



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS
PROCESOS DE DIFUSIÓN EN EL
FORMALISMO DE LA ECUACIÓN
GENERALIZADA DE
KRAMERS-FOKKER-PLANCK

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

PRESENTA:

CARLOS ROMERO CORDERO

TUTOR:

DR. FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ

2018





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.

Agradecimientos

En primer lugar, agradezco a mi tutor de tesis el Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez por haberme brindado la oportunidad de recurrir a su capacidad, conocimiento, apoyo, paciencia, y a su dedicación.

Así mismo, agradezco a cada uno de mis sinodales, Dr. Rosalío Fernando Rodríguez Zepeda, Dra. Patricia Goldstein Menache, Dr. José Inés Jiménez Aquino y al Dr. Ricardo Atahualpa Solórzano Kraemer. Gracias por su paciencia y tiempo que me brindaron para guiarme durante el desarrollo de esta tesis.

El agradecimiento más profundo y sentido va para mi familia, a mis padres Petra Cordero y Rogelio Romero, a mis hermanos, Ana Lilia Romero, Rogelio Adrian Romero y Luis Alberto Romero, por su gran cariño y apoyo incondicional, detrás de este logro están ustedes.

Por ultimo pero no menos importante, quiero agradecer a Martha Reyna Vega, por enseñarme a no dejarme vencer, por luchar contra mis propios miedos, me has brindado tu amor, tu comprensión y sobre todo tu apoyo incondicional, gracias por todo.

Esta tesis ha sido realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM IN-114717 “Materia activa: modelos de movimiento y fenómenos colectivos“. Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca recibida.

Índice general

Agradecimientos	2
1. Motivación	6
1.1. Caminata Aleatoria Simple	6
1.2. Caminata aleatoria en tiempo continuo (CTRW)	8
1.3. Caminata Aleatoria con Velocidad Estocástica	9
2. Conceptos Fundamentales	16
2.1. Movimiento Browniano Libre	17
2.2. Caminatas aleatorias su relación con movimiento Browniano	17
2.3. Teoría de Langevin	18
2.3.1. Teorema de fluctuación-disipación	19
2.4. Einstein	19
2.5. Difusión	20
3. La Ecuación de Transporte y su generalización	24
3.1. Derivación de la Ecuación de Transporte	24
3.2. Casos particulares de la ecuación de transporte	27
3.3. Generalización de la ecuación de transporte	30
4. La Ecuación de Kramers-Fokker-Planck (KFP) Generalizada	31
4.1. Kramers-Fokker-Planck Generalizada	39
4.2. Promedio al cuadrado del desplazamiento (PCD) de la ecuación Kramers-Fokker-Planck Generalizada	45
4.2.1. Promedio al cuadrado del desplazamiento de la ecuación de Kramers-Fokker-Planck 4.14	46
4.2.2. Memoria Exponencial	47
4.2.3. Ley de potencias	48

4.3. Caminata aleatoria con velocidad estocástica <i>vs</i> Kramers-Fokker-Planck generalizada	49
5. Conclusiones	52

Resumen

El presente trabajo toma como punto de partida el comportamiento de la caminata aleatoria con velocidad estocástica, en la cual un caminante se mueve con una densidad de probabilidad para la velocidad y para el tiempo de salto en una dimensión. Si pensamos al caminante como una partícula que se mueve dentro de un fluido con las características antes mencionadas nos parece que el movimiento de dicha partícula se comparta como un movimiento Browniano es por ello que con ayuda de la ecuación de Kramers-Fokker-Planck (KFP) se trata de encontrar conexiones entre dichos procesos. En física estadística la ecuación de KFP es una ecuación diferencial parcial que describe la evolución en el tiempo de la función de densidad de probabilidad para una partícula bajo la influencia de fuerzas de arrastre y fuerzas aleatorias (fluctuante) como en el movimiento Browniano.

Mostraremos que a través de la ecuación de transporte generalizada se deduce la ecuación Kramers-Fokker-Planck generalizada (unidimensional), propondremos la solución a dicha ecuación una expansión en polinomios de Hermite para así obtener una solución simplificada pero no trivial. Al encontrar la solución aproximada de la ecuación de KFP generalizada se comparará con la solución de la caminata aleatoria con velocidad estocástica encontrando así un puente entre dichos procesos.

Por último consideraremos los desplazamientos cuadráticos medios para los procesos antes mencionados, obteniendo así las expresiones analíticas para tiempos cortos y para tiempos largos lo cual nos dará una mejor perspectiva de como es la difusión de dichos procesos.

Capítulo 1

Motivación

Movimiento Browniano y caminatas aleatorias

La motivación para la realización de esta tesis se halla en la hipótesis de que la *ecuación de transporte* da una descripción alterna al marco teórico de la *caminata aleatoria con velocidad estocástica* introducido y analizado en la referencia [1]. A diferencia de la caminata aleatoria simple en una dimensión, en la que un caminante se mueve aleatoriamente en saltos de longitud fija durante tiempos de viaje fijos (es decir, a rapidez constante), en la caminata aleatoria con velocidad estocástica, el caminante se desplaza durante tiempos de viaje aleatorios con velocidad aleatoria (la longitud de desplazamiento es también aleatoria, determinada por los valores del tiempo y velocidad de viaje). Este proceso estocástico causa la difusión del caminante, por lo que dicho proceso de transporte puede entenderse de manera general como el movimiento Browniano de una partícula. Se usa el marco teórico de la ecuación de transporte [2] que contiene como caso particular la ecuación de difusión para describir la mencionada caminata.

En este capítulo se revisará la *caminata aleatoria con velocidad estocástica* en una dimensión introducida en el artículo [1], la cual generaliza la caminata aleatoria simple en tanto que considera una distribución de probabilidad para la velocidad de los caminantes. De este modo la mencionada caminata permite la descripción de procesos físicos y biológicos en los que la aleatoriedad de la velocidad es importante.

1.1. Caminata Aleatoria Simple

La caminata aleatoria simple en una dimensión describe el movimiento de un caminante que puede transitar de su posición x al tiempo t a otra posición x' a un tiempo posterior t' ($t' > t$) con una cierta probabilidad. En el caso isotrópico dicha probabilidad

es independiente de la dirección de la transición y del tiempo.

El caso más simple considera a un caminante que se mueve haciendo *saltos* (transiciones) de longitud δ en intervalos de tiempo fijos τ . Así pues, se puede considerar que el caminante se mueve sobre una malla uniforme y unidimensional, diremos además que el movimiento será completamente aleatorio si la probabilidad de moverse en cualquiera de las dos direcciones (derecha o izquierda) es igual a $1/2$. De este modo, en la primera transición el caminante está a una distancia δ del origen, para la siguiente transición el caminante tendrá dos posibilidades: en una estará a una distancia 2δ (con probabilidad $\frac{1}{4}$) o habrá regresado al origen (con probabilidad $\frac{1}{2}$), si continuamos así, una trayectoria que termine en m saltos del origen deberá caminar a la derecha una cantidad de veces α y a la izquierda $\alpha - m$ veces. Si éste camino tiene n transiciones totales, entonces $2\alpha - m = n$, así $\alpha = (n + m)/2$, por lo que hay $\binom{n}{(n+m)/2}$ caminos posibles por los que podría transitar por lo tanto la función de distribución para la posición m del caminante después de n transiciones es,

$$P(m, n) = \left(\frac{1}{2}\right)^n \binom{n}{(n+m)/2} = \frac{n!}{2^n [(n+m)/2]! [(n-m)/2]!},$$

la cual corresponde a la distribución binomial. Se puede demostrar que utilizando la aproximación de Stirling para una n suficientemente grande, la última expresión converge a una distribución Normal o Gaussiana para un tiempo, $t = n\tau$, suficientemente largo. Se dice entonces que la posición del caminante, $x = m\delta$, está normalmente distribuida con media 0 y varianza $\delta^2 t / \tau$. Ahora tomando el límite $\delta, \tau \rightarrow 0$, tal que $\delta^2 / \tau = 2D$, donde D es el coeficiente de difusión, finalmente tendremos la siguiente función de distribución de la posición del caminante,

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

la cual es la solución fundamental de la ecuación de difusión en una dimensión

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t). \quad (1.1)$$

En esta tesis nos interesan dos resultados inmediatos el promedio del desplazamiento $\langle x \rangle$ y el promedio del cuadrado del desplazamiento $\langle x^2 \rangle$. Es fácil de demostrar que

$$\langle x \rangle = 0,$$

$$\langle x^2 \rangle = 2Dt,$$

el primer resultado nos indica que en el promedio no tenemos una dirección preferente de nuestro caminante. El segundo resultado es más interesante debido a que el promedio del cuadrado del desplazamiento muestra el comportamiento asintótico de la difusión que para este caso aumento linealmente con el tiempo y por lo tanto es de difusión normal. [5].

1.2. Caminata aleatoria en tiempo continuo (CTRW)

La caminata aleatoria en tiempo continuo (CTRW por las siglas del término en inglés continuous time random walk) [10] en una dimensión, se basa en la idea de la caminata aleatoria simple, con la diferencia de que en esta tendremos tiempos de espera transcurridos entre dos saltos sucesivos, los cuales se obtienen de una función de densidad de probabilidad $\psi(x, t)$ a la cual llamaremos la función de densidad de salto y puede ser función de la posición y del tiempo. De esta densidad de probabilidad podemos obtener la distribución de longitud de salto de la siguiente manera,

$$\lambda(x) = \int_0^{\infty} dt \psi(x, t),$$

y la función de densidad de probabilidad para los tiempos de espera,

$$w(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x, t),$$

por lo tanto $\lambda(x)dx$ da la probabilidad de que la longitud de un salto se encuentre en el intervalo $(x, x + dx)$ y $w(t)dt$ la probabilidad de un tiempo de espera en el intervalo $(t, t + dt)$. Si la longitud de salto y el tiempo de espera, siendo variables aleatorias, las suponemos independientes, podríamos encontrar la forma desacoplada de la función de densidad de salto, $\psi(x, t) = \lambda(x)w(t)$, si las suponemos acopladas, es decir, que la función de densidad de salto tendrá la forma $\psi(x, t) = p(x|t)w(t)$ o $\psi(x, t) = p(t|x)\lambda(x)$, entonces un salto implica un costo de tiempo o viceversa, es decir, en un lapso de tiempo dado el caminante solo puede moverse una distancia máxima, para esta sección emplearemos sólo la version desacoplada es decir la variables aleatorias independientes.

Existen distintos tipos de CTRW que pueden ser categorizados por un tiempo de espera característico,

$$T = \int_0^{\infty} dt w(t)t,$$

y la varianza de la longitud de salto

$$\Sigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \lambda(x)x^2.$$

Con estas definiciones se puede describir un proceso de CTRW a través de la ecuación maestra generalizada apropiada, nosotros utilizaremos la siguiente,

$$\eta(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_0^{\infty} dt' \eta(x', t') \psi(x - x', t - t') + \delta(x)\delta(t), \quad (1.2)$$

que relaciona la función de densidad $\eta(x, t)$ de haber llegado a la posición x en el tiempo t , con el evento de salir de la posición x' al tiempo t' , $\eta(x', t')$. el segundo sumando en la ecuación 1.2 denota la condiciones iniciales de la caminata aleatoria, donde se escogen como deltas de Dirac. En consecuencia, la función de densidad de probabilidad de que el caminante esté en x al tiempo t es:

$$W(x, t) = \int_0^t dt' \eta(x, t') \Psi(t - t'),$$

es decir el caminante llegó al sitio x en el tiempo t' y no haberse movido desde entonces, este último esta definido por la probabilidad acumulada,

$$\Psi(t) = 1 - \int_0^t dt' w(t'),$$

donde la densidad de probabilidad $\Psi(t)$ asegura que ningún evento de salto ocurra en el intervalo $(0, t)$, en el espacio de Fourier-Laplace la función de densidad de probabilidad $W(x, t)$ es:

$$W(k, \rho) = \frac{1 - w(\rho)}{\rho} \frac{W_0(k)}{1 - \psi(k, \rho)},$$

donde $W_0(k)$ denota la transformada de Fourier de la condición inicial $W_0(x)$

1.3. Caminata Aleatoria con Velocidad Estocástica

El movimiento aleatorio con velocidad estocástica es inherente a varios sistemas físicos y biológicos. Como ya hemos mostrado en la caminata aleatoria simple además de cambios instantáneos en la dirección, tenemos longitudes de salto fijas y tiempo de salto fijo, por lo tanto, la magnitud de la velocidad se mantendrá fija $v = \delta/\tau$. Para un proceso cercano a un sistema real, la velocidad v y el tiempo de salto τ están lejos de ser fijos o constantes, es por ello que las consideraremos como variables aleatorias con funciones de densidad $h(v)$ y $f(\tau)$ respectivamente. También consideramos una función de distribución de probabilidad

inicial, $n_0(x)$, al tiempo $t = 0$ para la posición x de una partícula. Con dichas funciones dadas, se quiere determinar la evolución de la distribución de probabilidad $n(x, t)$ en la posición x para todo tiempo t , entonces consideraremos una cantidad adicional cuya dinámica nos ayuda a determinar dicha distribución, introduciremos la función $\nu(x, t)$,

$$\nu(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dv \int_0^t \nu(x - v\tau, t - \tau) h(v) f(\tau) d\tau + n_0(x) \delta(t), \quad (1.3)$$

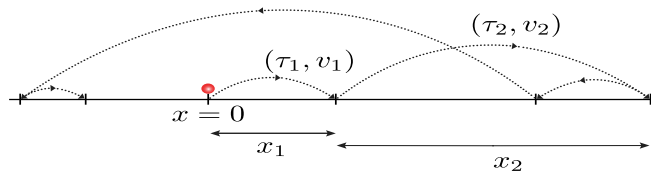


Figura 1.1: Muestra un ejemplo de la evolución de una caminata aleatoria con velocidad estocástica

la ecuación 1.3 la llamaremos la frecuencia de cambios de velocidad y muestra la frecuencia con la que la partícula cambia su velocidad, es decir, una partícula cambia su velocidad en el punto (x, t) cuando en el anterior punto tenía una velocidad v en $([t - \tau], [x - v\tau])$, por ejemplo, en la Figura 1.1 notamos que si una partícula cambia su velocidad en el punto $(x = x_1 + x_2, t = \tau_1 + \tau_2)$, cuando en su anterior transición tenía una velocidad v_1 en el tiempo $(t - \tau_2) = \tau_1$ en la posición $(x - v_2\tau_2) = x_1$ (donde vemos que $x_2 = v_2\tau_2$), entonces dado los puntos anteriores podemos ver con qué frecuencia la partícula cambia su velocidad. Podemos apreciar el término del lado derecho tiene en cuenta que el producto $h(v)f(\tau)$ que es la probabilidad para una velocidad v y un tiempo de salto τ ocurran (en el ejemplo este producto es la probabilidad para que un salto con v_2 y τ_2 puedan ocurrir), de igual forma tenemos en cuenta la distribución inicial $n_0(x)$, donde ésta inmediatamente cambia su velocidad en $t = 0$ iniciando así la evolución del sistema.

Ahora expresaremos la distribución de partículas $n(x, t)$, con la ayuda de la frecuencia de cambios en la velocidad

$$n(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dv \int_0^t \nu(x - v\tau, t - \tau) h(v) F(\tau) d\tau, \quad (1.4)$$

donde $F(\tau)$ es la probabilidad de que la velocidad no cambia en un tiempo τ de salto, es decir, $F(\tau)$ asegura que las partículas no eligen otra velocidad antes de que estas pasen

el punto (x, t)

$$F(\tau) = 1 - \int_0^\tau f(\tau') d\tau',$$

Podemos notar que la distribución $n(x, t)$ a un punto dado (x, t) , es resultado de los cambios de la velocidad en todos los otros puntos del pasado, esto quiere decir que en la dinámica del sistema existe un tipo de memoria.

Las ecuaciones 1.3 y 1.4 son las que describen la dinámica del sistema tomando una distribución inicial $n_0(x, t)$ y dos funciones de distribución para los saltos, estas ecuaciones las podemos resolver analíticamente.

