



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Fenómenos de transporte en medios desordenados

Marián Boguñá



Aquesta tesi doctoral està subjecta a la llicència **Reconeixement- NoComercial – SenseObraDerivada 4.0. Espanya de Creative Commons.**

Esta tesis doctoral está sujeta a la licencia **Reconocimiento - NoComercial – SinObraDerivada 4.0. España de Creative Commons.**

This doctoral thesis is licensed under the **Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivs 4.0. Spain License.**

LIBRARY OF THE UNIVERSITY OF BARCELONA
L. 10000
C. 10000
A33

Universitat de Barcelona



Facultat de Física

Departament de Física Fonamental

Fenómenos de Transporte en Medios Desordenados

Marián Boguñá

LIBRARY OF THE UNIVERSITY OF BARCELONA
L. 10000
C. 10000
A33

BIBLIOTECA DE LA UNIVERSITAT DE BARCELONA



0700452749

Universitat de Barcelona



Facultat de Física

Departament de Física Fonamental

Fenómenos de Transporte en Medios Desordenados

Memoria presentada por **Marián Bogná**
para optar al Grado de Doctor en Ciencias Físicas.

Barcelona, 14 de Octubre de 1998.

Universitat de Barcelona
Facultat de Física
Departament de Física Fonamental

Fenómenos de Transporte en Medios Desordenados

Certifico que la presente tesis doctoral, presentada por Marián Boguñá para optar al Grado de Doctor en Ciencias Físicas dentro del programa de doctorado Métodos Estadísticos en la Física correspondiente al bienio 1994-96, ha sido realizada bajo mi dirección.
Barcelona, 30 de Octubre de 1998.



Dr. Jaume Masoliver García Profesor Titular de Física de la Materia Condensada
de la Universitat de Barcelona

*A mis Padres,
que perdonan mis pecados.*

*De salto en salto
 el sable de luz
es hoja de sauce
 ojo de halcón
mirar temerario
 amor andaluz
Invisible nota y navaja
filo que taja y desgaja
 nocturnos y nostalgias
trémulo encanto de rondó
 vagabundo y solitario
y cuando toca corazón
 es estremecimiento
y es vivificador*

IVÁN SANTAMARÍA HOLEK

Agradecimientos

Finalmente ha llegado la hora de escribir los agradecimientos que, curiosamente, son lo último que se escribe pero lo primero que se lee. En ellos quisiera agradecer a todas aquellas personas que, científicamente o no, voluntaria o involuntariamente, se han visto involucradas en esta tesis.

En Primer lugar quisiera agradecer a mi director, Jaume Masoliver, la confianza que depositó en mí al comienzo de este periplo. Él fue quién me inició en el fantástico mundo de los procesos estocásticos, primero como profesor y más tarde como mi director y tutor. Siempre ha estado a mi disposición, y con la mejor disposición, en todos los trabajos que hemos realizado juntos. Pero, por encima de todo, quisiera agradecerle su franqueza y sinceridad, siempre de agradecer en el complejo mundo de la ciencia.

Pep Porrà merece un lugar destacado en estos agradecimientos. Sin temor a exagerar, puedo decir que Pep es el coautor de esta tesis. Ha sido una gran suerte tenerle a mi lado y haber podido trabajar con él. Su gran conocimiento de los procesos estocásticos y su gran generosidad al compartílos conmigo han sido factores decisivos para el buen término de este trabajo. Nuestras discusiones sobre Física siempre han sido de lo más estimulantes. No quiero dejar de mencionar los buenos momentos que hemos pasado juntos y espero que en el futuro los seguiremos pasando.

Desde el otro lado del Atlántico he tenido la suerte de colaborar con los Drs. George Weiss y Katja Lindenberg. Al Dr. Weiss le debo agradecer el haberme dado la oportunidad de escribir mi primer artículo. Espero que pronto seguiremos escribiendo muchos más desde los N.I.H. A la Dr. Lindenberg le agradezco sobre todo su simpatía y amabilidad. Nuestra colaboración se tradujo en un artículo del que estoy especialmente satisfecho.

Mi iniciación al mundo de los sistemas críticos autoorganizados la debo a mi gran amigo Álvaro Corral. Su gran conocimiento sobre el tema y su sentido crítico me han influido más de lo que él mismo cree. Nuestras conversaciones de sofá siempre fueron de

lo más interesantes e instructivas. He de decir que nuestra colaboración nació gracias a los famosos seminarios $g \sim$ quasicero, fundados por él mismo y por Gabriel Gomila. Creo que Álvaro está especialmente satisfecho de ello. Esta etapa ha sido una de las más interesantes y divertidas por las que he pasado durante estos últimos años.

Finalmente agradezco a todos y cada uno de los miembros del tribunal el haber aceptado formar parte del mismo así como su paciencia por leer este trabajo.

Dejando ya la parte "científica" de estos agradecimientos paso a la parte llamémosla "paracientífica" de los mismos. Para empezar quisiera mencionar a todos mis compañeros del departamento que durante los últimos cuatro años han tenido que sufrirme día a día. Por orden de aparición, quiero recordar a los colegas que ya no están entre nosotros (descansen en paz). Muy especialmente a M Carmen, Jose Antonio y Mercè. Ellos hicieron que mi entrada en el departamento fuera lo menos traumática posible—Las conversaciones con José Antonio siempre fueron de lo más deliciosas y divertidas. También en tierras extrañas están José Manuel (el mago de los computers), Leonor y Alvaro (el fistro de Dinamarca). Un saludo muy grande para ellos. No puedo, ni quiero, olvidarme de los colegas de planta 3. Chema (nuestro Rey), Dani, David, Jordi y, por supuesto, Montse, con quien comparto la pasión por la música, por ser mi fan incondicional cuando toco el piano, evidentemente mal, muy mal, y equivocándome siempre. Y ya que hablamos de música, mencionar a Alberto Lobo con quien he pasado unos impagables "*moments musicoux*".

También habitan por estos lares los miembros del F.L.A.T.U., y su letal comando itinerante "Comando Etilov", con los que he compartido días y noches memorables (y alguna que otra bacanal) bajo la atenta mirada del Curda (que siempre vela por nosotros). Tomás, con un humor poco habitual (conservalo muchos años), Francesc (Franki), el amo de la pista, Jose (jpozo), el de la voz sobrehumana, Sergi, Xavi, el lector de Poesia, David, Iván (del mismo modo que existe el amor a primera vista, existe la amistad a primera vista. Eso es lo que me ha ocurrido con Iván. El destino ha querido que nos encontráramos en un momento y una situación especial para ambos. El destino también nos separará pronto aunque puedo decir con toda seguridad que aunque estemos a 4500 millas marinas seguiremos siendo "casnalitos" para siempre), y, finalmente, Marian, la Coronela, la auténtica *alma mater* del comando, nuestra guía espiritual (y terrenal), la que cuando pierde el habla recupera el sentido¹.

Ya fuera del departamento debo mencionar a los colegas de D'Ivori. Con ellos he

¹ Tomás dixit.

pasado, creo, más tiempo que con nadie en esta vida. Ellos son los responsables de que esta sea una tesis a tiempo parcial. Manel (Manolo cabeza bolo), mi jefe, el mejor jefe que nunca he tenido. Albert y Victor, dos tipos geniales. Un recuerdo especial para Pere (RIP).

Ahora toca el turno de los amigos de siempre: Jordi, mi amigo del alma, Javier, mi amigo de la infancia, Marta, Isi, Arantxa, Juan Carlos; los amigos reencontrados: Imma, a la que debo una factura que suma y sigue que espero poder pagar; y los nuevos amigos, Xavi Pérez Basora, un tío, simplemente, genial.

Belén ha sufrido esta tesis más que nadie. Quiero agradecerle muy sinceramente todo el apoyo que siempre me ha dado para poder seguir adelante. Siempre ha comprendido mi pasión por la Física y mi tozudez por querer llevar esta vida, renunciando a muchas otras cosas. Sin duda alguna, sin ella nunca hubiera podido terminar esta tesis. Y, como no, gracias a nuestro perro, el ser más humano que conozco.

Por último, un agradecimiento especial a toda mi familia, mis hermanos, cuñados, tías, mis innumerables sobrinos y, muy especialmente, a mis padres, que me han dado tanto sin pedir nunca nada.

Índice

Agradecimientos	ix
1 Introducción general	1
1.1 Fenómenos de Transporte	1
1.2 Procesos Estocásticos con Dinámicas Acopladas	4
1.3 Sumario de la Tesis	9
Bibliografía	11
2 Transporte en Medios Desordenados	13
2.1 Introducción	13
2.2 Caminos Aleatorios Persistentes a Tiempo Continuo como un Modelo de Transporte en Medios Desordenados	14
2.3 Conexión entre los CAPTC y la Teoría de Transporte	16
2.4 Límite Difusivo	17
2.5 Tiempo de Isotropización	19
2.5.1 Desplazamiento Cuadrático Medio	19
2.5.2 Distribución de Velocidades	28
2.6 La Aproximación de las Fracciones Continuas	31
2.6.1 Aplicaciones	34
2.7 Conclusiones	35
Bibliografía	37
3 Caminos Aleatorios Persistentes en Dimensiones Arbitrarias	39
3.1 Introducción	39
3.2 CAP en una Dimensión	40
3.2.1 Límite Continuo. Modelo de Goldstein	41

