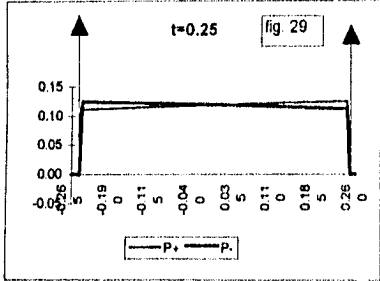
Notaremos lo siguiente:

1.) La evolución de la densidad de partículas $(P_+) + (P_-)$ tiende gradualmente

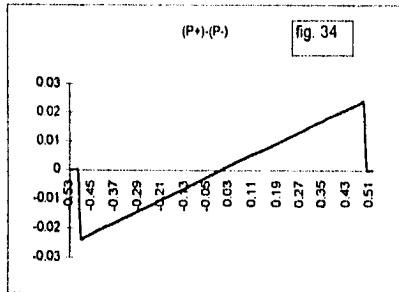
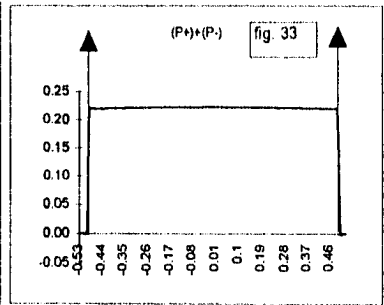
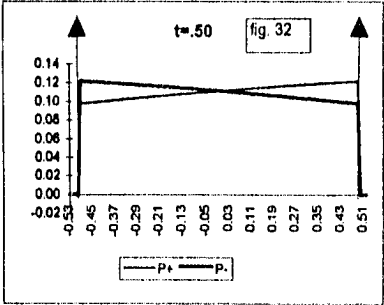
a que la cauda (de forma cada vez más próxima a una curva gaussiana), domine a lo largo de todo el medio, hasta la posición correspondiente a las partículas balísticas, como se puede ver para $t=\pm x$. Vemos aquí la primera ventaja del nuevo modelo: ya no tenemos la situación clásica en la cual la distribución resultaba no nula para todo valor de x en todo tiempo t , y descrita siempre por una curva gaussiana.

2.) La función delta de Dirac de la distribución inicial de la densidad de partículas, va extendiéndose después de sufrir una fragmentación en dos, a lo largo de las dos direcciones horizontales positiva y negativa, cada una de estas particiones en movimiento se ve afectada en su amplitud por un factor de decaimiento exponencial, demostrando que hay una cierta cantidad de partículas que se comporta como balísticas que obedecen a la misma relación funcional de la distribución inicial. Por lo tanto es la cauda lo que se va a distribuir en forma normal.

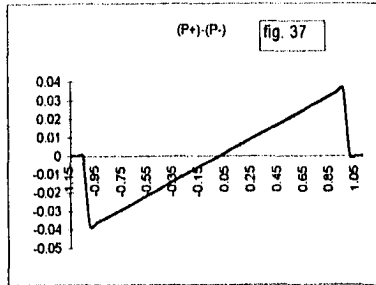
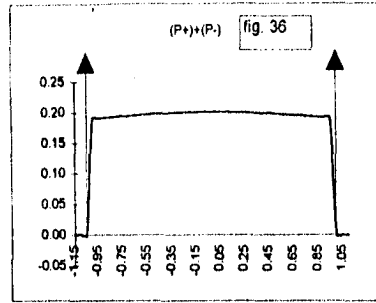
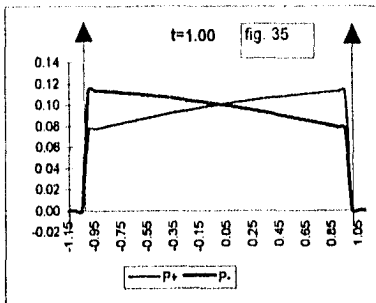
3.) La densidad de corriente es una función impar de la posición, por lo tanto, se satisface la condición de que una distribución de partículas con derivada temporal inicial nula tenderá a difundirse de manera completamente equilibrada en las direcciones que se le ofrezca para hacerlo.



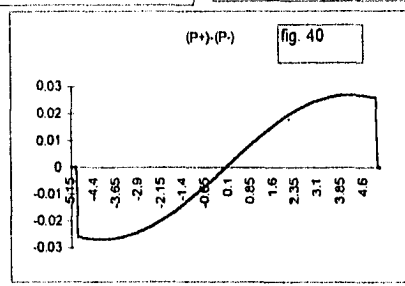
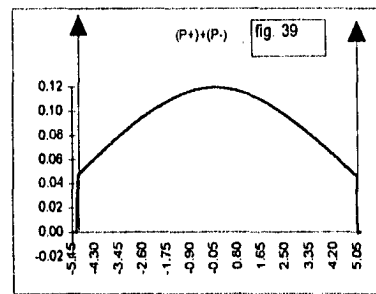
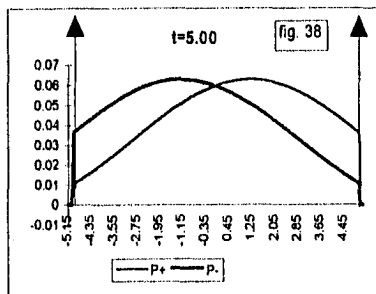
Grupo 1:
 Difusión Mesoscópica Unidimensional
 en la recta infinita de la distribución:
 $P_+(x,t=0) = \delta(x)/2 = P_-(x,t=0)$,
 derivada temporal nula en $t=0$.



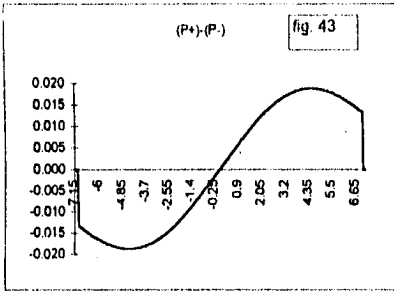
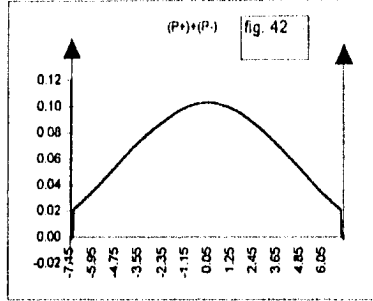
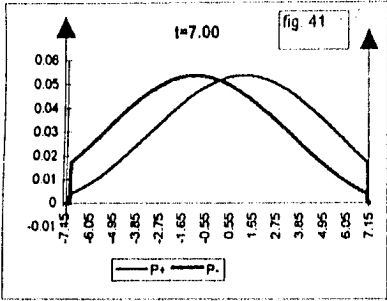
GRUPO 2.



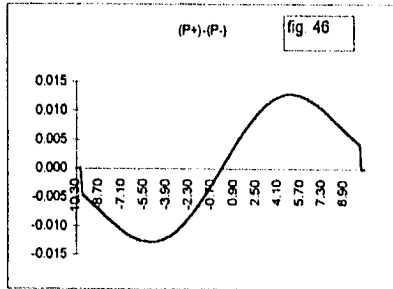
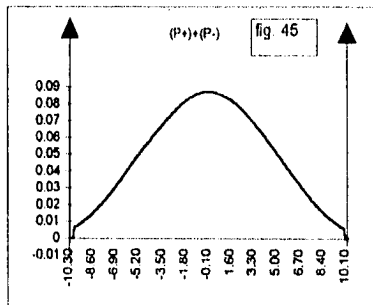
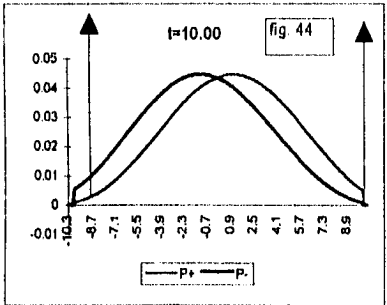
Grupo 3:
 Difusión Mesoscópica Unidimensional
 en la recta infinita de la distribución:
 $P_+(x,t=0)=\delta(x)/2=P_-(x,t=0)$,
 derivada temporal nula en $t=0$.



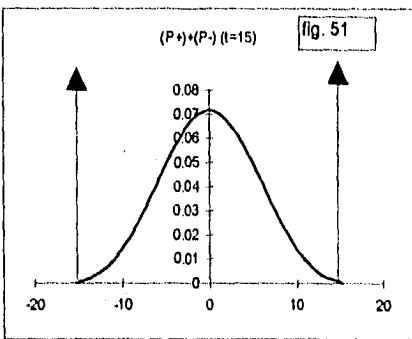
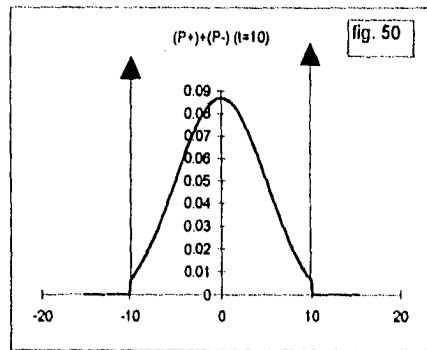
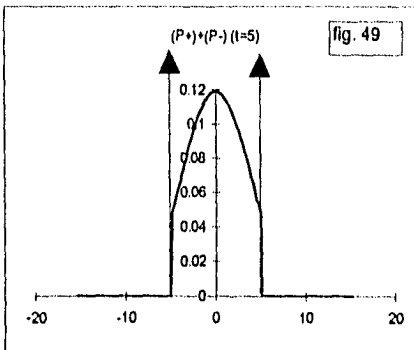
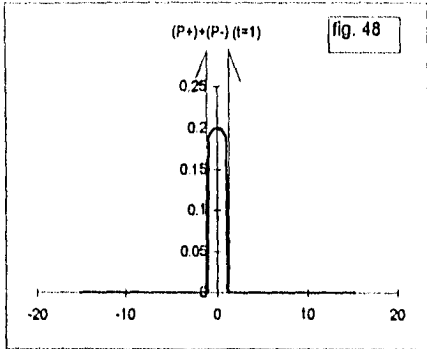
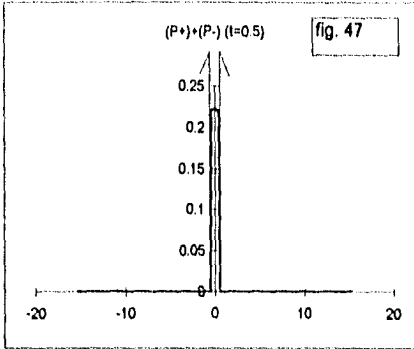
GRUPO 4



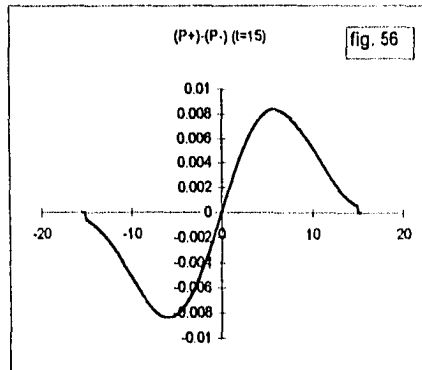
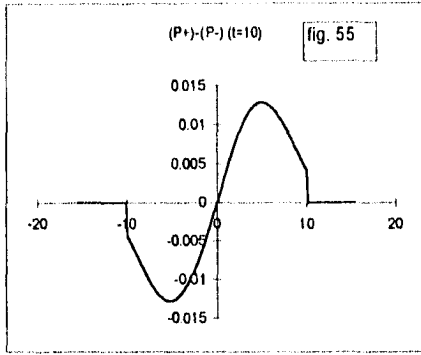
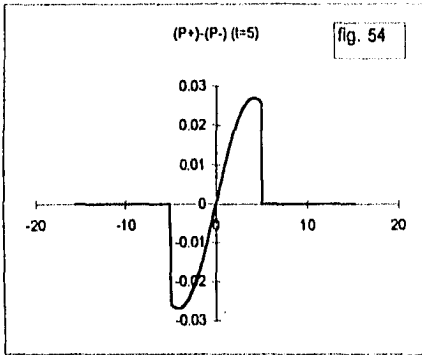
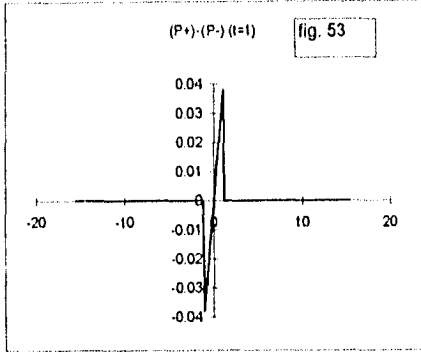
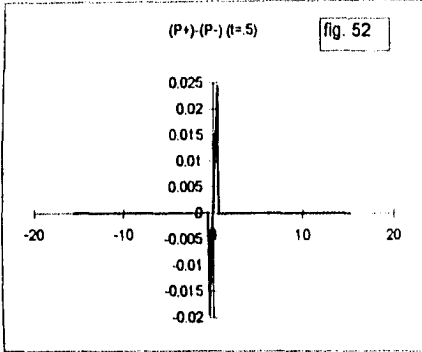
Grupo 5:
 Difusión Mesoscópica Unidimensional
 en la recta infinita de la distribución:
 $P_+(x, t=0) = \delta(x)/2 = P_-(x, t=0)$,
 derivada temporal nula en $t=0$.



GRUPO 6



Difusión Mesoscópica Unidimensional
de la distribución:
 $\rho(x,t=0)=\delta(x)$,
derivada temporal nula en $t=0$,
recta Infinita.
GRÁFICA DE DENSIDAD DE PARTÍCULAS



Difusión Mesoscópica Unidimensional
de la distribución:
 $p(x,t=0)=\delta(x)$,
derivada temporal nula en $t=0$,
recta infinita.
GRÁFICA DE DENSIDAD DE CORRIENTES.

3.1: SOLUCIONES EN EL ESPACIO DE CONFIGURACIÓN.

OBJETIVOS:

1.-Comprobar que de la formulación en espacio fase se puede obtener la ecuación de Maxwell-Cattaneo y de continuidad.

2.-Determinar las condiciones iniciales en espacio de configuración tanto para la densidad de partículas como para la de corrientes a partir de las condiciones iniciales de las distribuciones de probabilidad P_1 .

3.-Encontrar la solución de difusión mesoscópica unidimensional para dos distribuciones iniciales de partículas libres: una finita (pulso rectangular de partículas) y la otra infinita (distribución inicial gaussiana.)

1.-Obtención de las Ecuaciones de Continuidad y Maxwell-Cattaneo a partir del Sistema de Ecuaciones Dinámicas.

Sabemos que en el caso de las distribuciones de probabilidad P_1 y P_2 , y desde luego cualquier combinación lineal de ellas o de sus derivadas, digamos P , se cumple la ecuación de los telegrafistas, así pues:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial P}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \quad (3.1.1)$$

Para el caso en que $\lambda = 1/2$ y $\gamma = 1$ tendremos:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} + \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \quad (3.1.2)$$

Sin perder de vista que se cumple simultáneamente el sistema de ecuaciones dinámicas (1.2.1):

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} + \frac{\partial P_1}{\partial x} = -\frac{1}{2}P_1 + \frac{1}{2}P_2; \quad \frac{\partial P_2}{\partial t} - \frac{\partial P_2}{\partial x} = \frac{1}{2}P_1 - \frac{1}{2}P_2 \quad (3.1.3)$$

También denotamos, de acuerdo con las definiciones de las densidades de partículas y de corriente:

$$\rho = P_1 + P_2; \quad J = (P_1 - P_2) \quad (3.1.4)$$

Si sumamos las (3.1.3):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial J}{\partial x} \quad (3.1.5)$$

Si las restamos tenemos que:

$$\frac{\partial J}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial x} = -J \quad (3.1.6)$$

Se identifica de inmediato (3.1.5) con la ecuación de continuidad y (3.1.6) con la ecuación de Maxwell-Cattaneo (1.3.1). Estas relaciones nos serán muy útiles para obtener las condiciones iniciales en el espacio de configuración.

2.-Condiciones Iniciales para las Densidades a Partir de las Condiciones Iniciales de las Distribuciones de Movimiento a Derecha e Izquierda.

Si prefijamos P_1 y P_2 al tiempo cero, y llamamos $P_1(x, t=0) = f_1(x)$, $P_2(x, t=0) = f_2(x)$ tenemos primeramente, por definición de ρ :

$$\rho(x, t=0) = P_1(x, t=0) + P_2(x, t=0) \quad (3.1.7.a)$$

y de la ecuación de continuidad (3.1.5), que es válida para todo x, t , considerada particularmente en $t=0$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} \Big|_{t=0} = - \frac{d}{dx} [P_1(x, t=0) - P_2(x, t=0)] \quad (3.1.7.b)$$

Esto nos confirma que para distribuciones sin movimiento inicial podemos poner con absoluta confianza la corriente inicial y la derivada temporal de la densidad a $t=0$ nulas, porque suponemos que las P_1 son iguales inicialmente, como dijimos en la sección 1.2.

Por otra parte, estas son las condiciones iniciales para $Tel(\rho)=0$: $\rho(x, t=0) = P_1(x, t=0) + P_2(x, t=0) = f_1(x) + f_2(x)$; $\partial \rho(x, t=0) / \partial t = -df_1(x)/dx + df_2(x)/dx$. De manera similar, para J , por (3.1.6):

Por definición: $J(x, t=0) = P_1(x, t=0) - P_2(x, t=0)$

aplicando ahora la ecuación de Maxwell-Cattaneo (3.1.6) en $t=0$:

$$\frac{\partial J}{\partial t} \Big|_{t=0} = -J(x, t=0) - \frac{d}{dx} [P_1(x, t=0) + P_2(x, t=0)] \quad (3.1.8)$$

que son sus condiciones iniciales a partir de las de P_1 .

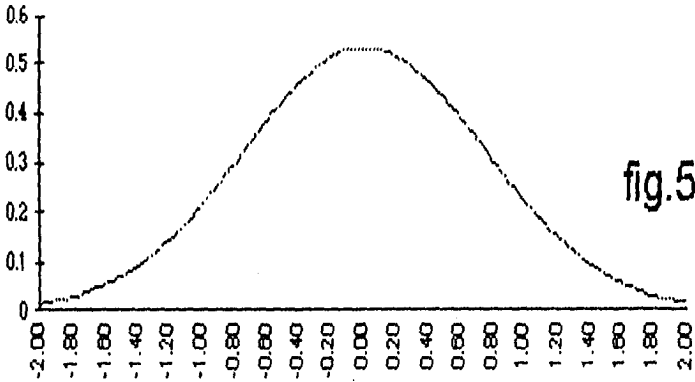
3.-Soluciones de Difusión Mesoscópica Unidimensional para Distribuciones Iniciales Pulso Rectangular y Distribución Gaussiana.

Nos proponemos ahora resolver dos casos de distribuciones iniciales sin movimiento inicial que nos han parecido de interés. Para resolver estos problemas consideramos la solución del apéndice 1, (A.1.43), empleando métodos de integración numérica y aproximaciones para las funciones de Bessel. La integración numérica que se empleó para generar las soluciones fue una subrutina del Método de Simpson y la definición en serie de las funciones de Bessel, tal como se presentan en el libro de Hildebrand *Advanced Calculus for Applications*. Prentice Hall:

$$A) f(x) = \rho(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2); \quad \partial \rho(x, t=0) / \partial t = 0.$$

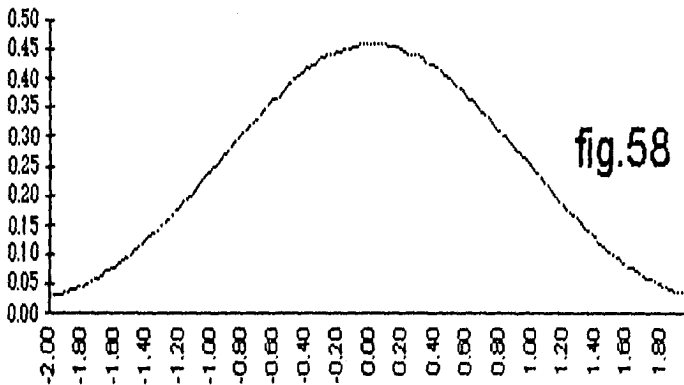
Tenemos un caso de distribución inicial a lo largo de toda la recta. Podemos ver en la serie de gráficas que siguen que de una distribución gaussiana, ya para $t=1.00$ se comienza a percibir una "partición" en dos de la distribución, y para $t=3.0$ en adelante aparece la cauda que eventualmente se convierte en dominante y para tiempos muy largos ($t=20$) ya prácticamente tiene forma de distribución gaussiana, como se esperaba.

densidad $t = 0.25$



En las gráficas de esta página, considerando los tiempos $t=0.25$ y $t=0.50$, tenemos que para $p(x,0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2)$ se mantiene prácticamente la forma inicial, la condición inicial sobre la derivada temporal es: $p(x,t=0)/\partial t=0$.

densidad $t = 0.50$



Como las partículas se distribuyen a lo largo de la recta horizontal sin una dirección preferente, a lo largo de todo el tiempo la distribución de partículas es completamente simétrica respecto al origen.

densidad $t = 1.00$

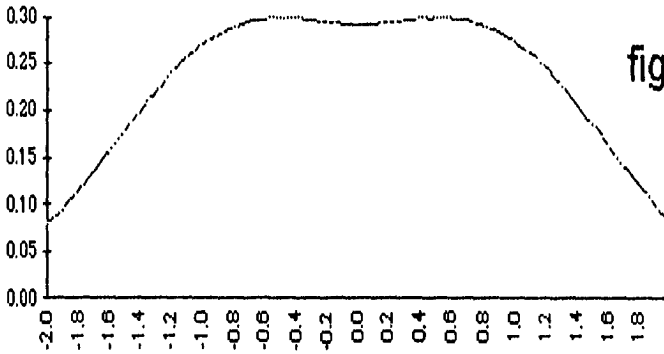


fig.59

densidad $t = 1.50$

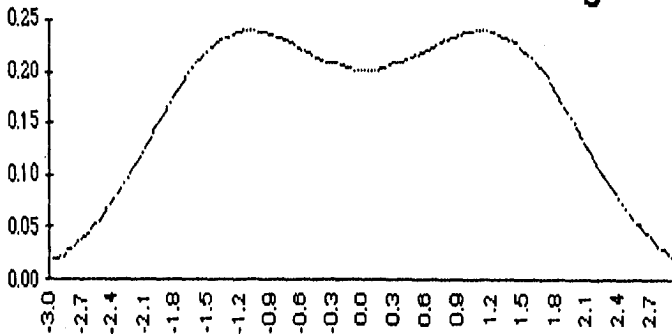
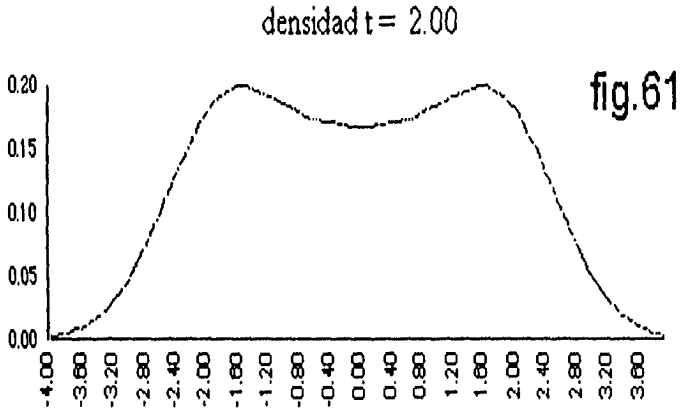
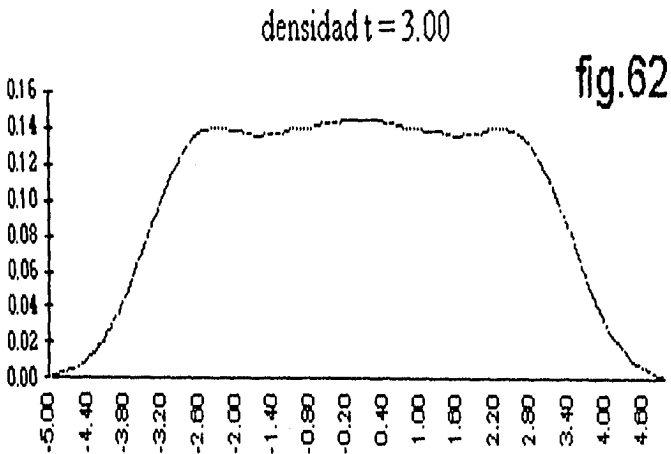


fig.60

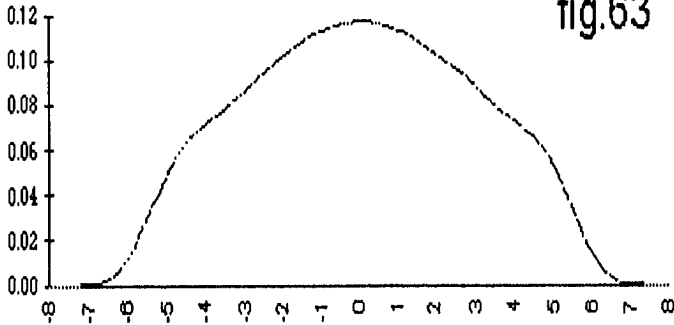
Los máximos se desplazan a una velocidad finita.