Primero calculamos la frecuencia de cambios en la velocidad $\nu(x, t)$, esta la sustituimos en la ecuación 1.4 y aplicando la transformada de Fourier cambiando la variable x por la variable k tenemos que:

$$\nu_k = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dv h(v) \int_0^t \nu(x - v\tau, t - \tau) f(\tau) d\tau e^{-ikx} \right] dx + n_{k0}(x) \delta(t),$$

multiplicando por $e^{-ik(v\tau)} e^{ik(v\tau)}$ la término del lado derecho de la ecuación

$$\nu_k = \int_0^t h_{k\tau} \nu_k(t - \tau) f(\tau) d\tau + n_{k0}(x) \delta(t), \quad (1.5)$$

la ecuación 1.5 es la transformada de Fourier para la frecuencia de cambios de velocidad, donde los índices k y $(k\tau)$ son las variables conjugadas de Fourier, ahora aplicamos la transformada de Laplace cambiando a t por ρ siendo esta la variable conjugada de Laplace para el tiempo entonces,

$$\nu_k = \int_0^{\infty} dt \left(\int_0^t h_{k\tau} \nu_k(t - \tau) f(\tau) d\tau + n_{k0}(x) \delta(t) \right) e^{-\rho t},$$

usando la propiedad de la delta de Dirac para la distribución inicial tenemos que

$$\nu_k = \int_0^{\infty} dt \left(\int_0^t h_{k\tau} \nu_k(t - \tau) f(\tau) d\tau \right) e^{-\rho t} + n_{k0}(x),$$

multiplicamos el miembro derecho por $e^{-\rho\tau + \rho\tau}$

$$\nu_k = \int_0^t d\tau f(\tau) h_{k\tau} e^{-\rho\tau} \int_0^{\infty} dt \nu_k(t - \tau) e^{\rho(t-\tau)} + n_{k0}(x),$$

identificando las transformadas de Laplace tenemos:

$$\nu_{k\rho} = \nu_{k\rho} [h_{k\tau} f(\tau)]_{\rho} + n_{k0}(x),$$

despejamos $\nu_{k\rho}$:

$$\nu_{k\rho} = \frac{n_{k0}}{1 - [h_{k\tau}f(\tau)]_\rho}, \quad (1.6)$$

si hacemos lo mismo con la distribución de partículas $n(x, t)$:

$$n(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dv \int_0^t \nu(x - v\tau, t - \tau) h(v) F(\tau) d\tau,$$

aplicamos la Transformada de Fourier con respecto a la coordenada espacial x siendo k la variable conjugada de Fourier entonces:

$$n_k = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dv \int_0^t d\tau \nu(x - v\tau, t - \tau) h(v) F(\tau) e^{-ikx},$$

de igual forma multiplicamos por $e^{ikv\tau - ikv\tau}$ entonces:

$$n_k = \int_0^t d\tau F(\tau) h_{k\tau} \nu_k(t - \tau),$$

aplicamos la transformada de Laplace intercambiando t por ρ siendo la variable conjugada de Laplace

$$n_{k\rho} = \int_0^\infty dt \int_0^t d\tau F(\tau) h_{k\tau} \nu_k(t - \tau) e^{-\rho t},$$

multiplicamos la ecuación por $e^{-\rho\tau + \rho\tau}$,

$$n_{k\rho} = \int_0^t d\tau F(\tau) h_{k\tau} e^{-\rho\tau} \int_0^\infty dt \nu_k(t - \tau) e^{-\rho(t-\tau)},$$

por lo tanto:

$$n_{k\rho} = [F(\tau)h_{k\tau}]_\rho \nu_{k\rho}, \quad (1.7)$$

sustituimos la anterior expresión en la distribución:

$$n_{k\rho} = \frac{[F(\tau)h_{k\tau}]_\rho n_{k0}}{1 - [h_{k\tau}f(\tau)]_\rho}, \quad (1.8)$$

esta es la expresión analítica para la distribución de probabilidad de una partícula en la posición x al tiempo t con velocidades aleatorias en la representación en Fourier-Laplace.

Propiedades asintóticas

Antes de analizar los posibles regímenes de transporte consideraremos dos ejemplos, en el primero la velocidad tiene un valor constante, para el segundo ejemplo tomamos la distribución de velocidades como una Lorentziana generalizada típica.

En el primer ejemplo asumimos que la velocidad v puede tomar dos valores $\pm v_0$ por lo tanto la distribución de velocidades $h(v) = [\delta(v - v_0) + \delta(v + v_0)]/2$ y con tiempos de salto exponencialmente distribuidos, $f(\tau) = (1/\tau_0) \exp(-\tau/\tau_0)$ entonces para k y ρ pequeñas es sencillo ver que

$$n_{k\rho} = \frac{n_{0,k}}{\rho + k^2\tau_0v_0^2}, \quad (1.9)$$

Para la distribución de tiempos de saltos con la ley de potencias $f(\tau) = \gamma/(1 + \tau)^{1+\gamma}$ con $0 < \gamma < 1$ recuperamos los resultados para las caminatas de Lévy [6–8],

$$n_{k\rho} = \frac{\cos[\varphi(\gamma - 1)]}{|\rho^2 + k^2v_0^2|^{1/2} \cos(\varphi\gamma)},$$

$$\cos(\varphi) = \frac{\rho}{\sqrt{\rho^2 + k^2v_0^2}}.$$

Para ilustrar la solución, mostramos la inversa de Fourier-Laplace para el caso $\gamma = 1/2$, $n(x, t) = \pi^{-1}\theta(v_0t - |x|)(t^2v_0^2 - x^2)^{-1/2}$. En la Fig. 1(a)(de [1]) se traza en coordenadas reescaladas junto con resultados numéricos computacionales, donde se simula directamente las rutas de un conjunto de caminantes aleatorios. Para comparar el resultado del modelo de Caminata Aleatoria en tiempo continuo se muestra que una partícula espera un tiempo aleatorio τ y luego hace un salto instantáneo de longitud $|x| = v\tau$ (línea discontinua y símbolos abiertos en Fig. 1(a)).

Por otro lado, para el segundo problema consideremos por un momento el espacio de dimensión arbitraria $d \geq 1$. Todas las ecuaciones anteriores siguen siendo válidas si las cantidades x, v y k son considerados vectores d -dimensionales. Tomando la distribución de velocidades en la Lorentziana generalizada (o de Cauchy) de: $h(v) \propto 1/(1 + v^2)^{(d+1)/2}$, independiente de la elección de distribución de tiempos de salto, obtenemos una respuesta sorprendentemente simple, para la densidad de partículas en el espacio y tiempo reales:

$$n(x, t) = \frac{\Gamma\left(\frac{d+1}{2}\right)t}{[\pi(t^2 + x^2)]^{(d+1)/2}},$$

la cual es la distribución Lorentziana generalizada, el caso $d = 1$ representado en la Fig.1(b) (de la Ref. [1]), este es un resultado muy notable ya que demuestra que una distribución de velocidades Lorentziana se puede usar para cualquier distribución de tiempos

de salto. Observamos aquí que este resultado es muy poco probable que se recupere de cualquier otro modelo de Caminata Aleatoria en tiempo continuo, además que un perfil Lorentziano de velocidades aparece en algunos fenómenos físicos reales tales como la turbulencia bidimensional y también es uno de los modelos de distribuciones de la teoría cinética. [9]

Para el análisis de las propiedades asintóticas de la función de distribución de probabilidad 1.8, consideramos tiempos largos y escalas espaciales grandes, lo cual reflejado en el espacio de Fourier-Laplace corresponde al límite $k, \rho \rightarrow 0$, entonces tomaremos sólo los primeros términos de la expansión de 1.8 con respecto a k y ρ pequeños.

En lugar de determinar todos los detalles del perfil de densidad solo mostraremos sus propiedades de escala. Para hacerlo empleamos los resultados para el modelo estándar de CTRW (Caminata Aleatoria en tiempo Continuo) [10]. Ahí se muestra que el perfil de densidad tiene la forma $n(x, t) = (1/t)^\alpha \Phi(x/t^\alpha)$. Si las longitudes de salto se distribuyen como una ley de potencia $g(|x|) \propto |x|^{-1-2\beta}$ y los tiempos de espera también tienen una ley de potencia de $\Psi(\tau) \propto \tau^{-1-\gamma}$ el exponente en la función depende de la siguiente manera:

$$\alpha = \begin{cases} \gamma/2\beta & 0 < \beta < 1 & 0 < \gamma < 1 \\ 1/2\beta & 0 < \beta < 1 & \gamma > 1 \\ \gamma/2 & \beta > 1 & 0 < \gamma < 1. \end{cases} \quad (1.10)$$

En la Fig.2 de [1] nos muestra un diagrama fase de los posibles regímenes de transporte en el modelo de caminata aleatoria con velocidad estocástica, donde δ y γ son los exponentes en la ley de potencias para las distribuciones de velocidad y del tiempo respectivamente. El escalar resultante esta dado por $\alpha: x \propto t^\alpha$.

Los resultados mostrados en el artículo [1] de las simulaciones numéricas con varios exponentes γ colapsan excelentemente en la curva teórica y confirman la independencia del perfil de densidad de la distribución del tiempo de vuelo.

En cuanto a las aplicaciones del modelo, observamos que cualquier proceso físico o biológico real puede involucrar a otras características típicas de caminatas aleatorias, como la persistencia, los tiempos de espera, multidimensional, etc. Se pueden agregar al modelo, sin embargo, aumentaría significativamente el espacio de parámetros.

En los siguientes capítulos retomaremos los resultados mostrados con anterioridad, com-

parándolos con la ecuación de transporte generalizada y a su vez trataremos de ver las posibles conexiones entre estas, antes de ello revisemos algunos conceptos.

Capítulo 2

Conceptos Fundamentales

Los sistemas alejados del equilibrio termodinámico son ubícuos en la naturaleza y son de gran interés en muchas áreas del conocimiento. En física, uno de los aspectos de interés corresponde al estudio del movimiento de partículas que a *priori* están alejados del equilibrio, teniendo como paradigma de estos sistemas al Movimiento Browniano. La teoría del Movimiento Browniano, con sus respectivas generalizaciones, puede aplicarse no solo al movimiento de partículas Brownianas “pasivas” (partículas inertes sujetas a fluctuaciones de origen térmico), sino a una gran variedad de entidades más complejas que son capaces de absorber energía de su medio ambiente y usarla en su beneficio disipándola para producir su propio movimiento. A este tipo de entidades se les denomina “partículas autopropulsadas”. Un ejemplo claro de partículas activas corresponde al movimiento de organismos biológicos (bacterias, células, peces, aves), aunque en los últimos años se han desarrollado partículas coloidales que se valen de diversos mecanismos de autóforesis para propulsarse, como lo son las partículas de Jano (dios romano del cambio a menudo representado con dos caras que miran en direcciones opuestas), consisten de esferas micrométricas de silicio con un semihesferio recubierto de platino y que usan los efectos de una reacción química en el solvente circundante (peróxido de hidrógeno) para autopropulsarse. Mostraremos y describiremos las distintas expresiones que describen procesos difusivos en función de las condiciones iniciales y de movimiento impuestas a las partículas.

Para poder dar una idea más clara sobre lo que son estos tipos de sistemas es necesario previamente establecer algunos conceptos teóricos.

2.1. Movimiento Browniano Libre

En 1828 cuando el botánico llamado Robert Brown observó que granos de polen suspendidos en un cierto líquido y vistos a través de un microscopio, realizan un movimiento irregular, este extraño movimiento fue objeto de muchas discusiones formulándose todo tipo de hipótesis con la intención de dar una explicación al fenómeno observado, en particular nombremos las de Langevin, él formuló la ecuación fundamental para este tipo de movimiento (la cual lleva su nombre). El movimiento Browniano se refiere al movimiento errático de una partícula microscópica suspendida en un medio, que en general podemos considerarlo en un estado de equilibrio térmico caracterizado por una temperatura T . La evolución temporal de la posición de la partícula sometida a un movimiento Browniano se puede aproximar a escalas de tiempo cortas mediante la ecuación de difusión, la difusión de partículas es un movimiento aleatorio caracterizado por cambios abruptos y frecuentes de dirección esta aleatoriedad de las partículas es el resultado de la colisión con moléculas presentes en el medio, es decir, el movimiento Browniano es un sistema alejado del equilibrio termodinámico.

La constatación de que el movimiento Browniano es una manifestación de las fluctuaciones estadísticas entre los microestados de un sistema termodinámico, tuvo para el estudio de los sistemas fuera de equilibrio consecuencias de mayor alcance para los sistemas que se mantenían dentro de este. En el equilibrio, el orden con que los sucesos se producen es irrelevante; las fluctuaciones entre los microestados difícilmente da lugar a un macroestado observable. Para sistemas fuera de equilibrio, sin embargo, el orden temporal de los acontecimientos resulta de suma importancia.

Hay muchos microestados en esencia indistinguibles asociados con un macroestado, por lo que la termodinámica estadística trata de hablar sobre el estado de equilibrio termodinámico a escalas de tiempo significativamente grandes, si observamos los microestados relacionados, podemos decir que el macroestado no alcanza estrictamente el equilibrio termodinámico.

2.2. Caminatas aleatorias su relación con movimiento Browniano

Si introducimos una partícula en un medio, el cual está constituido por moléculas las cuales golpearán a la partículas causando que su posición al tiempo cero sea, S_0 entonces

transcurrido un tiempo n su posición sera $S_n = S_0 + \sum_{i=1}^n x_i$, donde los incrementos en cada paso de la partícula son x_1, x_2, x_3, \dots , si suponemos que estos son variables aleatorias independientes y distribuidos de forma idéntica, entonces el proceso $\{S_n : n \geq 0\}$, está escalado por:

$$W^n(t) = \frac{S_{[nt]}}{\sqrt{n}} \quad t \in [0, 1],$$

este tipo de movimiento puede verse como un caminante aleatorio donde los desplazamientos son causados por los golpes de las moléculas antes mencionadas, cuando $n \rightarrow \infty$, $W^n(t)$ converge en una distribución para el movimiento Browniano estándar, es decir, el movimiento Browniano aparece como el límite de una caminata aleatoria para n grande.

2.3. Teoría de Langevin

La ecuación formulada por Paul Langevin (2.1) contiene dos fuerzas características, una fuerza de resistencia (fricción) y una fuerza fluctuante, aleatoria o Browniana (la fuerza total que actúa sobre una partícula Browniana es la suma de estas) que a tiempos cortos, la fuerza que domina es la fluctuante. En intervalos de tiempo largos predominan los efectos de la fuerza de resistencia. La fuerza total equivale a la masa de la partícula multiplicada por la aceleración producida por ambas componentes. Aquí m y $v = x'(t)$ son la masa y la velocidad de la partícula Browniana respectivamente, $-\zeta v$ es la fuerza de fricción, proporcional a la velocidad y el coeficiente de fricción puede estar dado por la ley de Stokes $\zeta = 6\pi\eta a$, si la partícula tiene forma esférica con radio a .

$$m \frac{dv}{dt} = -\zeta v + \delta F(t), \quad (2.1)$$

El término $\delta F(t)$ en la ecuación (2.1) representa una fuerza aleatoria originada por los bombardeos de la partícula Browniana con las moléculas del medio. Por hipótesis, dicha fuerza está sujeta a dos condiciones,

$$\langle \delta F(t) \rangle = 0 \quad y \quad \langle \delta F(t) \delta F(s) \rangle = 2B\delta(t-s), \quad (2.2)$$

donde B mide la intensidad de los impactos o la magnitud de la fuerza fluctuante y es función de la temperatura del medio. La primera condición en esta hipótesis (2.2) indica que la fuerza aleatoria no empuja hacia ningún lado de manera preferente, lo cual es consecuencia de suponer que el baño térmico esta en equilibrio termodinámico. La otra hipótesis expresa que los impactos varían con mucha rapidez y de hecho, la función delta $\delta(t-s)$ indica que no hay correlación entre impactos para un intervalo finito $(t-s)$.