3.3	CAP en Dimensiones Arbitrarias	43
3.3.1	Límite Continuo	44
3.3.2	Densidad de Probabilidad Marginal. Un caso particular.	47
3.4	Modelo de Goldstein con Barreras Absorbentes.	49
3.4.1	Planteamiento del Problema	51
3.4.2	Solución Exacta en el Espacio de Fourier-Laplace	54
3.4.3	Probabilidad de Supervivencia. Tiempos Característicos	55
3.4.4	Densidad Estacionaria	60
3.4.5	Coefficientes de Reflexión y de Transmisión	62
3.5	Conclusiones	64
	Bibliografía	67
4	Fenómenos de Activación Resonante	69
4.1	Introducción	69
4.2	Planteamiento del Problema	70
4.3	Solución Analítica del Modelo de Doering y Gadoua	74
4.4	Un Modelo Simple que Muestra Activación Resonante	79
4.5	El Modelo de Bier y Astumian	84
4.6	Activación Generada por una Señal Periódica Cuadrada	91
4.7	Probabilidad de Supervivencia y Momentos del Tiempo de Primer Paso	94
4.8	Conclusiones	96
	Bibliografía	99
5	Transporte en una Pila Granular Crítica Auto-Organizada	101
5.1	Introducción	101
5.2	El Experimento de Oslo	103
5.3	CATC como un Modelo de Transporte en una Pila de Arroz Crítica Auto-Organizada	104
5.4	Simulaciones	115
5.4.1	Simulaciones del Modelo de CATC	115
5.4.2	El Autómata Celular	118
5.5	Conclusiones	124
	Bibliografía	127

ÍNDICE	xv
6 Conclusiones y Perspectivas	129
6.1 Conclusiones	129
6.2 Perspectivas	132
Apéndice A	133
A.1 Teoremas Abelianos	133
A.2 Teoremas Tauberianos	136
Bibliografía	141
Lista de Publicaciones	143

Capítulo 1

Introducción General

1.1 Fenómenos de Transporte

Los fenómenos de transporte pertenecen a esa clase de fenómenos “universales” en Física. Y decimos “universales” porque, a pesar de no formar un campo propio de la Física, se dan en todos ellos [1]. Cualquier campo de la Física involucra el concepto de movimiento y, por lo tanto, de transporte. Es justamente esta ubicuidad la que hace de la teoría de transporte una teoría interesante ya que nos da la oportunidad de trabajar en campos muy distintos y romper así (o al menos intentarlo) la gran compartimentación que existe entre estos. La teoría de transporte se aplica en campos tan diversos como la dinámica de gases [2, 3, 4, 5], la termodinámica de no equilibrio (la difusión de una gota de tinta en agua es un buen ejemplo de ello) [6], el transporte de neutrones en un reactor nuclear [7], el transporte de cargas en semiconductores o el transporte de luz en medios difusivos [8, 9].

Es justamente este último ejemplo el que motivó el origen de esta tesis. Los sistemas que involucran transporte de luz son realmente importantes tanto en la Física como en la Tecnología. Debemos precisar, sin embargo, que no estudiaremos el transporte de luz en cualquier tipo de medio. Entre los medios puramente geométricos, donde la propagación sigue las leyes de la óptica geométrica y los medios donde es necesaria una descripción microscópica cuántica de la interacción radiación-materia, existen los medios difusivos o desordenados. Cuando un rayo de luz incide en uno de estos medios, la propagación de los fotones que consiguen penetrar en el medio se puede aproximar por un movimiento rectilíneo hasta que se produce una colisión con un centro dispersor. En

este caso, el fotón cambia de dirección y continúa nuevamente en línea recta según la nueva dirección. Cuando el medio a estudiar tiene una densidad de centros dispersores elevada (o bien es un medio muy extenso) este proceso se repite y lo que tenemos es un problema de colisiones múltiples. El estudio de este sistema se puede enfocar de dos maneras distintas: concentrarse en las características de las colisiones [10] o asumir un tipo particular de colisiones como *input* y estudiar el efecto de las colisiones múltiples. Nuestro trabajo está enfocado únicamente hacia este último problema, es decir, nunca nos preocuparemos de los detalles finos de las colisiones e intentaremos encontrar el número máximo de propiedades para tipos de colisiones arbitrarias. Esto tiene sentido porque muchas de las propiedades del transporte dependen solamente de propiedades globales de las colisiones, pero en ningún caso dependen de las propiedades finas o particulares del proceso de colisión. Ejemplos de estos medios los encontramos abundantemente en la naturaleza: las nubes, la atmósfera, gran cantidad de disoluciones, los tejidos biológicos y en general cualquier medio geométrico al que añadamos impurezas que actúen como centros dispersores. También en la industria encontramos gran cantidad de aplicaciones aunque quizás la más conocida sea la de los cristales difusores de luz.

Durante la última década el interés por estos problemas se ha renovado notablemente gracias a las aplicaciones biomédicas (actuales y futuras) [12, 13]. El motivo es que los tejidos biológicos son medios desordenados—las inhomogeneidades presentes en el tejido, las células o los orgánulos citoplasmáticos actúan como centros dispersores de luz. Tales aplicaciones están orientadas básicamente al desarrollo de técnicas que nos permitan medir las propiedades ópticas de los tejidos a analizar y tener en cuenta que estas propiedades ópticas son distintas entre, por ejemplo, un tejido sano y otro canceroso [12]. Existen varias técnicas distintas que funcionan en este sentido pero las más destacables son las técnicas basadas en el estudio del estado estacionario [15], y las técnicas de resolución temporal [16]. La primera consiste en inyectar un haz de luz laser en un tejido y estudiar como se comporta el estado estacionario. La otra técnica es más moderna y se basa en inyectar un pulso de luz laser muy corto¹ y estudiar la dependencia temporal del flujo de luz que sale del sistema.

Todas estas técnicas requieren de un marco teórico con el que poder interpretar los experimentos y extraer de ellos las propiedades ópticas del tejido. La teoría que usualmente se utiliza para estudiar estos fenómenos es la teoría de transporte de radiación [11], aunque la gran dificultad que presenta provoca que se utilice en su lugar la apro-

¹ actualmente la duración de estos pulsos es del orden de los femtosegundos (fs).

ximación difusiva. Hay que decir que la aproximación difusiva es genérica a todos los campos del transporte, ya sea transporte de masa, energía o momento. Sin embargo, esta aproximación no resulta muy apropiada cuando el tiempo característico asociado al proceso de transporte es pequeño. El motivo es que la teoría difusiva tiene velocidad de propagación infinita, es decir, cualquier perturbación realizada en un punto concreto se propaga instantáneamente al resto del espacio. Además, el hecho de perder el concepto de velocidad de propagación implica que se pierde también la noción de dirección y al resolver problemas con contornos aparecen dificultades para implementar las condiciones de contorno, es decir, las condiciones de contorno no surgen de manera “natural” de la teoría. Para intentar evitar este problema hemos modelado el proceso de transporte como un camino aleatorio a tiempo continuo con velocidad de propagación finita [13, 14]. El objetivo principal es encontrar ecuaciones diferenciales para la densidad de probabilidad de presencia, equivalente a la concentración de partículas ², que sean de tipo hiperbólico, es decir, con velocidad finita de propagación.

Para intentar resolver este problema es preciso estudiar los llamados procesos estocásticos con dinámicas acopladas, es decir, procesos que, de forma intermitente, cambian de dinámica. La necesidad de estudiar estos procesos nos sirvió de pretexto para internarnos en campos aparentemente muy distintos al del transporte de luz pero que, sin embargo, pueden ser estudiados con el mismo formalismo. Los dos sistemas que decidimos estudiar son, por un lado, los sistemas que presentan procesos de activación resonante [17], y, por el otro, los medios granulares que muestran criticalidad autoorganizada [18]. La elección de estos sistemas y no otros se debe al gran auge que estos han tenido durante la última década y a la falta de trabajos teóricos sobre el transporte en tales medios.

El problema de la activación resonante consiste en encontrar la frecuencia de transición de un sistema Browniano en un potencial biestable cuando la barrera de potencial que separa los dos estados estables fluctúa en el tiempo. Como veremos en el capítulo 4 existe una frecuencia de oscilación de la barrera que optimiza la frecuencia de transición. En este sentido decimos que el sistema presenta resonancia. Los resultados que existían en este campo eran, básicamente, numéricos. Los estudios analíticos se limitaban a aproximaciones que no capturaban el comportamiento resonante. Nosotros hemos desarrollado un modelo simple que permite calcular analíticamente las propiedades res-

²Estamos suponiendo, naturalmente, que la luz no es coherente, de tal modo que la concentración o intensidad de luz en un punto es proporcional a la densidad de probabilidad de una sola partícula. Una explicación de la pérdida de coherencia se puede encontrar en la referencia [10].

onantes del proceso.

Nuestro interés en el transporte en medios granulares proviene, por un lado, de que recientemente se ha demostrado experimentalmente que algunos de estos medios presentan criticalidad autoorganizada y, además, no hay muchos trabajos sobre transporte en medios que presenten este comportamiento y, por otro lado, de que los medios granulares, presenten criticalidad autoorganizada o no, en general muestran difusión anómala, mucho más interesante que la difusión Gaussiana que presentan la mayoría de medios [19, 20]. Por difusión anómala entendemos un proceso de difusión en un medio homogéneo que no converge hacia la solución Gaussiana para tiempos grandes, es decir, el sistema no verifica el teorema del límite central. Este hecho es sintomático de la existencia de leyes de potencias con momentos centrales infinitos. Esto puede comportar la pérdida de las escalas características del proceso, es decir, el proceso de transporte tiene estructura fractal.

1.2 Procesos Estocásticos con Dinámicas Acopladas

Los procesos estocásticos con dinámicas acopladas son el nexo común a los tres sistemas que estudiaremos en los capítulos posteriores. Es preciso entonces definir de un modo general las ecuaciones de evolución de estos procesos. Imaginemos un sistema que está gobernado por un conjunto de dinámicas

$$\{f_k(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0)\}, \quad k = 1, \dots, n, \quad (1.1)$$

es decir, $f_k(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0)$ es el propagador de la dinámica k -ésima desde el punto (\vec{r}_0, \vec{v}_0) hasta el punto (\vec{r}, \vec{v}) o, si se prefiere, la densidad de probabilidad de encontrar al sistema en la posición (\vec{r}, \vec{v}) en el tiempo t si en el tiempo t_0 estaba en (\vec{r}_0, \vec{v}_0) . Naturalmente las dinámicas $\{f_k(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0)\}$ pueden representar procesos estocásticos, leyes deterministas o una mezcla de ambas. Asumimos que los tiempos a los que ocurren los cambios de dinámica son independientes del estado de proceso. Entonces, el proceso es un proceso de renovación y es posible definir una densidad de probabilidad de tiempos entre dos cambios de dinámica consecutivos $\psi(t)$, es decir, $\psi(t)dt$ nos da la probabilidad de que el tiempo entre dos cambios de dinámica esté en el intervalo $(t, t + dt)$ [21].