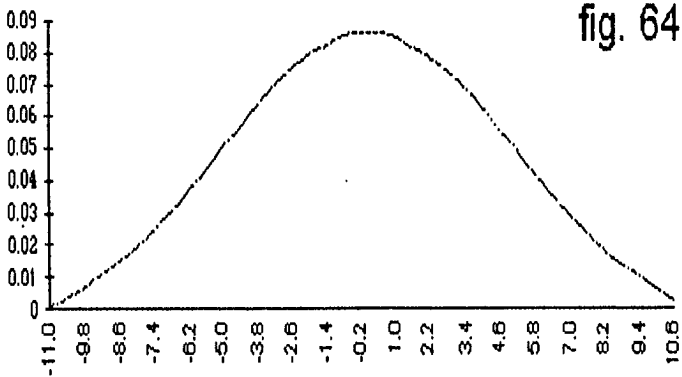
Para las dos gráficas que se presentan ahora podemos observar con claridad cómo tenemos ya la aparición de la cauda.



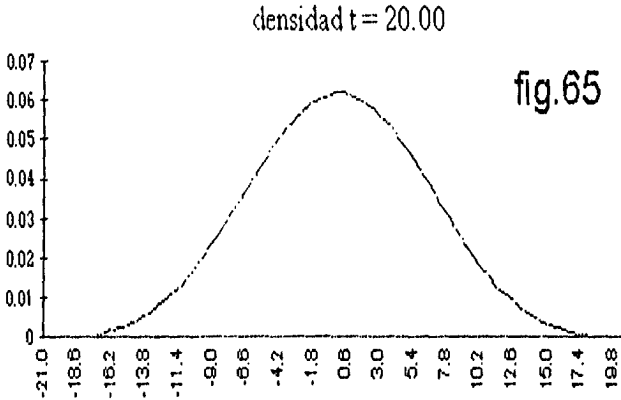
densidad $t = 5.00$



densidad $t = 10.00$



Ahora nos podemos dar cuenta como la cauda va tomando forma gaussiana.



Comparemos ahora nuestros resultados mediante el modelo macroscópico, del siguiente modo: dada la distribución inicial $\rho(x,0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2)$, con derivada temporal nula en $t=0$, por el resultado del apéndice 3 (A.3.2), tenemos que:

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{t\pi}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2) \exp[-(x-\xi)^2/(4t)] d\xi \text{ (Fick),}$$

particularmente en $x=0$ tenemos que:

$$\rho(0, t) = \frac{1}{2\pi\sqrt{t}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\xi^2(1 + \frac{1}{4t})] d\xi = \frac{1}{2\pi\sqrt{t}} \sqrt{\frac{\pi}{1 + 1/(4t)}}$$

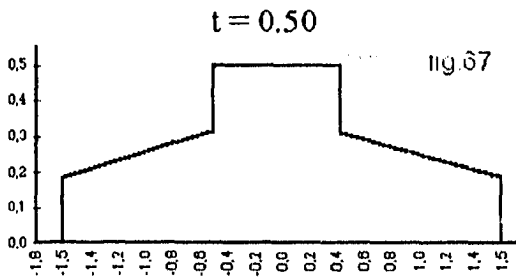
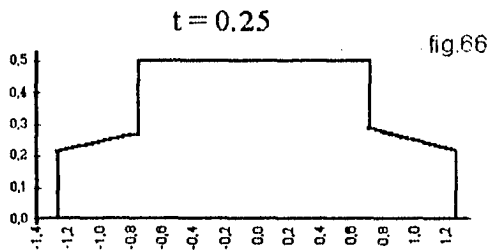
lo cual en $t=20$ nos da:

$$\rho(0, 20) = 0.0626877.$$

en buena concordancia con la gráfica de esta página.

B) $f(x)=0.50$ para $|x|<1$.

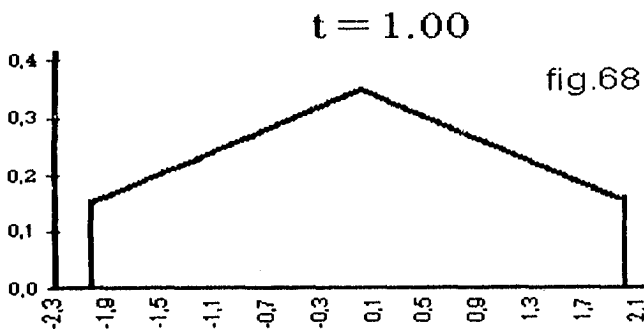
Podemos ver en las serie de gráficas siguientes que para $t<1$ esta distribución cuadrada va poco a poco reduciendo su "meseta" horizontal, ésta desaparece en $t=1$ y después de ese tiempo comienza a percibirse el efecto mesoscópico: presencia de cauda, hasta llegar a $t=15.00$ en que los cortes de la distribución inicial prácticamente han desaparecido para dar lugar gradualmente al efecto dominante de forma de gaussiana que debíamos esperar.



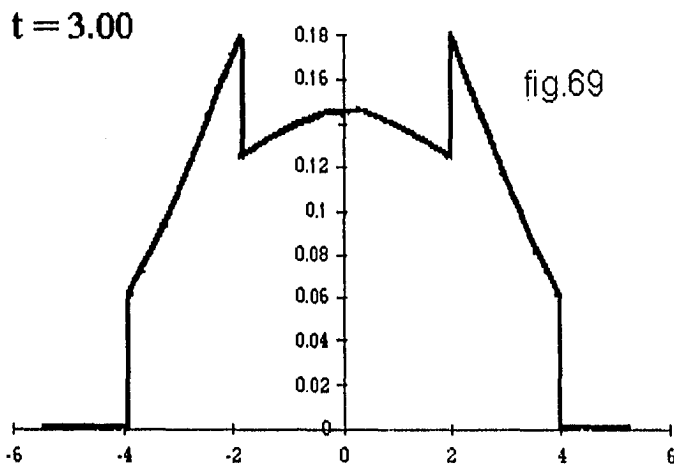
Difusión Mesoscópica Unidimensional de la distribución:

$$\rho(x, t=0) = \frac{1}{2}(1-|x|), \quad \partial\rho(x, t=0)/\partial t = 0.$$

El máximo alcance de las partículas es el de las balísticas que parten de $x=\pm 1$.

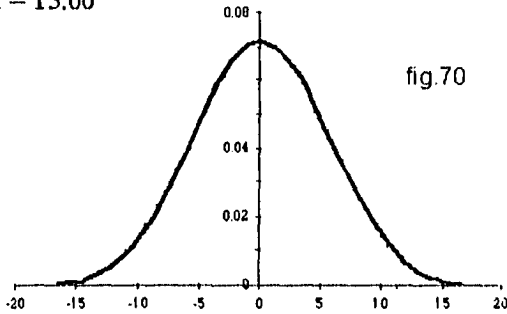


En estas dos gráficas podemos notar cómo para $t=1.00$ ocurre la partición en el origen quedando la cauda correspondiente de forma gradualmente igual a la de una gaussiana.



Difusión mesoscópica de la distribución: $\rho(x, t=0) = \frac{1}{2}(1 - |x|)$, $\partial\rho(x, t=0)/\partial t = 0$.

t = 15.00



A manera de comprobación tomemos el modelo de Fick, con

$$\rho(x,0) = \frac{1}{2} H(1-|x|),$$

y derivada temporal nula en t=0, nos da:

$$\rho(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} \int_{-1}^1 \exp[-(x-\xi)^2/(4t)] d\xi$$

de acuerdo al apéndice 3, ecuación (A.3.2).

Este resultado, poniendo x=0 se puede desarrollar en series de Taylor, y tendremos lo siguiente:

$$\int_{-1}^1 \exp[-\xi^2/(4t)] d\xi = 1 - \xi^3/(12t) + \xi^5/(160t^2) - \xi^7/(2688t^3) + \text{etc.}$$

que en t=15 nos da:

$$\rho(0, t=15) = 0.0728365,$$

en buena aproximación con el resultado mesoscópico.

4.1: SOLUCIÓN EN EL ESPACIO FASE PARA $x > 0$, CON PARED ABSORBENTE EN EL ORIGEN.

OBJETIVOS:

1.-Demostrar que una condición de frontera y las dos iniciales para el sistema de ecuaciones dinámicas es necesaria y suficiente para resolver el problema de difusión mesoscópica unidimensional en un medio semi-infinito con pared absorbente en el origen.

2.-Determinar explícitamente los valores de P_+ y P_- para el apartado anterior con dos condiciones iniciales simples.

3.-Representar gráficamente la evolución de una distribución sujeta a las condiciones anteriores.

1.-Planteamiento del Problema y Estrategia para Resolverlo.

Supongamos que tenemos un problema de difusión mesoscópica unidimensional en un medio que se extiende a lo largo del eje x positivo y que en el origen $x=0$ colocamos una pared absorbente. Para una cierta distribución inicial descrita por $P_1(x, t=0) + P_2(x, t=0) = f_1(x) + f_2(x)$ nos proponemos hallar P_1 y P_2 , a partir del sistema de ecuaciones dinámicas, quedando determinadas de este modo tanto la densidad de partículas como la densidad de corriente.

Nuevamente, consideramos distribuciones sin movimiento inicial, de modo que se cumplen las condiciones (3.1.7): $\rho(x, t=0) = f_1(x) + f_2(x)$; $\partial\rho(x, t=0)/\partial t = -df_1(x)/dx + df_2(x)/dx = 0$.

El efecto de la pared absorbente es, en principio, tal que todas las partículas que lleguen desde la derecha alcanzando la pared ya no puedan regresar al medio, por lo tanto es de esperar que en el origen:

$$P_1(0, t) = 0$$

$$P_2(0, t) \neq 0$$

no anulamos, entonces, la posibilidad de que las partículas sigan llegando desde la derecha a la pared. Por lo tanto la densidad en $x=0$ no es nula, tendrá el valor correspondiente a las partículas que llegan a la pared.

Colocaremos la distribución inicial obviamente fuera del origen. Al principio del proceso difusivo sucede que, antes de que las primeras partículas lleguen a la pared absorbente, se comportarán igual que en la recta infinita, porque el efecto de la pared tarda el tiempo finito que tardan las

primeras partículas (las balísticas) en llegar a dicha pared.

Para poder encontrar $P_1(x,t)$, en el apéndice 4 se resuelve el problema general:

$$\begin{aligned} \text{Tel}(u)=0: x \geq 0 \\ \text{suje to a: } u(0,t)=0, u(x,t=0)=f(x), \partial u(x,t=0)/\partial t=g(x) \end{aligned} \quad (4.1.1)$$

Y podemos obtener $P_2(x,t)$ a partir del sistema de ecuaciones dinámicas:

$$\frac{\partial P_1}{\partial x} + \frac{\partial P_1}{\partial t} = \frac{-P_1 + P_2}{2},$$

es decir, despejando:

$$P_2(x,t) = P_1(x,t) + 2 \left(\frac{\partial P_1}{\partial x} + \frac{\partial P_1}{\partial t} \right).$$

El cálculo de esta derivada aparece en el apéndice 7. Las expresiones (A.7.5) y (A.7.6) son las soluciones del problema para condiciones iniciales dadas por:

$$P_1(x,t=0) = P_2(x,t=0) = \frac{1}{2} \delta(x-1).$$

$$P_1(x=0,t) = 0.$$

además del sistema de ecuaciones dinámicas sabemos que las condiciones iniciales para la derivada temporal de P_1 y P_2 son:

$$\frac{\partial P_{1/2}(x,t=0)}{\partial t} = \mp \frac{1}{2} \frac{d\delta(x-1)}{dx},$$

basta considerar que el sistema de ecuaciones dinámicas vale en todo t , particularmente en $t=0$ y hacer $P_{1/2}(x,t=0) = \frac{1}{2} \delta(x-1)$

2.-Soluciones para P_+ y P_- .

Escribiremos las soluciones en el intervalo $0 < x < t-1$, para $t > 1$, denotando:

$$B_0^\pm(x,t) = I_0 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x \pm 1)^2} \right), \quad D^\pm(x,t) = \frac{I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x \pm 1)^2} \right)}{\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x \pm 1)^2}},$$

$$P^{\pm}(x, t) = \frac{B_0^{\pm}(x, t) - 2D^{\pm}(x, t, \pm 1)}{[t^2 - (x \pm 1)^2]}, \quad H^{\pm}(x, t) = H(t - (x \pm 1)).$$

tendremos:

$$P_1(x, t) = \frac{1}{4} \exp\left(-\frac{t}{2}\right) \{-tD^+H^+/4 + (x+1)D^+H^+/8 + tD^-H^-/4 + (x-1)D^-H^-/8 + B_0^-H^-/2 - B_0^+H^+/2\}$$

$$P_2(x, t) = \frac{1}{4} \exp\left(-\frac{t}{2}\right) \{-D^+H^+/4 - t^2P^+H^+/4 + t(x+1)P^+H^+/8 + D^-H^-/4 + t^2P^-H^-/4 + t(x-1)P^-H^-/8 + tD^-H^-/8 - tD^+H^+/8\}$$

La solución buscada para ρ , densidad de partículas es:

$$\rho(x, t) = \rho_0(x-1, t) K_1(x, t) + \frac{1}{4} K_2(x, t) \exp\left(-\frac{t}{2}\right) \{+D^+H^+[-1/8 - 3t/8 + (x+1)/4] + D^-H^-[3/8 + 3t/8] + P^+H^+[-t^2/4 - (x+1)^2/8 - 3t(x+1)/8] + P^-H^-[t^2/4 - (x-1)^2/8 - t(x-1)/8] + B_0^-/2 - B_0^+/2\}$$

y para J , densidad de corrientes:

$$J(x, t) = J_0(x-1, t) K_1(x, t) + \frac{1}{4} K_2(x, t) \exp\left(-\frac{t}{2}\right) \{+D^+H^+[t/8 + 1/8] + D^-H^-[-3/8 - t/8 + (x-1)/4] + P^+H^+[t^2/4 + (x+1)^2/8 + t(x+1)/8] + P^-H^-[-t^2/4 + (x-1)^2/8 - 3t(x-1)/8] + B_0^-/2 - B_0^+/2\}$$

Donde ρ_0 (y J_0) es la solución de Difusión mesoscópica para el medio infinito y:

$$K_1(x, t) = \begin{cases} 1 & t-1 < x < t+1 \\ 0 & \text{de otro modo} \end{cases}$$

$$K_2(x, t) = \begin{cases} 1 & \text{en } t > 1, 0 < x < t-1 \\ 0 & \text{de otro modo} \end{cases}$$

Realmente las expresiones se han podido obtener, pero indudablemente dicen

mucho más las representaciones gráficas.

3.-Representación Gráfica de las Soluciones.

Las gráficas que se presentan en grupos de (P_+) , (P_-) , $(P_+)+(P_-)$ en las figuras de la 71 a la 97 muestran el siguiente comportamiento de la distribución inicial:

1.) Para $t < 1$ (grupos 1 y 2) las soluciones tienen el comportamiento ya conocido de difusión mesoscópica en medios infinitos porque no ha habido interacción con la pared absorbente.

2.) Por efecto de la interacción con la pared siempre tendremos una densidad de partículas no nula en el origen, debida al frente de partículas que llega siempre.

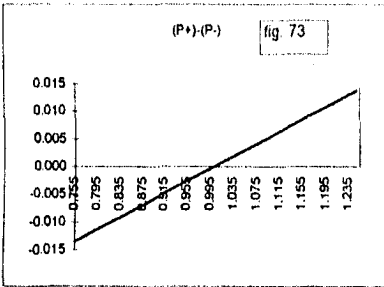
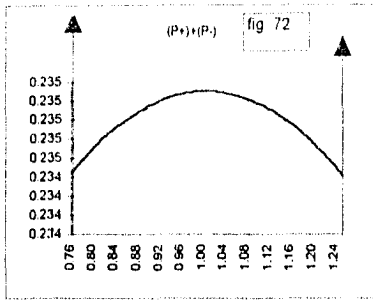
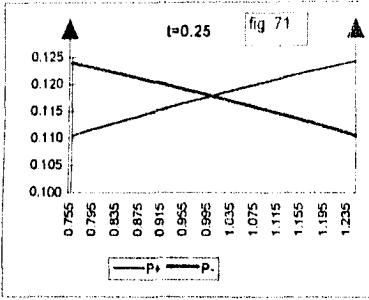
3.) Por efecto de la interacción de la pared tendremos una cada vez mayor densidad de corrientes negativa en el origen, como se esperaba, este efecto es algo así como el de un "vaclado".

4.) Existe un frente de discontinuidad en $x=t-1$, el cual debe aparecer como resultado de que gradualmente las partículas se van "enterando" de la presencia de la pared a una velocidad unitaria, correspondiente como siempre a las partículas balísticas. Este frente también aparece en los problemas hidráulicos de drenado de fluidos en una dimensión.

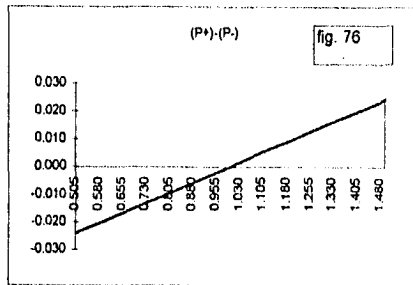
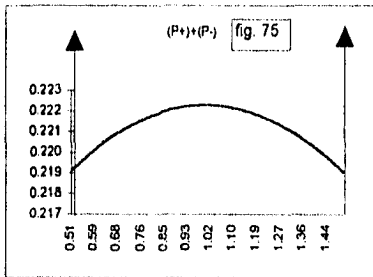
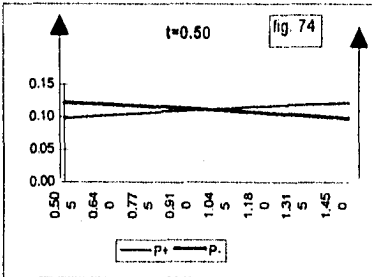
5.) El frente de discontinuidad afecta también a la densidad de corriente disminuyendo o haciendo negativo su valor, como debía ser.

6.) Existe un efecto residual de partículas que no "se enteran" de la existencia de la pared y continúan su avance como en el medio infinito entre $x=t-1$ y $x=t+1$.

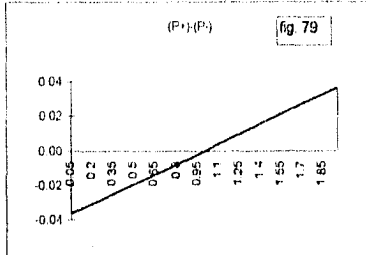
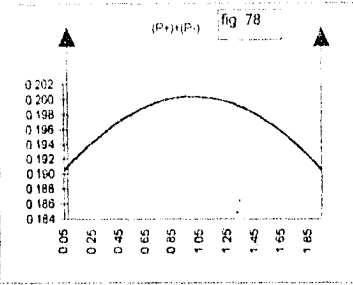
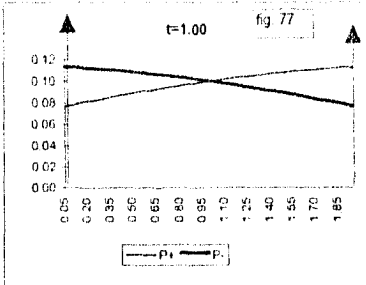
7.) Para tiempos muy largos es visible un resultado aproximadamente igual al que se obtendría del modelo de Fick, pero con una densidad de masa residual siempre en el origen, lo cual es mucho más aceptable físicamente que el resultado que se propone en el modelo macroscópico (densidad cero en el origen), puesto que en realidad sí llegan partículas al origen (desde la derecha.)