2.3.1. Teorema de fluctuación-disipación

La manera más simple de describir el teorema de fluctuación-disipación es, si tomamos las expresiones anteriores (2.2) y resolvemos la ecuación (2.1) al calcular el promedio del cuadrado de la velocidad podemos llegar a que,

$$B = k_B T \zeta, \quad (2.3)$$

la ecuación (2.3) se conoce como el teorema de fluctuación-disipación del primer tipo. Este relaciona la intensidad B del ruido aleatorio o la fuerza de fluctuación con la magnitud ζ de la disipación o fricción. En otras palabras, esta relación expresa el balance de fricción, que tiende a llevar al sistema a un estado en equilibrio, y el ruido, que tiende a mantener al sistema activo. Este balance es necesario para tener un estado de equilibrio termodinámico a tiempos largos. Como caso particular, cuando el coeficiente de fricción ζ esta dado por la ley de Stokes, la ecuación (2.3) tiene la forma particular de $B = 6\pi\eta a k_B T$.

2.4. Einstein

La interpretación de Einstein se basó en que la velocidad de la partícula Browniana no es una magnitud definida (efectivamente entre dos medidas consecutivas, la partícula choca multitud de veces cambiando su velocidad de dirección y módulo, llegando incluso a anularse muchas veces). Los dos puntos principales de la solución de Einstein son:

- i) El movimiento de los granos de polen está provocado por el gran número de impactos con las moléculas del líquido en que están inmersos.
- ii) El movimiento de las moléculas es tan complicado que sólo se puede describir probabilísticamente en términos de un gran número de impactos independientes.

Entonces cada partícula ejecuta un movimiento que se asume independiente del de todas las demás y además dos movimientos de la misma partícula (en distinto tiempo) son también procesos independientes. Einstein encontró que la función de distribución de partículas cumple la ecuación diferencial de difusión 2.11 cuya solución es:

$$n(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}},$$

si calculamos la raíz del promedio al cuadrado del desplazamiento obtenemos lo siguiente:

$$\alpha_x = \sqrt{\langle x^2(t) \rangle} = \sqrt{2Dt}$$

La importancia radica en que este promedio al cuadrado del desplazamiento resultó ser el punto de comparación con la teoría desarrollada por Langevin y la desarrollada por Einstein.

2.5. Difusión

Una de las ecuaciones fundamentales de para el estudio de sistemas fuera de equilibrio es conocida como la ecuación de calor la cual gobierna la conducción térmica en medios materiales continuos.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T, \quad (2.4)$$

donde $T(x, y, z, t)$ representa la distribución de temperatura en un medio como función del espacio y del tiempo, α es un parámetro positivo que depende de las propiedades del medio, este mide la facilidad con la que el calor se puede transmitir a través de él.

Un fenómeno importante de este tipo es la difusión molecular, la mejor manera de describir este fenómeno es mediante un ejemplo concreto, como el que se presenta a continuación. Considerése un recipiente lleno de agua en equilibrio hidrostático. Sabemos que, desde un punto de vista microscópico, en el recipiente hay un enorme número de moléculas de agua, cada una de las cuales no está en reposo sino que se mueve aleatoriamente debido a sus continuas colisiones con moléculas vecinas, con una rapidez promedio que depende de la temperatura. Supóngase ahora que en el centro de la masa de agua se deposita una gota de un líquido coloreado, por ejemplo una gota de tinta con una jeringuilla. En el momento de depositar la gota (si la sustancia se a elegido adecuadamente) se podrá observar claramente la región ocupada por la nueva sustancia, con una frontera nítida que la separa del resto del volumen de agua. Sin embargo, con una rapidez que depende de la sustancia elegida, esa frontera se irá difuminando y la sustancia coloreada va invadiendo toda la región que inicialmente sólo contenía agua, hasta que finalmente la tinta se habrá extendido por todo el volumen de manera homogénea, lo cual se manifiesta en una coloración uniforme del líquido.

La explicación microscópica de ese proceso es lo que se llama difusión molecular. La gota de tinta consiste en otro número enorme de moléculas de una nueva especie, que también se mueven en direcciones aleatorias con una rapidez promedio dependiente de la temperatura. En un punto próximo a la superficie de la gota habrá moléculas de tinta que se moverán hacia el interior de la gota, pero también habrá otras que se moverán en el sentido opuesto, escapando de la región inicial y disolviéndose entre las moléculas de

agua. Las colisiones de las moléculas de tinta con las moléculas de agua que las rodean por todas partes hacen que aquellas mantengan una distribución isótropa de velocidades en cualquier punto del líquido. Si en un punto dado se considera un elemento de superficie con una determinada orientación (una pequeña área plana ΔS con normal n), en un instante dado habrá moléculas de tinta que atraviesen ese elemento de área en los dos sentidos. En el caso de que la concentración (número de moléculas por unidad de volumen) de tinta sea distinta a ambos lados del elemento de superficie, habrá un flujo neto de moléculas de tinta a través de ΔS desde el lado en donde la concentración es mayor hacia el lado en que es menor. La relación cuantitativa entre la cantidad de flujo neto y las variaciones de concentración de un punto a otro viene expresada por la denominada ley de Fick:

$$\mathbf{j} = -D\nabla n \quad (2.5)$$

en donde $n(\mathbf{r}, t)$ representa la concentración de moléculas, $j(\mathbf{r}, t)$ el flujo neto en ese punto, definido como el número de moléculas que atraviesan un área unidad por unidad de tiempo, y D es un parámetro que depende del tipo de moléculas inyectadas y que se llama coeficiente de difusión. Este coeficiente da una medida de la facilidad con la que las moléculas de una especie (tinta) pueden moverse a través de las de la otra especie (agua). Esta ley empírica, que tiene un amplio rango de validez, fue propuesta originalmente en 1855 por un fisiólogo alemán, Adolf Fick (1829-1901). La distribución en el espacio y en el tiempo de las moléculas de la nueva especie está gobernada por la (2.5), y también por la restricción de que el número total de moléculas se mantiene constante (se excluyen problemas más complejos en los cuales pueden intervenir además reacciones químicas.) Esta ley de conservación del número de moléculas (ni se crean ni se destruyen, sólo pueden trasladarse, o fluir, de un sitio a otro) se expresa matemáticamente mediante la llamada ecuación de continuidad. Se trata de una de las ecuaciones básicas en distintos campos de la Física, y aparece siempre que alguna magnitud física está sometida a un principio de conservación local.

Sea A una región acotada dada en el sistema, es decir, un trozo dado del volumen total ocupado por el líquido. La cantidad total $N_A(t)$ de moléculas de tinta que hay dentro de A en un instante t es:

$$N_A(t) = \int_A n(\mathbf{r}, t) d^3r,$$

Si $j(\mathbf{r}, t)$ representa el flujo de moléculas, por unidad de área y de tiempo, en cada punto, el número total de moléculas que salen de A a través de su frontera ∂A por unidad de

tiempo será:

$$\text{flujo neto saliente} = \int_{\partial A} \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} da, \quad (2.6)$$

en donde \mathbf{n} es la normal exterior en cada punto de ∂A : Ahora bien, por la ley de conservación, la pérdida neta de moléculas en A por unidad de tiempo, $-\frac{dN_A}{dt}$ es justo igual a ese flujo saliente, de modo que se tiene:

$$\frac{d}{dt} \int_A n(\mathbf{r}, t) d^3r = \int_{\partial A} \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} da, \quad (2.7)$$

la primera integral en esta ecuación puede transformarse mediante la regla usual para derivar integrales dependientes de parámetros, ya que se supone que se cumplen todas las condiciones de suavidad requeridas:

$$\frac{d}{dt} \int_A n(\mathbf{r}, t) d^3r = \int_A \frac{\partial n}{\partial t} d^3r,$$

la segunda integral en la (2.7) puede transformarse en una integral sobre la región A utilizando uno de los resultados fundamentales del Análisis Vectorial, el teorema de la divergencia:

$$\int_{\partial A} \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} da = \int_A \nabla \cdot \mathbf{j} d^3r,$$

así la ecuación (2.7) la podemos reescribir como:

$$\int_A \left(\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} \right) d^3r = 0, \quad (2.8)$$

puesto que el razonamiento anterior es válido para cualquier elección de la región A , el integrando de (2.8) ha de ser nulo en cada punto del interior del volumen y en cualquier instante de tiempo. Esto permite expresar el principio de conservación de una forma local, que es la que habitualmente se denomina ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (2.9)$$

si ahora se combina la ecuación de continuidad, (2.9), con la ley de Fick, (2.5), se obtiene finalmente la relación:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \nabla^2 n \quad (2.10)$$

que en una dimensión es:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}, \quad (2.11)$$

La teoría que explica como se lleva a cabo el comportamiento de las partículas y de las variables que intervienen en el proceso de difusión, es la teoría de transporte la cual nos ayuda a comprender analíticamente como es que ocurren dichos procesos estocásticos y la importancia que podrían llegar a tener.

Capítulo 3

La Ecuación de Transporte y su generalización

En este capítulo mostraremos la derivación de la ecuación de transporte equilibrando las distintas condiciones a las que estarán sujetas las partículas. En los procesos de transporte, la evolución de un sistema es el resultado del comportamiento de dos factores que compiten entre sí. Por un lado la presencia de fuerzas externas que aportan al sistema masa, ímpetu o energía, hace que este se aparte del estado de equilibrio inicial y evolucione hacia configuraciones de no equilibrio.

En situaciones alejadas del equilibrio termodinámico es conveniente plantear balances de diversos mecanismos por los que las partículas pueden moverse a través de un medio, entonces las fluctuaciones no evolucionan de manera arbitraria sino que deben satisfacer el teorema de fluctuación-disipación que establece una relación entre la respuesta del sistema a una perturbación externa la correlación de la variable estocástica. Una partícula Browniana efectúa un movimiento aleatorio, pero la correlación de la fuerza que origina el movimiento, es proporcional al coeficiente de difusión. A través de éste balance podemos obtener distribuciones de probabilidad que rigen la evolución del sistema [2].

3.1. Derivación de la Ecuación de Transporte

Empecemos considerando un volumen arbitrario V en el espacio de posiciones y velocidades, y calculamos el cambio con respecto al tiempo del número de partículas $n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, si ignoramos fuerzas macroscópicas que podrían cambiar la trayectoria de las partículas en V , es evidente que los mecanismos que pueden cambiar el número de partículas en dicho volumen son las colisiones, fugas y fuentes a través de la superficie de V esto es:

[Cambio de partículas con respecto al tiempo]=[Cambios debido a fugas] +[Cambio debido a colisiones]+[Cambio debido a difusión +[Fuentes],

podemos expresar esta condición de equilibrio como sigue:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V d^3r n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v = - \int_s dS \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v + \int_V d^3r \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{coll} d^3v + \int_V d^3r \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{diff} d^3v + \int_V d^3S(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v,$$

donde $S(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ es la función de densidad de las fuentes existentes en el volumen V , $\left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{coll}$ es el cambio con respecto al tiempo de la densidad de partículas $n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ debido a colisiones y $\left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{diff}$ debido a difusión. Al elegir un volumen arbitrario, podemos agregar la derivada parcial con respecto al tiempo dentro de la integral sobre V ya que este no depende del tiempo y con ayuda de la ley de Gauss reescribimos la integral para la contribución de fugas como una integral sobre el volumen

$$\int_s dS \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3v = \int_V d^3r \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int_V d^3r \nabla \cdot \mathbf{v} n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int_V d^3r \mathbf{v} \cdot \nabla n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (3.1)$$

por lo que notamos que $\nabla \cdot \mathbf{v} n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \mathbf{v} \cdot \nabla n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ donde \mathbf{r} y \mathbf{v} son variables independientes.

La siguiente expresión muestra el concepto que relaciona la función de densidad de corriente con la densidad de corriente angular $\mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{S} d\mathbf{v} = \mathbf{v} n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{S} d\mathbf{v}, \quad (3.2)$$

donde el número de partículas $n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ atraviesan un área $d\mathbf{S}$ con velocidad \mathbf{v} en un tiempo t ,

Si sustituimos la expresión 3.2 en la condición de equilibrio obtendremos la siguiente expresión,

$$\int_V d^3r d^3v \left\{ \frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) - \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{coll} - S \right\} = 0,$$

por lo tanto, para un volumen V arbitrario la ecuación anterior se satisface si y solo si, el integrando es idénticamente cero:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{coll} + S, \quad (3.3)$$

llegando a una ecuación en derivadas parciales para la densidad de partículas $n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, la cual es la forma general adoptada por la ecuación de transporte, podemos simplificarla un poco considerando el caso donde el cambio total con respecto al tiempo en una densidad de partículas local es el cambio de la densidad debido a colisiones y fuentes:

$$\frac{Dn}{Dt} = \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{coll} + S,$$

es decir $\frac{Dn}{Dt}$ es el cambio total de la densidad de partículas $n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ con respecto al tiempo t , lo que sigue es expresar la derivada total con la regla de la cadena expresando dicha derivada en derivadas parciales:

$$\frac{Dn}{Dt} = \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{v}},$$

entonces identificamos la velocidad como $(\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t})$ y a la aceleración con ayuda de la segunda ley de Newton como $(\frac{F}{m} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t})$, sustituyendo

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} + \frac{F}{m} \frac{\partial n}{\partial v},$$

donde el gradiente lo tendremos presente en notación en derivadas parciales $\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \equiv \nabla$ siendo $grad(n) = \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}}$. La ecuación 3.4 es la forma estándar de la ecuación de transporte, ahora si consideremos el término de difusión y sin considerar fuentes externa sin fuentes de partículas [2].

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} + \frac{F_{ext}}{m} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{coll} + \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{diff}. \quad (3.4)$$

Para simplificar los cálculos en los siguientes capítulos, escribiremos la ecuación en una dimensión y no consideraremos fuerzas externas

$$\frac{\partial n}{\partial t} + v \frac{\partial n}{\partial x} = \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{coll} + D \frac{\partial^2 n}{\partial v^2} + \gamma v \frac{\partial n}{\partial v}, \quad (3.5)$$

donde el término difusión es:

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{diff} = D \frac{\partial^2 n}{\partial v^2} + \gamma v \frac{\partial n}{\partial v},$$

observamos que el último término del lado derecho de la expresión anterior, caracteriza el término de arrastre en el transporte difusivo y el siguiente término del lado derecho, donde tenemos el coeficiente de difusión D , el cual es un valor que representa la facilidad con la que las partículas se moveran dentro de un medio. Cabe mencionar que para los siguientes casos mostrados en el desarrollo de esta tesis no se considerara el término de colisión sin embargo este es de suma importancia por lo cual, en el apéndice A se discute un poco más sobre dicho término y en el apéndice B se muestran algunos métodos de soluciones para los casos más simples.

3.2. Casos particulares de la ecuación de transporte

Para mostrar la importancia de la ecuación 3.5 mostramos algunos casos particulares que han surgido en varios campos, presentándolos muy brevemente en sus aplicaciones más populares.

Difusión

Como caso particular e inmediato de la ecuación de transporte es la ecuación de difusión. Supongamos que el término de arrastre es considerablemente mayor comparado con la velocidad ($\gamma \rightarrow \infty$), por lo tanto la velocidad de las partículas será considerablemente pequeña ($v \rightarrow 0$), entonces el movimiento de las partículas dependerá únicamente de las propiedades del medio (D) en el que se difunden.

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

Caminatas aleatorias en biología

La modelación matemática del movimiento de animales, microorganismos y células es de gran relevancia en los campos de la biología, la ecología y la medicina. Los modelos de movimiento pueden tomar muchas formas diferentes, pero las más utilizadas se basan en las extensiones de procesos de caminata aleatoria.