Estamos interesados en la densidad de probabilidad conjunta del proceso en el estado k -ésimo $p_k(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0)$, es decir, la densidad de probabilidad de que en el tiempo t el sistema esté en el punto del espacio fásico (\vec{r}, \vec{v}) y que en ese instante esté gobernado por la dinámica k -ésima. Sin embargo, esta densidad no se puede obtener de forma directa. Es

preciso definir primero la llamada densidad de renovación $\rho_k(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0)$ [21]. Esta función se define de tal modo que $\rho_k(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0) d\vec{r} d\vec{v}$ nos da la probabilidad por unidad de tiempo de que en el intervalo $(\vec{r} + d\vec{r}, \vec{v} + d\vec{v})$ y estando el sistema gobernado por la dinámica k -ésima, se produzca un cambio de dinámica en el instante t . Nótese que $\rho_k(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0)$ no es una densidad de probabilidad respecto al tiempo. En realidad

$$\sum_k \int \int d\vec{r} d\vec{v} \rho_k(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0) \quad (1.2)$$

nos da la frecuencia media entre cambios de dinámica y al integrarlo para un intervalo de tiempo $[t_0, t_0 + T]$ nos da el número medio de cambios durante un intervalo de tiempo T . La densidad de renovación verifica una ecuación de Chapman-Kolmogorov generalizada de modo que podemos escribir³ [22]

$$\begin{aligned} \rho_k(\vec{r}, \vec{v}, t) &= P_0(k) f_k(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0) \psi(t) \\ &+ \int_0^t d\tau \int \int d\vec{r}' d\vec{v}' \sum_{j \neq k} \rho_j(\vec{r}', \vec{v}', \tau) f_j(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}', \vec{v}', \tau) \psi(t - \tau) P(j \rightarrow k). \end{aligned} \quad (1.3)$$

El primer término es la contribución a la densidad de renovación de las partículas que en el instante inicial comienzan su evolución según la dinámica k -ésima. $P_0(k)$ es la probabilidad de que en $t = t_0$ el proceso arranque con la dinámica k -ésima. El término de la integral es la contribución a $\rho_k(\vec{r}, \vec{v}, t)$ de las partículas que en el último cambio de dinámica, ocurrido en el punto (\vec{r}', \vec{v}') en el tiempo τ , estaban gobernadas por la dinámica j -ésima y que tras un cambio pasan a la dinámica k -ésima. $P(j \rightarrow k)$ es la probabilidad de transición entre dos dinámicas distintas. Una vez tenemos definidas las densidades de renovación es posible encontrar las densidades de probabilidad $p_k(\vec{r}, \vec{v}, t)$. Estas se relacionan con las densidades de renovación mediante las ecuaciones

$$\begin{aligned} p_k(\vec{r}, \vec{v}, t) &= P_0(k) f_k(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0) \Psi(t) \\ &+ \int_0^t d\tau \int \int d\vec{r}' d\vec{v}' \sum_{j \neq k} \rho_j(\vec{r}', \vec{v}', \tau) f_j(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}', \vec{v}', \tau) \Psi(t - \tau) P(j \rightarrow k). \end{aligned} \quad (1.4)$$

La interpretación es análoga al caso anterior. La única diferencia es que hay que sustituir la densidad de probabilidad del tiempo entre cambios por la probabilidad de superviven-

³Por comodidad omitiremos en la notación de ρ_k las condiciones iniciales, es decir, cuando escribamos $\rho_k(\vec{r}, \vec{v}, t)$ deberíamos poner $\rho_k(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0)$.

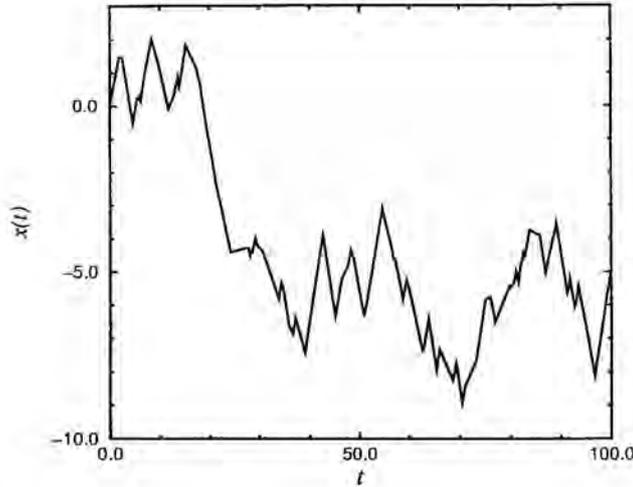


Figura 1.1. Proyección sobre el eje x de la realización de una partícula que evoluciona de acuerdo con un camino aleatorio persistente a tiempo continuo. En este caso los tiempos entre cambios siguen una ley de Poisson de parámetro $\lambda = 1$.

cia en un estado,

$$\Psi(t) \equiv \int_t^{\infty} \psi(\tau) d\tau. \quad (1.5)$$

Esto se debe a que los cambios de dinámica son procesos puntuales en el tiempo y, por lo tanto, son un conjunto de medida nula que no contribuye a la densidad de probabilidad. En otras palabras, cuando observamos el proceso siempre lo vemos evolucionando en una de las dinámicas, nunca en el preciso instante del cambio. Bajo este formalismo, lo que distingue un sistema de otro es el número de dinámicas distintas bajo las que puede evolucionar el sistema y el tipo particular de dinámica que actúa en cada caso. A continuación describiremos, para cada uno de los sistemas con los que trabajaremos, las dinámicas específicas a las que están sometidos. Esto es equivalente a fijar el conjunto de propagadores $\{f_k(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0)\}$ que aparecen en las ecuaciones (1.3) y (1.4). De todos modos, en los capítulos respectivos se dan descripciones mucho más detalladas de cada modelo.

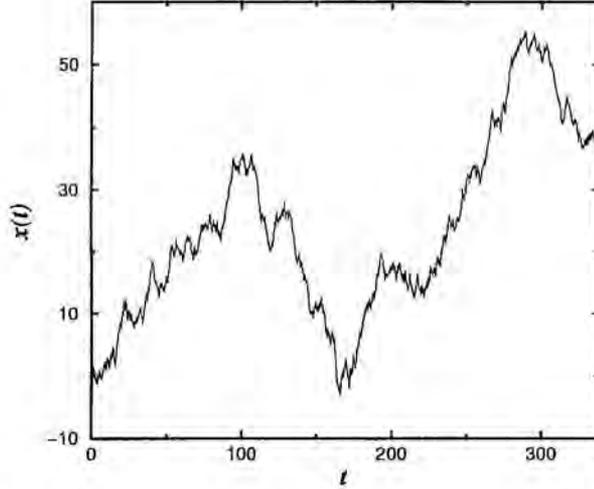


Figura 1.2. Realización de una partícula movida por ruido blanco más una fuerza constante que alternadamente cambia de signo. Esto corresponde al modelo de Bier y Astumian que introduciremos en el capítulo 5.

Transporte de Luz

El transporte de luz en un medio desordenado se modela mediante un camino aleatorio persistente a tiempo continuo. La diferencia entre un camino aleatorio normal y uno persistente es que en el normal los cambios de dirección del caminante son independientes de la dirección incidente, en otras palabras, los distintos pasos del camino están descorrelacionados. En el caso de caminos persistentes, los cambios de dirección dependen fuertemente de la dirección incidente. En nuestro modelo suponemos que la partícula se mueve en línea recta a velocidad constante hasta que colisiona, cambia de dirección y continúa nuevamente a velocidad constante. En este caso sólo tenemos una dinámica, aunque cada dirección de propagación se puede entender también como una dinámica distinta con un índice continuo $\hat{v} \equiv \hat{\Omega}$. El propagador f es entonces

$$f(\vec{r}, \vec{v}, t | \vec{r}_0, \vec{v}_0, t_0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0 - v(t - t_0)\hat{\Omega})\beta(\Omega|\Omega_0), \quad (1.6)$$

es decir, $\beta(\Omega|\Omega_0)$ nos da la probabilidad de cambiar de la dirección de propagación $\hat{\Omega}_0$ a $\hat{\Omega}$ (después de una colisión) y, con esta nueva dirección, el término $\delta(\vec{r} - \vec{r}_0 - v(t - t_0)\hat{\Omega})$ nos asegura que la partícula se mueva en línea recta a velocidad constante v según la

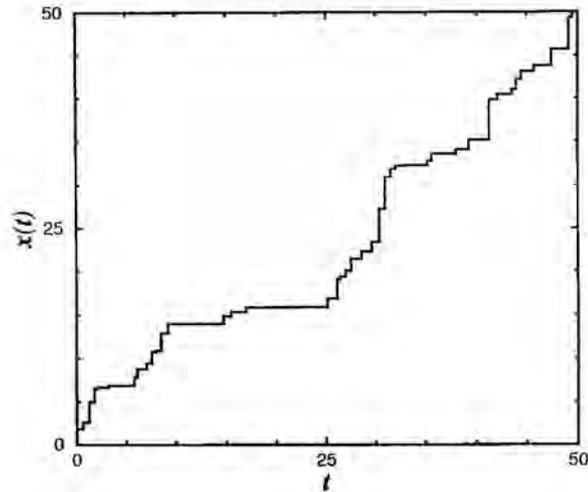


Figura 1.3. Realización de una partícula que evoluciona de acuerdo con el modelo que utilizamos en el transporte en la pila de arroz. Nótese que las partículas quedan atrapadas en una posición durante un tiempo aleatorio y entonces saltan una distancia también aleatoria. La realización es asimétrica debido a la asimetría de la pila.

dirección $\hat{\Omega}$. La única salvedad es que ahora hay que cambiar $P_0(k)$ por una densidad de probabilidad angular que tenga en cuenta en que dirección comienzan las partículas su movimiento. En la Fig-(1.1) se muestra una simulación de la realización de una partícula que sigue un modelo de este tipo proyectada sobre el eje x .