Grupo 1:
 Difusión Mesoscópica Unidimensional
 en la semi-recta $x>0$ de la distribución:
 $P_+(x,t=0)=\delta(x-1)/2=P_-(x,t=0)$,
 derivada temporal nula en $t=0$,
 pared absorbente en el origen.



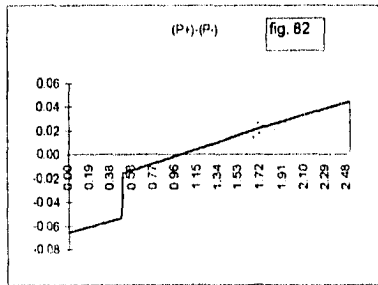
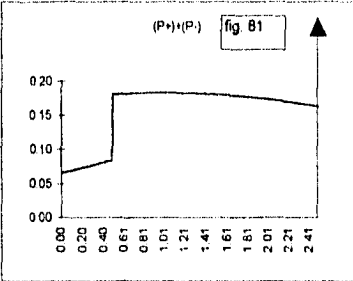
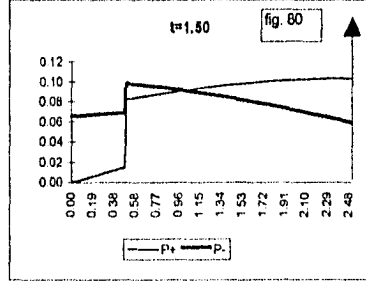
GRUPO 2.



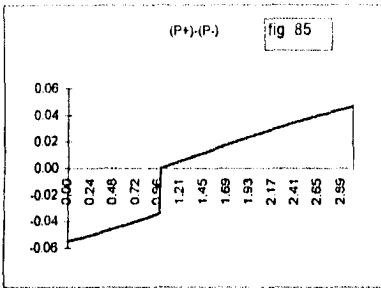
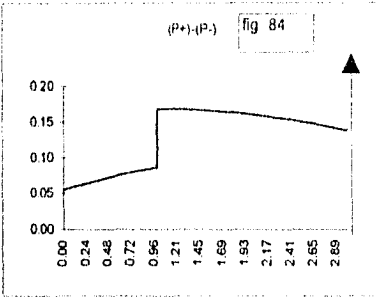
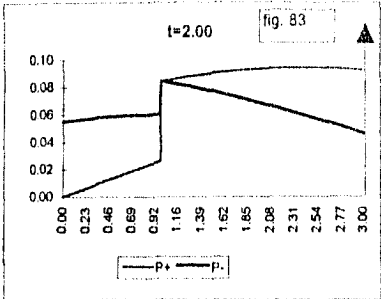
Grupo 3

Difusión Mesoscópica Unidimensional en la semi-recta $x>0$ de la distribución:

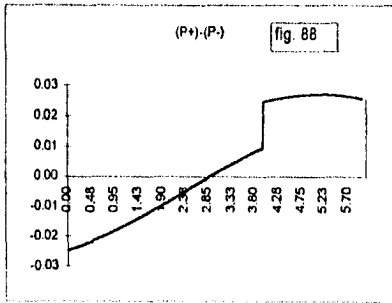
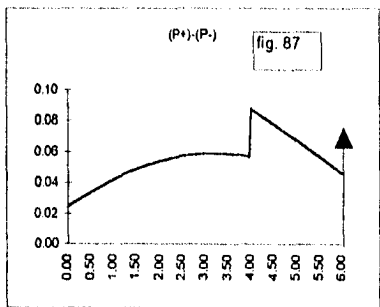
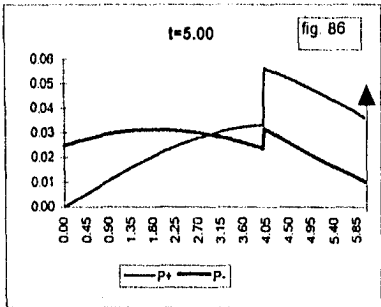
$P_+(x,t=0)=\delta(x-1)/2=P_-(x,t=0)$,
 derivada temporal nula en $t=0$,
 pared absorbente en el origen.



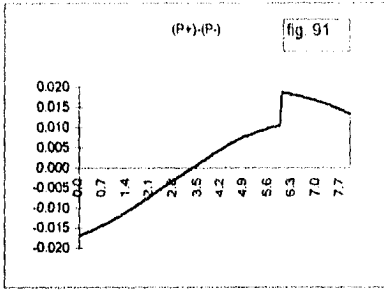
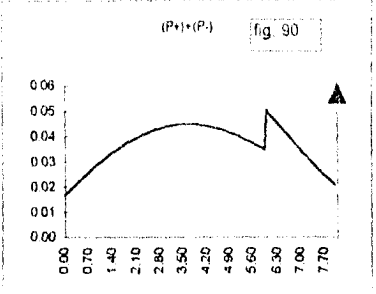
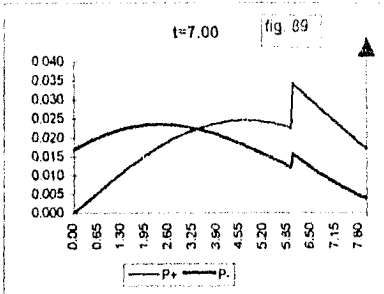
GRUPO 4



Grupo 5
 Difusión Mesoscópica Unidimensional
 en la semi-recta $x>0$ de la distribución:
 $P_+(x,t=0)=\delta(x-1)/2=P_-(x,t=0)$,
 derivada temporal nula en $t=0$,
 pared absorbente en el origen.



GRUPO 6

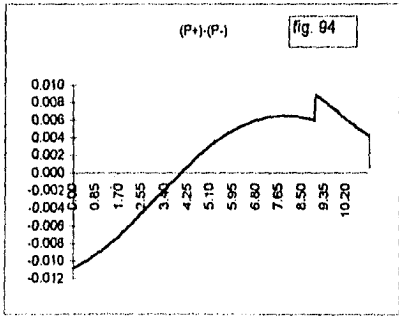
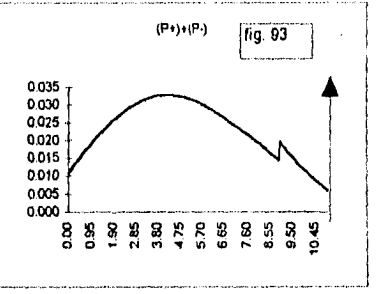
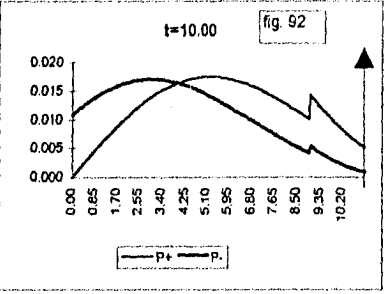


Grupo 7.

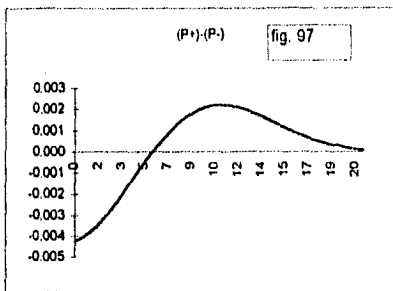
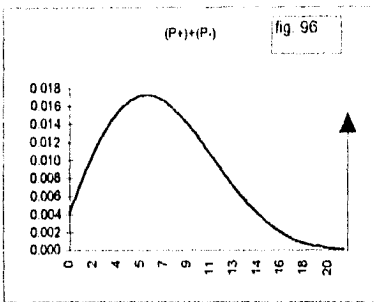
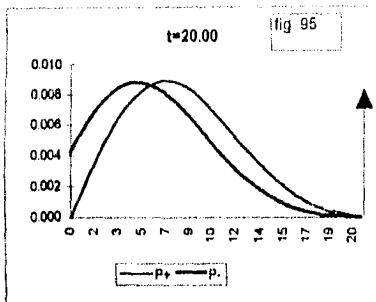
Difusión Mesoscópica Unidimensional en la semi-recta $x > 0$ de la distribución:

$$P_+(x, t=0) = \delta(x-1)/2 = P_-(x, t=0),$$

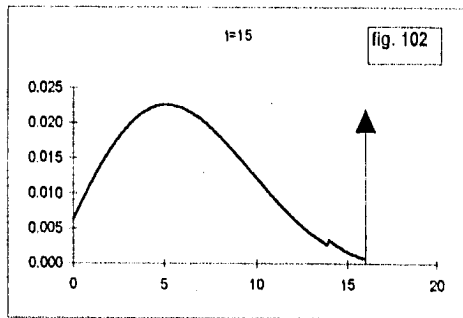
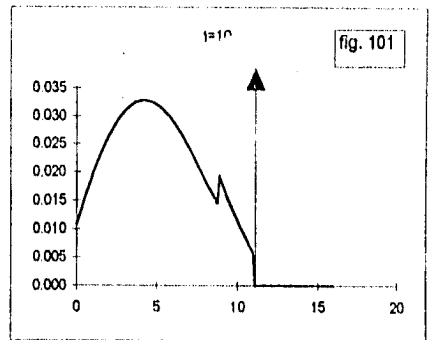
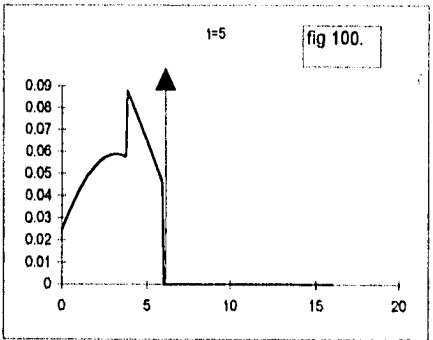
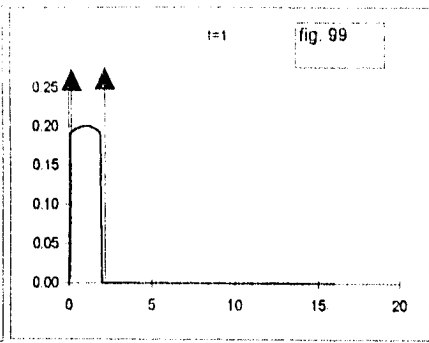
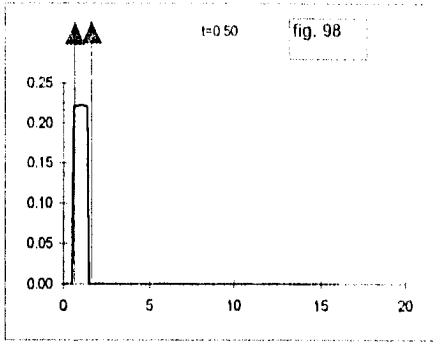
derivada temporal nula en $t=0$,
pared absorbente en el origen.



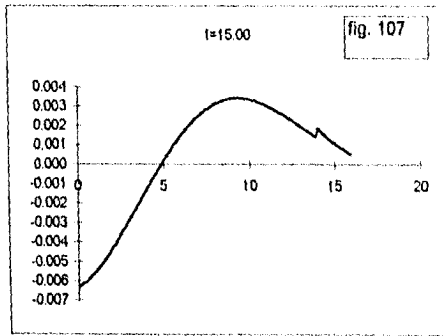
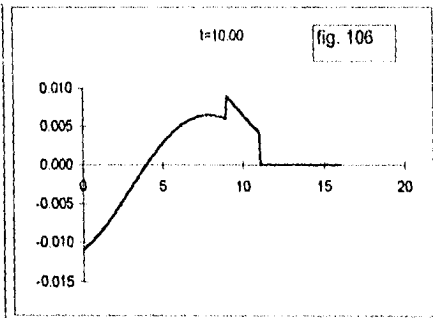
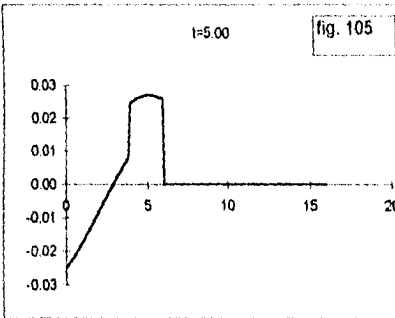
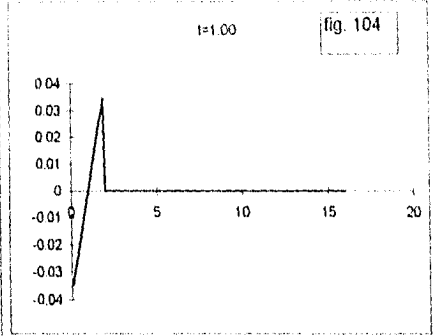
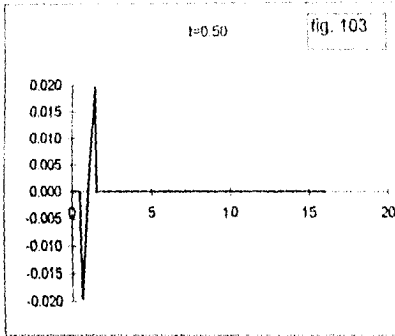
GRUPO 8



Grupo 9:
Difusión Mesoscópica Unidimensional
en la semi-recta $x > 0$ de la distribución:
 $P_+(x, t=0) = \delta(x-1)/2 = P_-(x, t=0)$,
 derivada temporal nula en $t=0$,
 pared absorbente en el origen.



Representación gráfica de Difusión Mesoscópica de la distribución:
 $\rho(x,t=0)=\delta(x-1)$, derivada temporal nula en $t=0$, semieje x positivo
 Pared absorbente en el origen.
 Densidad de Partículas.



Representación gráfica de Difusión Mesoscópica de la distribución:
 $p(x,t=0)=\delta(x-1)$, derivada temporal nula en $t=0$, semieje x positivo
 Pared absorbente en el origen.
 Densidad de Corrientes.

5.1: SOLUCIÓN EN EL ESPACIO FASE PARA $x > 0$ CON PARED REFLEJANTE EN EL ORIGEN.

OBJETIVOS:

1.-Caracterizar la frontera reflejante a través de sus condiciones de frontera.

2.-Efectuar un cambio de variables que permita aplicar las condiciones de frontera así obtenidas para resolver la ecuación de los telegrafistas.

3.-Obtener la solución para la densidad de partículas con pared reflejante mediante la condición de frontera: $\partial\rho(x=0,t)/\partial x=0$.

4.-Combinar las dos soluciones anteriores para generar la solución en el espacio fase.

5.-Representar gráficamente las soluciones para una distribución sujeta a condiciones iniciales simples.

1.-Condiciones de Frontera para la Pared Reflejante.

Consideremos el intervalo $x > 0$, colocamos en $x=x_0 > 0$ una densidad inicial de partículas caracterizada, en el espacio fase, por

$P_1(x, t=0)=f_1(x)$ y $P_2(x, t=0)=f_2(x)$, tal que $\int_{x=0}^{x=\infty} (f_1(x)+f_2(x))=1$. Si

colocamos una pared reflejante en $x=0$, la pared actúa de modo que la probabilidad de que una partícula esté en la posición δ al tiempo $t+\tau$ tiene dos componentes, una debida a la reflexión que naturalmente puede ocurrir con probabilidad R desde la propia pared; es decir que esta primera componente es el resultado de que la partícula esté en la misma posición de la pared pero, se refleje como resultado del proceso independientemente de la presencia de la pared. Una segunda componente se debe a la transmisión, pero como la pared es reflejante, en lugar de que la partícula llegue a $-\delta$, va a llegar a $+\delta$, y ésta es precisamente la característica de la pared, su peculiaridad, digámoslo de ese modo. Así que tenemos:

$$P_1(\delta, t+\tau) = TP_2(0, t) + RP_2(0, t),$$

pero como $R+T=1$, al efectuar un desarrollo en Serie de Taylor de primer

orden:

$$P_1(0,t) + \delta \frac{\partial P_1}{\partial x} + \tau \frac{\partial P_1}{\partial t} = P_2(0,t),$$

si dividimos entre τ , tenemos:

$$\left(\frac{\delta}{\tau} \frac{\partial P_1}{\partial x} + \frac{\partial P_1}{\partial t} \right) = \frac{1}{\tau} (P_2(0,t) - P_1(0,t)),$$

necesitamos obtener el límite cuando δ, τ tienden a cero, y este límite no se puede determinar al menos que supongamos que:

$$P_1(0,t) - P_2(0,t) = 0, \quad (5.1.1)$$

Estas son las condiciones de frontera para la pared reflejante: es inmediato ver que estas condiciones en el espacio de configuración significan que la densidad de corrientes es nula en el origen, para todo tiempo. Y de hecho esta es la forma de ver la pared reflejante más propia de la intuición física, toda pared reflejante es anuladora de corrientes.

Por otro lado, ya sabemos que al especificar condiciones iniciales para P_1 y P_2 , esto es $P_1(x,0) = f_1(x)$ y $P_2(x,0) = f_2(x)$ tenemos, para la derivada temporal:

$$\frac{\partial P_1}{\partial t}(x,t=0) = -\frac{df_1}{dx} - \frac{f_1(x)}{2} + \frac{f_2(x)}{2} = g_1(x)$$

$$\frac{\partial P_2}{\partial t}(x,t=0) = +\frac{df_2}{dx} + \frac{f_1(x)}{2} - \frac{f_2(x)}{2} = g_2(x) \quad (5.1.2)$$

2.-Cambio de Variable para Resolver la Ecuación de los Telegrafistas.

Consideremos ahora el sistema de ecuaciones dinámicas en un tiempo t diferente de cero:

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} + \frac{\partial P_1}{\partial x} = -\frac{P_1}{2} + \frac{P_2}{2}$$

$$\frac{\partial P_2}{\partial t} - \frac{\partial P_2}{\partial x} = \frac{P_1}{2} - \frac{P_2}{2}$$

y la condición (5.1.1) se puede expresar de esta manera:

$$J(0,t) = 0. \quad (5.1.3)$$

Por el principio de superposición J también debe satisfacer la ecuación de los Telegrafistas, de modo que se cumple:

$$\text{Tel}(J)=0 \quad (5.1.4)$$

Además:

$$J(x,t) = f_2(x) - f_1(x), \text{ en } t=0, \quad (5.1.5)$$

Por otro lado, derivando J con respecto al tiempo tenemos: $\frac{\partial J(x,t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial P_1}{\partial t} - \frac{\partial P_2}{\partial t} \right)$, cantidad ésta última válida para todo t , particularmente en $t=0$ y debemos tener:

$$\frac{\partial J(x,t=0)}{\partial t} = (-g_1(x) + g_2(x)), \quad (5.1.6)$$

donde $g_1(x)$ y $g_2(x)$ vienen dadas por (5.1.2). Como este problema, el descrito por la ecuación (5.1.4) con las condiciones $x \geq 0$, (5.1.5), (5.1.6) se resuelve en el apéndice 4, podemos tener en principio:

$J(x,t)$, que ya involucra contar con $P_2(x,t) - P_1(x,t)$.

3.-Combinación de la Función J y la Solución en Espacio de Configuración para Obtener cada Valor de P_1 .

También podemos resolver el problema en el espacio de configuración para la densidad de partículas, esto es: $\text{Tel}(\rho)=0$, sujeto a: $\rho(x,0)=f(x)$, $\partial\rho(x,t=0)/\partial t=g(x)$, $\partial\rho(x=0,t)/\partial x=U(t)=0$, ésta última es la condición de frontera para el caso de paredes reflejantes, la cual se deduce de la ecuación de Maxwell-Cattaneo con $J=0$ (condición indispensable en el origen). Tratando las ecuaciones que definen a ρ y a J como simultáneas, vamos a tener:

$$P_{1/2}(x,t) = \frac{\pm J(x,t) + \rho(x,t)}{2}. \quad (5.1.7)$$

4.-Distribución Inicial sin Movimiento con Condiciones Iniciales Simples.

Como un caso particular supongamos que deseamos resolver el problema de encontrar $P_1(x,t)$ y $P_2(x,t)$ bajo las siguientes condiciones:

$$P_1(x,0) = \frac{1}{2} \delta(x-1) = f_1(x); \quad g_1(x) = -\frac{1}{2} \delta'(x-1),$$

$$P_2(x,0) = \frac{1}{2} \delta(x-1) = f_2(x); \quad g_2(x) = +\frac{1}{2} \delta'(x-1),$$

$$P_1(0,t) = P_2(0,t)$$

Del apéndice 4 tenemos, combinando (A.4.4) y (A.4.7) en (5.1.7):

$$P_{1/2}(x,t) = \frac{1}{8} \exp(-t/2) \{ 2\delta(x-1-t) + 2\delta(t-x-1) \\ + I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+1)^2} \right) \frac{t \pm (x+1)}{2 \sqrt{t^2 - (x+1)^2}} H(t-x-1) + I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x-1)^2} \right) \frac{t \pm (x-1)}{2 \sqrt{t^2 - (x-1)^2}} H(t-x+1) \\ + \frac{1}{2} I_0 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+1)^2} \right) H(t-x-1) + \frac{1}{2} I_0 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x-1)^2} \right) H(t-x+1) \};$$

Nuevamente, dirá mucho más la representación gráfica que las relaciones matemáticas.

5.- Representación Gráfica de la Solución.

En las figuras 108 a 144 podemos ver que:

1.) Mientras $t < 1$, vemos que el desarrollo de las distribuciones P_1 y P_2 es la misma que resulta en un medio infinito, por lo tanto, las partículas tardan un tiempo finito en enterarse de la existencia de la pared.

2.) A partir de $t > 1$, notamos cómo P_1 (o P_+) va tomando un valor dominante, de modo que P_- o P_2 tiene el efecto complementario que hace que la derivada con respecto a x en el origen se anule.