Aquí mostramos a $p(x, v, t)$ la función de densidad de los caminantes, entonces la densidad

total de caminantes en el lugar x se da al integrar sobre todas las velocidades resultando:

$$n(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} p(x, v, t) dv,$$

si tomamos la densidad total a $t \rightarrow 0$ entonces $|x| \rightarrow \infty$ y que los cambios en la velocidad se distribuyen como una distribución de Poisson con intensidad λ que depende de la posición x , por lo tanto, λ^{-1} es la media del tiempo entre los cambios de dirección, definiremos la reorientación $T(v, v')$ como la probabilidad de un cambio en la velocidad de v' a v dado que si ocurre una reorientación no negativa y normalizada para que $\int T(v', v) dv = 1$ para toda v' . Supongamos que $T(v', v)$ es independiente del tiempo entre saltos. Se puede demostrar que la ecuación gobernante, conocida como **la ecuación de transporte lineal** que para este proceso en una dimensión es:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + v \frac{\partial p}{\partial x} = -\lambda p + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} T(v', v) p(x, v', t) dv', \quad (3.6)$$

en general, el interés está en los primeros momentos para la velocidad, si introducimos la velocidad promedio:

$$n(x, t)u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} p(x, v, t)v dv,$$

integrando 3.7 sobre todas las velocidades, nos da una ecuación para n en términos de u

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(n \cdot u)}{\partial x} = 0,$$

similarmente multiplicando 3.7 por v e integrando sobre todas las velocidades resulta:

$$\frac{\partial(n \cdot u)}{\partial t} + \int_{-\infty}^{\infty} v \frac{\partial vp}{\partial x} dv = -\lambda(n \cdot u) + \lambda \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} T(v', v) p(x, v', t) dv' dv. \quad (3.7)$$

Cabe señalar que la anterior ecuación describe un proceso general, del cual muchos son modelos básicos de caminatas aleatorias, por ejemplo, si suponemos que los caminantes se mueven con una velocidad v fija (constante), solo hay dos velocidades posibles $+v$, $-v$, entonces tendremos el caso de la caminata aleatoria simple. [11]

Transporte de neutrones

Para describir la difusión de neutrones a través de un medio, definiremos $n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ como el espacio fase de densidad de neutrones $\varphi(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t)$, donde E es la energía por unidad de volumen, $\hat{\Omega}$ el ángulo sólido y \mathbf{r} vector de posición en el instante t , interpretamos a $\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v})$ como la caracterización de la sección transversal macroscópica de interacciones

neutrón-nucleares. Dado que la teoría del transporte de neutrones es esencial solo una forma especializada de la teoría cinética de los gases en la que el gas de neutrones se difunde a través del fondo gas de los núcleos, podríamos esperar que los conceptos y la notación de la teoría cinética del gas puedan ser adaptado directamente. Sin embargo, debido a la naturaleza bastante especializada de la problemas y las aproximaciones utilizadas en el transporte de neutrones, es acostumbrado a adoptar una notación algo diferente:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \hat{\Omega} \cdot \nabla \varphi + \Sigma_t \varphi = \int_0^\infty dE' \int \hat{\Omega}' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \varphi(\mathbf{r}, E', \hat{\Omega}', t) + s,$$

con las condiciones iniciales y de contorno [2]:

$$\varphi(r, E, \hat{\Omega}, 0) = \varphi_0(r, E, \hat{\Omega})$$

$$\varphi(r, E, \hat{\Omega}, t) = 0 \quad \hat{\Omega} \cdot \hat{e}_s < 0 \quad (\text{superficie libre}).$$

Altas energías, transporte de partículas cargadas

Si tratamos de aplicar una ecuación de transporte similar a la utilizada para describir transporte de neutrones o fotones a procesos con alta energía (por ejemplo, electrones o iones ligeros). Existen dos fenómenos físicos bastante diferentes que caracterizan el transporte de partículas cargadas de luz, y nos conduce a un enfoque matemático algo diferente:

- i) Las fuertes pero frecuentes colisiones de las partículas con iones pesados en el cual ocurre poca transferencia de energía.
- ii) Frecuentes colisiones débiles con electrones atómicos, que dan lugar a trayectorias de partículas irregulares.

Por lo tanto, generalmente se comienza el estudio del transporte de partículas cargadas mediante el uso de una descripción independiente de la energía para tener en cuenta las colisiones elásticas con iones pesados.

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \hat{\Omega} \cdot \nabla \varphi + \Sigma_s \varphi = \int \hat{\Omega}' \Sigma_s(\hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \varphi(r, v, \hat{\Omega}', t) + s, \quad (3.8)$$

luego se introducen las frecuentes colisiones débiles, que dan lugar a la energía pérdida mediante el uso de una teoría de desaceleración continua en la que es asumido que la pérdida de energía en una longitud de ruta dada ξ es conocido y expresado en términos

de $dE/d\xi$. Luego usando $dE = vdt$ podemos transformar la variable independiente en la anterior ecuación reescribiendo [2]:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} + \hat{\Omega} \cdot \nabla \varphi + \Sigma_s \varphi = \int \hat{\Omega} \Sigma_s(\hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \varphi(\hat{\Omega}') + s. \quad (3.9)$$

3.3. Generalización de la ecuación de transporte

La forma 3.4 de la ecuación de transporte está limitada a eventos que podrían describirse como esencialmente localizados en tiempo y espacio, es decir, existe una gran variedad de procesos de transporte en que ya no podemos suponer que el camino libre medio de la partícula es mucho más grande que el rango de las fuerzas de interacción (por ejemplo, un plasma o un gas denso y en nuestro caso la variación estocástica de la velocidad). Para dichos procesos debemos generalizar la forma de la ecuación de transporte, para permitir eventos que no son necesariamente instantáneos ó localizado en el espacio. Entonces la siguiente expresión muestra la forma más general de la ecuación de transporte en una dimensión se puede escribir como:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + v \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{F}{m} \frac{\partial n}{\partial v} = \int_0^t d\tau \int dx \int dv \sum (v' \rightarrow v, x' \rightarrow x, t - \tau) n(x', v', \tau) + \vartheta(x, v, t), \quad (3.10)$$

donde el término de colisión se ha generalizado para tener en cuenta los procesos no localizados. El término $\vartheta(x, v, t)$ que aparece depende del valor inicial y con frecuencia desaparece en el tiempo rápidamente lo suficiente para que pueda ser ignorado.

El kernel $\sum (v' \rightarrow v, x' \rightarrow x, t - \tau)$ representa la colisión o la difusión de las partículas, aunque la expresión explícita para estos kernel pueden escribirse en términos del comportamiento microscópico del medio anfitrión, la determinación de estas cantidades sigue siendo una tarea para nada trivial, y generalmente se aproximan utilizando cálculos, modelados o medidas experimentales. En muchos casos los kernel de colisión o difusión dependerán de forma no lineal de la función de distribución de partículas $n(x, v, t)$ [2].

Capítulo 4

La Ecuación de Kramers-Fokker-Planck (KFP) Generalizada

Bajo condiciones de difusión libre, las propiedades estadísticas del movimiento de una partícula, como es el caso del promedio del cuadrado del desplazamiento, dependen del tiempo por un lado, es decir, no alcanzan un estado estacionario, y por otro lado, exhiben las características de equilibrio del fluido en el que se mueve la partícula. Lo anterior se manifiesta explícitamente en el promedio del cuadrado del desplazamiento, que en una dimensión se expresa como $\langle x^2 \rangle = 2Dt$, donde D es el coeficiente de difusión, que depende de la temperatura del fluido (donde se mueve la partícula), y t es el tiempo. El promedio al cuadrado del desplazamiento es medida conveniente para describir el movimiento errático de una partícula Browniana, además su dependencia con el tiempo t es de gran ayuda para describir la forma en la que las partículas se difunden.

A nivel microscópico una partícula suspendida en un medio se ve sometida al bombardeo continuo de las moléculas de dicho fluido (si suponemos que una sola molécula choca contra la partícula difícilmente podría tener suficiente ímpetu para que la trayectoria de la partícula se vea afectado), entonces cuando un gran número de moléculas chocan con la partícula en la misma dirección y este ímpetu no es cancelado por otras moléculas circundantes, simultáneamente, producen un cambio significativo en la trayectoria. Como ya se mencionó el movimiento Browniano es un efecto aleatorio, la trayectoria de la partícula en suspensión cambia imprescindiblemente en razón de las fluctuaciones arbitrarias de la velocidad de las moléculas circundantes.

Caracterizaremos un proceso de transporte del cual determinaremos la evolución temporal de una distribución de probabilidad $P(x, v, t)$ de que una partícula se encuentre en una posición dada x moviéndose con velocidad v al tiempo t . Por lo tanto debemos de generalizar el concepto de la densidad de partículas, la naturaleza aleatoria de eventos de partículas interactuando nos obliga a introducir un campo de densidades de probabilidad ya que no podemos dar el número exacto de partículas en una región en un tiempo dado sea:

$N(x, t)dx$ = número esperado de partículas en dx sobre x al tiempo t .

Es importante subrayar aquí que $N(x, t)$ caracteriza solo el valor esperado o la densidad de partículas promedio en (x, t) , aunque el conocimiento de la densidad $N(x, t)$ sería suficiente para muchas aplicaciones desafortunadamente no hay ecuación adecuada que describa cuantitativamente y la mayor parte de la física de la situación.

El estado de la partícula puntual clásica puede caracterizarse especificando la posición x y la velocidad v de las partículas entonces definimos la densidad,

$n(x, v, t)dx dv$ = valor esperado de partículas en dx sobre x con velocidad en dv , sobre v al tiempo t

esta función contiene toda la información que es usualmente requerida para descripción de una proceso de transporte, por ejemplo podemos integrar $n(x, v, t)$ en todo el espacio de velocidades, obteniendo la densidad de partículas,

$$N(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} n(x, v, t)dv,$$

en algunos casos especiales $n(x, v, t)$ podría ser fácil de calcular. Por ejemplo, si las partículas están en equilibrio térmico a temperatura T entonces, $n(x, v, t)$ se convierte en la familiar función de distribución de *Maxwell - Boltzman*

$$n(x, v, t) \longrightarrow n_0 M(v) = n_0 \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{mv^2}{2kT} \right\},$$

donde n_0 es la densidad promedio de partículas de un sistema homogéneo.

Para normalizar $n(x, v, t)$ dividiremos por la densidad de partículas $N(x, t)$,

$$P(x, v, t) = \frac{n(x, v, t)}{N(x, t)}$$

esta terminología es útil por que $P(x, v, t)$ se identifica como la probabilidad o función de densidad con la normalización.

$$P(x, v, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{n(x, v, t)}{N(x, t)} dv = 1,$$

lo cual es fácil de demostrar [2]. Si aplicamos este concepto en la ecuación de transporte, sin considerar eventos de colisión 3.5 tendremos como resultado la ecuación de Kramers-Fokker-Planck para una partícula Browniana correspondiente a la descripción de Langevin (fuerzas de arrastre y fluctuante):

$$\frac{\partial P}{\partial t} + v \frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} D_v + \frac{\partial}{\partial v} (v\gamma P), \quad (4.1)$$

donde γ es el coeficiente de fricción de las moléculas del fluido y D_v es el coeficiente de difusión con unidades [*velocidad*² *tiempo*⁻¹], el cual depende de la temperatura, de la viscosidad y del tamaño o forma del fluido, en pocas palabras D_v , representa la facilidad con la que una partícula Browniana se moverá a través del medio. Los términos del lado derecho de la ecuación representan el término fluctuante y el término de arrastre respectivamente.

Resolveremos la ecuación 4.1 usando la transformada de Fourier cambiando la variable x por su variable conjugada de Fourier k , aplicando la transformada de ambos lados de la ecuación obtenemos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\partial P}{\partial t} + v \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v} (-v\gamma P) \right) e^{-ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial^2 P}{\partial v^2} D_v e^{-ikx},$$

entonces:

$$\frac{\partial P_k}{\partial t} + ikvP_k - \gamma \left(P_k + v \frac{\partial P_k}{\partial v} \right) = D_v \frac{\partial^2 P_k}{\partial v^2},$$

donde P_k representa la transformada de Fourier, de $P(x, v, t)$ denotando k como la variable conjugada, si aplicamos de nuevo la transformada de Fourier pero ahora cambiando la variable v por β siendo esta su variable conjugada de Fourier, en ambos lados de la ecuación resulta:

$$\frac{\partial P_{k,\beta}}{\partial t} + (\beta\gamma - k) \frac{\partial P_{k,\beta}}{\partial \beta} = -\beta^2 D_v P_{k,\beta},$$

la ecuación anterior se puede resolver con el método de características ya que es una ecuación diferencial parcial de primer orden entonces interpretando que la derivada total con respecto al tiempo de $P_{k,\beta}$ es:

$$\frac{dP_{k,\beta}}{dt} = \frac{\partial P_{k,\beta}}{\partial t} + \frac{dk}{dt} \frac{\partial P_{k,\beta}}{\partial k} + \frac{d\beta}{dt} \frac{\partial P_{k,\beta}}{\partial \beta},$$

identificamos que:

$$\frac{dk}{dt} = 0 \quad (4.2)$$

$$\frac{d\beta}{dt} = (\beta\gamma - k), \quad (4.3)$$

$$\frac{dP_{k,\beta}}{dt} = -\beta^2 D_v P_{k,\beta}, \quad (4.4)$$

cuya solución de la primera ecuación es $k(t) = k_0 = cte$, La solución de la segunda ecuación diferencial la podemos encontrar con el método del factor integrante

$$\beta(t) = e^{\gamma t} \left(\beta_0 - \frac{k}{\gamma} \right) + \frac{w}{\gamma}. \quad (4.5)$$

Lo que sigue es sustituir la anterior ecuación en la ecuación (4.4)

$$\frac{dP_{k,\beta}}{dt} = - \left[e^{\gamma t} \left(\beta_0 - \frac{k}{\gamma} \right) + \frac{k}{\gamma} \right]^2 D_v P_{k,\beta}, \quad (4.6)$$

haciendo un poco de álgebra a la ecuación anterior :

$$\frac{dP_{k,\beta}}{dt} = - \left[e^{2\gamma t} \left(\beta_0 - \frac{k}{\gamma} \right)^2 + 2e^{\gamma t} \left(\beta_0 - \frac{k}{\gamma} \right) \frac{k}{\gamma} + \frac{k^2}{\gamma^2} \right] D_v P_{k,\beta},$$

ó equivalentemente,

$$\frac{dP_{k,\beta}}{P_{k,\beta}} = - \left[e^{2\gamma t} \left(\beta_0 - \frac{k}{\gamma} \right)^2 + 2e^{\gamma t} \left(\beta_0 - \frac{k}{\gamma} \right) \frac{k}{\gamma} + \frac{k^2}{\gamma^2} \right] D_v dt,$$

la cual puede integrarse inmediatamente obteniéndose

$$\ln \left(\frac{P_{k,\beta}}{P_{(0)k,\beta}} \right) = -D_v \left[\frac{\left(\beta_0 - \frac{k}{\gamma} \right)^2}{2\gamma} (e^{2\gamma t} - 1) + \frac{2k \left(\beta_0 - \frac{k}{\gamma} \right)}{\gamma^2} (e^{\gamma t} - 1) + \frac{k^2}{\gamma^2} t \right], \quad (4.7)$$

donde $P_{(0)k,\beta}$ es la condición inicial para P , Ahora para tener a $P_{k,\beta}$ en términos de w, β, t (ver apéndice B) de la ecuación (4.5) y sustituimos en (4.7)

$$\ln \left(\frac{P_{k,\beta}}{P_{(0)k,\beta}} \right) = -D_v \left[\frac{\left(\beta - \frac{k}{\gamma} \right)^2}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) + \frac{2k}{\gamma^2} \left(\beta - \frac{k}{\gamma} \right) (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{k^2}{\gamma^2} t \right],$$

de las cual de obtiene $P_{k,\beta}(k, \beta, t)$:

$$P_{k,\beta}(k, \beta, t) = P_{(0)k,\beta} \exp \left[- \left\{ D_v \frac{\left(\beta - \frac{k}{\gamma} \right)^2}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) + \frac{2k}{\gamma^2} \left(\beta - \frac{k}{\gamma} \right) (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{k^2}{\gamma^2} t \right\} \right], \quad (4.8)$$

donde $P_{(0)k,\beta}$ se refiere a la condición inicial a $t = 0$. La expresión (4.8) corresponde a la función característica de $P(x, v, t)$,

$$F(k, \beta, t) = \exp \left\{ -D_v \left[\frac{\left(\beta - \frac{k}{\gamma} \right)^2}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) + \frac{2k}{\gamma^2} \left(\beta - \frac{k}{\gamma} \right) (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{k^2}{\gamma^2} t \right] \right\}, \quad (4.9)$$

cabe mencionar que en el caso donde se consideran deltas de Dirac para las condiciones iniciales, la ecuación (4.9) correspondería a su función característica.