Activación Resonante

En este caso, tenemos una partícula Browniana en una dimensión en presencia de un potencial que fluctúa en el tiempo. Suponemos que a intervalos de tiempo aleatorios el potencial cambia de forma entre $V_1(x)$ y $V_2(x)$. Como hay dos potenciales distintos, existen dos dinámicas distintas y $k = 2$. Los propagadores $f_{1(2)}(x, t|x_0, t_0)$ son aquí las densidades de probabilidad asociadas a las ecuaciones de Langevin

$$\dot{x}(t) + \frac{d}{dx}V_{1(2)}(x) = \xi(t), \quad (1.7)$$

donde $\xi(t)$ es un ruido blanco Gaussiano de media cero, deltacorrelacionado y de intensidad D . Nótese que, como las dos dinámicas involucradas corresponden a procesos Brownianos en el régimen sobreamortiguado, no aparece ninguna dependencia con la velocidad. En la Fig-(1.2) se muestra la realización de una partícula Browniana con una fuerza constante que a tiempos aleatorios cambia de signo. Este es un tipo particular de fluctuaciones del potencial.

Transporte en Medios Granulares

El transporte en un medio granular se caracteriza por estar generado por avalanchas. El tipo de sistemas a los que nos referimos son pilas granulares que son perturbadas lentamente añadiendo nuevos granos. La adición de estos nuevos granos genera avalanchas que se propagan por el sistema. Si nos centramos en el movimiento de un grano individual nos damos cuenta que, mientras el grano no es alcanzado por una avalancha permanece en reposo, y cuando esto ocurre cambia de posición rápidamente. Esto se debe a que las escalas temporales externa (asociada a la perturbación) e interna (asociada a las avalanchas) están muy separadas⁴. Esto implica que podemos considerar los saltos de los granos dentro de la pila como procesos puramente puntuales o instantáneos. Por lo tanto, las dos dinámicas alternadas son, en este caso, ó bien permanecer en reposo durante un tiempo aleatorio o dar un salto instantáneo. En resumen, el transporte se puede modelar mediante una distribución de tiempos de atrapamiento y una distribución de longitudes de salto independientes entre si. Entonces, para este sistema, el propagador $f(\vec{r}, t | \vec{r}_0, t_0)$ será

$$f(\vec{r}, t | \vec{r}_0, t_0) = f(\vec{r} | \vec{r}_0), \quad (1.8)$$

es decir, el propagador es independiente del tiempo. Además, debido a la hipótesis de separación de escalas temporales, tampoco aparece dependencia con la velocidad. En la Fig-(1.3) se muestra una realización de este modelo.

1.3 Sumario de la Tesis

La presente tesis está estructurada en tres bloques. El primero de ellos lo forman los capítulos 2 y 3 en los que nos ocupamos de los modelos de caminos aleatorios persistentes a tiempo continuo que se aplican al transporte de luz en medios desordenados. El capítulo 2 es más general. En él se formulan las ecuaciones integrales para estos modelos con

⁴Esto es una característica común a todos los sistemas que presentan criticalidad autoorganizada.

toda generalidad y se encuentra una conexión con la teoría de transporte. También se estudia el tiempo de isotropización para modelos generales y finalmente se propone un nuevo método para resolver el problema en el espacio libre. En el capítulo 3 proponemos un modelo más concreto de camino aleatorio persistente que nos permitirá encontrar la ecuación diferencial que satisface la densidad de probabilidad de presencia. Para este modelo resolvemos el problema del transporte a través de una lámina de grosor L y calculamos las magnitudes físicas interesantes como el coeficiente de transmisión o los tiempos característicos asociados al tamaño del sistema.

El siguiente bloque lo forma el capítulo 4, dedicado al fenómeno de la activación resonante. Damos un sumario de los resultados ya obtenidos por otros autores y a continuación resolvemos un modelo sencillo que permite encontrar aproximaciones analíticas y estudiar así la dependencia de la resonancia con los parámetros del sistema. Damos también una discusión detallada del origen del fenómeno de la resonancia y aclaramos el papel que juegan el ruido blanco y las condiciones de frontera.

El capítulo 5 está dedicado al transporte en una pila granular crítica autoorganizada. Comenzamos con una breve descripción del experimento realizado por el grupo de Oslo y seguidamente construimos un modelo de camino aleatorio que nos permitirá obtener información acerca del transporte individual de los granos dentro del sistema. El capítulo concluye con resultados de simulaciones, tanto del modelo en sí mismo como de un autómata celular. Estas simulaciones concuerdan muy bien con las conclusiones del modelo teórico.

La tesis termina con un apéndice en el que se incluyen los teoremas Abelianos y Tauberianos para la transformada de Laplace más utilizados, un capítulo de conclusiones finales y un comentario sobre las perspectivas de los posibles trabajos que se derivan de esta.

Bibliografía

- [1] J. J. Duderstadt y W. R. Martin, *Transport Theory* (J. Wiley, New York, 1979).
- [2] S. Chapman y T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Nonuniform Gases* (Cambridge University Press, London, 1973).
- [3] J. H. Ferziger y H. G. Kaper, *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases* (North Holland, Amsterdam, 1972).
- [4] W. G. Vincenti y C. H. Krüger, *Introduction to Physical Gas Dynamics* (Wiley, New York, 1965).
- [5] C. Cercignani, *Theory and Applications of the Boltzman Equation* (Elsevier, New York, 1975).
- [6] I. Prigogine, *Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Wiley-Interscience, New York, 1962).
- [7] B. Davison, *Neutron Theory* (Oxford university Press, London, 1957).
- [8] S. Chandrasekhar, *Radiative Transfer* (Dover, New York, 1969).
- [9] E. A. Milne, *Handbuch der Astrophysik* Vol. 3, (Springer, Berlin, 1930), Ch. 2, pp. 70-172.
- [10] H. C. van de Hulst, *Light Scattering by Small Particles* (Dover, New York, 1981).
- [11] A. J. Ishimaru, *Wave Propagation and Scattering in Random Media* (Academic, New York, 1978), Vol I.
- [12] B. B. Das, Feng Liu y R. R. Alfano, *Rep. Prog. Phys.* 60, 227 (1997).
- [13] A. H. Gandjbakhche y G. H. Weiss, *Prog. Optics* 34, 333 (1995)

- [14] G. H. Weiss, *Aspects and Applications of the Random Walk* (North-Holland, Amsterdam, 1994).
- [15] R. F. Bonner, R. Nossal, S. Havlin y G. H. Weiss, *J. Opt. Soc. Am.* **A4**, 423 (1987).
- [16] B. Chance, J. S. Leigh, H. Miyake, D. S. Smith, S. Nioka, R. Greenfeld, M. Finander, K. Kaufman, W. Levy, M. Young, P. Cohen, H. Yoshioka y R. Boretzky, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **85**, 4971 (1988).
- [17] C. R. Doering y J. C. Gadoua, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2318 (1992).
- [18] V. Frette, K. Christensen, A. Malthe-Sørenssen, J. Feder, T. Jøssang, y P. Meakin, *Nature (London)* **379**, 49 (1996); ver también M. Kardar, *Nature (London)* **379**, 22 (1996).
- [19] K. Christensen, A. Corral, V. Frette, J. Feder, y T. Jøssang, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 107 (1996).
- [20] M. Boguñá y A. Corral, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4950 (1997).
- [21] D. R. Cox, *Renewal Theory* (John Wiley, New York, 1966).
- [22] J. Masoliver, K. Lindenberg y G. H. Weiss, *Physica A* **157**, 891 (1989).

Capítulo 2

Transporte en Medios Desordenados

2.1 Introducción

Un gran número de propiedades de transporte de materiales en medios desordenados pueden ser estudiadas con modelos de caminos aleatorios a tiempo continuo (CATC) [1]. Durante muchos años, muchas de estas propiedades han sido estudiadas usando estos modelos simples, en los cuales, los sucesivos pasos del camino están descorrelacionados, es decir, los cambios de dirección del caminante son independientes entre sí. Estos modelos pueden servir en el caso de la existencia de gradientes externos que condicionen los cambios de dirección. No obstante, en el caso del transporte de luz en medios desordenados estos gradientes no existen [4]. En este caso, debemos introducir persistencia ya que cuando un fotón sufre una colisión con un centro dispersor cambia de dirección de propagación con una probabilidad que depende únicamente de la dirección incidente. Esto introduce una anisotropía local en el modelo que induce la aparición de correlaciones entre los distintos pasos del camino que aumentan la riqueza de comportamientos del modelo y obviamente su aplicabilidad [3]. Llamaremos a estos modelos extendidos caminos aleatorios persistentes a tiempo continuo (CAPTC).