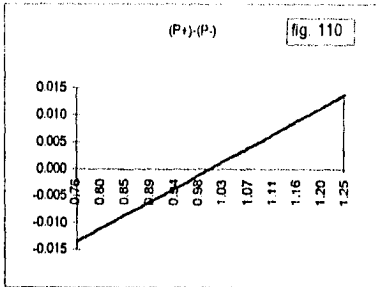
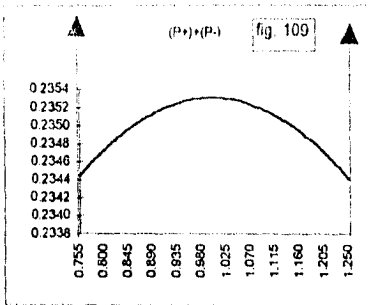
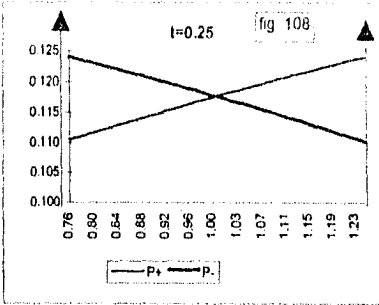
3.) El efecto de repulsión provocado por la pared reflejante hace que evidentemente exista un aglutinamiento en el origen.

4.) Para $t > 2$, cuando las últimas partículas balísticas con corriente hacia la izquierda, son rebasadas por el frente de partículas rechazadas por la pared, tenemos una corriente decreciente permanentemente positiva.

Con el fin de obtener un comparativo, evaluemos la densidad de partículas en $t=20$ para el modelo de Flick, apéndice 6, ec. (A.6.4):

$$C(x=0, t=20) = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \exp\left(-\frac{x^2+1}{4t}\right) \cosh\left(-\frac{x}{2t}\right) = 0.1261566.$$

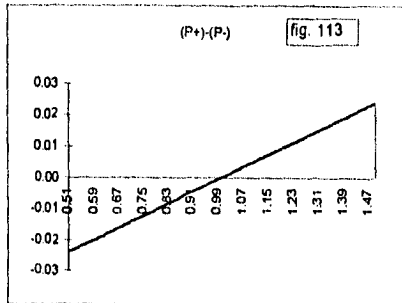
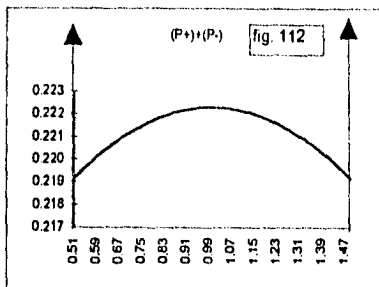
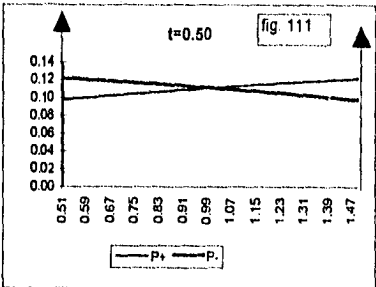
Este valor corresponde muy bien con el de la gráfica del grupo 9.



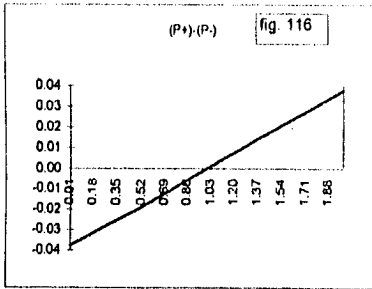
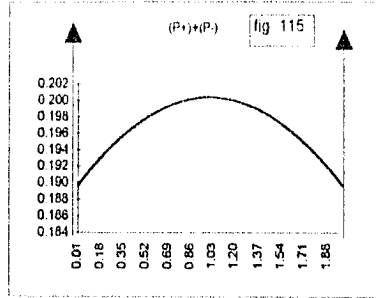
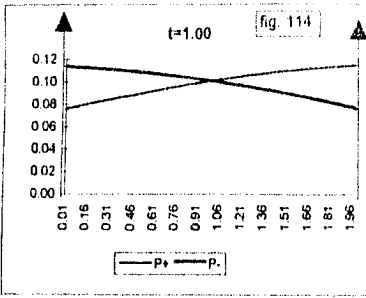
Grupo 1

Difusión Mesoscópica Unidimensional en la semi-recta $x>0$ de la distribución:

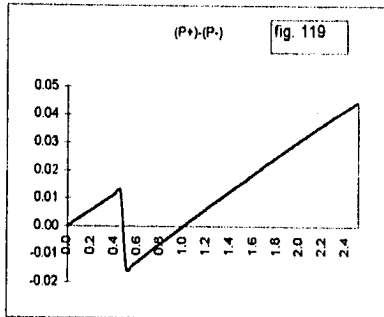
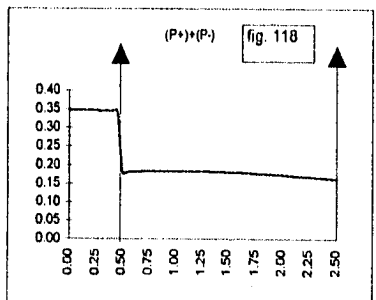
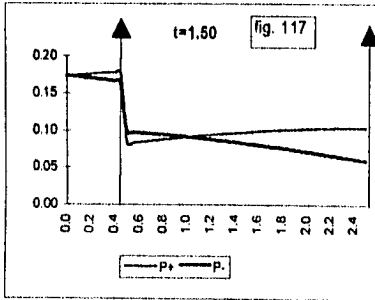
$P_+(x,t=0)=\delta(x-1)/2=P_-(x,t=0)$,
 derivada temporal nula en $t=0$,
 pared reflejante en el origen.



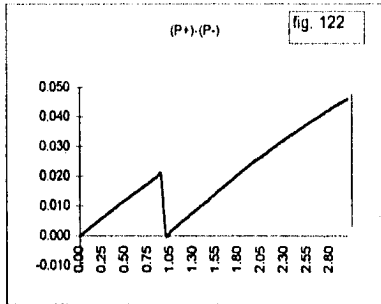
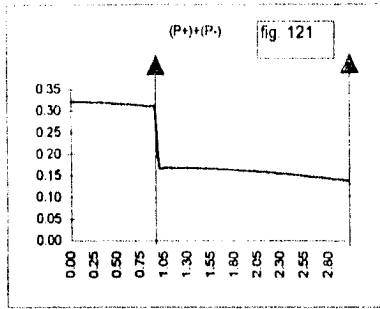
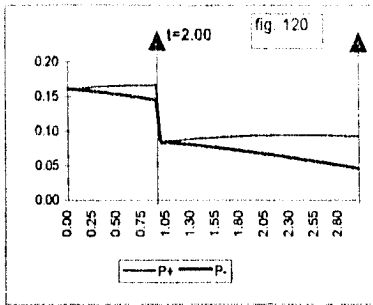
GRUPO 2



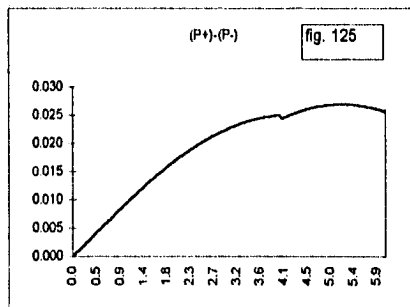
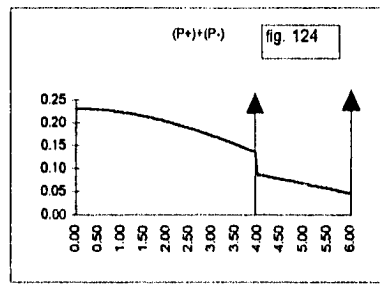
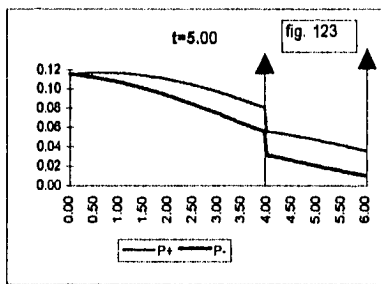
Grupo 3:
 Difusión Mesoscópica Unidimensional
 en la semi-recta $x > 0$ de la distribución:
 $P_+(x, t=0) = \delta(x-1)/2 = P_-(x, t=0)$,
 derivada temporal nula en $t=0$,
 pared reflejante en el origen.



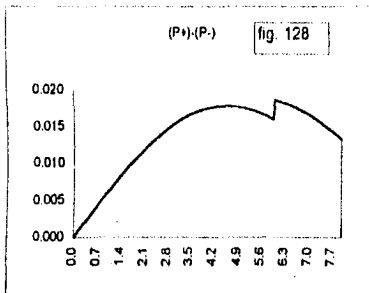
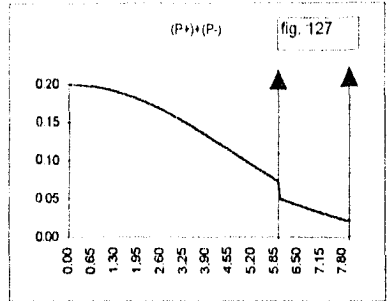
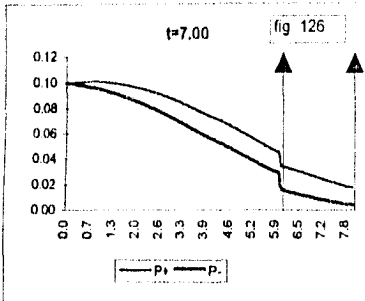
GRUPO 4



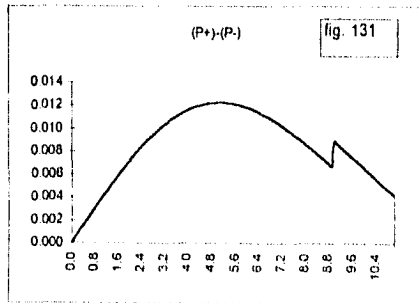
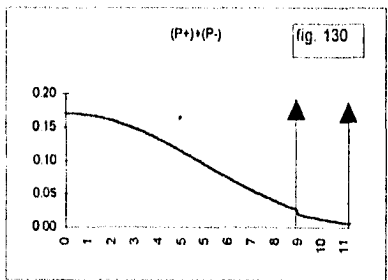
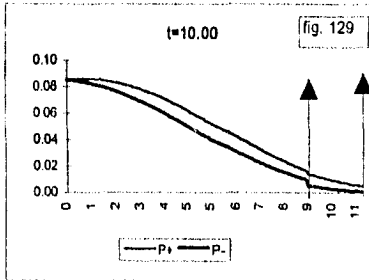
Grupo 5:
 Difusión Mesoscópica Unidimensional
 en la semi-recta $x>0$ de la distribución:
 $P_+(x,t=0)=\delta(x-1)/2=P_-(x,t=0)$,
 derivada temporal nula en $t=0$,
 pared reflejante en el origen.



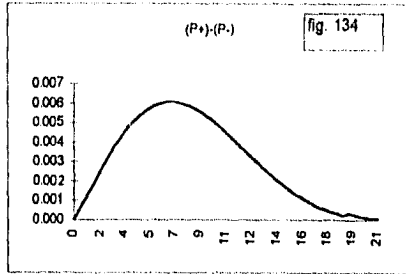
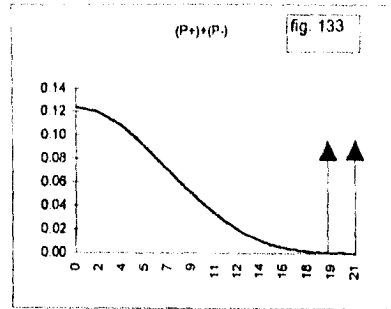
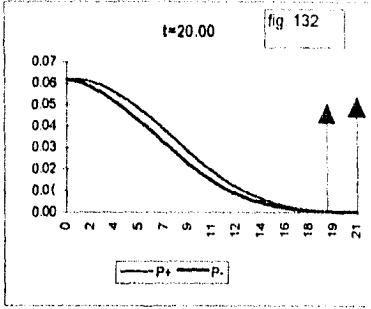
GRUPO 6



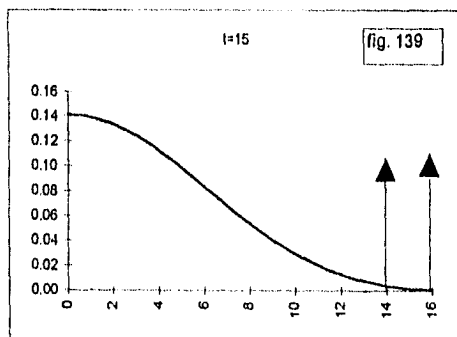
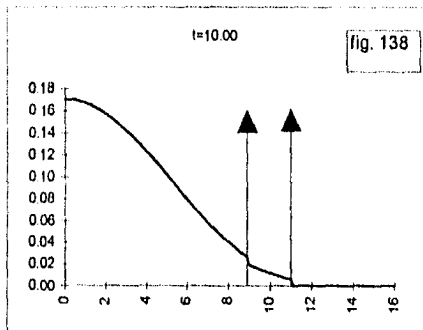
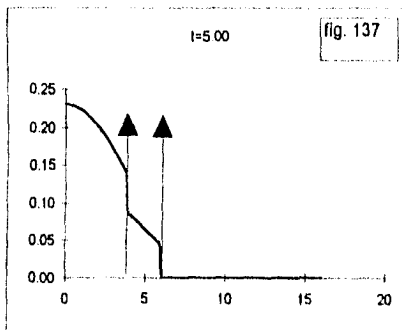
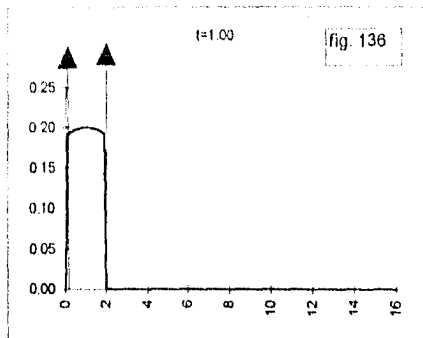
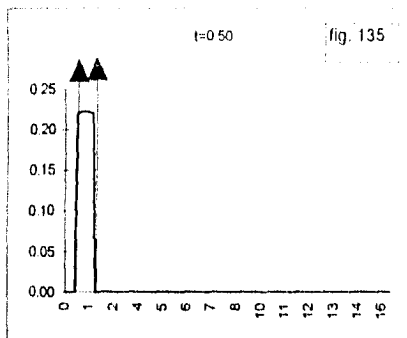
Grupo 7:
 Difusión Mesoscópica Unidimensional
 en la semi-recta $x > 0$ de la distribución:
 $P_+(x, t=0) = \delta(x-1)/2 = P_-(x, t=0)$,
 derivada temporal nula en $t=0$,
 pared reflejante en el origen.



GRUPO 8

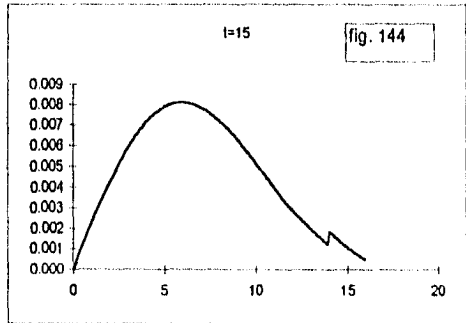
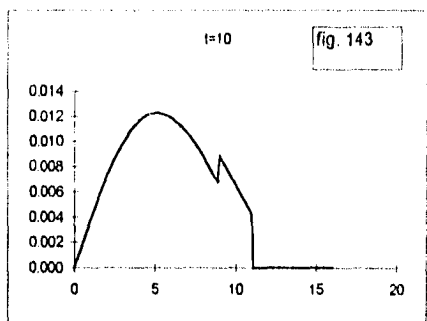
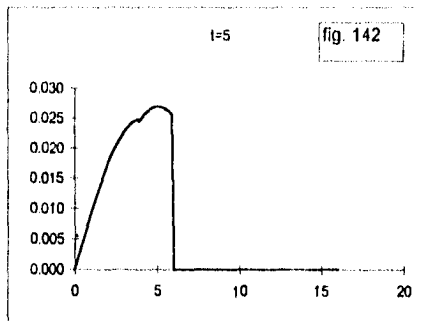
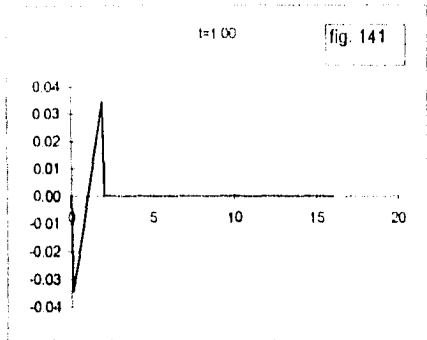
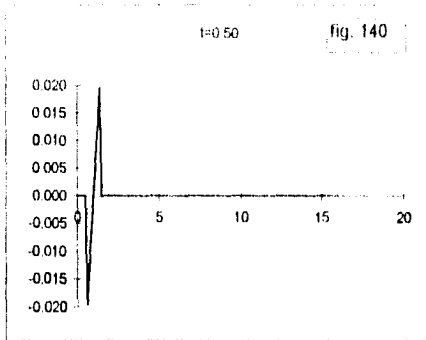


Grupo 9:
 Difusión Mesoscópica Unidimensional
 en la semi-recta $x > 0$ de la distribución:
 $P_+(x, t=0) = \delta(x-1)/2 = P_-(x, t=0)$,
 derivada temporal nula en $t=0$,
 pared reflejante en el origen.



Representación gráfica de Difusión Mesoscópica de la distribución:
 $\rho(x,t=0)=\delta(x-1)$, derivada temporal nula en $t=0$, semieje x positivo
 Pared reflejante en el origen.

Densidad de Partículas.



Representación gráfica de Difusión Mesoscópica de la distribución:
 $\rho(x,t=0)=\delta(x-1)$, derivada temporal nula en $t=0$, semieje x positivo
 Pared reflejante en el origen.

Densidad de Corrientes.

CONCLUSIONES:

Del desarrollo del presente trabajo he llegado a las conclusiones siguientes:

1.-La difusión mesoscópica puede analizarse desde dos puntos de vista. El primero consiste en estudiar el problema empleando dos distribuciones (que serían distribuciones de probabilidad, en el caso discreto) la primera corresponde a partículas moviéndose a la derecha y la segunda corresponde a las partículas moviéndose a la izquierda. El segundo punto de vista consiste en considerar como variables de decisión de nuestro problema la función de densidad de partículas y de corrientes. Dadas dos condiciones iniciales para las distribuciones en el Espacio Fase puede resolverse el problema completamente.

2.-La ecuación diferencial parcial de los telegrafistas, que es hiperbólica, es verificada por las variables de decisión en difusión mesoscópica clásica unidimensional: por las distribuciones de densidad de partículas con movimiento a derecha e izquierda, por la función de densidad de partículas y de corrientes.

3.-El modelo matemático propuesto por el sistema de ecuaciones dinámicas en el discreto y continuo es congruente con el resultado esperado: si estudiamos el fenómeno en escalas de tiempo mayores al tiempo de duración de un salto de las partículas encontraremos que una determinada cantidad de ellas se desplazan como balísticas y el resto quedan como una cauda, tal que a medida que el tiempo aumenta se reduce a la forma esperada por el modelo derivado de la ley de Fick. La cantidad de partículas en la cauda y la cantidad que se desplazan como balísticas dependen de las características del medio.

4.- Toda pared se puede distinguir matemáticamente con las adecuadas condiciones a la frontera. La pared reflejante anula las corrientes, y la absorbente anula la densidad de partículas que puedan reincorporarse al medio después de interactuar con ella. El tratamiento de los correspondientes problemas matemáticos es congruente con la solución que se esperaría intuitivamente.

5.-Este modelo de difusión mesoscópica unidimensional es también aproximado, no es el modelo exacto de difusión. Para convencernos consideremos el resultado en la recta infinita: de la distribución

inicial surgieron dos particiones que se desplazan como balísticas que siguen la misma forma matemática que la distribución inicial multiplicadas por un factor de decaimiento temporal exponencial, pero ¿no sería más razonable suponer que estas particiones se deformaran también con el tiempo en vez de conservar la relación funcional de la distribución inicial?. Esta investigación se deja como perspectiva de un futuro análisis, el trabajo se concluye con una formulación que puede expresarse por ecuaciones cerradas.

6.-La ecuación de Maxwell-Cattaneo, que es empleada, por ejemplo, en Termodinámica de Procesos Irreversibles como un resultado fenomenológico, *puede ser deducida a partir del sistema de ecuaciones dinámicas*, lo cual es un logro muy importante del modelo y que hace ver la congruencia entre la formulación macroscópica y mesoscópica.

PERSPECTIVAS:

Las perspectivas futuras de análisis del presente problema pueden ser las siguientes:

1.-Difusión mesoscópica unidimensional cuando la distribución de velocidades de salto de partículas no es constante (en este trabajo se tomó $c=\text{constante}$) sino que obedece a alguna función de distribución, digamos $c=\phi(x,t)$.

2.-Difusión mesoscópica en dos o tres dimensiones.

3.-Estudio de la evolución temporal de las particiones balísticas. Sin duda este estudio deberá realizarse diseñando los experimentos correspondientes.

Sin duda, los procedimientos para modelar estadísticamente los problemas de difusión deben mejorarse sensiblemente para proponer soluciones en dos y tres dimensiones, así como para considerar otros casos de paredes.

APÉNDICE 1: SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE LOS TELEGRAFISTAS PARA $-\infty < x < \infty$.

1. ECUACIONES DIFERENCIALES CARACTERÍSTICAS.

En este apéndice trataremos brevemente aspectos particulares sobre ciertas ecuaciones conocidas como cuasilineales de la forma:

$$A(x, y) \frac{\partial^2 z}{\partial x^2} + 2B(x, y) \frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y} + C(x, y) \frac{\partial^2 z}{\partial y^2} = F(x, y, z, \partial z / \partial x, \partial z / \partial y). \quad (\text{A.1.1})$$

Con la notación usual:

$$p = \partial z / \partial x, \quad q = \partial z / \partial y, \quad r = \partial^2 z / \partial x^2, \quad s = \partial^2 z / \partial x \partial y, \quad t = \partial^2 z / \partial y^2, \quad (\text{A.1.2})$$

se escribe brevemente:

$$Ar + 2Bs + Ct = F. \quad (\text{A.1.3})$$

Supondremos que las funciones A, B, C y F tienen derivadas continuas.