Usaremos la ecuación (4.9) para calcular el promedio al cuadrado del desplazamiento y el promedio al cuadrado de la velocidad, $\langle x^2 \rangle$ y $\langle v^2 \rangle$ respectivamente, siendo estos el segundo momento de cada una de las variables aleatorias que tenemos en la ecuación. Primero encontramos el primer momento de $\langle x \rangle$, al ser β es la variable conjugada de Fourier para v podemos ver que si $\beta = 0$, lo que significa en la ecuación (4.9) que estamos integrando sobre todas las velocidades en la inversa de Fourier-Laplace de F , facilitándonos así los cálculos para los momentos del desplazamiento x .

$$F_k = \exp \left\{ -k^2 D_v \left[\frac{1}{2\gamma^3} (1 - e^{-2\gamma t}) - \frac{2}{\gamma^3} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma^2} t \right] \right\},$$

obteniendo el promedio del desplazamiento:

$$\frac{dF_k}{dk} = -2kD_v \left[\frac{1}{2\gamma^3} (1 - e^{-2\gamma t}) - \frac{2}{\gamma^3} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma^2} t \right] * \exp \left(-D_v k^2 \left[\frac{1}{2\gamma^3} (1 - e^{-2\gamma t}) - \frac{2}{\gamma^3} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma^2} t \right] \right),$$

en $k = 0$ tenemos que:

$$\frac{dF_k}{dk} = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle x \rangle = 0,$$

derivando de nuevo obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F_k}{dk^2} &= -2D_v \left[\frac{1}{2\gamma^3} (1 - e^{-2\gamma t}) - \frac{2}{\gamma^3} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma^2} t \right] * \\ &\quad \exp \left(-k^2 D_v \left[\frac{1}{2\gamma^3} (1 - e^{-2\gamma t}) - \frac{2}{\gamma^3} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma^2} t \right] \right) \\ &+ \left[2kD_v \left\{ \frac{1}{2\gamma^3} (1 - e^{-2\gamma t}) - \frac{2}{\gamma^3} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma^2} t \right\} \right]^2 * \\ &\quad \exp \left(-k^2 D_v \left[\frac{1}{2\gamma^3} (1 - e^{-2\gamma t}) - \frac{2}{\gamma^3} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma^2} t \right] \right), \end{aligned}$$

de igual forma haciendo $k = 0$ tenemos que:

$$\left[\frac{d^2 F_k}{dk^2} \right]_{k=0} = -2D_v \left[\frac{1}{2\gamma^3} (1 - e^{-2\gamma t}) - \frac{2}{\gamma^3} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma^2} t \right],$$

y teniendo en cuenta que para la ecuación característica $\frac{d^2 F_k}{dk^2} = -\langle x^2 \rangle$ para $k = 0$, por lo tanto el promedio al cuadrado del desplazamiento es:

$$\langle x^2 \rangle = 2D_v \left[\frac{1}{2\gamma^3} (1 - e^{-2\gamma t}) - \frac{2}{\gamma^3} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma^2} t \right],$$

realizando la aproximación a tiempos largos $\gamma t \gg 1$, tenemos que el segundo momento:

$$\langle x^2 \rangle \longrightarrow \frac{2tD_v}{\gamma^2}, \quad (4.10)$$

es decir, el promedio al cuadrado del desplazamiento aumenta linealmente con el tiempo por lo tanto, la difusión es normal. Haremos lo mismo pero ahora con la velocidad v ,

cambiando v por β y a x por k con la transformada de Fourier. Tomando los desarrollos en series de Taylor de las exponencial, es decir, tomaremos la aproximación a tiempos cortos para el promedio al cuadrado del desplazamiento esto es:

$$e^{-2\gamma t} = 1 - 2\gamma t + 2\gamma^2 t^2 - 4\gamma^3 t^3/3 + \dots$$

$$e^{-\gamma t} = 1 - \gamma t + \gamma^2 t^2/2 - \gamma^3 t^3/6 + \dots,$$

tomando hasta el cuarto término de la expansión y lo sustituimos en la expresión del promedio al cuadrado del desplazamiento resulta:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{3} t^3 D_v, \quad (4.11)$$

para poder calcular el promedio al cuadrado de la velocidad lo que haremos ahora será poner a $k = 0$ para facilitarnos los cálculos para los momentos de v .

$$F_{k,\beta}(k = 0, \rho, t) = \exp\left(-\left[\frac{\rho^2 D_v}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})\right]\right),$$

Derivando con respecto de β :

$$\frac{dF_{k,\beta}(w = 0, \beta, t)}{d\beta} = -F_{(0)k,\beta} \left(\frac{\beta D_v}{\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})\right) \exp\left(-\left[\frac{\rho^2 D_v}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})\right]\right),$$

haciendo $\beta = 0$ tenemos que el primer momento resulta ser:

$$\langle v \rangle = 0,$$

ahora derivamos de nuevo con respecto de ρ resultando:

$$\begin{aligned} \frac{d^2[F_{k,\beta}]_{k=0}}{d\rho^2} = & -\frac{D_v (1 - e^{-2\gamma t})}{\gamma} \exp\left\{-\frac{\beta^2 D_v}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})\right\} + \\ & \left[\frac{\beta D_v}{\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})\right]^2 \exp\left\{-\left[\frac{\beta^2 D_v}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})\right]\right\}, \end{aligned}$$

y haciendo $\beta = 0$ tenemos que:

$$\frac{d^2[F_{k,\beta}]_{k=0}}{d\rho^2} = -\left[\frac{D_v}{\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})\right],$$

por lo tanto:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{D_v (1 - e^{-2\gamma t})}{\gamma},$$

para la aproximación de tiempos largos $\gamma t \gg 1$ tenemos que la velocidad cuadrática media tiene la siguiente forma:

$$\langle v^2 \rangle \longrightarrow \frac{D_v}{\gamma}, \quad (4.12)$$

la cual es una constante y la definiremos como

$$v_0^2 = \frac{D_v}{\gamma},$$

Ecuación de KFP como un caso particular de la caminata aleatoria con velocidad estocástica

Recordemos la siguiente expresión obtenida por medio de la ecuación de transporte (Kramers-Fokker-Planck):

$$P_{k,\rho} = P_{(0)k,\rho} \exp \left\{ - \left[\frac{\left(\rho - \frac{k}{\gamma}\right)^2}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) + \frac{2k}{\gamma^2} \left(\rho - \frac{k}{\gamma}\right) (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{k^2}{\gamma^2} t \right] D_v \right\},$$

haciendo a $\rho = 0$ ya que al hacer esto en el espacio de Fourier-Laplace, es como si $v \rightarrow \infty$ entonces obtenemos:

$$P_k(k, t) = P_{(0)k} \exp \left\{ - \left[\frac{k^2}{2\gamma^3} (1 - e^{-2\gamma t}) - 2 \left(\frac{k^2}{\gamma^3}\right) (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{k^2}{\gamma^2} t \right] D_v \right\},$$

ahora haciendo $\gamma t \gg 1$ para tiempos largos tenemos que:

$$P_k(k, t) = P_{(0)k} \exp \left\{ - \left[\frac{k^2}{\gamma^2} t - \frac{3k^2}{2\gamma^3} \right] D_v \right\},$$

despreciando el término $\frac{3k^2}{2\gamma^3}$. Aplicamos la transformada de Laplace a la anterior expresión:

$$P_{k,\rho}(k, \rho) = P_{(0)x} \int_0^\infty dt \exp \left\{ -t \left(\frac{k^2 D_v}{\gamma^2} + \rho \right) \right\},$$

sea $u = -t \left(\frac{k^2 D_v}{\gamma^2} + \rho \right)$ entonces $du = - \left(\frac{k^2 D_v}{\gamma^2} + \rho \right) dt \Rightarrow dt = \frac{-du}{\left(\frac{k^2 D_v}{\gamma^2} + \rho \right)}$ entonces

la integral es:

$$P_{k,\rho}(k, \rho) = \frac{P_{(0)k}}{\rho + \frac{k^2 D_v}{\gamma^2}}.$$

Al comparar este resultado con la ecuación 1.9 nos damos cuenta que al poner la siguientes relaciones, $\tau_0 = \gamma^{-1}$ y $v_0^2 = \frac{D_v}{\gamma}$ tendríamos exactamente la misma ecuación hay que resaltar que para poder llegar estas dos ecuaciones se tomaron en cuenta las mismas restricciones (tiempos largos, Fourier-Laplace, etc.)

$$P_{k,\rho} = \frac{P_{(0)k}}{\rho + k^2 \tau_0 v_0^2} \quad n_{k\rho} = \frac{n_{0,k}}{\rho + k^2 \tau_0 v_0^2}. \quad (4.13)$$

4.1. Kramers-Fokker-Planck Generalizada

La ecuación 4.14 es una generalización de la ecuación 4.1 dicha generalización es obtenida a través la ecuación 3.10 (sin considerar el término de colisión) aparece una función (o kernel) $\phi(t-s)$ donde dicha función es definida a partir del fenómeno de transporte (para eventos no localizados) que se quiera estudiar, lo tomaremos como una función de memoria en el tiempo, es decir, las transiciones o saltos hechos con anterioridad repercutirán en la evolución del sistema para las siguientes transiciones.

$$\frac{\partial P}{\partial t} + v \frac{\partial P}{\partial x} = \int_0^t ds \left[\frac{\partial}{\partial v} v \gamma P + \frac{\partial^2}{\partial v^2} D_v P \right] \phi(t-s), \quad (4.14)$$

en la ecuación 4.14, dado que no tenemos explícitamente la forma de la función $\phi(t-s)$, no la podremos resolver exactamente ya que los efectos no locales antes mencionados dependen del sistema que queramos describir, para ello aproximaremos la solución con la ayuda de los polinomios de Hermite

$$H_n(v/v_0) = (-1)^n e^{v^2/v_0^2} \frac{\partial^n}{\partial (v/v_0)^n} e^{-v^2/v_0^2} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.15)$$

se puede notar que se tiene un cambio de variable para adimensionar la expresión de los polinomios de Hermite. Elegimos los polinomios de Hermite ya que forman un sistema completo, y buscamos soluciones con condiciones de frontera naturales correctas en el espacio de velocidad $-\infty < v < \infty$, está es la principal ventaja con otros conjuntos completos.

Proponemos la como solución a la siguiente expansión:

$$P(x, v, t) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x, t) H_n(v/v_0) e^{-v^2/v_0^2}, \quad (4.16)$$

donde $v_0^2 = D_v/\gamma$, al sustituir la solución en la ecuación 4.16

$$\sum_{n=0}^{\infty} H_n e^{-v^2/v_0^2} \left(\frac{\partial P_n}{\partial t} + v \frac{\partial P_n}{\partial x} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^t ds \phi(t-s) P_n \left[\frac{\partial}{\partial v} \gamma v H_n e^{-v^2/v_0^2} + \frac{\partial^2}{\partial v^2} D_v H_n e^{-v^2/v_0^2} \right],$$

multiplicamos por $H_m(v)$ he integramos en las velocidades:

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dv H_m H_n e^{-v^2/v_0^2} \left(\frac{\partial P_n}{\partial t} + v \frac{\partial P_n}{\partial x} \right) = \\ & \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^t ds \phi(t-s) P_n \left[\gamma \int_{-\infty}^{\infty} dv H_m \frac{\partial}{\partial v} v H_n e^{-v^2/v_0^2} + D_v \int_{-\infty}^{\infty} dv H_m \frac{\partial^2}{\partial v^2} H_n e^{-v^2/v_0^2} \right], \end{aligned} \quad (4.17)$$

realizamos las integrales por separado:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv H_m \frac{\partial}{\partial v} v H_n e^{-v^2/v_0^2} = - \int_{-\infty}^{\infty} dv H'_m H_n v e^{-v^2/v_0^2}, \quad (4.18)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv H_m \frac{\partial^2}{\partial v^2} H_n e^{-v^2/v_0^2} = - \int_{-\infty}^{\infty} dv H'_m \frac{\partial}{\partial v} H_n e^{-v^2/v_0^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dv H''_m H_n e^{-v^2/v_0^2}, \quad (4.19)$$

sustituyendo las ecuaciones 4.18 y 4.19 en 4.17

$$\sum_{n=0}^{\infty} \int_0^t ds \phi(t-s) P_n \left[-\gamma \int_{-\infty}^{\infty} dv H'_m H_n v e^{-v^2/v_0^2} + D_v \int_{-\infty}^{\infty} dv H''_m H_n e^{-v^2/v_0^2} \right],$$

ahora sabemos que las relaciones de recurrencia de la derivada del polinomio de Hermite son las siguientes:

$$\begin{aligned} v_0 H'_m &= 2m H_{m-1}, \\ v_0^2 H''_m &= \frac{4vm H_{m-1}}{v_0} - 2m H_m, \end{aligned} \quad (4.20)$$

Observamos que, si bien sólo tiene sentido considerar polinomios de Hermite con índice positivo, las expresiones 4.20 puede ser extendida a $n = 0$, aunque haga parecer un factor $H(v)_{-1}$. En general, las relaciones recurrencia que obtendremos pueden considerarse válidas para cualquier índice entero, adoptando la convención de que los polinomios con subíndices negativos tienen el valor cero.

Utilizando las relaciones de recurrencia el lado derecho de la ecuación es:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \int_0^t ds \phi(t-s) P_n \left[\left(\frac{4mD_v}{v_0^2} - 2m\gamma \right) \int_{-\infty}^{\infty} dv \frac{v}{v_0} H_{m-1} H_n e^{-v^2/v_0^2} - \frac{2mD_v}{v_0^2} \int_{-\infty}^{\infty} dv H_m H_n e^{-v^2/v_0^2} \right],$$

donde las siguientes integrales son las relaciones de ortogonalidad de los polinomios de Hermite con la función de peso e^{v^2/v_0^2} :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dv \frac{v}{v_0} H_{m-1} H_n e^{-v^2/v_0^2} &= \sqrt{\pi} 2^{n-1} n! \delta_{m-1, n-1} + \sqrt{\pi} 2^n (n+1)! \delta_{m-1, n+1}, \\ \int_{-\infty}^{\infty} dv H_m H_n e^{-v^2/v_0^2} &= \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{n, m}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

por lo tanto el lado derecho de la ecuación 4.17 es:

$$\begin{aligned} &\sum_{n=0}^{\infty} \int_0^t ds \phi(t-s) 2m P_n * \\ &\left[\left(\frac{2D_v}{v_0^2} - \gamma \right) \left(\sqrt{\pi} 2^{n-1} n! \delta_{m-1, n-1} + \sqrt{\pi} 2^n (n+1)! \delta_{m-1, n+1} \right) - \left(\frac{2mD_v}{v_0^2} \right) \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{n, m} \right], \end{aligned}$$

ahora trabajemos el lado izquierdo de la ecuación 4.17:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial P_n}{\partial t} (\sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{n, m}) + \frac{\partial P_n}{\partial x} v_0 (\sqrt{\pi} 2^{n-1} n! \delta_{m, n-1} + \sqrt{\pi} 2^n (n+1)! \delta_{m, n+1}),$$

por lo tanto el lado izquierdo de 4.17 es:

$$\frac{\partial P_m}{\partial t} \sqrt{\pi} 2^m m! + \frac{\partial P_{m+1}}{\partial x} v_0 (\sqrt{\pi} 2^m (m+1)!) + \frac{\partial P_{m-1}}{\partial x} v_0 (\sqrt{\pi} 2^{m-1} (m)!),$$

simplificando ambos lados de la ecuación tenemos que la ecuación 4.17 es:

$$\frac{\partial P_m}{\partial t} + \frac{\partial P_{m+1}}{\partial x} v_0 (m+1) + \frac{1}{2} v_0 \frac{\partial P_{m-1}}{\partial x} = \int_0^t ds \phi(t-s) \left[\frac{1}{2} \left(\frac{2D_v}{v_0^2} - \gamma \right) P_{m-2} - \gamma m P_m \right], \quad (4.22)$$

para $m = 0$

$$\frac{\partial P_0}{\partial t} + \frac{\partial P_1}{\partial x} = 0,$$

para $m = 1$

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} + v_0 \frac{\partial P_2}{\partial x} (2) + \frac{v_0}{2} \frac{\partial P_0}{\partial x} = - \int_0^t ds \phi(t-s) P_1 [\gamma],$$

para $m = 2$

$$\frac{\partial P_2}{\partial t} + v_0 \frac{\partial P_3}{\partial x} + \frac{v_0}{2} \frac{\partial P_1}{\partial x} = \int_0^t ds \phi(t-s) \left[\frac{1}{2} \left(\frac{2D_v}{v_0^2} - \gamma \right) P_0 + 2\gamma P_2 \right],$$

⋮

podemos observar que en $m = 0$ la ecuación obtenida es idéntica a la forma diferencial de la ecuación de continuidad donde el segundo término representa la masa que sale por unidad de tiempo a través de la superficie de un volumen y el primer término representa la variación de masa por unidad de tiempo.