2.2 Caminos Aleatorios Persistentes a Tiempo Continuo como un Modelo de Transporte en Medios Desordenados

El modelo concreto que nosotros estudiaremos es el siguiente: Tenemos una partícula moviéndose en un medio desordenado con centros dispersores distribuidos de forma aleatoria. En todo el desarrollo supondremos que el medio es homogéneo aunque pueden existir correlaciones espaciales. La partícula se mueve a velocidad constante, v , durante un tiempo aleatorio, t , hasta que encuentra un centro dispersor y sufre una colisión. El ángulo relativo entre las direcciones anterior, $\hat{\Omega}'$, y posterior a la colisión, $\hat{\Omega}$, viene caracterizado por una densidad de probabilidad $\beta(\hat{\Omega}|\hat{\Omega}')$ que llamaremos función de fase. Esta función define el tipo de interacción entre las partículas transportadas y los centros dispersores del medio. Como estamos estudiando modelos sin ningún tipo de gradiente externo y el medio es homogéneo la función de fase únicamente puede depender del ángulo relativo entre $\hat{\Omega}$ y $\hat{\Omega}'$. La función de fase introduce una anisotropía local en el modelo y es la causante de la aparición de correlaciones entre los sucesivos pasos del camino de la partícula.

Sea $\psi(t)$ la densidad de probabilidad del tiempo entre dos colisiones consecutivas. La forma concreta de esta densidad depende de la distribución espacial de los centros dispersores. Cuando el medio no presenta ningún tipo de correlación espacial y suponiendo que estamos en el límite de baja densidad (ya que justamente el volumen de los centros dispersores introduce de por sí una correlación espacial) los tiempos entre colisiones estarán generados por un proceso de Poisson y, por lo tanto,

$$\psi(t) = \lambda e^{-\lambda t}, \quad (2.1)$$

donde λ es la frecuencia de colisión o, si se prefiere, $l \equiv v\lambda^{-1}$ el recorrido libre medio de las partículas. Esta distribución es la que suele utilizarse en la literatura aunque nosotros intentaremos encontrar el mayor número posible de propiedades para densidades de probabilidad, $\psi(t)$, arbitrarias. En este caso λ se define como

$$\lambda^{-1} \equiv \int_0^{\infty} t\psi(t)dt. \quad (2.2)$$

Para fijar ideas podemos resumir el modelo en sus ingredientes principales:

- Medio homogéneo. No consideramos agentes externos en el transporte.

- Colisiones entre las partículas transportadas y los centros dispersores del medio definidas por una función de fase $\beta(\hat{\Omega}|\hat{\Omega}')$ que depende únicamente del ángulo relativo entre las direcciones anterior y posterior a la colisión.
- Una densidad de tiempos entre colisiones, $\psi(t)$, relacionada con la distribución espacial del medio.

Con todos estos ingredientes en mente ya podemos empezar a trabajar. Sea $p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$ la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en la posición \vec{r} moviéndose según la dirección del vector $\hat{\Omega}$ en el tiempo t y sea $\rho(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$ la densidad de renovación de que una partícula que se está moviendo en la dirección $\hat{\Omega}$ sufra una colisión en la posición \vec{r} en el instante t . Como vimos en la introducción general, la densidad de renovación, $\rho(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$, es solución de la ecuación integral

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) = & P_0(\hat{\Omega})f(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)\psi(t) + \\ & + \int d\vec{r}' \int d\hat{\Omega}' \int_0^t d\tau \rho(\vec{r}', \hat{\Omega}', \tau) \beta(\hat{\Omega}|\hat{\Omega}') f(\vec{r} - \vec{r}', t - \tau, \hat{\Omega}) \psi(t - \tau), \end{aligned} \quad (2.3)$$

donde

$$f(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) \equiv \delta(x - vt \sin \theta \cos \psi) \delta(y - vt \sin \theta \sin \psi) \delta(z - vt \cos \theta) \quad (2.4)$$

y $P_0(\hat{\Omega})$ es la distribución angular inicial. El primer término de esta ecuación proviene de las partículas que sufren su primera colisión justamente en el instante t mientras que el segundo es la contribución de las que han sufrido como mínimo una colisión. El propagador $f(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$ garantiza que entre dos colisiones consecutivas la partícula se mueva en línea recta y a velocidad constante v .

La densidad de probabilidad $p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$ está relacionada con $\rho(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$ mediante la ecuación [18]

$$\begin{aligned} p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) = & P_0(\hat{\Omega})f(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)\Psi(t) + \\ & + \int d\vec{r}' \int d\hat{\Omega}' \int_0^t d\tau \rho(\vec{r}', \hat{\Omega}', \tau) \beta(\hat{\Omega}|\hat{\Omega}') f(\vec{r} - \vec{r}', t - \tau, \hat{\Omega}) \Psi(t - \tau), \end{aligned} \quad (2.5)$$

donde

$$\Psi(t) \equiv \int_t^\infty \psi(\tau) d\tau \quad (2.6)$$

es la probabilidad de que el tiempo entre dos colisiones sea mayor o igual que t . La ecuación (2.3) es una ecuación integral cerrada para $\rho(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$. Por lo tanto, si somos capaces de resolverla podremos encontrar la solución para la densidad $p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$ mediante la ecuación (2.5).

2.3 Conexión entre los CAPTC y la Teoría de Transporte

Lo que acabamos de ver en la sección previa es la formulación integral de un camino aleatorio persistente a tiempo continuo. Estos caminos aleatorios tienen la característica de ser No-markovianos respecto a la posición, ya que necesitamos conocer, además de la posición de la partícula, su velocidad para poder determinar su evolución posterior. Ahora pretendemos encontrar una conexión entre este modelo de transporte y la teoría usual del transporte. Esto pasa necesariamente por encontrar una ecuación integro-diferencial para la densidad $p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$ que podamos relacionar con la ecuación de transporte. Derivando la ecuación (2.5) respecto del tiempo y usando la ecuación (2.3) es fácil darse cuenta de que es posible escribir la siguiente ecuación integro-diferencial:

$$\frac{\partial p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)}{\partial t} + v\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) + \rho(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) = \int \beta(\hat{\Omega}|\hat{\Omega}') \rho(\vec{r}, \hat{\Omega}', t) d\hat{\Omega}', \quad (2.7)$$

donde hemos usado que

$$\frac{d\Psi(t)}{dt} = -\psi(t) \quad (2.8)$$

y que

$$\frac{\partial f(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)}{\partial t} = -v\hat{\Omega} \cdot \nabla f(\vec{r}, \hat{\Omega}, t). \quad (2.9)$$

La ecuación (2.7) no es aún una ecuación de transporte ya que no está cerrada para $p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$. En el caso particular de que la densidad del tiempo entre colisiones sea exponencial, es decir, un medio homogéneo sin correlaciones espaciales, es fácil darse cuenta de que $\psi(t) = \lambda\Psi(t)$ y, por lo tanto, que $\rho(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) = \lambda p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$. Entonces sí recuperamos una ecuación de transporte para colisiones elásticas. Resulta notable el hecho de que este es el único caso en el que recuperamos la ecuación de transporte de forma exacta y, por lo tanto, podemos afirmar que nuestro modelo es más completo que la teoría de transporte usual ya que incluye casos no contemplados por esta. Sin embargo, cuando el tiempo al que observamos el sistema es mayor que el tiempo medio entre colisiones la teoría de transporte sigue funcionando ya que en ese caso existe un teorema que nos asegura que [6]

$$\Psi(t) \sim \lambda^{-1}\psi(t) \quad t \gg \lambda^{-1} \quad (2.10)$$

y entonces

$$\rho(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) \sim \lambda p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) \quad t \gg \lambda^{-1}. \quad (2.11)$$

Naturalmente este resultado es cierto suponiendo que la densidad $\psi(t)$ tenga todos los momentos definidos. Si esto no es así (por ejemplo, tiempos entre colisiones gobernados por leyes de potencias) no existe una ecuación íntegro-diferencial cerrada para $p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$. Esto es consistente con el hecho de que en estos casos el comportamiento no es difusivo mientras que la ecuación de transporte tiene, a tiempos largos, un comportamiento difusivo. Si integramos la ecuación (2.7) para todas las velocidades recuperamos la ecuación de continuidad que nos asegura la conservación de la probabilidad

$$\frac{\partial p(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0, \quad (2.12)$$

donde hemos definido el flujo de partículas promediado sobre todas las direcciones como

$$\vec{j}(\vec{r}, t) \equiv v \int \hat{\Omega} p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega}, \quad (2.13)$$

y la densidad marginal

$$p(\vec{r}, t) \equiv \int p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega}. \quad (2.14)$$

2.4 Límite Difusivo

En muchas aplicaciones es necesario estudiar la densidad de probabilidad de la posición de la partícula independientemente de su velocidad, es decir, $p(\vec{r}, t)$. Desafortunadamente no existe, en general, una ecuación diferencial cerrada para esta densidad (aunque en algunos casos sí es posible, vease por ejemplo [10]). A pesar de todo, podemos estudiar el comportamiento a tiempos largos y ver que ecuación satisface $p(\vec{r}, t)$ en este límite. Para ello es preciso hacer la llamada aproximación P_1 [7, 8, 9]. Esta aproximación se basa en desarrollar la densidad conjunta $p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$ en armónicos esféricos y argumentar que para tiempos suficientemente largos el sistema se ha “casi-isotropizado” y es lícito truncar la serie a primer orden. Lo que entendemos aquí por tiempos largos lo precisaremos en secciones posteriores. Para dimensión tres podemos escribir

$$p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) \sim \frac{1}{4\pi} p(\vec{r}, t) + \frac{3}{4\pi v^2} \hat{\Omega} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t). \quad (2.15)$$