Para determinar ahora una superficie integral, no basta, como para las ecuaciones de primer orden, dar una curva inicial B; es necesario, además, dar el plano tangente a la superficie en cada uno de los puntos de la curva inicial, lo que equivale a prescribir la superficie reglada circunscrita a lo largo de la curva dada. Los planos tangentes quedan fijados por sus vectores normales $n = pi + qj - tk$, es decir, por p y q. Al conjunto de todos los planos correspondientes a todos los puntos de una curva lo llamaremos una banda (fig. 1).

Una banda queda, por lo tanto, determinada en forma paramétrica por las cinco funciones:

$$x = x(\tau), \quad y = y(\tau), \quad z = z(\tau), \quad p = p(\tau), \quad q = q(\tau). \quad (\text{A.1.4})$$

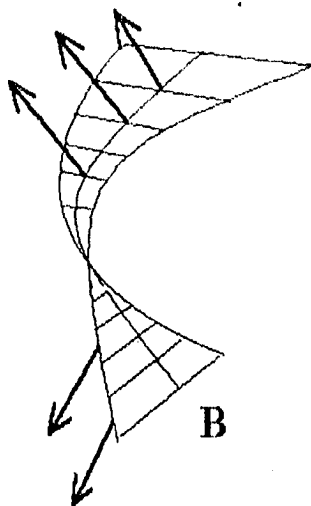
Ahora bien, para que esta banda pueda corresponder a una superficie $z(x, y)$ es preciso que verifique la siguiente relación:

$$z' = px' + qy' \quad (z = dz/d\tau, \text{ etc.}), \quad (\text{A.1.5})$$

llamada condición de las bandas, que se obtiene derivando con respecto a τ la cantidad: $z(\tau) = z[x(\tau), y(\tau)]$.

Supongamos dada una banda (A.1.4) con la condición (A.1.5) y que por ella pasa la superficie integral $z = z(x, y)$. Podemos calcular los valores de las derivadas segundas r, s, t a lo largo de esta banda. De $p(\tau) = p[x(\tau), y(\tau)]$ se deduce, derivando respecto a la variable τ : $p' = x' \partial p / \partial x + y' \partial p / \partial y = rx' + sy'$.

Fig. 1.



Análogamente se halla que $q' = sx' + ty'$. Por consiguiente, tenemos, junto con la ecuación entre derivadas parciales, tres ecuaciones:

$$x'r + y's = p', \quad x's + y't = q', \quad Ar + 2Bs + Ct = F, \quad (\text{A.1.6})$$

para el cálculo de r, s, t .

Este sistema se puede resolver unívocamente respecto de r, s, t cuando su determinante:

$$\begin{vmatrix} x' & y' & 0 \\ 0 & x' & y' \\ A & 2B & C \end{vmatrix} = \Delta y'^2 - 2Bx'y' + Cx'^2 \quad (\text{A.1.7})$$

no se anula. si se supone además que $A, B, F, x(\tau), y(\tau), z(\tau)$ son funciones analíticas, se pueden calcular las derivadas de orden superior de $z(x, y)$ a lo

largo de C de modo completamente análogo y se obtiene así el desarrollo de Taylor de $z(x,y)$. Puede probarse que este desarrollo converge y finalmente, que su suma representa la integral de la ecuación diferencial entre derivadas parciales dada. Si el determinante (A.1.7) se anula a lo largo de una curva, ninguna banda que la contenga determinará una única superficie integral. Resulta de aquí que la ecuación diferencial

$$A(x,y)y'^2 - 2B(x,y)x'y' + C(x,y)x'^2 = 0, \quad (A.1.8)$$

desempeña un papel importante en la Teoría de las ecuaciones entre derivadas parciales; se llama ecuación diferencial de las curvas características. Como $y'/x' = dy/dx$ se puede poner en la forma:

$$A(dy/dx)^2 - 2B(dy/dx) + C = 0. \quad (A.1.9)$$

Esta ecuación es cuadrática en dy/dx , resuelta da: $dy/dx = (1/A)[B \pm \sqrt{B^2 - AC}]$. Se obtendrán, por lo tanto, dos ecuaciones diferenciales ordinarias, cuyas soluciones definen dos haces de curvas $y=y_1(x, c_1)$, $y=y_2(x, c_2)$ (fig. 2)

Estas curvas se llaman curvas características de la ecuación diferencial (A.1.1). Resolviendo estas ecuaciones respecto de c_1 y c_2 se obtiene:

$$c_1 = \phi(x, y), c_2 = \psi(x, y). \quad (A.1.10)$$

Para el primer haz se verifica:

$$dy/dx = -\phi_x/\phi_y = (1/A)[B + \sqrt{B^2 - AC}] \text{ con: } \phi_y \text{ diferente de } 0. \quad (A.1.11)$$

Y, para el segundo:

$$dy/dx = -\psi_x/\psi_y = (1/A)[B - \sqrt{B^2 - AC}] \text{ con: } \psi_y \text{ diferente de } 0. \quad (A.1.12)$$

Sustituyendo en (A.1.9) se obtiene para ϕ y ψ las ecuaciones entre derivadas parciales de primer orden:

$$A\phi_x^2 + 2B\phi_x\phi_y + C\phi_y^2 = 0, \quad A\psi_x^2 + 2B\psi_x\psi_y + C\psi_y^2 = 0. \quad (A.1.13)$$

Atendiendo al valor del discriminante $D = B^2 - AC$ de (A.1.9) se distinguen los siguientes casos:

$$D = B^2 - AC \begin{cases} > 0 & \text{caso hiperbólico,} \\ = 0 & \text{caso parabólico,} \\ < 0 & \text{caso elíptico.} \end{cases} \quad (A.1.14)$$

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

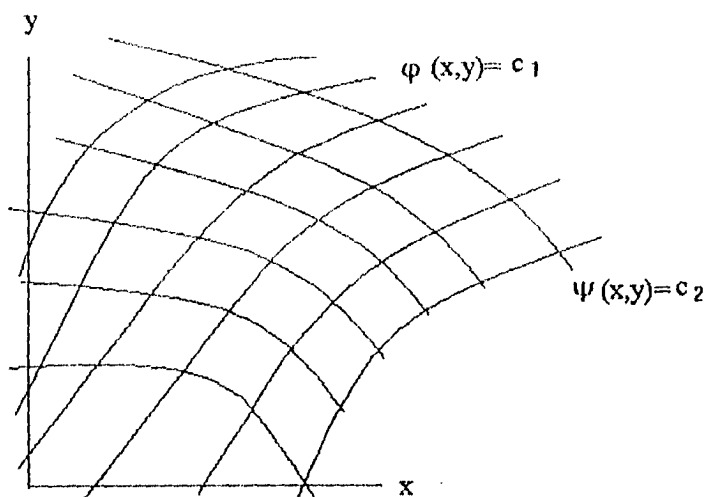


fig. 2.

Debe observarse aquí que esta discriminación depende de (x,y) y que, por lo tanto, puede ser distinta para distintos puntos del plano (x,y) .

En el caso hiperbólico son los dos haces de curvas características reales; en el elíptico imaginarias conjugadas; en el parabólico coinciden los dos haces.

2. MÉTODO DE RIEMMAN.

La ecuación diferencial de tipo hiperbólico en su forma que se conoce como normal es:

$$L[z] = \frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y} + a(x,y) \frac{\partial z}{\partial x} + b(x,y) \frac{\partial z}{\partial y} + c(x,y)z = 0. \quad (A.1.15)$$

Consideremos el método clásico, debido a Riemman, que puede, en muchos casos, resolver el problema de condiciones iniciales para esta ecuación. Para ello necesitamos hacer algunas observaciones previas: representaremos por $H(w)$ la expresión diferencial adjunta de $L[z]$:

$$M[w] = \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} - \frac{\partial(aw)}{\partial x} - \frac{\partial(bw)}{\partial y} + cw. \quad (\text{A.1.16})$$

Si se verifica que $L[z]=M[z]$, se dice que la ecuación (15) es autoadjunta. Este es, por ejemplo, el caso en el que $a=b=0$. Se ve fácilmente que, empleando las abreviaturas:

$$P = \frac{1}{2} \frac{\partial(zw)}{\partial x} + z \left(\frac{\partial w}{\partial x} - bw \right); \quad Q = \frac{1}{2} \frac{\partial(zw)}{\partial y} - z \left(\frac{\partial w}{\partial y} - aw \right). \quad (\text{A.1.17})$$

Se verifica la identidad:

$$wL[z] - zM[w] = \frac{\partial Q}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial y}. \quad (\text{A.1.18})$$

Supondremos que $z=z(x,y)$ sea la solución de (A.1.15) y $w=w(x,y)$ una solución de su adjunta $M[w]=0$. En virtud de (A.1.18) se cumple que:

$$\frac{\partial Q}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial y} = 0. \quad (\text{A.1.19})$$

Si C es una curva cerrada del plano x,y se deduce entonces del Teorema de Stokes que la integral curvilínea de $Pdx+Qdy$ a lo largo de C es nula:

$$\oint_C (Pdx+Qdy) = 0. \quad (\text{A.1.20})$$

Empleemos ahora como C una curva formada por dos segmentos rectilíneos paralelos a los ejes coordenados y un arco de curva R que a lo sumo es cortado en un punto por las paralelas a dichos ejes (fig.3)

Estas paralelas $x=\text{const.}$, $y=\text{const.}$ son las características de la ecuación diferencial (A.1.15). Supuestos conocidos los valores de z , $\partial z/\partial x$, $\partial z/\partial y$ a lo largo de R , se trata de hallar el valor de z en el lugar A de coordenadas x_0 , y_0 . Sean $y=\phi(x)$ y $x=\psi(y)$ las ecuaciones del trazo curvilíneo de R . De (20) se deduce:

$$\int_{A_1}^{A_2} (Pdx+Qdy) + \int_{A_2}^A (Pdx+Qdy) + \int_A^{A_1} (Pdx+Qdy) = 0. \quad (\text{A.1.21})$$

En el segmento de A_2 a A es $x=x_0=\text{const.}$ luego $dx=0$ y, análogamente, en el punto de A a A_1 es $y=y_0=\text{const.}$ luego $dy=0$. Teniendo esto en cuenta y substituyendo parcialmente (A.1.17) en (A.1.21) se obtiene:

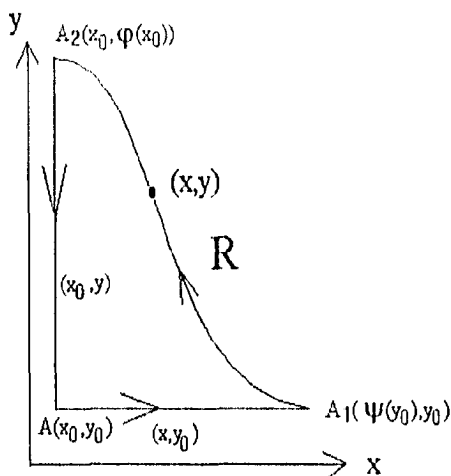


fig. 3.

$$\int_{A_1}^{A_2} (Pdx+Qdy) + \int_{A_2}^A \left[\frac{1}{2} \frac{\partial(zw)}{\partial y} - z \left(\frac{\partial w}{\partial y} - aw \right) \right] dy - \int_A^{A_1} \left[\frac{1}{2} \frac{\partial(zw)}{\partial x} - z \left(\frac{\partial w}{\partial x} - bw \right) \right] dx =$$

$$\int_{A_1}^{A_2} (Pdx+Qdy) - \int_{A_2}^A z \left(\frac{\partial w}{\partial y} - aw \right) dy + \int_A^{A_1} z \left(\frac{\partial w}{\partial x} - bw \right) dx - \frac{1}{2} [zw]_A^{A_1} + \frac{1}{2} [zw]_{A_2}^A = 0,$$

o bien:

$$[zw]_A = \frac{1}{2} \left([zw]_{A_1} + [zw]_{A_2} \right) - \int_{A_1}^{A_2} (Pdx+Qdy) + \int_{A_2}^A z \left(\frac{\partial w}{\partial y} - aw \right) dy + \int_{A_1}^A z \left(\frac{\partial w}{\partial x} - bw \right) dx. \quad (A.1.22)$$

Se trata ahora de determinar la función $w=w(x,y)$ de modo que, además de la ecuación $M[w]=0$, verifique las condiciones:

$$w(x_0, y_0)=1, \quad \partial w / \partial x - bw = 0, \quad \text{sobre } A_1A, \quad \partial w / \partial y - aw = 0 \quad \text{sobre } A_2A. \quad (A.1.23)$$

Como $y=y_0=\text{const.}$ sobre A_1A y $x=x_0=\text{const.}$ sobre A_2A las dos últimas

condiciones representan ecuaciones diferenciales lineales ordinarias para $w(x, y_0)$ y $w(x_0, y)$, respectivamente, que son fáciles de integrar con la condición inicial $w(x_0, y_0)=1$. Por consiguiente, resultan en total las siguientes condiciones para w :

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} - \frac{\partial(aw)}{\partial x} - \frac{\partial(bw)}{\partial y} + cw = 0$$

$$w(x, y_0) = \exp\left[\int_{x_0}^x b(\zeta, y_0) d\zeta\right], \quad w(x_0, y) = \exp\left[\int_{y_0}^y a(x_0, \eta) d\eta\right]. \quad (A.1.24)$$

Teniendo presente (A.1.23) se obtiene de (A.1.22):

$$z(x_0, y_0) = \frac{1}{2} [z(\psi(y_0), y_0)w(\psi(y_0), y_0) + \int_{A_1}^{A_2} (Pdx + Qdy)w(x_0, \phi(x_0)))] + \int_R (Pdx + Qdy). \quad (A.1.25)$$

Si se puede hallar ahora una función $w(x, y)$, llamada de Riemman, que verifique las condiciones (A.1.24), queda el segundo miembro de (A.1.25) totalmente conocido y se puede calcular $z(x_0, y_0)$. si se hace variar x_0, y_0 se obtiene una superficie integral $z=z(x, y)$ en el entorno de la curva inicial R. Debe observarse que al variar x_0, y_0 varía también la función de Riemman $w(x, y)$. La mayor dificultad del método consiste en determinar la función de Riemman $w(x, y)$ que verifique las condiciones (A.1.24).

3. EJEMPLO: LA ECUACIÓN DE LOS TELEGRAFISTAS.

Consideremos la siguiente ecuación entre derivadas parciales de tipo hiperbólico con coeficientes constantes $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$:

$$\frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y} + \alpha_0 \frac{\partial z}{\partial x} + \beta_0 \frac{\partial z}{\partial y} + \gamma_0 z = 0. \quad (A.1.26)$$

Esta ecuación tiene ya la forma normal, pero por medio de la transformación:

$$z(x, y) = w(x, y) \exp(-\alpha_0 y - \beta_0 x) \quad (A.1.27)$$

en su forma autoadjunta:

$$L[u] = \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + ku = 0, \quad k = \gamma_0 - \alpha_0 \beta_0. \quad (A.1.28)$$

En virtud de (A.1.24), una función de Riemman $w(x, y)$ para este problema debe satisfacer las siguientes condiciones ($a=b=0$):

condiciones representan ecuaciones diferenciales lineales ordinarias para $w(x, y_0)$ y $w(x_0, y)$, respectivamente, que son fáciles de integrar con la condición inicial $w(x_0, y_0) = 1$. Por consiguiente, resultan en total las siguientes condiciones para w :

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} - \frac{\partial(aw)}{\partial x} - \frac{\partial(bw)}{\partial y} + cw = 0$$

$$w(x, y_0) = \exp\left[\int_{x_0}^x b(\zeta, y_0) d\zeta\right], \quad w(x_0, y) = \exp\left[\int_{y_0}^y a(x_0, \eta) d\eta\right]. \quad (\text{A.1.24})$$

Teniendo presente (A.1.23) se obtiene de (A.1.22):

$$z(x_0, y_0) = \frac{1}{2} [z(\psi(y_0), y_0)w(\psi(y_0), y_0) + z(x_0, \phi(x_0))w(x_0, \phi(x_0))] + \int_{A_2}^{A_1} (Pdx + Qdy). \quad (\text{A.1.25})$$

Si se puede hallar ahora una función $w(x, y)$, llamada de Riemman, que verifique las condiciones (A.1.24), queda el segundo miembro de (A.1.25) totalmente conocido y se puede calcular $z(x_0, y_0)$. si se hace variar x_0, y_0 se obtiene una superficie integral $z = z(x, y)$ en el entorno de la curva inicial R. Debe observarse que al variar x_0, y_0 varía también la función de Riemman $w(x, y)$. La mayor dificultad del método consiste en determinar la función de Riemman $w(x, y)$ que verifique las condiciones (A.1.24).

3. EJEMPLO: LA ECUACIÓN DE LOS TELEGRAFISTAS.

Consideremos la siguiente ecuación entre derivadas parciales de tipo hiperbólico con coeficientes constantes $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$:

$$\frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y} + \alpha_0 \frac{\partial z}{\partial x} + \beta_0 \frac{\partial z}{\partial y} + \gamma_0 z = 0. \quad (\text{A.1.26})$$

Esta ecuación tiene ya la forma normal, pero por medio de la transformación:

$$z(x, y) = w(x, y) \exp(-\alpha_0 y - \beta_0 x) \quad (\text{A.1.27})$$

en su forma autoadjunta:

$$L[u] = \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + ku = 0, \quad k = \gamma_0 - \alpha_0 \beta_0. \quad (\text{A.1.28})$$

En virtud de (A.1.24), una función de Riemman $w(x, y)$ para este problema debe satisfacer las siguientes condiciones ($a=b=0$):

$$M\{w\} = L\{w\} = \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} + kw = 0, \quad (\text{A.1.29})$$

$$w(x, y_0) = 1, \quad w(x_0, y) = 1. \quad (\text{A.1.30})$$

La función $w(x, y)$ debe tomar por consiguiente sobre las rectas $y=y_0$ y $x=x_0$ el valor constante 1. Ahora bien, sobre estas rectas es $\sigma=(x-x_0)(y-y_0)$ igual a cero. Por consiguiente se trata de hallar una función $\omega=\omega(\sigma)$ que sea solución de la ecuación (A.1.29) y que verifique las condiciones $\omega(0)=1$ y:

$$w(x, y) = \omega[(x-x_0)(y-y_0)]$$

con lo que se habrá hallado una apropiada función de Riemann. De (A.1.31) se deduce:

$$\frac{\partial w}{\partial x} = \frac{\partial \omega}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial x} = \frac{d\omega}{d\sigma} (y-y_0)$$

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{\partial \omega}{\partial \sigma} (y-y_0) \right\} = \frac{\partial \omega}{\partial \sigma} + (y-y_0) \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{d\omega}{d\sigma} \right) =$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial \sigma} + (y-y_0) \frac{\partial^2 \omega}{\partial \sigma^2} \frac{\partial \sigma}{\partial y} = \frac{\partial \omega}{\partial \sigma} + (y-y_0)(x-x_0) \frac{d^2 \omega}{d\sigma^2} = \frac{d\omega}{d\sigma} + \sigma \frac{d^2 \omega}{d\sigma^2}.$$

Sustituyendo esto en (A.1.29) se obtiene la ecuación diferencial ordinaria:

$$\sigma \frac{d^2 \omega}{d\sigma^2} + \frac{d\omega}{d\sigma} + k\omega = 0,$$

para $\omega=\omega(\sigma)$ que, mediante la sustitución $4k\sigma=\tau^2$ se transforma en la ecuación diferencial de Bessel:

$$\frac{d^2 \omega}{d\tau^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d\omega}{d\tau} + \omega = 0.$$

La cual tiene, alrededor de $\tau=0$, es decir: $\sigma=0$, la solución continua:

$$\omega = J_0(\tau) = J_0(2\sqrt{k\sigma}) = J_0(2\sqrt{k(x-x_0)(y-y_0)})$$

como: $\omega(0) = J_0(0) = 1$, la función:

$$w(x, y) = J_0(2\sqrt{k(x-x_0)(y-y_0)}), \quad (\text{A.1.33})$$

es una función de Riemann para nuestro problema. De (A.1.17) se obtiene en nuestro caso:

$$P = \frac{1}{2} \left(w \frac{\partial u}{\partial x} - u \frac{\partial w}{\partial x} \right), \quad Q = \frac{1}{2} \left(w \frac{\partial u}{\partial y} - u \frac{\partial w}{\partial y} \right).$$

Además, como: $J_0'(\tau) = -J_1(\tau)$:

$$\frac{\partial w}{\partial x} = k(y_0 - y) \frac{J_1 \sqrt{k(x-x_0)(y-y_0)}}{\sqrt{k(x-x_0)(y-y_0)}}$$

$$\frac{\partial w}{\partial y} = k(x_0 - x) \frac{J_1 \sqrt{k(x-x_0)(y-y_0)}}{\sqrt{k(x-x_0)(y-y_0)}}$$

Sustituyendo todo en (A.1.25) resulta:

$$u(x_0, y_0) = \frac{1}{2} [u(\psi(y_0), y_0) + u(x_0, \phi(x_0))] + \frac{1}{2} \int_{\Lambda_2}^{\Lambda_1} J_0 [2 \sqrt{k(x-x_0)(y-y_0)}] \left(-\frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial y} dy \right) +$$

$$+ \frac{k}{2} \int_{\Lambda_2}^{\Lambda_1} \frac{J_1 \sqrt{k(x-x_0)(y-y_0)}}{\sqrt{k(x-x_0)(y-y_0)}} u(y_0 - y) dx - (x_0 - x) dy.$$

De aquí se obtiene también la solución $z(x, y)$ sustituyendo en (A.1.27). La llamada ecuación de los Telegrafistas:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial s^2} - \alpha_1^2 \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - 2\beta_1 \frac{\partial U}{\partial t} - \gamma_1 U = 0, \quad (\text{A.1.34})$$

se puede reducir a un caso particular de A.1.26. La transformación:

$$x = s - t/\alpha_1, \quad y = s + t/\alpha_1, \quad (\text{A.1.35})$$

pone (A.1.34) en su forma normal. Se obtiene:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} = -\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial U}{\partial y}$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{1}{\alpha_1^2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right)$$

$$\frac{\partial U}{\partial s} = \frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s} + \frac{\partial U}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial s} = \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial y}$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial s^2} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - 2 \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2}$$

Sustituyendo en (A.1.34) resulta:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} = \frac{\beta_1}{2\alpha_1} \left(\frac{\partial U}{\partial x} - \frac{\partial U}{\partial y} \right) - \frac{\gamma_1}{4} U = 0, \quad (\text{A.1.36})$$

pero ésta es precisamente (A.1.26) con:

$$\alpha_0 = \beta_1 / (2\alpha_1), \quad \beta_0 = -\beta_1 / (2\alpha_1), \quad \gamma_0 = -\gamma_1 / 4.$$

La transformación (A.1.27) será ahora:

$$U = u(x, y) \exp\left[\frac{\beta_1}{2\alpha_1}(x-y)\right]. \quad (\text{A.1.37})$$

En virtud de (A.1.28) se debe poner:

$$k = \frac{\beta_1^2}{4\alpha_1^2} - \frac{\gamma_1}{4}.$$

Queremos imponer ahora a la ecuación (A.1.34) las condiciones iniciales:

$$U(s, 0) = f(s), \quad \frac{\partial U}{\partial t}(s, 0) = g(s). \quad (\text{A.1.38})$$

Donde $f(s)$ y $g(s)$ son funciones prescritas. En virtud de (A.1.35) a $t=0$ corresponden las rectas $y=x=s$. El trozo de curva R es, por consiguiente, un trozo de estas rectas (Fig. 4); así que, en (A.1.25) y en (A.1.33) debe ponerse $\psi(y)=y$; $\phi(x)=x$.