Transformamos la ecuación 4.22 con ayuda de la transformada de Fourier intercambiando así la coordenada espacial x por k siendo esta la variable conjugada de Fourier:

$$\bar{P}_m + \bar{P}_{m+1} ikv_0(m+1) + \frac{ikv_0}{2} \bar{P}_{m-1} = \int_0^t ds \phi(t-s) \left[\frac{1}{2} \left(\frac{2D_v}{v_0^2} - \gamma \right) \bar{P}_{m-2} - \gamma m \bar{P}_m \right]. \quad (4.23)$$

Ahora aplicaremos la transformada de Laplace en la ecuación 4.23 intercambiando a t por ρ siendo la variable conjugada de Laplace

$$\rho \hat{P}_m - C_m + \hat{P}_{m+1} ikv_0(m+1) + \frac{ikv_0}{2} \hat{P}_{m-1} = \widehat{\phi(t)} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{2D_v}{v_0^2} - \gamma \right) \hat{P}_{m-2} - \gamma m \hat{P}_m \right], \quad (4.24)$$

donde $\hat{P} = \hat{P}(\rho, k)$ y $\bar{P}_m(0) = C_m$. Ahora resolvemos para $m = 0, 1$ entonces no consideraremos \hat{P}_2 resultando:

$m = 0$

$$\rho \hat{P}_0 - C_0 + \hat{P}_1 ikv_0 = 0, \quad (4.25)$$

$m = 1$

$$\rho \hat{P}_1 + \frac{ikv_0}{2} \hat{P}_0 = -\gamma \widehat{\phi(t)} \hat{P}_1, \quad (4.26)$$

entonces tenemos un sistema de ecuaciones 4.25 y 4.26. De 4.25 tenemos que:

$$\hat{P}_1 = \frac{C_0 - \rho \hat{P}_0}{ikv_0}, \quad (4.27)$$

ahora sustituimos 4.27 en 4.26, despejamos \hat{P}_0 :

$$\hat{P}_0 = \frac{C_0}{\rho - \frac{k^2 v_0^2}{2[\rho + \hat{\phi}\gamma]}},$$

calculamos la segunda derivada de \hat{P}_0 y en $k = 0$ resulta:

$$\frac{\partial^2 \hat{P}_0}{\partial k^2} = -\frac{C_0}{\rho^2 [\hat{\phi}\gamma - \rho]},$$

por lo tanto, el promedio al cuadrado del desplazamiento es:

$$\langle x^2 \rangle_0 = \frac{C_0 v_0^2}{\rho^2 [\hat{\phi}\gamma - \rho]}. \quad (4.28)$$

Consideramos de nuevo la ecuación 4.24 pero ahora tomaremos en cuenta $m = 0, 1, 2$ sin tomar en cuenta a \hat{P}_3 , Entonces tenemos el siguiente sistema de ecuaciones: $m = 0$

$$\hat{P}_1 = \frac{C_0 - \rho \hat{P}_0}{i k v_0}, \quad (4.29)$$

$m = 1$

$$(\rho - \hat{\phi}\gamma) \hat{P}_1 + 2i k v_0 \hat{P}_2 + \frac{i k v_0}{2} \hat{P}_0 = 0, \quad (4.30)$$

$m = 2$

$$(\rho + 2\hat{\phi}\gamma) \hat{P}_2 - C_2 + \frac{i k v_0}{2} \hat{P}_1 - \frac{\hat{\phi}}{2} \left[\frac{2D_v}{v_0^2} - \gamma \right] \hat{P}_0 = 0, \quad (4.31)$$

sustituimos 4.29 en 4.31, despejando \hat{P}_2 :

$$\hat{P}_2 = \frac{2C_2 - C_0 + \hat{P}_0 \left(\rho + \hat{\phi} \left[\frac{2D_v}{v_0^2} - \gamma \right] \right)}{2(\rho + 2\hat{\phi}\gamma)}, \quad (4.32)$$

sustituimos 4.29 y 4.32 en 4.30, despejando \hat{P}_0 :

$$\hat{P}_0 = \frac{2C_0 (\rho + \hat{\phi}\gamma) (\rho + 2\hat{\phi}\gamma) - 2k^2 v_0^2 (2C_2 - C_0)}{2\rho (\rho + \hat{\phi}\gamma) (\rho + 2\hat{\phi}\gamma) + k^2 v_0^2 (3\rho + 4\hat{\phi}\gamma)}, \quad (4.33)$$

de igual manera calculamos la segunda derivada y evaluando en $k = 0$ obtenemos:

$$\left[\frac{\partial^2 \widehat{P}_0}{\partial k^2} \right]_{k=0} = - \left[\frac{(4C_2 - C_0) v_0^2}{\rho(\rho + \widehat{\phi}\gamma)(\rho + 2\widehat{\phi}\gamma)} + \frac{2v_0^2 C_0}{\rho^2(\rho + \widehat{\phi}\gamma)} \right],$$

por lo tanto el promedio al cuadrado para el desplazamiento con $m = 0, 1, 2$ es:

$$\langle \widehat{x}^2 \rangle_0 = \left[\frac{(4C_2 - C_0) v_0^2}{\rho(\rho + \widehat{\phi}\gamma)(\rho + 2\widehat{\phi}\gamma)} + \frac{2v_0^2 C_0}{\rho^2(\rho + \widehat{\phi}\gamma)} \right]. \quad (4.34)$$

Determinación de la condición inicial

Tenemos que la condición inicial C_m puede ser calculada de la siguiente forma. Primero sabemos que:

$$P(x, v, t) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x, t) H_n(v) e^{-v^2/v_0^2},$$

entonces para $t = 0$

$$P(x, v, t = 0) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x, t = 0) H_n(v) e^{-v^2/v_0^2},$$

entonces multiplicamos ambos lados de la ecuación por $H_m(v)$ e integramos sobre todas las velocidades:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv H_m P(x, v, t = 0) = \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dv H_m P_n(x, t = 0) H_n(v) e^{-v^2/v_0^2},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dv H_m P(x, v, t = 0) = 2^m \sqrt{\pi} m! P_n(x, t = 0),$$

Realizando la transformada de Fourier intercambiando x por su variable conjugada de Fourier k :

$$C_m = \frac{1}{2^m \sqrt{\pi} m!} \int_{-\infty}^{\infty} dv H_m \widehat{P}(k, v, 0).$$

Ejemplos de condiciones iniciales

Gaussiana de equilibrio.

Supongamos que $P(x, v, 0) = \delta(x)g(v)$ y con la Transformada de Fourier $\widehat{P}(k, v, 0) = g(v)$

:

$$C_m = \frac{1}{2^m \sqrt{\pi} m!} \int_{-\infty}^{\infty} dv H_m(v) g(v),$$

consideremos que $g(v) = \frac{e^{-v^2/2v_0^2}}{\sqrt{2\pi}v_0}$, que es la Gaussiana de equilibrio, al sustituir tenemos que:

$$C_m = \frac{1}{2^m \sqrt{\pi} m!} \int_{-\infty}^{\infty} dv H_m(v) \frac{e^{-v^2/2v_0^2}}{\sqrt{2\pi}v_0},$$

por lo tanto:

$$C_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \quad C_2 = \frac{1}{4\sqrt{\pi}}. \quad (4.35)$$

Deltas de Dirac.

Consideremos que las condiciones iniciales son de la forma $P(x, v, 0) = \delta(x)\delta(v)$, por lo tanto:

$$C_m = \frac{1}{2^m \sqrt{\pi} m!} \int_{-\infty}^{\infty} dv H_m(v) \delta(v),$$

entonces las condiciones iniciales resultantes son:

$$C_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \quad C_2 = -\frac{1}{4\sqrt{\pi}} \quad (4.36)$$

4.2. Promedio al cuadrado del desplazamiento (PCD) de la ecuación Kramers-Fokker-Planck Generalizada

Primero consideremos la solución 4.16 propuesta para la ecuación de Kramers-Fokker-Planck si calculamos el promedio al cuadrado del desplazamiento (PCD, por sus siglas) directamente de la solución tenemos que:

$$\langle x^2 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 P_n(x, t) \int_{-\infty}^{\infty} dv H_n(v) e^{-v^2/v_0^2}, \quad (4.37)$$

entonces notamos que el término del lado derecho de 4.37 es de la siguiente forma

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \langle x^2 \rangle_n f_n = \langle x^2 \rangle_0 f_0 + \langle x^2 \rangle_1 f_1 + \langle x^2 \rangle_2 f_2 + \dots, \quad (4.38)$$

donde

$$\langle x^2 \rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 P_n(x, t),$$

y f_n el resultado al integrar los polinomios de Hermite,

$$f_n = \int_{-\infty}^{\infty} dv H_n(v) e^{-v^2/v_0^2},$$

a partir de la relación de ortogonalidad 4.21, se puede demostrar que:

$$f_n = \sqrt{\pi} \delta_{n,0},$$

por lo tanto la ecuación 4.37 se puede escribir como:

$$\langle x^2 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle x^2 \rangle_n f_n = \langle x^2 \rangle_0 \sqrt{\pi}. \quad (4.39)$$

4.2.1. Promedio al cuadrado del desplazamiento de la ecuación de Kramers-Fokker-Planck 4.14

Consideremos el promedio al cuadrado del desplazamiento 4.34, para la expansión hasta el tercer término de 4.14:

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_0 = \left[\frac{(4C_2 - C_0) v_0^2}{\rho (\rho + \hat{\phi} \gamma) (\rho + 2\hat{\phi} \gamma)} + \frac{2v_0^2 C_0}{\rho^2 (\rho + \hat{\phi} \gamma)} \right],$$

supongamos que ϕ es de la forma $\phi = \delta(t)$, entonces la transformada de Laplace es: $\hat{\phi} = 1$, si sustituimos este valor y calculamos la inversa de Laplace, la ecuación 4.34 es:

$$\langle x^2 \rangle_0 = \frac{(4C_2 - C_0) v_0^2}{\gamma^2} \left[e^{-\gamma t} \left(\frac{e^{-\gamma t}}{2} - 1 \right) + \frac{1}{2} \right] + \frac{2C_0 v_0^2}{\gamma^2} [e^{-\gamma t} - 1 + \gamma t], \quad (4.40)$$

por otro lado al sustituir las condiciones iniciales 4.35 mostradas con anterioridad tenemos que:

$$\langle x^2 \rangle_0 = \frac{2v_0^2}{\gamma^2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\gamma t + e^{-\gamma t} - 1), \quad (4.41)$$

para tiempos largos tenemos que:

$$\langle x^2 \rangle_0 \rightarrow \frac{2v_0^2}{\gamma^2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} (\gamma t) = \frac{2D_v}{\sqrt{\pi} \gamma^2} t,$$

por lo tanto el PCD total a tiempos largos es

$$\langle x^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_0 \sqrt{\pi} = \frac{2D_v}{\gamma^2} t,$$

aquí nos damos cuenta que el PCD obtenida con $\phi(t-s) = \delta(t)$ converge a el 4.10 obtenido de KFP en su forma estándar lo que quiere decir que la aproximación para $m = 0, 1, 2$ es suficientemente precisa, ya que si los coeficientes de arrastre y difusión no dependen del tiempo entonces tenemos que la solución límite, es la solución estacionaria de la ecuación KFP, es decir, si tenemos dos soluciones distintas a tiempos largos estas dos funciones coinciden

Para tiempos cortos usando la serie de Taylor para la exponencial a segundo orden, tenemos que:

$$\langle x^2 \rangle \rightarrow \langle x^2 \rangle_0 \sqrt{\pi} = v_0^2 t^2, \quad (4.42)$$

el anterior resultado se puede recuperar con la ecuación 4.8, la cual es la solución a la ecuación de KFP estándar, si la condición inicial es tomada al igual que 4.35, donde se considera una delta en la coordenada espacial x y una Gaussiana de equilibrio para la velocidad v .

Por otro lado al considerar el resultado con las condiciones iniciales 4.36 que es el resultado de considerar dos deltas de Dirac, entonces el PCD 4.34 es:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{3} t^3 D_v,$$

donde notamos que si consideramos deltas en las condiciones iniciales y en la función ϕ recuperamos la forma de la ecuación 4.1 y por lo tanto recuperamos la forma del PCD tanto para tiempos cortos como para tiempos largos.

4.2.2. Memoria Exponencial

Consideremos una memoria de tipo exponencial tal que $\phi(t-s) = \alpha e^{-\alpha(t-s)}$ ya que podemos considerarla como un modelo adecuado para la distribución de probabilidad del tiempo de espera entre dos hechos, transformando la al espacio de Laplace tenemos que:

$$\hat{\phi} = \frac{\alpha}{\alpha + \rho},$$

entonces considerando el promedio al cuadrado del desplazamiento,

$$\langle \hat{x}^2(\rho) \rangle = \left[\frac{(4C_2 - C_0) v_0^2 (\rho + \alpha)^2}{\rho [\rho (\rho + \alpha) + \alpha \rho] [\rho (\rho + \alpha) + 2\alpha \gamma]} + \frac{2C_0 v_0^2 (\rho + \alpha)}{\rho^2 [\rho (\rho + \alpha) + \alpha \gamma]} \right],$$

con las condiciones iniciales usadas con anterioridad

$$\langle \hat{x}^2(\rho) \rangle = \frac{2v_0^2(\rho + \alpha)}{\rho^2 [\rho(\rho + \alpha) + \alpha\gamma]},$$

encontrando la inversa de Laplace de dicha expresión:

$$\langle x^2(t) \rangle = 2v_0^2 \int_0^t (t - \tau) \left[e^{-\frac{\alpha\tau}{2}} \cos(b\tau) + \sin(b\tau) \right] d\tau$$

donde $b^2 = \alpha(\gamma - \frac{\alpha}{4})$, entonces, para tiempos largos tenemos que:

$$\langle x^2(t) \rangle \longrightarrow 2v_0^2 \left[\frac{t}{\gamma} \right] = \frac{2D_v}{\gamma^2} t, \quad (4.43)$$

para tiempos cortos:

$$\langle x^2(t) \rangle \longrightarrow 2v_0^2 t^2 = \frac{D_v}{\gamma} t^2, \quad (4.44)$$

cabe resaltar que para la ecuación 4.43 tenemos que la condición para b debe de ser positiva para no tener soluciones de forma imaginarias, entonces si tenemos que α ("concentración inicial") es más significativo en cortos periodos de tiempo, la constante de arrastre γ debe de cumplir que $\gamma > \frac{\alpha}{4}$ para que las soluciones sean no sean irracionales.

4.2.3. Ley de potencias

Consideremos a la función $\phi(t-s) = \gamma^{\alpha+1}(t-s)^\alpha$ como una ley de potencias, calculando la transformada de Laplace tenemos que:

$$\hat{\phi}(\rho) = \gamma^{\alpha+1} \Gamma(\alpha) \rho^{-(\alpha+1)} \quad \alpha > -1,$$

entonces para encontrar la expresión para el promedio al cuadrado del desplazamiento sustituimos el anterior resultado en 4.34 y considerando las condiciones iniciales de la sección 4.1 tenemos que:

$$\langle \hat{x}^2(\rho) \rangle = \left[\frac{2v_0^2}{\rho^2(\rho + \gamma^{\alpha+2} \Gamma(\alpha) \rho^{-(\alpha+1)})} \right],$$

si hacemos la siguiente aproximación ($\rho \rightarrow 0$) lo que significa que ($t \rightarrow \infty$)¹, es decir, tendremos la aproximación para tiempos largos la cual es:

$$\langle \hat{x}^2(\rho) \rangle \rightarrow \left[\frac{2v_0^2}{\rho^2 (\gamma^{\alpha+2} \Gamma(\alpha) \rho^{-(\alpha+1)})} \right], \quad (4.45)$$

calculando la transformada inversa de Laplace de la ecuación 4.2.3,

$$\langle x^2(t) \rangle \rightarrow \left[\frac{2t^{-\alpha} v_0^2}{\gamma^{\alpha+2} \Gamma(\alpha) \Gamma(1-\alpha)} \right] \quad \alpha > -1.$$

entonces para cuando α toma valores en el intervalo, ($-1 < \alpha < 0$), tenemos sub-difusión no podremos tener otro tipo de de difusión ya que estrictamente $\alpha > -1$.