Como estamos estudiando el límite de tiempos largos, podemos utilizar la ecuación de transporte (2.7) (naturalmente excluimos de este análisis las densidades de probabilidad de tiempos entre colisiones sin todos los momentos definidos). Derivándola respecto al tiempo y utilizando la aproximación (2.15) podemos escribir un sistema de ecuaciones diferenciales acoplado para $p(\vec{r}, t)$ y $\vec{j}(\vec{r}, t)$

$$\frac{\partial p(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0, \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial \vec{j}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \lambda(1-g)\vec{j}(\vec{r}, t) = -\frac{v^2}{3}\nabla p(\vec{r}, t), \quad (2.17)$$

donde g es un parámetro muy importante de estos modelos llamado parámetro de anisotropía y que se define como

$$g \equiv \langle \cos \theta \rangle, \quad (2.18)$$

donde θ es el ángulo relativo entre las direcciones anterior y posterior a una colisión cualquiera. La expresión de g es distinta dependiendo de la dimensión del espacio. Para $d = 2$ es

$$g = \int_0^{2\pi} \cos \theta \beta(\theta) d\theta. \quad (2.19)$$

Para el caso tridimensional, como las colisiones sólo dependen del ángulo polar relativo, definimos $\beta(\theta)$ de manera que

$$\beta(\hat{\Omega}|\hat{\Omega}') = \frac{1}{2\pi}\beta(\theta), \quad \text{con } \theta = \text{ángulo}(\hat{\Omega}, \hat{\Omega}'), \quad (2.20)$$

y entonces tenemos

$$g = \int_0^\pi \cos \theta \beta(\theta) \sin \theta d\theta. \quad (2.21)$$

En la Fig-(2.1) se muestran simulaciones de realizaciones de un camino aleatorio persistente para distintos valores del parámetro de anisotropía, g . Se puede apreciar de forma muy evidente el cambio de comportamiento en el transporte al variar este parámetro. La importancia de este parámetro radica en el hecho de que, a tiempos largos, es el único "recuerdo" que el sistema tiene del tipo de colisiones entre las partículas y los centros dispersores. Si asumimos, además, que el término $\partial \vec{j}(\vec{r}, t)/\partial t$ es despreciable frente a los otros términos obtenemos una ecuación de difusión para $p(\vec{r}, t)$

$$\frac{\partial p(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{2}D\nabla^2 p(\vec{r}, t), \quad (2.22)$$

con una constante de difusión

$$D = \frac{2}{3} \frac{v^2}{\lambda(1-g)}. \quad (2.23)$$

Si no despreciamos el término $\partial \vec{j}(\vec{r}, t)/\partial t$ la ecuación que obtenemos es la ecuación del telegrafista

$$\frac{\partial^2 p(\vec{r}, t)}{\partial t^2} + \lambda(1-g)\frac{\partial p(\vec{r}, t)}{\partial t} = \frac{v^2}{3}\nabla^2 p(\vec{r}, t). \quad (2.24)$$

A priori esta ecuación debería ser mejor aproximación que la ecuación de difusión. Sin embargo, presenta graves problemas. En primer lugar es una ecuación en derivadas parciales de tipo hiperbólico con una velocidad de propagación $v/\sqrt{3}$ (para dimensión arbitraria d , la velocidad que se obtiene es v/\sqrt{d}) que está en contradicción con la auténtica

velocidad de propagación de las partículas v . El segundo problema es que en el caso bidimensional las soluciones de la ecuación del telegrafista tienen regiones definidas negativas y, por lo tanto, esta ecuación no representa una densidad de probabilidad. En el caso tridimensional este problema no aparece y las soluciones están definidas positivas pero la convergencia de estas soluciones hacia la solución exacta es más lenta que las soluciones obtenidas directamente de la ecuación de difusión [12]. Por lo tanto, uno de los retos importantes en este campo es encontrar una ecuación diferencial para la densidad $p(\vec{r}, t)$ que realmente mejore a la teoría difusiva para tiempos no tan largos.

2.5 Tiempo de Isotropización

Hemos visto que para tiempos largos estos modelos convergen hacia la teoría de difusión aunque no hemos cuantificado lo que entendemos por tiempos largos. La escala de tiempo necesario para que el sistema se comporte difusivamente es lo que llamaremos tiempo de isotropización y lo denotaremos por τ_{iso} . Existen varios criterios para definir esta escala temporal. Nosotros utilizaremos dos: El criterio de la desviación cuadrática media y el de la distribución de velocidades. El primer criterio se basa en calcular la desviación cuadrática media, $\sigma_x^2(t)$, sobre una dirección y estudiar cual es el tiempo necesario para pasar de un comportamiento balístico (en el que $\sigma_x^2(t) \sim t^2$) a uno difusivo (en el que $\sigma_x^2(t) \sim t$). El otro criterio consiste en calcular la densidad de probabilidad de las velocidades de las partículas y estimar el tiempo necesario para que esta densidad sea uniforme. En general, estos dos criterios coinciden en la estimación del tiempo de isotropización aunque, como veremos, para algunos casos particulares de la función de fase esto no es así.

2.5.1 Desplazamiento Cuadrático Medio

Comenzaremos nuestro análisis notando que $\langle x^2(t) \rangle$ se puede escribir en la forma

$$\langle x^2(t) \rangle = \sum_{M=1}^{\infty} \langle x^2(t)|M \rangle p_t(M), \quad (2.25)$$

donde $\langle x^2(t)|M \rangle$ es el desplazamiento cuadrático medio condicionado a que la partícula haya sufrido $M - 1$ colisiones en un tiempo t . Por lo tanto, la trayectoria será una poligonal con M segmentos. $p_t(M)$ es la probabilidad de que hayan M segmentos en un tiempo t . El cálculo de $\langle x^2(t)|M \rangle$ es un poco complicado debido al hecho de que el

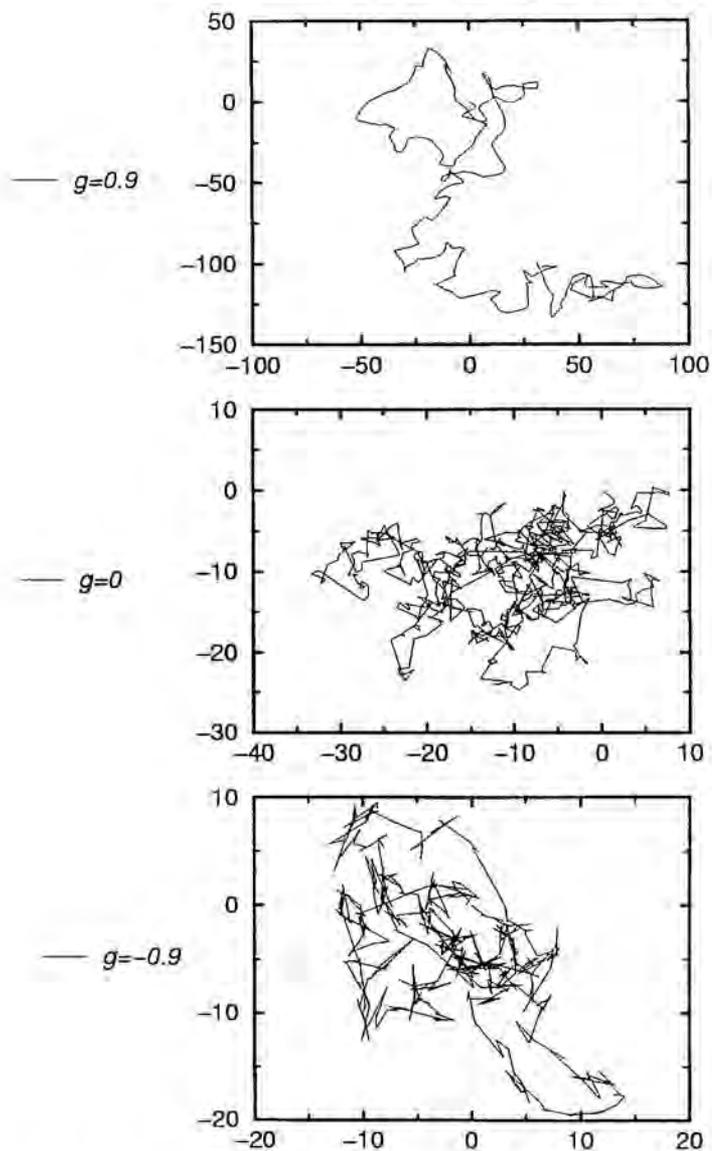


Figura 2.1. Realización de un camino aleatorio persistente en dos dimensiones después de 1000 colisiones. La densidad de tiempos entre colisiones es $\psi(t) = \lambda e^{-\lambda t}$, con $\lambda = 1$ y $v = 1$. En las simulaciones la partícula parte del origen con condiciones iniciales isotópicas. La función de fase que hemos usado en las simulaciones es $\beta(\theta) = (1 - g^2)(2\pi)^{-1}(1 - 2g \cos \theta + g^2)^{-1}$. De arriba a abajo $g = 0.9$, $g = 0$ y $g = -0.9$. Obsérvese la diferencia de escalas entre las distintas figuras.

último segmento no está completo, es decir, no tiene por que haber ocurrido una colisión en el tiempo t y, por lo tanto, el último segmento de la trayectoria es distinto a los demás. Para evitar este problema introducimos una nueva cantidad, $\langle x^2(t)|n, \tau \rangle$, definida como el desplazamiento cuadrático medio condicionado a que hayan n colisiones en un tiempo t y que la longitud del último segmento de la trayectoria sea τ . En términos de esta nueva cantidad podemos escribir

$$\langle x^2(t) \rangle = \int_0^t \sum_{n=0}^{\infty} \langle x^2(t)|n, \tau \rangle p_t(n, \tau) d\tau, \quad (2.26)$$

donde $p_t(n, \tau)$ es la densidad de probabilidad de que hayan n colisiones en un tiempo t y que el intervalo entre el tiempo de la última colisión y t sea τ .