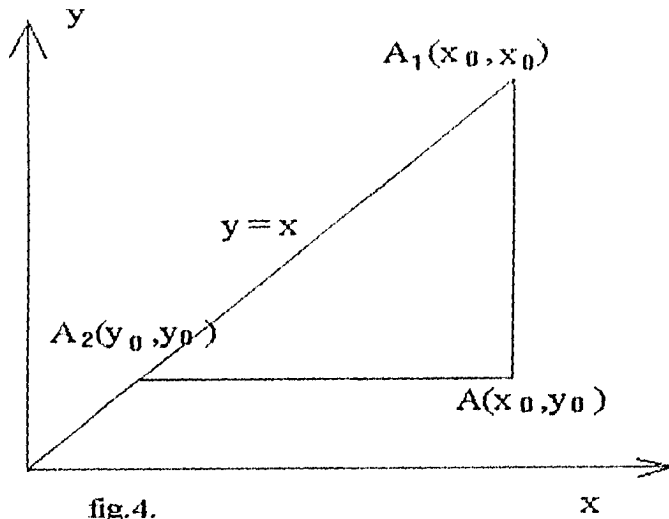
De (A.1.37):

$$U(s, 0) = u(x, x) = f(x), \quad (\text{A.1.39})$$

y:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} &= -\frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial U}{\partial x} + \frac{1}{\alpha_1} \frac{\partial U}{\partial y} = \frac{1}{\alpha_1} \exp\left[\frac{\beta_1}{2\alpha_1}(x-y)\right] \left[-\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial y} - \frac{\beta_1}{\alpha_1} u \right] \\ \frac{\partial U}{\partial t}(s, 0) &= \frac{1}{\alpha_1} \left[\frac{\partial U}{\partial y}(x, x) - \frac{\partial U}{\partial x}(x, x) - \frac{\beta_1}{\alpha_1} u(x, x) \right] = g(x) \\ \frac{\partial U}{\partial y}(x, x) - \frac{\partial U}{\partial x}(x, x) &= \frac{\beta_1}{\alpha_1} f(x) + \alpha_1 g(x). \end{aligned} \quad (\text{A.1.40})$$

A lo largo de la recta $x=y$ es $dx=dy$ y se tiene que integrar (A.1.33) desde $x=y_0$ hasta $x=x_0$, sustituyendo (A.1.39) y (A.1.40) en (A.1.33) se obtiene:



$$\begin{aligned}
 x(x_0, y_0) = & \frac{1}{2} [f(x_0) + f(y_0)] + \frac{1}{2} \int_{x=y_0}^{x_0} (J_0 [2\sqrt{k(x-x_0)(y-y_0)}]) \left[\frac{\beta_1}{\alpha_1} f(x) + \alpha_1 g(x) \right] \\
 & + k \frac{J_1 \sqrt{k(x-x_0)(y-y_0)}}{\sqrt{k(x-x_0)(y-y_0)}} f(x) (y-y_0) dx. \quad (A.1.41)
 \end{aligned}$$

Representando ahora la variable de integración como σ en lugar de x , escribiendo x, y en lugar de x_0, y_0 , e introduciendo de nuevo s y t con ayuda de (A.1.35) se obtiene de (A.1.41) y de (A.1.28) la solución:

$$\begin{aligned}
 U(s, t) &= \frac{1}{2} \exp\left(\frac{\beta_1}{\alpha_1^2} t\right) \{f(s-t/\alpha_1) + f(s+t/\alpha_1)\} \\
 &+ \int_{s-t/\alpha_1}^{s+t/\alpha_1} \{J_0[2\sqrt{k(s-\sigma)^2 - t^2/\alpha_1^2}] \frac{\beta_1}{\alpha_1} f(\sigma) + \alpha_1 g(\sigma)\} \\
 &+ \frac{2k}{\alpha_1} t f(\sigma) \frac{J_1[2\sqrt{k(s-\sigma)^2 - t^2/\alpha_1^2}]}{\sqrt{k(s-\sigma)^2 - t^2/\alpha_1^2}} \{d\sigma\}; \quad k = \frac{\beta_1^2}{4\alpha_1^2} - \frac{\gamma_1}{4}. \quad (A.1.42)
 \end{aligned}$$

Hagamos $\beta_1=1/2$, $\alpha_1=1$, $\gamma=0$, $k=1/16$; si hubiésemos cambiado el argumento de las Funciones de Bessel por $t^2/\alpha_1^2 - (s-\sigma)^2$ en vez de J_0 y J_1 aparecerían I_0 e I_1 , emplearemos esto último por ser para nosotros más adecuado en lo sucesivo, de modo que tendremos finalmente:

$$\begin{aligned}
 U(x, t) &= \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{1}{2}t\right) \{f(x-t) + f(x+t)\} \\
 &+ \int_{x-t}^{x+t} \{I_0\left[\frac{1}{2}\sqrt{t^2 - (x-\sigma)^2}\right] \left[\frac{1}{2}f(\sigma) + g(\sigma)\right] + \\
 &+ \frac{1}{2}t f(\sigma) \frac{I_1\left[\frac{1}{2}\sqrt{t^2 - (x-\sigma)^2}\right]}{\sqrt{t^2 - (x-\sigma)^2}} \{d\sigma\}. \quad (A.1.43)
 \end{aligned}$$

Supongamos los siguientes casos, en particular:

$$1. f(x) = \delta(x), g(x) = 0:$$

$$U(x, t) = \frac{1}{2} \exp(-t/2) \{\delta(x+t) + \delta(x-t)\} + \frac{1}{2} I_0\left[\frac{1}{2}\sqrt{t^2 - x^2}\right] + \frac{1}{2} \frac{I_1\left[\frac{1}{2}\sqrt{t^2 - x^2}\right]}{\sqrt{t^2 - x^2}} H(x-t).$$

Si ahora denominamos:

$$\phi(x, t, \sigma) = \frac{1}{2} H[t - (x-\sigma)] \left\{ I_0\left[\frac{1}{2}\sqrt{t^2 - (x-\sigma)^2}\right] + t \frac{I_1\left[\frac{1}{2}\sqrt{t^2 - (x-\sigma)^2}\right]}{\sqrt{t^2 - (x-\sigma)^2}} \right\} \quad (A.1.44)$$

podemos escribir:

$$U(x, t) = \frac{1}{2} \exp(-t/2) (\delta(x+t) + \delta(x-t) + \phi(x, t, 0)) H(x-t) \quad (\text{A. 1.45})$$

II. $f(x) = \exp(-x^2)/\sqrt{\pi}$, $g(x) = 0$:

$$U(x, t) = \frac{H(x-t)}{2\sqrt{\pi}} \exp(-t/2) (\exp[-(x-t)^2] + \exp[-(x+t)^2]) + \int_{x-t}^{x+t} \exp(-\sigma^2) \phi(x, t, \sigma) d\sigma \quad (\text{A. 1.46})$$

III. $f(x) = \frac{1}{2} H(1-|x|)$, $g(x) = 0$:

$$U(x, t) = \frac{H(x-t)}{4} \exp(-t/2) (H(1-|x+t|) + H(1-|x-t|)) + \int_{x-t}^{x+t} H(1-|\sigma|) \phi(x, t, \sigma) d\sigma \quad (\text{A. 1.47})$$

APÉNDICE 2: SOLUCIÓN DEL SISTEMA DE ECUACIONES DINÁMICAS

EN EL ESPACIO FASE ($-\infty < X < \infty$).

Para el desarrollo de este apéndice hemos seguido los procedimientos y tablas de Ruel V. Churchill en *Operational Mathematics*. Mc Graw Hill. Escribamos nuevamente el sistema de ecuaciones diferenciales simultáneas P_1 y P_2 que denominamos sistema de ecuaciones dinámicas con $\gamma=1$ y $\lambda=1/2$: vimos en la sección 1.3 que no existe pérdida alguna de información con esto, a fin de cuentas esto será útil para simplificar los cálculos. Entonces tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_1}{\partial t} + \frac{\partial P_1}{\partial x} &= -\frac{1}{2}(P_1 - P_2) \\ \frac{\partial P_2}{\partial t} - \frac{\partial P_2}{\partial x} &= +\frac{1}{2}(P_1 - P_2). \end{aligned} \quad (\text{A.2.1})$$

Exigiremos adicionalmente que para valores infinitos las P_i tiendan a cero. Pongamos como condiciones iniciales generales de nuestro sistema:

$$P_1(x,0)=f_1(x); \quad P_2(x,0)=f_2(x). \quad (\text{A.2.2})$$

Para resolverlo, utilizaremos transformaciones integrales, como sigue: considerando que deseamos especificar condiciones iniciales, el espacio de tiempo lo transformaremos mediante la transformación de Laplace. Considerando que la posición va a lo largo de todo el eje real, usaremos la transformación de Fourier. Así t queda convertido en s y x en w , y tenemos primero, aplicando la transformación de Laplace:

$$\begin{aligned} sP_{1L} - f_1(x) &= -\frac{dP_{1L}}{dx} - \frac{1}{2}P_{1L} + \frac{1}{2}P_{2L} \\ sP_{2L} - f_2(x) &= +\frac{dP_{1L}}{dx} + \frac{1}{2}P_{1L} - \frac{1}{2}P_{2L}. \end{aligned} \quad (\text{A.2.3})$$

Donde hemos utilizado la notación $P_{1L}(s,t)=\mathcal{L}\{P_1(x,t)\}$, para la transformada de Laplace.

Transformando ahora el espacio de posición:

$$sP_{1LF} - f_{1F} = -iwP_{1LF} - \frac{1}{2}P_{1LF} + \frac{1}{2}P_{2LF}$$

$$sP_{2LF} - f_{2F} = +1wP_{2LF} + \frac{1}{2}P_{1LF} - \frac{1}{2}P_{2LF}. \quad (A.2.4)$$

Donde $f_F = \mathcal{F}\{f\}$, es la notación empleada para la transformada de Fourier; en los casos de P_1 y P_2 no debemos olvidar que tenemos una Transformada de Laplace precedente.

Factorizando la relación (A.2.4) adecuadamente:

$$\begin{aligned} P_{1LF}\left[s + \frac{1}{2} + 1w\right] + P_{2LF}\left[-\frac{1}{2}\right] &= f_{1F} \\ P_{1LF}\left[-\frac{1}{2}\right] + P_{2LF}\left[s + \frac{1}{2} - 1w\right] &= f_{2F}. \end{aligned} \quad (A.2.5)$$

Podemos despejar P_{1LF} y P_{2LF} como sigue:

$$P_{1LF} = \frac{(s+1/2)f_1 + f_2/2 - 1wf_1}{s^2 + s + w^2}, \quad (A.2.6)$$

$$P_{2LF} = \frac{(s+1/2)f_2 + f_1/2 + 1wf_1}{s^2 + s + w^2}. \quad (A.2.7)$$

De modo que, al tomar por grupos de dos factores la transformada inversa de Fourier:

$$\begin{aligned} P_{1L} &= (s+1/2)\mathcal{F}^{-1}\left\{f_1 \frac{1}{(s^2+s)+w^2}\right\} + \\ &+ (1/2)\mathcal{F}^{-1}\left\{f_{2F} \frac{1}{(s^2+s)+w^2}\right\} - \mathcal{F}^{-1}\left\{\frac{1wf_{1F}}{(s^2+s)+w^2}\right\}. \end{aligned} \quad (A.2.8)$$

Sabiendo que:

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{\frac{1}{(s^2+s)+w^2}\right\} = \frac{\exp(-\sqrt{s^2+s}|x|)}{2\sqrt{s^2+s}} \text{ y que: } \mathcal{F}^{-1}\{1wf_{1F}\} = \frac{df_1}{dx}. \quad (A.2.9)$$

Podemos aplicar el teorema de convolución entre los diversos productos de pares de transformadas de Fourier y tendremos:

$$\begin{aligned} P_{1L} &= (s+1/2) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-\sqrt{s^2+s}|x-\xi|)}{2\sqrt{s^2+s}} f_1(\xi) d\xi + \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-\sqrt{s^2+s}|x-\xi|)}{2\sqrt{s^2+s}} f_2(\xi) d\xi + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-\sqrt{s^2+s}|x-\xi|)}{2\sqrt{s^2+s}} \frac{df_1(\xi)}{d\xi} d\xi. \end{aligned} \quad (A.2.10)$$

Podemos considerar todo bajo una sola integral:

$$\begin{aligned}
 P_{11} = & \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ (s+1/2) \frac{\exp(-\sqrt{(s+1/2)^2-1/4}|x-\xi|)}{\sqrt{(s+1/2)^2-1/4}} \frac{1}{2} f_1(\xi) \right. \\
 & + \frac{\exp(-\sqrt{(s+1/2)^2-1/4}|x-\xi|)}{\sqrt{(s+1/2)^2-1/4}} \frac{1}{2} f_2(\xi) \\
 & \left. - \frac{\exp(-\sqrt{(s+1/2)^2-1/4}|x-\xi|)}{\sqrt{(s+1/2)^2-1/4}} \frac{1}{2} \frac{df_1(\xi)}{d\xi} \right\} d\xi. \quad (A.2.11)
 \end{aligned}$$

Si tomamos en cuenta la propiedad de traslación de la transformada de Laplace, tenemos un factor común en la transformada inversa igual a $\exp(-t/2)$, además:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\exp(-\sqrt{s^2-1/4}|x-\xi|)}{\sqrt{s^2-1/4}} \right\} = I_0 \left[\frac{1}{2} \sqrt{t^2-(x-\xi)^2} \right] H(t-|x-\xi|), \quad (A.2.12)$$

donde I_0 es la función modificada de Bessel y H la función escalón de Heaviside. Como la cantidad: $|x-\xi| < t$, para que la función escalón unitario de Heaviside H sea igual a la unidad, es preciso que:

$$-t < x-\xi < t, \quad (A.2.13)$$

o sea, en términos de la variable de integración:

$$x+t > \xi > x-t. \quad (A.2.14)$$

Este es el dominio donde no tenemos integrando nulo. Además como para todo par $F(t) = \mathcal{L}\{f(s)\}$ (ver el resultado de Spiegel en *Laplace Transforms*. Mc Graw Hill Schaum):

$$\mathcal{L}^{-1}(sf(s)) = F'(t) + F(0)\delta(t). \quad (\text{A.2.15})$$

Podemos escribir, en base a esto:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{s \exp(-\sqrt{s^2-1/4}|x-\xi|)}{\sqrt{s^2-1/4}}\right) &= \frac{t}{2\sqrt{t^2-(x-\xi)^2}} I_1\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x-\xi)^2}\right) H(t-|x-\xi|) \\ &+ I_0\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x-\xi)^2}\right) \delta(t-|x-\xi|). \end{aligned} \quad (\text{A.2.16})$$

como $t > 0$ el segundo sumando en (A.2.15) $F(0)\delta(t)$ se anula.

Aplicando (A.2.16), (A.2.12) a (A.2.11) y restringiendo los límites de (A.2.11) según (A.2.14):

$$\begin{aligned} P_1(x, t) &= \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{t}{2}\right) \left(\frac{1}{2} f_1(x-t) + \frac{1}{2} f_1(x+t)\right) \\ &+ \int_{x-t}^{x+t} \left[I_0\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x-\xi)^2}\right) \left(\frac{1}{2} f_2(\xi) - \frac{df_1(\xi)}{d\xi}\right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{tf_1(\xi)}{2} \frac{I_1\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x-\xi)^2}\right)}{\sqrt{t^2-(x-\xi)^2}} \right] d\xi, \end{aligned} \quad (\text{A.2.17})$$

y por simple inspección de (A.2.7) es claro que:

$$\begin{aligned} P_2(x, t) &= \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{t}{2}\right) \left(\frac{1}{2} f_2(x-t) + \frac{1}{2} f_2(x+t)\right) \\ &+ \int_{x-t}^{x+t} \left[I_0\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x-\xi)^2}\right) \left(\frac{1}{2} f_1(\xi) + \frac{df_2(\xi)}{d\xi}\right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{tf_2(\xi)}{2} \frac{I_1\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x-\xi)^2}\right)}{\sqrt{t^2-(x-\xi)^2}} \right] d\xi. \end{aligned} \quad (\text{A.2.18})$$

de esto se deduce de inmediato que:

$$P_1(x, t) + P_2(x, t) = \rho(x, t) = \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{t}{2}\right) \{f_1(x, t) + f_2(x, t) + \int_{x-t}^{x+t} (\phi(x, t, \xi) [f_2(\xi) + f_1(\xi)] + (df_2(\xi)/d\xi - df_1(\xi)/d\xi)) I_0\left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x-\xi)^2}\right) d\xi\},$$

con $\phi(x, t, \xi)$ definido como en el apéndice 1, (A.1.44), la cual es precisamente la solución (A.1.43) pero en el Espacio Fase, como tenía que ser, dado que las P_i satisfacen la misma ecuación diferencial de los telegrafistas.

APÉNDICE 3: SOLUCIÓN DEL MODELO DE FICK EN $-\infty < x < \infty$

Consideremos para efectos de revisión y referencia la solución de la ecuación de difusión según el modelo macroscópico, que toma en cuenta la Ley de Fick y la ecuación de continuidad en la recta infinita. Los valores aquí obtenidos se compararán con la solución mesoscópica.

Tenemos que resolver la ecuación:

$$D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (\text{A.3.1})$$

sujeta a: $\rho(x, t=0) = f(x)$ que debemos, claro, dar de antemano en respuesta a la pregunta ¿cómo vamos a colocar nuestras partículas antes de dejarlas difundir? y $\partial \rho(x, t=0) / \partial t = 0$ o sea, como cuando colocamos la distribución inicial en una "envoltura" impermeable al paso de partículas y es retirada repentinamente. El caso en que $\partial \rho(x, t=0) / \partial t \neq 0$ corresponde a la situación en que la distribución inicial ya sufre un cambio de configuración al tiempo $t=0$. Resolveremos el problema por medio de transformaciones integrales.

Tomando la transformada de Laplace en t : denominándola $\rho_L = \mathcal{L}\{\rho(x, t)\} = \rho_L(x, s)$:

$$s \rho_L - f(x) = D \frac{d^2 \rho_L}{dx^2}$$

Ahora, tomando la Transformada de Fourier en x (porque x corre en el intervalo $-\infty < x < \infty$, llamando $\rho_{LF} = \mathcal{F}\{\rho_L(x, s)\} = \rho_{LF}(\alpha, s)$, $f_F(\alpha) = \mathcal{F}\{f(x)\}$ que son respectivamente la doble transformada de ρ y la transformada de Fourier de la distribución inicial:

$$s \rho_{LF} - f_F(\alpha) = -\alpha^2 D \rho_{LF}$$

es decir, al despejar la doble transformada:

$$\rho_{LF}(\alpha, s) = \frac{1}{s^2 + D\alpha^2} f_F(\alpha)$$

Podemos reescribir, de manera conveniente y para facilitar la obtención de la inversa de Fourier en las tablas de *Operational Mathematics* de Ruel V. Churchill:

$$\rho_{LF}(\alpha, s) = \frac{1}{2\sqrt{s}} \frac{\sqrt{s}}{D\alpha^2 + (\sqrt{s})^2} f_F$$

Aplicaremos el teorema de convolución de la transformada de Fourier tal y como se presenta en la última referencia mencionada para recuperar nuestra variable x :

$$\rho_L(x, s) = \frac{1}{2\sqrt{Ds}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\zeta) \exp(-\sqrt{s}|x-\zeta|\sqrt{D}) d\zeta$$

como se puede ver en la misma referencia:

$$\mathcal{F}^{-1}\left\{\frac{\exp(-\sqrt{s}|x-\zeta|\sqrt{D})}{\sqrt{s}}\right\} = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \exp\left(-\frac{(x-\zeta)^2}{4Dt}\right)$$

Nos queda finalmente:

$$\rho(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{D\pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} f(\zeta) \exp\left(-\frac{(x-\zeta)^2}{4Dt}\right) d\zeta. \quad (\text{A.3.2})$$

APÉNDICE 4: SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE LOS TELEGRAFISTAS
EN LA RECTA SEMI-INFINITA CON CONDICIÓN DE FRONTERA FUNCIÓN NULA
Y DERIVADA RESPECTO A LA POSICIÓN NULA.