Por otro lado consideremos la siguiente aproximación ($\rho \rightarrow \infty$) lo que significa que ($t \rightarrow 0$), es decir, tendremos la aproximación para tiempos cortos la cual es:

$$\langle \hat{x}^2(\rho) \rangle \rightarrow 2v_0^2 \left[\frac{1}{\rho^3} \right],$$

calculando la transformada inversa de Laplace

$$\langle x^2(t) \rangle \rightarrow v_0^2 t^2, \quad (4.46)$$

la cual coincide con la el resultado 4.42, siendo estos de forma super-difusión

4.3. Caminata aleatoria con velocidad estocástica vs Kramers-Fokker-Planck generalizada

En esta sección compararemos las transformadas de Fourier-Laplace para las ecuaciones 1.8 correspondiente al resultado mostrado en la sección 1.3 y 4.33 correspondiente al resultado de la ecuación de KFP.

¹Esto debido al teorema del valor inicial o primer teorema Tauberiano que dice; si existen los siguientes límites $\lim_{\rho \rightarrow \infty} \langle \hat{x}^2(\rho) \rangle$ de la transformada de Laplace de t y $\lim_{t \rightarrow 0} \langle x^2(t) \rangle$, entonces $\lim_{\rho \rightarrow \infty} \langle \hat{x}^2(\rho) \rangle = \lim_{t \rightarrow 0} \langle x^2(t) \rangle$ de la misma forma el segundo teorema Tauberiano dice que $\lim_{\rho \rightarrow 0} \langle \hat{x}^2(\rho) \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle x^2(t) \rangle$

La ecuación 4.33 la podemos llevar a una forma parecida a la ecuación 1.8, que es:

$$\hat{P}_0 = \frac{\frac{C_0}{\rho} - \frac{k^2 v_0^2 (2C_2 - C_0)}{\rho(\rho + \hat{\phi}\gamma)(\rho + 2\hat{\phi}\gamma)}}{1 + \frac{k^2 v_0^2 (3\rho + 4\hat{\phi}\gamma)}{2\rho(\rho + \hat{\phi}\gamma)(\rho + 2\hat{\phi}\gamma)}}, \quad (4.47)$$

por lo tanto si queremos encontrar la descripción en su descripción como un caso particular de la ecuación de KFP tenemos que resolver las siguientes ecuaciones:

$$[F(\tau)h_{k\tau}]_{\rho} n_{k0} = \frac{C_0}{\rho} - \frac{k^2 v_0^2 (2C_2 - C_0)}{\rho(\rho + \hat{\phi}\gamma)(\rho + 2\hat{\phi}\gamma)}, \quad [h_{k\tau}f(\tau)]_{\rho} = -\frac{k^2 v_0^2 (3\rho + 4\hat{\phi}\gamma)}{2\rho(\rho + \hat{\phi}\gamma)(\rho + 2\hat{\phi}\gamma)}. \quad (4.48)$$

a partir del resultado anterior del lado derecho se deduce lo siguiente:

$$\hat{\phi}(\tau) = \frac{-(5[h_{k\tau}f(\tau)]_{\rho} + 4k^2 v_0^2)}{4[h_{k\tau}f(\tau)]_{\rho}\gamma} \pm \frac{\sqrt{(5[h_{k\tau}f(\tau)]_{\rho}\rho^2 + 4k^2 v_0^2)^2 - 8\rho^2[h_{k\tau}f(\tau)]_{\rho}(2\rho^2[h_{k\tau}f(\tau)]_{\rho} + 3k^2 v_0^2)}}{4[h_{k\tau}f(\tau)]_{\rho}\gamma}. \quad (4.49)$$

Caso particular

Consideremos el ejemplo utilizado con anterioridad para la caminata aleatoria con velocidad estocástica donde tenemos que la función para la velocidad y el tiempo de salto son:

$$h(v) = \frac{1}{2} (\delta(v - v_0) + \delta(v + v_0)) \quad f(\tau) = \frac{1}{\tau_0} \exp(-\tau/\tau_0), \quad (4.50)$$

y entonces las expresiones 4.48 son:

$$[F(\tau)h_{k\tau}]_{\rho} n_{k0} = \frac{\tau_0(\rho\tau_0 + 1)n_{k0}}{(\rho\tau_0 + 1)^2 + k^2 v_0^2 \tau_0^2}, \quad [h_{k\tau}f(\tau)]_{\rho} = \frac{(\rho\tau_0 + 1)}{(\rho\tau_0 + 1)^2 + k^2 v_0^2 \tau_0^2}.$$

por lo tanto:

$$\frac{\tau_0(\rho\tau_0 + 1)n_{k0}}{(\rho\tau_0 + 1)^2 + k^2 v_0^2 \tau_0^2} = \frac{C_0}{\rho} - \frac{k^2 v_0^2 (2C_2 - C_0)}{\rho(\rho + \hat{\phi}\gamma)(\rho + 2\hat{\phi}\gamma)},$$

$$\frac{(\rho\tau_0 + 1)}{(\rho\tau_0 + 1)^2 + k^2 v_0^2 \tau_0^2} = -\frac{k^2 v_0^2 (3\rho + 4\hat{\phi}\gamma)}{2\rho(\rho + \hat{\phi}\gamma)(\rho + 2\hat{\phi}\gamma)},$$

utilizando la expresión 4.49 tenemos que la ecuación para $\hat{\phi}(\tau)$ es:

$$\hat{\phi}(\rho) = \frac{-(5a + 4k^2v_0^2b) \pm \sqrt{(5a\rho^2 + 4k^2v_0^2b)^2 - 8a\rho^2(2a\rho^2 + 3bk^2v_0^2)}}{4a\gamma}, \quad (4.51)$$

donde $a = (\rho\tau_0 + 1)$ y $b = [(\rho\tau_0 + 1)^2 + k^2v_0^2\tau_0^2]$, la expresión 4.51 corresponde a la función $\hat{\phi}(\rho)$ para su descripción en la ecuación 4.33.

Capítulo 5

Conclusiones

La ecuación de Kramers-Fokker-Planck (KFP) es de especial importancia en la física, ya que constituye un marco teórico sencillo, mas no trivial, para estudiar procesos de tipo difusivo, en este trabajo se consideraron dos formas de dicha ecuación, una en su forma estándar y la otra en su forma general (ambas en una dimensión) y además de determinar la solución exacta para el caso estándar y proponer una solución con ayuda de los polinomios de Hermite para el caso general, fue de nuestro interés encontrar conexiones con alguna de dichas soluciones para un modelo de caminata aleatoria con velocidad estocástica, en concreto, para un ejemplo expuesto en la sección 1.3 el cual considera funciones de distribución de salto para la velocidad ($\pm v$) y para el tiempo (exponencialmente distribuido). Bajo ciertas condiciones la ecuación de KFP en su forma estándar (capítulo 4) toma la forma de la solución de dicha caminata aleatoria 4.13, esto sugiere que a partir de la ecuación de KFP se puede hallar la forma de la ecuación para una caminata aleatoria en su descripción como un proceso de transporte, lo cual se logra con la ecuación de KFP general estableciendo un puente entre el marco teórico para la caminata aleatoria con velocidad estocástica y el de la ecuación generalizada de KFP 4.49, es decir, podemos pasar de una descripción a la otra con dicho puente, de igual manera se puede considerar distintos tipos de funciones de distribución $h(v)$, $f(\tau)$ y con ayuda de la función $\phi(t-s)$ encontrar las distintas conexiones entre otros tipos de descripción de caminatas aleatorias.

Para la ecuación de KFP 4.14 como un caso de la ecuación de transporte, al no poder dar una solución de manera exacta, debido a la inserción de la función $\phi(t-s)$, se propone la solución con ayuda de los polinomios de Hermite 4.16, llegando a una solución aproximada, como ejemplo tomamos dos funciones distintas, considerando una función $\phi(t-s) = \alpha e^{-\alpha(t-s)}$ la función conocida como un decaimiento exponencial y una función como una ley de potencias, para hacer notar como dichas funciones afectan la forma

de la solución. Comparando el promedio al cuadrado del desplazamiento para los casos donde tenemos una función de memoria exponencial 4.43 con la ecuación de KFP 4.10 a tiempos largos el promedio al cuadrado del desplazamiento es el mismo para ambos casos, la forma en que se difunden las partículas sigue de forma lineal (difusión normal) esto es de esperarse ya que la influencia de una función de tipo decaimiento exponencial será insignificante para tiempos suficientemente largos como es nuestro caso. Por otro lado cuando consideremos un efecto no local que sigue una ley de potencias ocurre de manera inversa que si consideramos la memoria exponencial, la expresión para tiempos largos cambia significativamente, comparada con la expresión del promedio al cuadrado del desplazamiento de KFP 4.11, esto es de esperarse ya que si se considera una ley de potencias en el tiempo los efectos no locales serán más significativos a escalas de tiempo grandes, y para cuando comparamos los PCD 4.46 para la ley de potencias y 4.42 para KFP a tiempos cortos estos coinciden, tomando en cuenta que se considero una $(\delta(t-s))$ esto también es de esperarse ya que los efectos no locales considerados como una ley de potencial para tiempos suficientemente cortos no son significativos.

Cabe resaltar que al proponer a $\phi(t-s) = \delta(t-s)$, y al sustituirla en la ecuación 4.34, se recupera la expresión para el promedio al cuadrado del desplazamiento para tiempos largos, este de difusión normal (lineal), es decir, la solución propuesta para el truncamiento ($m = 0, 1, 2$) es plausible, ya que las dos soluciones convergen a la misma solución para tiempos largos ($t \rightarrow \infty$), si esto no sucediera tendríamos que considerar más términos en la expansión. Por otro lado para tiempos cortos los promedios al cuadrado del desplazamiento coinciden para la ecuación de KFP generalizada 4.42 y para KFP estándar 4.10 esto es de esperarse ya que al tratarse tanto de condiciones iniciales como $\phi(t-s)$ como deltas de Dirac, entonces recuperamos la ecuación 4.10 y de igual manera al considerar condiciones iniciales como 4.35 en la ecuación 4.8 recuperamos el mismo promedio al cuadrado del desplazamiento a tiempos cortos y como se mencionó también a tiempos largos esto refuerza el hecho que la solución propuesta antes mencionada para la ecuación generalizada de KFP es sin duda alguna suficientemente precisa.

En general la ecuación de KFP, juega un papel importante en problemas que implican ruido, por ejemplo, en circuitos eléctricos, en sistemas biológicos a la física del láser, la difusión en potenciales periódicos, etc. Las fluctuaciones son una característica muy común en una gran cantidad de campos. Casi todos los sistemas están sujetos a influencias externas o internas complicadas que no se conocen completamente y que a menudo se denominan ruido o fluctuaciones. La ecuación de KFP se ocupa de las fluctuaciones de

los sistemas que se derivan de pequeñas perturbaciones, cada una de las cuales cambia las variables del sistema de una forma impredecible.

Apéndice A

Variable estocástica

Una *variable estocástica* X esta definida por

- 1.- Un conjunto de posibles resultados. a este conjunto se le suele denominar rango, conjunto de estados, espacio de muestreo, o espacio de fases.
- 2.- Una distribución de probabilidad sobre este conjunto.

Distribución de Densidad o Probabilidad

La distribución de probabilidad, en el caso de un rango unidimensional continuo, está dado por una función $P(x)$ no negativa y normalizada en el siguiente sentido

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x)dx = 1 \quad (5.1)$$

donde la integral se extiende sobre todo el espacio. La probabilidad de que la variable estocástica X tenga un valor entre x y $x + dx$ es $P(x)dx$.

El conjunto de estados y la distribución de probabilidad definen completamente a la *variable estocástica* X , sin embargo un número de conceptos adicionales son usados frecuentemente. El *promedio* o *valor de espectación* de cualquier función f_X definida en el mismo espacio de la variable X es

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)P(x)dx, \quad (5.2)$$

en particular $\langle x^m \rangle = \mu_m$ se denomina el m-ésimo momento de X , promedio o media.

Función característica

Dada una variable aleatoria continua X su función característica, que se denota mediante $\varphi_X(t)$ para t real se define como,

$$\varphi_X(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{itx} f_X(x) dx, \quad (5.3)$$

donde $f_X(x)$ es la función de densidad de la variable aleatoria X

Momentos

Cuando los momentos de una variable aleatoria existen, se pueden calcular a través de las derivadas de la función característica y tomando la variable real $t = 0$,

$$\varphi'_X(0) = i\langle x \rangle,$$

y Tomando la segunda derivada en $t = 0$

$$\varphi''_X(0) = -\langle x^2 \rangle,$$

de modo que podemos tener una relación entre las derivadas y los momentos,

$$\varphi_X^{(n)}(0) = i^{(n)} \langle x^{(n)} \rangle.$$

Apéndice B

Métodos de soluciones de la ecuación de transporte cuando el término de colisión no está presente

Estudiaremos algunos métodos de solución a la ecuación de transporte, primeramente consideremos el caso en el que no hay término de interacción o colisión es decir $\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{coll} = 0$, es decir, las partículas no interaccionan entre sí estas solo estarán en interacción constante con las moléculas donde estén sumergidas.

En este caso la ecuación (3.4) se reduce a la ecuación de Liouville la cual puede resolverse utilizando el método de las características, simplificaremos nuestro análisis considerando el caso en una dimensión. Para el caso en que no existen fuerzas externas ($F_{ext} = 0$) tendremos la siguiente ecuación diferencial.

$$\frac{\partial n}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial n}{\partial x} = 0,$$

El método de las características consiste, en considerar el cambio total en el tiempo de la función de densidad $n(x, v, t)$

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{dv}{dt} \frac{\partial n}{\partial v},$$

he identificaremos las siguientes ecuaciones para las curvas características $x(t)$, $v(t)$:

$$\frac{dx}{dt} = v(t) \tag{5.4a}$$

$$\frac{dv}{dt} = 0 \tag{5.4b}$$

la solución a estas ecuaciones nos dan una familia de soluciones para $n(x(t), v(t), t)$ y entonces a partir de la curva inicial (condiciones iniciales), podemos encontrar la solución para la función de densidad de partículas, deducimos que

$$n(x(t), v(t), t) = n_0,$$

donde n_0 es la densidad en $t = 0$ y esta dada por las condiciones iniciales, ya que $\frac{dn}{dt} = 0$ entonces su solución es una constante.

Las expresiones para las curvas características son

$$v(t) = v_0$$

$$x(t) = x_0 + v_0 t$$

Entonces dadas las condiciones iniciales, la función de densidad para todo tiempo t se puede deducir poniendo las condiciones iniciales x_0 v_0 en términos de $x(t)$ $v(t)$ para encontrar la solución a todo tiempo para $n(x, v, t)$, es decir,

$$v_0 = v(t)$$

$$x_0 = x(t) - v(t)t,$$

Así la función de densidad $n(x, v, t)$ queda determinada por

$$n(x, v, t) = n(x_0, v_0, t = 0) = n(x - vt, v, 0),$$

Podemos observar de la solución dada es que para función de velocidad inicial para cualquier tiempo no cambiará ya que esta se mantiene constante como $v(t) = v_0$ para cualquier tiempo, entonces la función para posición para una partícula dada cambiará constantemente proporcional a esta velocidad.