Empezaremos calculando $\langle x^2(t)|n, \tau \rangle$. En lo sucesivo nos concentraremos en el caso bidimensional aunque el resultado es general para cualquier dimensión. El cálculo sigue el método expuesto por Gandjbakhche, Bonner y Nossal en [5]. Para simplificar el cálculo tomamos la velocidad de las partículas igual a la unidad de forma que espacio y tiempo sean equivalentes. La posición sobre el eje X de la partícula en el tiempo t si han habido n colisiones, $n \geq 1$, y no ha habido ninguna colisión entre $t - \tau$ y τ se descompone en

$$x(t) = \sum_{i=1}^n x_i + x_{n+1}, \quad (2.27)$$

donde $x_i = t_i \cos(\beta_i + \phi_0)$ y ϕ_0 representa la dirección del primer segmento de la trayectoria. t_i es la longitud del segmento i -ésimo (ya que hemos tomado la velocidad igual a uno) y β_i es la suma de los ángulos de las colisiones, θ_i , desde la primera hasta la $(i - 1)$ -ésima, es decir

$$\begin{aligned} \beta_i &= \theta_1 + \dots + \theta_{i-1}, & (i \geq 2); \\ \beta_1 &= 0. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Cuando no hay ninguna colisión, ($n = 0$), entenderemos que el primer término de la ecuación (2.27) no contribuye y que $x(t) = x_1 = t \cos(\phi_0)$. Por lo tanto, $\langle x^2(t)|n, \tau \rangle$ tiene la siguiente forma para $n \geq 1$

$$\begin{aligned} \langle x^2(t)|n, \tau \rangle &= \sum_{i=1}^n \langle x_i^2 \rangle + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j<i} \langle x_i x_j \rangle + \langle x_{n+1}^2 \rangle + 2 \sum_{i=1}^n \langle x_i x_{n+1} \rangle \\ &= \sum_{i=1}^n \langle t_i^2 \rangle \langle \cos^2(\beta_i + \phi_0) \rangle + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j<i} \langle t_i t_j \rangle \langle \cos(\beta_i + \phi_0) \cos(\beta_j + \phi_0) \rangle \end{aligned} \quad (2.29)$$

$$+ \langle \cos^2(\beta_{n+1} + \phi_0) \rangle \tau^2 + 2\tau \sum_{i=1}^n \langle t_i \rangle \langle \cos(\beta_i + \phi_0) \cos(\beta_{n+1} + \phi_0) \rangle. \quad (2.30)$$

Para escribir la segunda identidad hemos tenido en cuenta que la duración de un segmento de trayectoria es independiente de la dirección que la partícula tenía antes de la colisión y de la que tendrá después de esta. Además, la correlación entre distintos segmentos t_i y t_j es independiente de i como demostraremos más adelante. Para $n = 0$, τ tiene que ser igual a t y

$$\langle x^2(t)|0, t \rangle = \langle \cos^2(\beta_1 + \phi_0) \rangle t^2. \quad (2.31)$$

Si suponemos que el ángulo inicial ϕ_0 está uniformemente distribuido, entonces

$$\langle \cos^2(\beta_i + \phi_0) \rangle = 1/2, \quad (2.32)$$

y [5]

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j < i} \langle \cos(\beta_i + \phi_0) \cos(\beta_j + \phi_0) \rangle = \frac{g}{2(1-g)} \left(n - \frac{1-g^n}{1-g} \right). \quad (2.33)$$

Un razonamiento similar nos muestra que

$$\langle \cos(\beta_i + \phi_0) \cos(\beta_{n+1} + \phi_0) \rangle = \frac{g(1-g^n)}{2(1-g)}. \quad (2.34)$$

La sustitución de esta ecuación en la ecuación (2.30) nos permite escribir

$$\langle x^2(t)|n, \tau \rangle = \frac{n}{2} \langle t^2|n, \tau \rangle + \Delta(n, \tau) \frac{g}{(1-g)} \left(n - \frac{1-g^n}{1-g} \right) + \frac{\tau^2}{2} + \langle t|n, \tau \rangle \tau g \frac{1-g^n}{1-g}, \quad (2.35)$$

donde $\langle t|n, \tau \rangle$ y $\langle t^2|n, \tau \rangle$ son los momentos de la longitud de cualquier segmento de la trayectoria (ya que están idénticamente distribuidos) cuando hay n colisiones en un tiempo t y la última colisión ocurrió en el tiempo $t - \tau$. El símbolo $\Delta(n, \tau)$ denota la correlación $\langle t_i t_j \rangle$ entre segmentos bajo las mismas condiciones que para $\langle t|n, \tau \rangle$. Esta expresión continúa siendo correcta para $n = 0$ si $\langle t|0, \tau \rangle$, $\langle t^2|0, \tau \rangle$ y $\Delta(0, \tau)$ se toman igual a cero, recordando que en este caso τ es igual que t .

Ahora vamos a concentrarnos en la evaluación de $p_t(n, \tau)$, la densidad de probabilidad de que hayan n colisiones en un tiempo t y que la última colisión haya ocurrido en $t - \tau$. Si tenemos en cuenta que la generación de segmentos constituye un proceso de renovación ordinario [6], esta densidad se escribe

$$p_t(n, \tau) = \psi_n(t - \tau) \Psi(\tau) \quad (n \geq 1), \quad (2.36)$$

y

$$p_t(0, \tau) = \delta(t - \tau)\Psi(\tau), \quad (2.37)$$

donde

$$\Psi(t) = \int_t^\infty \psi(t') dt', \quad (2.38)$$

es, como ya hemos comentado, la probabilidad de supervivencia y $\psi_n(t)$ es la densidad de probabilidad para la longitud total de n segmentos. Si usamos el teorema de convolución de la transformada de Laplace, vemos fácilmente que la transformada de Laplace de $\psi_n(t)$ es

$$\hat{\psi}_n(s) = \hat{\psi}^n(s), \quad (2.39)$$

donde $\hat{\psi}(s)$ es la transformada de Laplace de la densidad de tiempos entre colisiones $\psi(t)$.

El cálculo de $\langle t|n, \tau \rangle$, $\langle t^2|n, \tau \rangle$ y $\Delta(n, \tau)$ resulta bastante laborioso; por lo tanto, aquí daremos el resultado final para no cortar el desarrollo y lo explicitaremos en la sección posterior (2.5.1). El resultado es

$$\langle t|n, \tau \rangle = (t - \tau)/n, \quad (2.40)$$

$$\langle t^2|n, \tau \rangle = h_2(n, t - \tau)/\psi_n(t - \tau), \quad (2.41)$$

$$\Delta(n, \tau) = f(n, t - \tau)/\psi_n(t - \tau), \quad (2.42)$$

$n \geq 1$, y donde la transformada de Laplace de las funciones $h_2(n, t - \tau)$ y $f(n, t - \tau)$ es

$$\hat{h}_2(n, s) = \hat{\psi}_{n-1}(s)\hat{\psi}''(s), \quad (2.43)$$

y

$$\hat{f}(n, s) = \hat{\psi}_{n-2}(s)[\hat{\psi}'(s)]^2. \quad (2.44)$$

Las primas denotan derivadas respecto a la variable de Laplace s .

Si sustituimos la expresión de $p_t(n, \tau)$ y las ecuaciones (2.36)-(2.37) en la ecuación (2.26) podemos escribir

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= \int_0^t \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{n}{2} h_2(n, t - \tau)\Psi(\tau) + f(n, t - \tau)\Psi(\tau) \frac{g}{1-g} \left(n - \frac{1-g^n}{1-g} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\tau^2 \Psi(\tau)}{2} \psi_n(t - \tau) + \frac{\psi_n(t - \tau)\tau}{n} \tau \Psi(\tau) \left(g \frac{1-g^n}{1-g} \right) \right] d\tau. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Usando el teorema de convolución podemos escribir la transformada de Laplace de $\langle x^2(t) \rangle$ como

$$\langle \hat{x}^2(s) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{n}{2} \hat{h}_2(n, s)\hat{\Psi}(s) + \hat{f}(s)\hat{\Psi}(s) \frac{g}{1-g} \left(n - \frac{1-g^n}{1-g} \right) \right]$$

$$+ \hat{\psi}_n(s) \frac{\mathcal{L}\{\tau^2 \Psi(\tau)\}}{2} + \frac{\mathcal{L}\{\psi_n(\tau)\tau\}}{n} \mathcal{L}\{\Psi(\tau)\tau\} \left(g \frac{1-g^n}{1-g} \right) \Big], \quad (2.46)$$

donde $\mathcal{L}\{f(t)\}$ denota la transformada de Laplace de $f(t)$. El caso $n = 0$ se tiene en cuenta en el sumatorio con las prescripciones que hemos explicado más arriba. Tras un poco de álgebra la ecuación (2.46) se reduce a

$$\langle \hat{x}^2(s) \rangle = \frac{1}{s^3} + \frac{\hat{\psi}'(s)}{s^2(1-\hat{\psi}(s))} - \frac{g\hat{\psi}'(s)}{s^2(1-g\hat{\psi}(s))} \quad (2.47)$$

Por lo tanto, hemos obtenido la transformada de Laplace del desplazamiento cuadrático medio sobre el eje X para un CAPTC bidimensional con una densidad de tiempos entre colisiones, $\psi(t)$, arbitraria y con una función de fase, $\beta(\theta)$, general cuando la dirección inicial está uniformemente distribuida [11]. La función de fase sólo aparece en esta expresión a través del parámetro de anisotropía g , (2.18).

No es posible obtener la transformada inversa de $\langle \hat{x}^2(s) \rangle$ para densidades generales de tiempos entre colisiones $\psi(t)$. A pesar de esto, el desplazamiento cuadrático medio se puede escribir formalmente como

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{t^2}{2} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1-g^n}{n} \int_0^t (t-\tau)\tau\psi_n(\tau) d\tau, \quad (2.48)$$

donde $\psi_n(t)$ representa la densidad de probabilidad de la duración de n segmentos.