Consideremos la solución del siguiente problema:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} + \frac{\partial U}{\partial t} \quad \text{para } x \geq 0,$$

sujeta a: (i) $U(x, t=0)=f(x)$; (ii) $\partial U/\partial t=g(x)$ en $x \geq 0, t=0$; (iii) $U(0, t)=k(t)$. Las primeras condiciones son iniciales, válidas en el rango de x positivas, la segunda es una condición de frontera. Nos será necesaria en futuras ocasiones para distinguir un problema en el cual tenemos que el origen actúa como pared absorbente o reflejante. Por lo pronto la dejaremos en forma totalmente general: $k(t)$.

Este problema sugiere el uso de una transformación de Fourier seno, puesto que podríamos pensar en una situación en la cual tuviésemos una distribución de "propiedad U " en $x \geq 0$ y otra (por supuesto sólo en nuestra imaginación, como artificio matemático) con distribución de "propiedad U " negativa en $x \leq 0$, es decir: una distribución que tuviese la forma de una función impar. La solución se facilita enormemente por el uso de transformaciones integrales, y la de Fourier seno es la adecuada para este tipo de problemas. Este modo de pensar nos recuerda una forma de encontrar potenciales para distribuciones de carga en geometrías particularmente susceptibles de emplear "imágenes" de modo que las fronteras se convierten en equipotenciales.

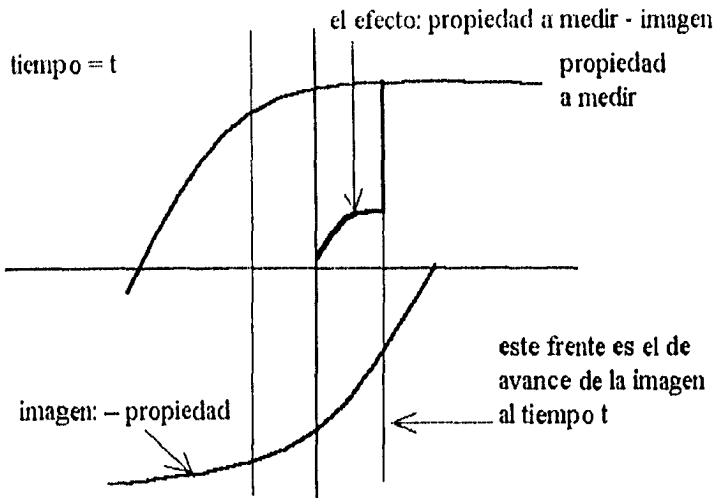
Aplicando la transformación, denotando por U_F la transformada $U_F(\alpha, t)=\mathcal{F}_s\{U(x, t)\}$:

$$-\alpha^2 U_F + \alpha k(t) = \frac{d^2 U_F}{dt^2} + \frac{dU_F}{dt}$$

las condiciones iniciales de este problema serán transformadas, por lo tanto, de acuerdo a:

$$U_F(\alpha, t=0)=f_F, \quad \partial U_F/\partial t=g_F \quad \text{en } \alpha, t=0,$$

resultado que usaremos a continuación.



Ahora, desde luego que para el tiempo se impone, como de costumbre aplicar la transformada de Laplace, denotando por $U_{FL}(\alpha, s) = \mathcal{L}\{U(\alpha, t)\}$:

$$-\alpha^2 U_{FL} + \alpha k_L = s^2 U_{FL} - s f_F - g_F + s U_{LF} - f_F$$

Factoricemos ahora $U_{FL}(\alpha, s)$:

$$U_{FL}(-\alpha^2 - s^2 - s) = -\alpha k_L - s f_F - g_F - f_F$$

Como ya sabemos que a fin de cuentas la cantidad $s^2 + s$ va dar lugar a la factorización $s^2 + s = (s + 1/2)^2 - 1/4$, escribamos de manera equivalente la última expresión:

$$U_{FL}(\alpha^2 + s^2 + s) = (s + 1/2) f_F + f_F/2 + k_L \alpha + g_F$$

Por lo tanto:

$$U_{FL} = (s + \frac{1}{2}) f_F \frac{1}{\alpha^2 + s^2 + s} + \frac{1}{2} f_F \frac{1}{\alpha^2 + s^2 + s} + k_L \frac{\alpha}{\alpha^2 + s^2 + s} + g_F \frac{1}{\alpha^2 + s^2 + s} \quad (A.4.1)$$

Requerimos ahora la transformada de Fourier Inversa, y recordando que la convolución en este caso nos obliga a incluir un factor de $2/\alpha$:

$$U_{FL} = (s + \frac{1}{2}) \frac{1}{2} \frac{2}{\alpha} f_F \frac{\alpha}{\alpha^2 + s^2 + s} + \frac{1}{4} \frac{2}{\alpha} f_F \frac{\alpha}{\alpha^2 + s^2 + s} + k_L \frac{\alpha}{\alpha^2 + s^2 + s} + \frac{1}{2} \frac{2}{\alpha} g_F \frac{\alpha}{\alpha^2 + s^2 + s}$$

Encontramos finalmente:

$$\begin{aligned}
 U_L = & (s + \frac{1}{2}) \frac{1}{2} \int_0^{\infty} f(\zeta) \int_{|x-\zeta|}^{x+\zeta} \exp(-\sqrt{s^2+s} w) dw d\zeta + \\
 & + \frac{1}{4} \int_0^{\infty} f(\zeta) \int_{|x-\zeta|}^{x+\zeta} \exp(-\sqrt{s^2+s} w) dw d\zeta + \\
 & + k_L \exp(-\sqrt{s^2+s} w) + \\
 & + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} g(\zeta) \int_{|x-\zeta|}^{x+\zeta} \exp(-\sqrt{s^2+s} w) dw d\zeta \quad (A.4.2)
 \end{aligned}$$

Pero la integral:

$$\int_{|x-\zeta|}^{x+\zeta} \exp(-\sqrt{s^2+s} w) dw = \frac{-1}{\sqrt{s^2+s}} (\exp[-\sqrt{s^2+s}(x+\zeta)] - \exp[-\sqrt{s^2+s}|x-\zeta|])$$

es, desde luego, inmediata, de manera que escribiéndola en (A.4.2):

$$\begin{aligned}
 U_L = & \int_0^{\infty} \left\{ \frac{f(\zeta)}{2} \left[-\frac{(s+1/2)}{\sqrt{s^2+s}} \exp[-\sqrt{s^2+s}(x+\zeta)] + \frac{(s+1/2)}{\sqrt{s^2+s}} \exp[-\sqrt{s^2+s}|x-\zeta|] \right] \right. \\
 & - \frac{f(\zeta)}{4\sqrt{s^2+s}} \exp[-\sqrt{s^2+s}(x+\zeta)] + \frac{f(\zeta)}{4\sqrt{s^2+s}} \exp[-\sqrt{s^2+s}|x-\zeta|] \left. \right\} + \\
 & \frac{g(\zeta)}{2} \left[-\frac{1}{\sqrt{s^2+s}} \exp[-\sqrt{s^2+s}(x+\zeta)] + \frac{1}{\sqrt{s^2+s}} \exp[-\sqrt{s^2+s}|x-\zeta|] \right] d\zeta \quad (A.4.3)
 \end{aligned}$$

$$k_L \exp[-x\sqrt{s^2+s}].$$

También encontramos en tablas que:

$$\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\exp[-\sqrt{s^2-1/4} B]}{\sqrt{s^2-1/4}} \right\} = I_0 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - B^2} \right) H(t-B);$$

$$\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{s \exp[-\sqrt{s^2-1/4} B]}{\sqrt{s^2-1/4}}\right\} = \frac{1}{2} \frac{t}{\sqrt{t^2-B^2}} I_1\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-B^2}\right)H(t-B) + I_0\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-B^2}\right)\delta(t-B);$$

$$\mathcal{L}^{-1}\{\exp[-\sqrt{s^2-1/4} B]\} = \delta(t-B) + \frac{B}{2\sqrt{t^2-1/4}} I_1\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-1/4}\right)H(t-B);$$

$$\mathcal{L}^{-1}\{\delta(t-B)\} = \int_0^{\infty} \exp(-st)\delta(t-B)dt = \exp(-Bs);$$

$$\mathcal{L}^{-1}\{a(s)b(s)\} = \int_0^t a(\lambda)b(t-\lambda)d\lambda.$$

De modo que cada una de las inversas queda en una inversa global aparte de la integral desde 0 hasta ∞ , como sigue:

$$\frac{f(\zeta)}{2} \mathcal{L}^{-1}\left\{-\frac{(s+1/2)}{\sqrt{(s+1/2)^2-1/4}} \exp[-\sqrt{(s+1/2)^2-1/4}(x+\zeta)]\right\} =$$

$$\frac{f(\zeta)}{2} \exp(-t/2) \left\{-\frac{1}{2} \frac{t}{\sqrt{t^2-(x+\zeta)^2}} I_1\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x+\zeta)^2}\right)H(t-(x+\zeta)) - I_0\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x+\zeta)^2}\right)\delta(t-(x+\zeta))\right\}$$

$$\frac{f(\zeta)}{2} \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{(s+1/2)}{\sqrt{(s+1/2)^2-1/4}} \exp[-\sqrt{(s+1/2)^2-1/4}|x-\zeta|]\right\} =$$

$$\frac{f(\zeta)}{2} \exp(-t/2) \left\{+\frac{1}{2} \frac{t}{\sqrt{t^2-(x-\zeta)^2}} I_1\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x-\zeta)^2}\right)H(t-|x-\zeta|) + I_0\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x-\zeta)^2}\right)\delta(t-|x-\zeta|)\right\};$$

$$\left[\frac{f(\zeta)}{2} + g(\zeta)\right] \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{-1/2}{\sqrt{(s+1/2)^2-1/4}} \exp[-\sqrt{(s+1/2)^2-1/4}(x+\zeta)]\right\} =$$

$$\left(\frac{f(\zeta)}{4} + \frac{g(\zeta)}{2}\right) \exp(-t/2) \left(-I_0\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2 - (x+\zeta)^2}\right) H(t - (x+\zeta))\right);$$

$$\left[\frac{f(\zeta)}{2} + g(\zeta)\right] \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1/2}{\sqrt{(s+1/2)^2 - 1/4}} \exp[-\sqrt{(s+1/2)^2 - 1/4}|x-\zeta|]\right\} =$$

$$\left[\frac{f(\zeta)}{4} + \frac{g(\zeta)}{2}\right] \exp(-t/2) \left(+I_0\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2 - (x-\zeta)^2}\right) H(t - |x-\zeta|)\right);$$

Ahora bien, para invertir el término en k_L , dado que:

$$\exp(-x\sqrt{s^2+s}) = \exp(-x\sqrt{(s+1/2)^2 - 1/4})$$

Por el Teorema de traslación y las identidades presentadas:

$$\mathcal{L}^{-1}\{\exp(-x\sqrt{s^2+s})\} = \exp(-t/2) \left\{ \delta(t-x) + \frac{x}{2\sqrt{t^2-x^2}} I_1\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-x^2}\right) H(t-x) \right\}$$

Por lo tanto nos queda, finalmente:

$$\mathcal{L}^{-1}\{k_L \exp(-x\sqrt{s^2+s})\} = \int_0^t k(t-\lambda) \exp(-\lambda/2) \left\{ \delta(\lambda-x) + \frac{x}{2\sqrt{\lambda^2-x^2}} I_1\left(\frac{1}{2}\sqrt{\lambda^2-x^2}\right) H(\lambda-x) \right\} d\lambda.$$

Para las integrales en las que aparecen las δ tenemos, en la inversa general:

$$-\exp(-t/2) \int_0^{\infty} \frac{f(\zeta)}{2} I_0\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2 - (x+\zeta)^2}\right) \delta(t-x-\zeta) d\zeta = -\exp(-\frac{t}{2}) \frac{f(t-x)}{2};$$

$$+\exp(-t/2) \int_0^{\infty} \frac{f(\zeta)}{2} I_0\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2 - (x-\zeta)^2}\right) \delta(t-|x-\zeta|) d\zeta =$$

$$\frac{1}{2} \exp(-t/2) \int_0^{\infty} f(\zeta) I_0\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2 - (x-\zeta)^2}\right) \{\delta(\zeta - (t+x)) + \delta(\zeta - (x-t))\} d\zeta =$$

$$\exp(-\frac{t}{2}) \frac{f(-t-x)}{2} + \exp(-\frac{t}{2}) \frac{f(x-t)}{2}$$

La solución final, la inversa de (A.4.3) es:

$$\begin{aligned}
 U(x,t) = & \frac{1}{2} \exp(-t/2) \{-f(t-x) + f(t+x) + f(x-t)\} + k(t-x) \exp(-x/2) + \\
 & \int_0^t \frac{xk(t-\lambda) \exp(-\lambda/2)}{2\sqrt{\lambda^2-x^2}} I_1\left(\frac{1}{2}\sqrt{\lambda^2-x^2}\right) H(\lambda-x) d\lambda + \\
 & + \exp(-t/2) \int_0^{t-x} \left\{ -\frac{f(\zeta)}{2} \frac{1}{2} \frac{t}{\sqrt{t^2-(x+\zeta)^2}} I_1\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x+\zeta)^2}\right) - \right. \\
 & \left. - \left(\frac{f(\zeta)}{4} + \frac{g(\zeta)}{2}\right) I_0\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x+\zeta)^2}\right) \right\} d\zeta + \\
 & + \exp(-t/2) \int_0^{t+x} \left\{ \frac{f(\zeta)}{2} \frac{1}{2} \frac{t}{\sqrt{t^2-(x-\zeta)^2}} I_1\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x-\zeta)^2}\right) + \right. \\
 & \left. \left(\frac{f(\zeta)}{4} + \frac{g(\zeta)}{2}\right) I_0\left(\frac{1}{2}\sqrt{t^2-(x-\zeta)^2}\right) \right\} d\zeta. \tag{A.4.4}
 \end{aligned}$$

Es importante observar el efecto de la condición de frontera $k(t)$, vamos a tomar en general $k(t)=0$.

Por otro lado, si el problema se intenta resolver prescribiendo $k(t)=\partial U/\partial x=0$ en $(x=0,t)$ y no $U(x=0,t)$ como hicimos aquí, la transformación integral adecuada hubiese sido la transformación coseno de Fourier. Tenemos, pues, que resolver:

$$T_1(U)=0; \quad x \geq 0, \quad \partial U(0,t)/\partial x = Z(t), \quad U(x,0)=f(x), \quad \partial U(x,0)/\partial t = g(x) \text{ (digamos).}$$

Denotemos por U_L la transformada de Laplace de U en el tiempo, como hemos hecho hasta ahora, es decir: $U_L = \mathcal{L}\{U(x,t)\} = U_L(x,s)$. Llamemos U_{LF} a la transformada de Fourier Coseno de U_L , esto es: $U_{LF}(\alpha,s) = \mathcal{F}_c\{U_L(x,s)\}$. Entonces tendremos, sucesivamente:

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 U_L}{dx^2} &= sU_L - f(x) + s^2 U_L - sf(x) - g(x) \\
 -\alpha^2 U_{LF} - Z_L(s) &= sU_{LF} - f_F + s^2 U_{LF} - sf_F - g_F
 \end{aligned}$$

Que puede factorizarse como antes, quedando ahora:

$$U_{1F} = \frac{(s+1/2)}{2} 2f_F \frac{1}{\alpha^2 + (\sqrt{s^2+s})^2} + \frac{1}{4} 2f_F \frac{1}{\alpha^2 + (\sqrt{s^2+s})^2} +$$

$$+ \frac{1}{2} 2g_F \frac{1}{\alpha^2 + (\sqrt{s^2+s})^2} - Z_1 \frac{1}{\alpha^2 + (\sqrt{s^2+s})^2}$$

Daremos a cada sumando de U_{1F} la notación siguiente:
 $u = p(i) + p(ii) + p(iii) + p(iv)$. Para $p(i)$:

$$\mathcal{F}_c^{-1} \left\{ 2f_F \frac{\sqrt{s^2+s}}{\alpha^2 + (\sqrt{s^2+s})^2} \right\} = \int_0^{\infty} f(w) \{ \exp[-\sqrt{s^2+s}(x+w)] + \exp[-\sqrt{s^2+s}|x-w|] \} dw$$

añadiendo, desde luego, el factor y divisor $\sqrt{s^2+s}$. Ya estamos familiarizados con el efecto del factor $s+1/2$, que nos da al tomar la transformada inversa de Laplace un factor $\exp(-t/2)$ y una derivada, de modo que la inversa de $p(i)$ es:

$$\frac{1}{2} \exp(-\frac{t}{2}) \int_0^{\infty} f(w) dw \left\{ I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+w)^2} \right) \frac{t}{2\sqrt{t^2 - (x+w)^2}} H\{t - (x+w)\} \right.$$

$$+ I_0 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+w)^2} \right) \delta(t - (x+w)) + I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x-w)^2} \right) \frac{t}{2\sqrt{t^2 - (x-w)^2}} H\{t - |x-w|\} \left. \right.$$

$$+ I_0 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x-w)^2} \right) \delta(t - |x-w|) \}$$

Para $p(ii)$ y $p(iii)$:

$$\exp(-t/2) \int_0^{\infty} \left\{ \frac{1}{4} f(w) + \frac{1}{2} g(w) \right\} dw \left\{ I_0 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+w)^2} \right) H(t - (x+w)) \right.$$

$$+ \left. I_0 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x-w)^2} \right) H(t - |x-w|) \right\}$$

y, finalmente, para $p(iv)$:

$$\int_0^{\infty} Z(t-w) \exp(-\frac{w}{2}) I_0 \left(\frac{1}{2} \sqrt{w^2 - x^2} \right) H(w-x) dw$$

Consideremos el caso de $U(t)=0$, de modo que la solución final es:

$$U(x, t) = \frac{1}{2} \exp(-t/2) \{ f(x-t) + f(t+x) + f(t-x) \}$$

$$+ \int_0^{\infty} \left\{ \left[I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+w)^2} \right) \frac{t}{2\sqrt{t^2 - (x+w)^2}} H\{t - (x+w)\} + \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
& + I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x-w)^2} \right) \frac{t}{2\sqrt{t^2 - (x-w)^2}} H(t - |x-w|) f(w) + \\
& + \left(\frac{1}{2} f(w) + g(w) \right) \left\{ I_0 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+w)^2} \right) H(t - (x+w)) + \right. \\
& \quad \left. I_0 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x-w)^2} \right) H(t - |x-w|) \right\} dw. \tag{A.4.5}
\end{aligned}$$

Si asumimos que $f(x) = \delta(x-1)$, $g(x) = 0$ y $h(t) = 0$, la solución (A.4.1) para el primer caso, función nula es ($t > 1$, $0 < x < t-1$):

$$\begin{aligned}
U(x, t) &= \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{t}{2}\right) \{ \delta(t+x-1) - \delta(t-x-1) + \delta(x-t-1) \} \\
& - \frac{t}{2\sqrt{t^2 - (x+1)^2}} I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+1)^2} \right) H(t-x-1) \\
& - \frac{1}{2} I_0 \left(\sqrt{t^2 - (x+1)^2} \right) H(t-x-1) + \frac{t}{2\sqrt{t^2 - (x-1)^2}} I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x-1)^2} \right) H(t-x+1) \\
& + \frac{1}{2} I_0 \left(\sqrt{t^2 - (x-1)^2} \right) H(t-x+1) \tag{A.4.6}
\end{aligned}$$

No existe componente δ porque $\delta(x-1-t) = \delta(t-x+1)$ y $\delta(x+t-1)$ es nula para $t > 1$ en todos los valores de $x > 0$, que son los que nos interesan.

La solución con $U(t) = 0$ en (4.1.5) para la derivada nula:

$$\begin{aligned}
U(x, t) &= \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{t}{2}\right) \{ \delta(x-1-t) + \delta(t-x+1) \} \\
& + \frac{t}{2\sqrt{t^2 - (x+1)^2}} I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+1)^2} \right) H(t-x-1) + \frac{1}{2} I_0 \left(\sqrt{t^2 - (x+1)^2} \right) H(t-x-1) + \\
& + \frac{t}{2\sqrt{t^2 - (x-1)^2}} I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x-1)^2} \right) H(t-x+1) + \frac{1}{2} I_0 \left(\sqrt{t^2 - (x-1)^2} \right) H(t-x+1) \tag{A.4.7}
\end{aligned}$$

pues $\delta(x+t+1)$, si $x, t > 0$ no tiene efecto.

APÉNDICE 5: DEL MODELO MESOSCÓPICO AL MODELO DE FICK.

Advertencia: en este apéndice he tomado la notación de Zrauder, como en *Partial Differential Equations of Applied Mathematics*, Wiley, capítulo 1. El resultado que presento como apéndice 5 es un problema que Zrauder deja abierto para resolver en la sección correspondiente, por lo que la constante de amortiguamiento que yo uso como λ , en el texto mencionado se emplea como 2λ .

Consideremos la ecuación (3.1.1) con $P=\rho=P_1+P_2$

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + 2 \lambda \frac{\partial \rho}{\partial t} = \gamma^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (\text{A.5.1})$$

Si definimos la densidad de corriente como un producto de la forma:

$$\rho=R(x,t)\exp(-\lambda t), \quad (\text{A.5.2})$$

esto en base a la experiencia que hemos adquirido en la solución de esta ecuación diferencial por otros métodos, los términos de la ecuación diferencial serán ahora:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{\partial R}{\partial t} \exp(-\lambda t) - \lambda R \exp(-\lambda t), \\ \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} &= \frac{\partial^2 R}{\partial t^2} \exp(-\lambda t) - 2\lambda \frac{\partial R}{\partial t} \exp(-\lambda t) + \lambda^2 R \exp(-\lambda t), \end{aligned}$$

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} \exp(-\lambda t). \quad (\text{A.5.3})$$

Esto es, la ecuación finalmente se lee:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial t^2} - \lambda^2 R - \gamma^2 \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} = 0. \quad (\text{A.5.4})$$

Sea ahora:

$$z = \sqrt{\gamma^2 t^2 - x^2} \quad \text{y} \quad R = W(\sqrt{\gamma^2 t^2 - x^2}), \quad (\text{A.5.5})$$

donde también hemos hecho uso de los resultados previamente obtenidos, nótese que no estamos considerando la posibilidad de que existan componentes $f(xt)$ que son componentes de la solución de la ecuación de onda.