Este método se puede extender de manera inmediata al caso cuando hay una fuerza externa F_{ext} solo si dicha fuerza es lineal en las coordenadas. Por ejemplo para el caso en el que $F_{ext} = g$, g — constante, (el caso mas interesante es cuando tenemos $F = -kx$) entonces tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{g}{m} \frac{\partial n}{\partial v} = 0,$$

ahora como en el ejemplo anterior:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{dv}{dt} \frac{\partial n}{\partial v},$$

identificamos las siguientes expresiones para las curvas características:

$$\frac{dn}{dt} = 0,$$

$$\frac{dx}{dt} = v(t),$$

$$\frac{dv}{dt} = \frac{g}{m},$$

entonces deducimos lo siguiente:

$$n(x, v, t) = n_0,$$

donde n_0 es la condición inicial a $t = 0$

$$n(x, v, t) = n(x_0, v_0, t = 0),$$

$$v(t) = v_0 + \frac{g}{m}t,$$

$$\frac{dx}{dt} = v(t),$$

$$x(t) = x_0 + v_0t + \frac{g}{m} \frac{t^2}{2},$$

entonces las condiciones iniciales serían:

$$x_0 = x(t) - v_0t - \frac{g}{m} \frac{t^2}{2},$$

$$v_0 = v(t) - \frac{g}{m}t,$$

sustituyendo v_0 en x_0 tenemos que:

$$x_0 = x(t) - vt + \frac{g}{m} \frac{t^2}{2},$$

entonces dada la densidad de partículas inicial podemos deducir que para todo tiempo t la densidad de partículas es:

$$n(x, v, t) = n(x_0, v_0, t = 0) = n\left(x - vt + \frac{g}{m} \frac{t^2}{2}, v - \frac{g}{m} t, 0\right),$$

Para el caso en el la fuerza externa $F_{ext} = -kx$ donde F ahora depende linealmente con x entonces la ecuación de transporte para esta fuerza sería:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial n}{\partial x} - \frac{kx}{m} \frac{\partial n}{\partial v} = 0,$$

entonces:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \frac{\partial n}{\partial x} + \frac{dv}{dt} \frac{\partial n}{\partial v},$$

como en los ejercicios anteriores tenemos las siguientes expresiones para las curvas características

$$\frac{dn}{dt} = 0, \tag{5.5}$$

$$\frac{dx}{dt} = v(t),$$

$$\frac{dv}{dt} = \frac{-kx}{m},$$

podemos derivar una vez mas la diferencial para la velocidad $v(t)$

$$\frac{dx}{dt} = v(t),$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{dv}{dt},$$

sustituyendo de las anteriores expresiones tenemos:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{-kx}{m},$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{kx}{m} = 0,$$

la cual es una ecuación diferencial de segundo orden que la resolveré por el método de Laplace entonces tenemos:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{kx}{m} = 0,$$

aplicamos la Transformada de Laplace por ambos lados:

$$L \left\{ \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{kx}{m} \right\} = 0,$$

y tenemos que la Transformada de Laplace Aplicada a una derivada es como:

$$L \{x'\} = sL \{x\} - x(0),$$

entonces para una diferencial de segundo orden tenemos que la transformada de Laplace es:

$$L \{x''\} = s^2L \{x\} - sx(0) - x'(0),$$

sustituyendo en la ecuación diferencial tenemos que:

$$L \left\{ \frac{d^2x}{dt^2} \right\} + \frac{k}{m}L \{x\} = 0,$$

$$s^2L \{x\} - sx(0) - x'(0) + \frac{k}{m}L \{x\} = 0,$$

$$L \{x\} \left(s^2 + \frac{k}{m} \right) = sx_0 + x'_0,$$

de donde sabemos que $x'_0 = v_0$ Entonces:

$$L \{x\} = \frac{sx_0 + v_0}{s^2 + \frac{k}{m}},$$

$$L \{x\} = \frac{sx_0}{s^2 + \frac{k}{m}} + \frac{v_0}{s^2 + \frac{k}{m}}.$$

aplicando la inversa de la de la transformada de Laplace y usando tablas tenemos que la ecuación para la curva característica de $x(t)$ es:

$$x(t) = x_0 \cos(wt) + \frac{v_0}{w} \operatorname{sen}(wt), \quad (5.6)$$

donde $w = k/m$ ahora para obtener $v(t)$ tenemos que:

$$\frac{dx}{dt} = v(t),$$

$$v(t) = \frac{d}{dt} \left(x_0 \cos(wt) + \frac{v_0}{w} \operatorname{sen}(wt) \right),$$

$$v(t) = -v_0 \operatorname{sen}(wt) - x_0 w \operatorname{sen}(wt), \quad (5.7)$$

Como podemos apreciar que la densidad $n(x, v, t)$ es:

$$n(x, v, t) = n(x_0, v_0, t = 0), \quad (5.8)$$

entonces ahora resolvamos el sistema de ecuaciones de 5.6 y 5.7 para saber cual es la forma de las condiciones iniciales, primero despejamos de 5.6 a x_0 :

$$x_0 = \frac{x - \frac{v_0}{w} \operatorname{sen}(wt)}{\cos(wt)},$$

Ahora la sustituimos en la ecuación 5.7 y obtenemos que:

$$v(t) = v_0 \cos(wt) - \frac{x - \frac{v_0}{w} \operatorname{sen}(wt)}{\cos(wt)} w \operatorname{sen}(wt),$$

hacemos un poco de álgebra:

$$v(t) = v_0 \cos(wt) - \frac{xw - v_0 \operatorname{sen}(wt)}{\cos(wt)} \operatorname{sen}(wt),$$

$$v(t) = \frac{v_0 \cos^2(wt) - xw \operatorname{sen}(wt) + v_0 \operatorname{sen}^2(wt)}{\cos(wt)},$$

$$v(t) = \frac{v_0 - xw \operatorname{sen}(wt)}{\cos(wt)},$$

despejamos v_0 de la ecuación anterior:

$$v_0 = v \cos(wt) + xw \operatorname{sen}(wt), \quad (5.9)$$

sustituimos la anterior ecuación en la ecuación 5.6 y despejamos x_0 :

$$x(t) = x_0 \cos(wt) + \frac{v \cos(wt) + xw \operatorname{sen}(wt)}{w} \operatorname{sen}(wt),$$

$$x_0 = \frac{x \cos^2(wt) - \frac{v}{w} \cos(wt) \operatorname{sen}(wt)}{\cos(wt)},$$

$$x_0 = x \cos(wt) - \frac{v}{w} \operatorname{sen}(wt), \quad (5.10)$$

Entonces ahora con las ecuaciones anteriores podemos concluir que la densidad $n(x, v, t)$ es:

$$n(x, v, t) = n\left(x \cos(wt) - \frac{v}{w} \operatorname{sen}(wt), v \cos(wt) + xw \operatorname{sen}(wt), t = 0\right),$$

Método de características

Para un ejemplo particular de ecuación general de una EDP de primer orden.

$$a(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + b(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} + c(x, y)u + d(x, y) = 0,$$

con condiciones iniciales dadas.

Para Hallar la expresión de $u = u(x, t)$ suponemos dada una curva inicial C de parámetro τ , que será la condición inicial dada. Sea C la curva inicial dada paramétricamente por

$$x = x(\tau)$$

$$y = y(\tau),$$

$$u = u(\tau).$$

Entonces si por cada punto de C podemos trazar otra curva de parámetro s , entonces la superficie S así determinada será la solución buscada. Para cada valor de τ tenemos un punto de C por el cual pasa una curva característica. La familia de curvas determinadas por los puntos de C esta dada por:

$$x = x(s, \tau),$$

$$y = y(s, \tau),$$

$$u = u(s, \tau),$$

representado la superficie en el espacio, tal que cuando $s = 0$ tenemos C , es decir

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

$$y(0, \tau) = y(\tau)$$

$$u(0, \tau) = u(\tau)$$

Ecuaciones características.

Ahora deseamos cambiar nuestra EDP en términos de nuestros nuevos parámetros. Así usando el hecho que:

$$u(s, \tau) = u(x(s, \tau), y(s, \tau))$$

derivando a u sobre s tenemos

$$\frac{du}{ds} = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dx}{ds} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{dy}{ds},$$

usando la nueva parametrización, la ecuación diferencial parcial puede ser cambiado al siguiente sistema de EDO,

$$\frac{dx}{ds} = a(x, y),$$

$$\frac{dy}{ds} = b(x, y),$$

$$\frac{du}{ds} = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dx}{ds} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{dy}{ds} = \frac{\partial u}{\partial y} + c \frac{\partial u}{\partial x} = -(c(x, t)u + d(x, t)).$$

Las soluciones de EDO es llamado ecuaciones características. Las soluciones de este sistema son familias de curvas: $x = x(s), t = t(s), u = u(s)$, llamadas curvas características.

”Kernel de colisión”. [2]

Definimos el ”Kernel”de colisión $\sum(\mathbf{r}, \mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})$ que caracteriza los procesos antes mostrados esto es:

$$\sum(\mathbf{r}, \mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}) = \sum(\mathbf{r}, \mathbf{v}')c(\mathbf{r}, \mathbf{v}')f(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}). \quad (5.11)$$

Esta ecuación describe la probabilidad, por unidad de distancia recorrida, de que una partícula incidente con velocidad \mathbf{v}' sufra una colisión en la que una partícula secundaria de velocidad \mathbf{v} es producida que también puede ser la partícula original, pero con una nueva velocidad, también nos podemos dar cuenta como estas distintas probabilidades y funciones de probabilidad dentro del ”kernel”de colisión la multiplicación de estas nos dice que suceden simultáneamente (intersección de eventos), es decir que el término $\sum(\mathbf{r}, \mathbf{v}')c(\mathbf{r}, \mathbf{v}')f(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})$ es que primero tenemos la probabilidad de que las partículas con velocidad \mathbf{v}' colisionen ($\sum(\mathbf{r}, \mathbf{v}')$), luego que esas mismas partículas emitan varias partículas secundarias debido a la colisión ($c(\mathbf{r}, \mathbf{v}')$) y finalmente que esas partículas emitidas que llevan velocidad \mathbf{v}' sufran una transición de estado de \mathbf{v}' a \mathbf{v} ($f(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})$).

Con esto nos podemos dar cuenta que por definición:

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \int d^3v' \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v} \longrightarrow \mathbf{v}') \quad (5.12)$$

Con estos conceptos ahora podemos obtener una forma explícita para el término de colisión $\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{coll}$ que esta presente en la forma general de la ecuación de transporte, primero tomemos en cuenta la siguiente cantidad:

$$\nu \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v}), \quad (5.13)$$

nos da como resultado la frecuencia con la que ocurren las colisiones, entonces la rapidez con la que ocurren estas reacciones en un volumen unitario lo podemos escribir como:

$$v \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v})n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (5.14)$$

la cual es la densidad de rapidez de reacción. Ahora observamos que la rapidez a la que las partículas de velocidad \mathbf{v} sufren interacciones (colisiones) que cambian su velocidad o momento de las partículas es $v \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v})n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, mientras que la rapidez a la que partículas de diferentes velocidades \mathbf{v}' el cambio de momento de partículas secundarias de velocidad \mathbf{v} es $\mathbf{v}' \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v}' \longrightarrow \mathbf{v})n(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t)d^3v'$ es decir este ultimo término provocan que partículas fuera del volumen sean emitidas dentro del mismo, mientras que el término $v \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v})n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ es la rapidez con la que las partículas se de velocidad \mathbf{v} se "pierden"(salen del elemento de volumen) entonces podemos escribir que el término de colisión es de la forma:

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{coll} = \int d^3v'v' \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v}' \longrightarrow \mathbf{v})n(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) - v \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v})n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (5.15)$$

entonces ahora podemos escribir la forma general de la ecuación de transporte como:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}_{ext}}{m} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{v}} = \int d^3v'v' \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v}' \longrightarrow \mathbf{v})n(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) - v \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v})n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (5.16)$$

Transformada de Fourier y sus propiedades

El concepto matemático que hoy conocemos como transformada de Fourier fue introducido por Joseph B. Fourier en 1811, en conexión con un tratado sobre la propagación del calor, mediante un argumento de paso al límite (del discreto al continuo) a partir de las series que también llevan su nombre. La transformada de Fourier (y el análisis armónico en general) constituye hoy una de las herramientas más útiles para el estudio y el tratamiento de múltiples aspectos de las ecuaciones en derivadas parciales. Desempeña un papel importante en el campo de las ecuaciones diferenciales ordinarias, permitiendo simplificaciones notables en las ecuaciones toda vez que contribuye a transformar derivadas en potencias, esto es, operadores diferenciales en polinomios. Es también significativo el papel que la transformada de Fourier juega en el terreno de las aplicaciones, fundamentalmente en teoría de la señal, teoría cuántica de campos, tomografía y tratamiento y digitalización de imágenes.

Definición de la transformada de Fourier

Definición: Definimos el espacio $L^1(\mathbb{R})$ como el conjunto de las funciones $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ tales que f es (absolutamente) integrable¹, es decir:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)| dx < \infty.$$

Definición: Si $f \in L^1(\mathbb{R})$ definimos su **transformada de Fourier** (para $k \in \mathbb{R}$) mediante la fórmula

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx} dx.$$

Una de las propiedades más importantes de la transformada de Fourier es que es posible reconstruir f a partir de su transformada, mediante la llamada **transformada inversa de Fourier**

$$f(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(k)e^{ikx} dx.$$

A continuación otras dos propiedades importantes.

Propiedad que relaciona la derivada con la transformada de Fourier.

¹No precisaremos en este apéndice el significado de la palabra integrable contentándonos con decir que la integral de $|f(x)|$ existe en algún sentido

Transformada de una derivada

Si $f \in L^1(\mathbb{R})$ tal que $f'(x) \in L^1(\mathbb{R})$ y $\lim_{|x| \rightarrow +\infty} f(x) = 0$, entonces

$$\widehat{f'}(k) = (-ik)f(k),$$

esta definición se extiende para derivadas de orden mayor.

Por ultimo la propiedad de **convolución**, si $f, g \in L^1(\mathbb{R})$ son dos funciones integrables, se define su convolución (denotada $f * g$) mediante la fórmula:

$$(f * g)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(y)g(x - y)dy,$$

entonces, la propiedad que relaciona la convolución con la transformada de Fourier es:

Si $f, g \in L^1(\mathbb{R})$

$$\widehat{(f * g)} = \widehat{f}\widehat{g}.$$

Existen otras propiedades de importantes sólo nombramos las mas importantes para el desarrollo de este trabajo.

Bibliografía

- [1] Zaburdaev, Vasily and Schmiedeberg, Michael and Stark, Holger PhysRevE.78.011119 *Random walks with random velocities*. 2008. Jul American Physical Society 10.1103/PhysRevE.78.011119 <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.78.011119>
- [2] James J. Duderstadt, William R. Martin 1942 Transport Theory 631 Department of Nuclear Engineering The University of Michigan, Ann Arbor New York: Wiley, c1979
- [3] J. Fourier, The analytical theory of heat Dover Phoenix Editions 2003
- [4] M. Alonso and E. J. Finn 1967 Fundamental University Physics Vol. 2
- [5] Edward A Codling, Michael J Plank and Simon Benhamou 6 August 2008 Random Walk models in biology J. R. Soc. Interface 2008 5, doi: 10.1098/rsif.2008.0014
- [6] V. Yu. Zaburdaev and K. V. Chukbar, JETP 94 252 (2002) E. Barkai, Chem. Phys. 284,13 (2002) M. M. Meerschaert, D. A. Benson, H. P. Scheffler, and P. Becker-Kern, Phys. Rev. E 66, 060102(R) (2002) I. M. Sokolov and R. Metzler, ibid. 67, 010101(R) (2003).
- [7] J. Klafter, A. Blumen, and M. F. Shlesinger, Phys. Rev. A 35, 3081 (1987).
- [8] G. Zumofen and J. Klafter, Phys. Rev. E 47, 851 (1993).
- [9] E. Ben-Naim, B. Machta, and J. Machta, Phys. Rev. E 72, 021302 (2005); E. Trizac, A. Barrat, and M. H. Ernst, ibid. 76, 031305 (2007).
- [10] R. Metzler and J. Klafter, Phys. Rep. 339, 1 (2000).
- [11] Random walk models in biology, Edward A colling, Michel J Plank and Simon Benhamou, J. R. Soc. INterface 2008 5, doi 10.1098/rsif.2008.0014, published 6 August 2008
- [12] . M.J. Valderrama, Métodos Matemáticos Aplicados a las Ciencias Experimentales (Pirámide, Madrid, 1989).