Se sigue que:

$$\partial z / \partial x = -x/z, \quad \partial^2 z / \partial x^2 = -\gamma^2 t^2 / z^3, \quad \partial z / \partial t = -\gamma^2 t / z, \quad \partial^2 z / \partial t^2 = -\gamma^2 x^2 / z^3; \quad (\text{A.5.6})$$

de manera que los términos de la ecuación diferencial (A.5.4) ahora llegan a ser:

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial x} &= \frac{dW}{dz} \frac{\partial z}{\partial x}, \\ \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} &= \frac{d^2 W}{dz^2} \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)^2 + \frac{dW}{dz} \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial^2 R}{\partial t^2} &= \frac{d^2 W}{dz^2} \left(\frac{\partial z}{\partial t} \right)^2 + \frac{dW}{dz} \frac{\partial^2 z}{\partial t^2}, \end{aligned} \quad (\text{A.5.7})$$

Por lo tanto la ecuación diferencial parcial se convierte en una ecuación diferencial ordinaria que queda:

$$\frac{d^2 W}{dz^2} \left[\left(\frac{\partial z}{\partial t} \right)^2 - \gamma \left(\frac{\partial z}{\partial x} \right)^2 \right] + \frac{dW}{dz} \left[\frac{\partial^2 z}{\partial t^2} - \gamma \frac{\partial^2 z}{\partial x^2} \right] - \lambda^2 W = 0. \quad (\text{A.5.8})$$

Pero a partir de (A.5.7) y de (A.5.6) podemos simplificar aún más la presente ecuación diferencial puesto que:

$$\frac{\gamma^4 t^2}{z^2} - \frac{\gamma^2 x^2}{z^2} = \gamma^2, \quad -\frac{\gamma^2 x^2}{z^3} + \frac{\gamma^4 t^2}{z^3} = \frac{\gamma^2}{z}. \quad (\text{A.5.9})$$

Así pues, el aspecto de la ecuación diferencial es mucho más simple:

$$\frac{d^2 W}{dz^2} + \frac{1}{2} \frac{dW}{dz} - \frac{\lambda^2}{\gamma^2} W = 0. \quad (\text{A.5.10})$$

Si hacemos ahora:

$$W(z) = \frac{1}{\sqrt{z}} \omega = z^{-1/2} \omega, \quad (\text{A.5.11})$$

Que es un cambio típico de la ecuación de Bessel, la ecuación (A.5.10) nos da:

$$\omega'' + \left[\frac{1}{4z^2} - \frac{\lambda^2}{\gamma^2} \right] \omega = 0, \quad (\text{A.5.12})$$

hagamos la siguiente aproximación para tiempos largos y valores pequeños de x , para los cuales es válida la aproximación del modelo mesoscópico al de Fick.:

$$z = \sqrt{\gamma^2 t^2 - x^2} = \gamma t \sqrt{1 - \frac{x^2}{\gamma^2 t^2}} \approx \gamma t - \frac{x^2}{2\gamma t}. \quad (\text{A.5.13})$$

Por otro lado, viendo (A.5.12), es claro que z crece sin límite si γt también crece, de modo que para un tiempo largo, (A.5.12) nos quedaría:

$$\omega'' - \frac{\lambda^2}{\gamma^2} \omega \approx 0 \quad (\text{A.5.14})$$

escribiendo $\lambda = \gamma^2/D$:

$$\lambda^2 = \gamma^4/D^2, \text{ es decir: } \omega'' - \frac{\gamma^2}{D^2} \omega \approx 0$$

una solución es:

$$\omega(z) = c_1 \exp(\gamma z / D). \quad (\text{A.5.15})$$

Volviendo a la notación original y empleando (A.5.13):

$$W = \frac{c_1}{\sqrt{z}} \exp(\gamma z / D), \quad (\text{A.5.16})$$

o bien, en términos de R :

$$R = \frac{c_1}{\sqrt{\gamma t}} \exp\left[\frac{\gamma}{D} \left(\gamma t - \frac{x^2}{2\gamma t}\right)\right], \quad (\text{A.5.17})$$

aquí vemos el porqué consideramos la solución $\exp(\gamma z/D)$ y no la de argumento negativo, que nos hubiera generado un término del tipo $\exp\left[\frac{\gamma}{D} \left(\gamma t + \frac{x^2}{2\gamma t}\right)\right]$ que obviamente crece sin límite si x crece sin límite, y finalmente, en términos de la densidad de corriente:

$$\rho = \frac{c_1}{\sqrt{\gamma t}} \exp\left(-\frac{x^2}{2Dt}\right). \quad (\text{A.5.18})$$

Ahora tomemos la solución de la ecuación de difusión fickiana:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial u}{\partial t}$$

$$\text{sujeta a: } u(x,0) = \delta(x), \quad -\infty < x < \infty, \quad (\text{A.5.19})$$

tal solución (en general) es, de acuerdo al apéndice 3:

$$u(x,t) = \frac{1}{2c\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-y) \exp\left[-\frac{(x-y)^2}{4c^2 t}\right] dy = \frac{1}{2c\sqrt{\pi t}} \exp\left[-\frac{x^2}{4c^2 t}\right] \quad (\text{A.5.20})$$

Este resultado tiene precisamente la forma (A.5.18) con $c=1$, $D=2$, $\gamma=1/2$,

$$c_1 = \frac{1}{2\sqrt{2}}$$

APÉNDICE 6: SOLUCIÓN DEL MODELO DE FICK
EN LA RECTA SEMI-INFINITA.

Consideremos la variación de la densidad de partículas $C(x,t)$ en una dimensión según la ley de Fick. entonces, para este caso se cumple la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad x \geq 0. \quad (A.6.1)$$

Pongamos como condición inicial que $C(x,0)=f(x)$ y como condición de frontera que $C(0,t)=h(t)$, en general.

Llamemos $C_L = \mathcal{L}\{C\}$ como la transformada de Laplace de la concentración:

$$\frac{d^2 C_L}{dx^2} = s C_L - f(x)$$

Llamando C_{LF} a la transformada de Fourier seno de C_L :

$$-\alpha^2 C_{LF} + \alpha h_L = s C_{LF} - f_F,$$

es decir:

$$C_{LF}(\alpha^2 + (\sqrt{s})^2) = \alpha h_L + f_F$$

$$C_{LF} = \frac{\alpha}{\alpha^2 + (\sqrt{s})^2} h_L + \frac{f_F}{\alpha^2 + (\sqrt{s})^2} \frac{2\alpha}{2\alpha}$$

Tomando la inversa de Fourier:

$$C_L = h_L \exp(-x\sqrt{s}) + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} f(w) \int_{|x-w|}^{x+w} \exp(-z\sqrt{s}) dz dw$$

En esta última, la integral interior es inmediata: y tenemos:

$$C_L = h_L \exp(-x\sqrt{s}) -$$

$$- \frac{1}{2\sqrt{s}} \int_0^{\infty} f(w) \exp(-(x+w)\sqrt{s}) dw + \frac{1}{2\sqrt{s}} \int_0^{\infty} f(w) \exp(-|x-w|\sqrt{s}) dw$$

La transformada inversa de Laplace nos da:

$$C(x,t) = \int_0^t h(w-t) \frac{x}{2\sqrt{\pi w^3}} \exp\left(-\frac{x^2}{4w}\right) dw$$

$$- \frac{1}{2} \int_0^{\infty} f(w) \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \exp\left(-\frac{(x+w)^2}{4t}\right) dw + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} f(w) \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \exp\left(-\frac{(x-w)^2}{4t}\right) dw$$

Para el caso de una pared absorbente tendremos entonces que la densidad en el origen debe ser en todo momento nula, de modo que:

$$C(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} \int_0^{\infty} f(w)dw \left[\exp\left(-\frac{(x-w)^2}{4t}\right) - \exp\left(-\frac{(x+w)^2}{4t}\right) \right].$$

Esta suposición trae implícito el hecho de que en los modelos clásicos la velocidad de transmisión de partículas es infinita: el medio completo se entera instantáneamente de que existe un proceso difusivo. En toda difusión mesoscópica esto no es correcto, las paredes absorbentes no tienen densidad de partículas nula.

Por otro lado, supongamos ahora que la condición de frontera es que: $\partial C/\partial x = U(t)$ en $x=0$, de modo que la formulación del problema debe hacerse en base a transformada de Laplace en el tiempo y de Fourier coseno en la posición, por lo tanto, la solución será ahora:

$$C(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} \int_0^{\infty} f(w)dw \left[\exp\left(-\frac{(x-w)^2}{4t}\right) + \exp\left(-\frac{(x+w)^2}{4t}\right) \right] - \int_0^t U(w-t) \frac{1}{\sqrt{\pi w}} \exp\left(-\frac{x^2}{4w}\right) dw \quad (A.6.2)$$

Para una pared reflejante tendremos que $U(t)=0$, esto es, no hay cambio en la densidad respecto a la posición en el origen, lo cual es condición necesaria para que todas las partículas que lleguen regresen, o "reboten".

Por lo tanto, después de algunas operaciones simples llegamos a la conclusión de que para una distribución inicial dada por $f(x)=\delta(x-1)$ se tiene:

Pared absorbente en el origen:

$$C(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \exp\left(-\frac{x^2+1}{4t}\right) \sinh\left(\frac{x}{2t}\right) \quad (A.6.3)$$

Pared reflejante en el origen:

$$C(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} \exp\left(-\frac{x^2+1}{4t}\right) \cosh\left(-\frac{x}{2t}\right). \quad (A.6.4)$$

APÉNDICE 7: DERIVADA DE P+(X,T) PARA LA RECTA
SEMI-INFINITA CON PARED ABSORBENTE EL EN ORIGEN..

Denotemos ahora como:

$$B_0(x, t) = I_0 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+w)^2} \right) \quad (\text{A.7.1})$$

las derivadas se calculan a continuación como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\sqrt{t^2 - (x+w)^2}) = \frac{\partial}{\partial t} [t^2 - (x+w)^2]^{1/2} = \frac{1}{2} [t^2 - (x+w)^2]^{-1/2} (2t) = \frac{t}{\sqrt{t^2 - (x+w)^2}},$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (\sqrt{t^2 - (x+w)^2}) = \frac{\partial}{\partial x} [t^2 - (x+w)^2]^{1/2} = \frac{1}{2} [t^2 - (x+w)^2]^{-1/2} (-2(x+w)) = \frac{-(x+w)}{\sqrt{t^2 - (x+w)^2}},$$

y también:

$$\frac{\partial B_0}{\partial t} = I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+w)^2} \right) \frac{1}{2} \frac{t}{\sqrt{t^2 - (x+w)^2}} = \frac{t}{2} \frac{I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+w)^2} \right)}{\sqrt{t^2 - (x+w)^2}}$$

$$\frac{\partial B_0}{\partial t} = \frac{t}{4} \frac{I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+w)^2} \right)}{\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+w)^2}} = \frac{t}{4} D(t, x, w).$$

donde hemos definido:

$$D(x, t, w) = \frac{I_1 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+w)^2} \right)}{\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+w)^2}}. \quad (\text{A.7.2})$$

Aquí hemos hecho uso de las siguientes identidades:

$$\frac{d[zJ_1(z)]}{dz} = zJ_0(z),$$

podemos derivar por lo tanto: $\frac{J_0(z)}{z} = zJ_0(z) \frac{1}{z^2}$

$$\frac{d}{dz} \left(\frac{J_1(z)}{z} \right) = \frac{1}{z} [J_0(z) - \frac{2J_1(z)}{z}].$$

como: $\frac{\partial B_0}{\partial x} = -\frac{x+w}{4} D(x, t, w)$, tendremos:

$$\frac{\partial}{\partial t} [D(x, t, w)] = \frac{2}{\sqrt{t^2 - (x+w)^2}} \left[1_0 \left(\frac{1}{2} \sqrt{t^2 - (x+w)^2} \right) - 2D(x, t, w) \right] \frac{1}{2} \frac{t}{\sqrt{t^2 - (x+w)^2}}$$

$$= t \frac{B_0(x, t, w) - 2D(x, t, w)}{[t^2 - (x+w)^2]} = tP(x, t, w),$$

donde definimos $P(x, t, w)$ como

$$P(x, t, w) = \frac{B_0(x, t, w) - 2D(x, t, w)}{[t^2 - (x+w)^2]} \quad (A.7.3)$$

Podemos escribir, por lo tanto:

$$\partial D(x, t, w) / \partial t = tP(x, t, w), \quad \partial D(x, t, w) / \partial x = -(x+w)P(x, t, w),$$

y en lo sucesivo denotaremos como $D^+(x, t) = D(x, t, 1)$ y $D^-(x, t) = D(x, t, -1)$, $P^+(x, t) = P(x, t, 1)$, $P^-(x, t) = P(x, t, -1)$, $\delta^+ = \delta(t-x-1)$, $\delta^- = \delta(t-x+1)$, $\Pi^+ = \Pi(t-x+1)$, etc.

Una observación importante: el problema de resolver el sistema $\partial P_1 / \partial t + \partial P_1 / \partial x = (-P_1 + P_2) / 2$; $\partial P_2 / \partial t - \partial P_2 / \partial x = (P_1 - P_2) / 2$ con condiciones iniciales $P_1(x, t=0) = f_1(x)$ y $P_2(x, t=0) = f_2(x)$, como ya hemos visto, significa que, como este sistema es válido para todo tiempo, lo es particularmente en $t=0$, de modo que el propio sistema se vería de la siguiente manera (para $t=0$): $\partial P_1(x, t=0) / \partial t + df_1/dx = (-f_1(x) + f_2(x)) / 2$ y además $\partial P_2(x, t=0) / \partial t - df_2(x) / dx = (f_1(x) - f_2(x)) / 2$. Estas relaciones son las que nos dan el valor inicial de la derivada de P_1 y P_2 con respecto al tiempo, que, en el caso de que $f_1(x) = f_2(x) = \delta(x-1) / 2$ tendremos: $\partial P_1(x, t=0) / \partial t = -df_1(x) / dx$ y: $\partial P_2(x, t=0) / \partial t = +df_2(x) / dx$.

Adicionalmente, ya conocemos la solución del problema:

$$\text{Tel}(P_1(x, t)) = 0; \quad x \geq 0$$

$$P_1(0, t) = 0, \quad \Gamma_1(x) = P_1(x, t=0) = \frac{\delta(x-1)}{2}, \quad \partial P_1(x, t=0) / \partial t = g_1(x) = -\frac{\delta'(x-1)}{2} \quad (A.7.4)$$

la cual está dada por:

$$P_1(x, t) = \frac{1}{4} \exp(-t/2) \{ -tD^+\Pi^+ / 4 +$$

$$+ (x+1)D^+\Pi^+ / 8 + tD^-\Pi^- / 4 + (x-1)D^-\Pi^- / 8$$

$$+H^-B^-_0/2 - H^+B^+_0/2\}. \quad (A.7.5)$$

De modo que tendremos:

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} = -\frac{P_1(x, t)}{2} +$$

$$+\frac{1}{4} \exp(-t/2) \{ -D^+H^+/4 - t^2P^+H^+/4 + (x+1)tP^+H^+/8 + D^-H^-/4$$

$$+ t^2P^-H^-/4 + (x-1)tP^-H^-/8 + tD^-H^-/8 - tD^+H^+/8 \} + W(x, t);$$

(con $W(x, t) = -\frac{1}{4}tD^+\delta^+ + \frac{1}{4}tD^-\delta^- + \frac{1}{8}(x+1)D^+\delta^+ + \frac{1}{8}(x-1)D^-\delta^- + \frac{1}{2}B^-\delta^- - \frac{1}{2}B^+\delta^+$)

Por otro lado, tenemos también que:

$$\frac{\partial P_1}{\partial x} = \frac{1}{4} \exp(-t/2) \{ (x+1)tP^+H^+/4 + D^+H^+/8 - (x+1)^2P^+H^+/8$$

$$- t(x-1)P^-H^-/4 + D^-H^-/8 - (x-1)^2P^-H^-/8 -$$

$$- (x-1)D^-H^-/8 + (x+1)D^+H^+/8 \} - W(x, t),$$

o, más fácilmente:

$$P_2(x, t) = \frac{1}{4} \exp(-t/2) [A+B] \quad (A.7.6)$$

donde A y B son las expresiones entre llaves en negrilla.

APÉNDICE 8: UN RESULTADO DE LA MATEMÁTICA FINITA IMPORTANTE.

Consideremos la siguiente transformada de Fourier que deseamos invertir, y que surgió en el artículo 1.1, del problema de la página 4:

$$G_f(k, N) = \cos^\sigma k \exp(\beta ik) dk$$

directamente la inversa es:

$$G(x, N) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos^\sigma k \exp(-ikx) \exp(\beta ik) dk$$

por definición de $\cos k$ en términos de exponenciales complejas:

$$\cos^\sigma k = \frac{[\exp(ik) - \exp(-ik)]^\sigma}{2^\sigma} = \frac{1}{2^\sigma} \exp(ik\sigma) [1 + \exp(-2ik)]^\sigma$$

Empleando el Teorema del Binomio en el segundo paréntesis:

$$[1 + \exp(-2ik)]^\sigma = \sum_{l=0}^{\sigma} \binom{\sigma}{l} \exp(-2ikl)$$

incorporando esto en la integral para la inversa:

$$G(x, N) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{2^\sigma} \exp(ik\sigma) \sum_{l=0}^{\sigma} \binom{\sigma}{l} \exp(-2ikl) \exp(-ikx) \exp(\beta ik) dk$$

es decir:

$$G(x, N) = \frac{1}{2^{\sigma+1}} \sum_{l=0}^{\sigma} \binom{\sigma}{l} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{\pi} \exp[ik(-2l-x+\beta+\sigma)] dk$$

la integral es inmediata y nos da:

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \frac{\exp[i\pi(-2l-x+\beta+\sigma)] - \exp[-i\pi(-2l-x+\beta+\sigma)]}{i\pi(-2l-x+\beta+\sigma)} = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{2i \operatorname{sen}[\pi(-2l-x+\beta+\sigma)]}{i\pi(-2l-x+\beta+\sigma)}$$

$$(2l+x=\beta+\sigma)$$

$$(2l+x=\beta+\sigma)$$

$$= 2\delta(2l+x, \beta+\sigma)$$

finalmente, eliminando l :

$$G(x, N) = 2^{-\sigma} \sum_{l=0}^{\sigma} \binom{\sigma}{l} \delta(2l+x, \beta+\sigma) = 2^{-\sigma} \frac{\sigma!}{[(\sigma+\beta-x)/2]! [(\sigma-\beta+x)/2]!}$$

donde los argumentos de los factoriales sean estrictamente enteros positivos.

BIBLIOGRAFIA.

I. FISICA.

1.-Rohsenow, Warren M. y Harry Y. Choi. *Heat, Mass and Momentum Transfer*. Prentice Hall, Englewood Cliffs. 1961.

Referencia útil para el estudio preliminar de modelos macroscópicos.

2.-Stratton, Julius Adams. *Electromagnetic Theory*. Mac Graw Hill, New York. 1941.

En este texto se encuentra la solución de la Ecuación de los Telegrafistas, por un método distinto al que presentamos.

3.-Streeter, Victor L. y E. Benjamin Wylie. *Fluid Mechanics*. Mac Graw Hill, New York. 1981.

Referencia útil como consulta de modelos hidrodinámicos.

4.-Heer, C.V. *Statistical Mechanics*. D. Academic Press. New York. 1972.

Este trata, entre otros temas de Interés, Teoría de Camino Aleatorio en procesos Markovianos.

II. MATEMÁTICAS.

5.-Churchill, Ruel V. *Operational Mathematics*. Mac Graw Hill, New York. 1972.

Referencia básica sobre las Transformaciones Integrales.

6.-Hildebrand, Francis B. *Advanced Calculus for Applications*. Prentice Hall. Englewood Cliffs. 1976.

Útil para encontrar soluciones de la Ecuación de difusión macroscópica.

7.-Kaplan, Wilfred. *Advanced Calculus*. Addison-Wesley, Reading Massachusetts. 1973.

Referencia útil que compendia las propiedades de la función delta de Dirac.

8.-Lévedev, B. *Special Functions of and their Applications*. Dover Publications, New York. 1972.

Texto adecuado para el estudio de las propiedades de las funciones de Bessel.

9.-Doetsch, Gustav. *Theorie und Anwendung der Laplace-Transformation*. Julius Springer, Berlin. 1937.

A pesar de ser un texto antiguo y en alemán, contiene tablas muy útiles de las transformadas de Laplace que no se encuentran con frecuencia.

III. PROCESOS ESTOCÁSTICOS.

10.-Iranopur, Reza y Paul Chacon. *Basic Stochastic Processes, The Mark Kac Lectures*. Macmillan Publishing Co. New York. 1988.

11.- Keeping, E.S. *Mathematics of Statistics*. Van Nostrand. Princeton, New Jersey. 1951.

Estos textos son útiles como referencias del material estadístico empleado.

12.- Weiss, George H. "*Aspects & Applications of the Random Walk*". North Holland Co. Amsterdam. 1994.

IV. ARTÍCULOS.

13.-Chandrasekhar, S. *Stochastic Problems in Physics and Astronomy*. (1943.) *Reviews of Modern Physics* 15, 1 (1).

Lectura fundamental para comprender Teoría de Camino Aleatorio y procesos Markovianos

14.-Uhlenbeck, G.E. y L.S. Ornstein. *On the Theory of Brownian Motion*. (1930.) *Physical Review* 36 (823.)

15.-Wang, Ming Cheng, y G.E. Uhlenbeck. *On the Theory of Brownian Motion II*. (1945.) *Reviews of Modern Physics* 17, 23 (323.)

16.-Kac, Mark. *Random Walk and Theory of Brownian Motion*. *American Mathematic Monthly* 54, 7.

17.-Joseph D.D.; Luigi Preziosi. *Heat Waves*. *Reviews of Modern Physics* 61, 1 (41)

Referencias interesantes sobre Teoría de Camino Aleatorio.