La ecuación (2.47) se puede generalizar fácilmente al caso tridimensional. Entonces, si la ángulo azimutal está distribuido uniformemente después de cada colisión, tenemos

$$\langle \hat{x}^2(s) \rangle = \frac{2}{d} \left[\frac{1}{s^3} + \frac{1}{s^2} \frac{d}{ds} \ln \left(\frac{1-\hat{\psi}(s)}{1-g\hat{\psi}(s)} \right) \right], \quad (2.49)$$

donde $d = 2, 3$, y con la expresión apropiada de g para cada dimensión. Como hemos considerado condiciones iniciales isotrópicas podemos afirmar que el desplazamiento cuadrático medio radial es

$$\langle r^2(t) \rangle = d \langle x^2(t) \rangle. \quad (2.50)$$

Aplicaciones

Como ya hemos comentado, el caso de una densidad de probabilidad del tiempo entre colisiones exponencial tiene un interés especial al ser una aproximación muy aceptable al transporte en medios homogéneos sin correlaciones espaciales y es particularmente

apropiado para el transporte de luz en medios desordenados. La transformada de Laplace de una densidad exponencial es

$$\mathcal{L}\{\lambda e^{-\lambda t}\} = \frac{\lambda}{\lambda + s}. \quad (2.51)$$

Cuando esta expresión se introduce en la ecuación (2.47) la transformada de Laplace se puede invertir, con lo que se obtiene

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{1}{\lambda^2(1-g)^2} \left[\lambda(1-g)t - 1 + e^{-\lambda(1-g)t} \right]. \quad (2.52)$$

De esta expresión se puede deducir que el tiempo de isotropización es

$$\tau_{iso} = \frac{1}{\lambda(1-g)}. \quad (2.53)$$

Cuando la función de fase es

$$\beta(\theta) = \frac{1}{2\pi} + 2\epsilon \cos \theta, \quad (|\epsilon| \leq \frac{1}{4\pi}), \quad (2.54)$$

el parámetro de anisotropía, g , en dos dimensiones es

$$g = 2\pi\epsilon. \quad (2.55)$$

Entonces, el desplazamiento cuadrático medio coincide con la expresión que obtuvieron Masoliver, Porrà y Weiss en [10] con un método distinto, es decir

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{2}{(1-2\pi\epsilon)^2} \left[(1-2\pi\epsilon)t - 1 + e^{-(1-2\pi\epsilon)t} \right], \quad (2.56)$$

donde aquí λ se tomó igual a uno.

En muchas aplicaciones, el tiempo de observación es mucho mayor que el tiempo medio entre colisiones y, consecuentemente, sólo el comportamiento asintótico del desplazamiento cuadrático medio resulta interesante. Este comportamiento asintótico se puede obtener de la ecuación (2.47) si usamos los teoremas Tauberianos [13]. Consideraremos tres casos distintos: (i) los dos primeros momentos de la distribución del tiempo entre colisiones existen; (ii) el primer momento existe pero no el segundo y; (iii) no existen ni el primer ni el segundo momento. El comportamiento asintótico de los CATC con distribuciones de tiempo sin momentos definidos fué estudiado por primera vez por Shlesinger en la Ref-[15].

Sean los dos primeros momentos de $\psi(t)$, cuando existen, T y T_2 , es decir,

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

$$T_2 = \int_0^{\infty} t^2\psi(t) dt.$$

En el caso (i) ambos momentos existen y de la ecuación (2.47) encontramos

$$\langle x^2(t) \rangle \sim \frac{(1+g)T^2 + (1-g)\sigma^2}{dT(1-g)} t \quad (t \rightarrow \infty), \quad (2.57)$$

donde $\sigma^2 = T_2 - T^2$ y $d = 2, 3$ es la dimensión del espacio. Por lo tanto, el desplazamiento cuadrático medio crece linealmente con el tiempo y el CAPTC se comporta de forma difusiva. Para el caso particular $\psi(t) = \lambda e^{-\lambda t}$ tenemos

$$\langle x^2(t) \rangle \sim \frac{2}{d\lambda(1-g)} t \quad (\text{caso exponencial}) \quad (2.58)$$

como se obtiene también de la ecuación (2.52). Esta expresión es la análoga en el continuo de un resultado encontrado en [5, 16]. Cuando el tiempo entre colisiones es una constante, $\psi(t) = \delta(T-t)$, recuperamos un resultado ya conocido en física de polímeros [17] (con algunos cambios de notación),

$$\langle x^2(t) \rangle \sim \frac{(1+g)T}{d(1-g)} t \quad (\text{tiempo constante}), \quad (2.59)$$

para $t \rightarrow \infty$.

El siguiente caso es cuando T es finito pero el segundo momento no existe. A este fin suponemos un comportamiento asintótico de la densidad del tiempo entre colisiones del tipo ley de potencias $\psi(t) \sim t^{-(2+\alpha)}$ para $t \rightarrow \infty$ y $0 < \alpha < 1$. Entonces, la transformada de Laplace de $\psi(t)$ se comporta como

$$\tilde{\psi}(s) \sim 1 - Ts + (\mu s)^{\alpha+1} \quad (2.60)$$

cuando $s \rightarrow 0$. Si sustituimos esta expresión en la ecuación (2.47) obtenemos que

$$\langle \tilde{x}^2(s) \rangle \sim \frac{\alpha \mu^{\alpha+1}}{T} s^{\alpha-3}, \quad (2.61)$$

para $s \rightarrow 0$. Si ahora utilizamos los teoremas Tauberianos [13] podemos ver que ahora el comportamiento es superdifusivo ya que

$$\langle x^2(t) \rangle \sim \frac{\alpha \mu^{\alpha+1}}{T\Gamma(3-\alpha)} t^{2-\alpha}, \quad (2.62)$$

para $t \rightarrow \infty$. Notese que este resultado es independiente del parámetro de anisotropía g . Este hecho sugiere que el comportamiento superdifusivo se debe a la dispersión infinita de los tiempos entre colisiones.

Finalmente, en el tercer caso, $\psi(t)$ no tiene momentos definidos. Suponemos un comportamiento asintótico del tipo $\psi(t) \sim t^{-(1+\alpha)}$ para $t \rightarrow \infty$ y $0 < \alpha < 1$. Entonces

podemos escribir que $\psi(s) \sim 1 - (\mu s)^\alpha$ y con esta expresión se demuestra que el CAPTC se comporta de forma balística (excepto por un factor que reescala la velocidad):

$$\langle x^2(t) \rangle \sim \frac{(1 - \alpha)}{2} t^2, \quad (2.63)$$

para $t \rightarrow \infty$. Recordemos que para el caso unidimensional estos resultados fueron obtenidos por Masoliver, Lindenberg y Weiss en la Ref-[18].

Correlaciones entre Distintos Segmentos de la Trayectoria

Como ya hemos comentado en una sección precedente, vamos a calcular de forma separada las correlaciones entre los distintos segmentos de la trayectoria. Queremos encontrar la densidad de probabilidad para la longitud del segmento i -ésimo, el j -ésimo, el número de cambios entre $(0, t)$ y la duración del último intervalo, τ . Entonces $p(t_i, t_j, n, \tau) dt_i dt_j d\tau$ nos da la probabilidad de que el segmento i -ésimo tenga una longitud entre t_i y $t_i + dt_i$, el j -ésimo entre t_j y $t_j + dt_j$, hayan n colisiones entre $(0, t)$ y que el último segmento de la trayectoria esté entre τ y $\tau + d\tau$. Teniendo en cuenta que los segmentos t_i forman un proceso de renovación, podemos escribir

$$p(t_i, t_j, n, \tau) = \int_0^{t-\tau-t_i-t_j} dx \int_0^{t-\tau-t_i-t_j-x} dy \Psi(\tau) \psi_{i-1}(x) \psi(t_i) \psi_{j-i-1}(y) \psi(t_j) \psi_{n-j}(t - \tau - t_i - t_j - x - y), \quad (2.64)$$

donde hemos supuesto que $j > i$. Esta expresión se entiende si pensamos que x es la longitud del $(i - 1)$ -ésimo intervalo, que precede al i -ésimo, y que y es la longitud de los segmentos posteriores al i -ésimo y anteriores al j -ésimo. Se puede escribir de una forma mucho más simple si utilizamos la siguiente propiedad de los procesos de renovación ordinarios

$$\psi_n(t) = \int_0^t \psi_{n-1}(t - t') \psi(t') dt', \quad (2.65)$$

y por lo tanto

$$p(t_i, t_j, n, \tau) = \psi(t_i) \psi(t_j) \psi_{n-2}(t - \tau - t_i - t_j) \Psi(\tau). \quad (2.66)$$

De esta densidad de probabilidad se deducen las siguientes densidades condicionadas

$$\begin{aligned} p(t_i, t_j | n, \tau) &= \frac{p(t_i, t_j, n, \tau)}{\int_0^{t-\tau} dt_i \int_0^{t-\tau-t_i} dt_j p(t_i, t_j, n, \tau)} \\ &= \psi(t_i) \psi(t_j) \frac{\psi_{n-2}(t - \tau - t_i - t_j)}{\psi_n(t - \tau)}, \end{aligned} \quad (2.67)$$

y

$$p(t_i|n, \tau) = \psi(t_i) \frac{\psi_{n-1}(t - \tau - t_i)}{\psi_n(t - \tau)}. \quad (2.68)$$

La correlación entre distintos segmentos de la trayectoria condicionada a n colisiones en un tiempo t y con duración del último intervalo igual a τ es

$$\Delta(n, \tau) = \langle t_i t_j \rangle = \int_0^{t-\tau} dt_i \int_0^{t-\tau-t_i} dt_j t_i t_j p(t_i, t_j|n, \tau), \quad (2.69)$$

y después de usar la ecuación (2.67) se puede poner como

$$\Delta(n, \tau) = f(n, t - \tau) / \psi_n(t - \tau). \quad (2.70)$$

La función $f(\cdot)$ se define como

$$f(n, t - \tau) = \int_0^{t-\tau} dt_i \int_0^{t-\tau-t_i} dt_j t_i t_j \psi(t_i) \psi(t_j) \psi_{n-2}(t - \tau - t_i - t_j). \quad (2.71)$$

Por lo tanto, la correlación entre distintos segmentos de trayectoria condicionada a n colisiones es independiente de i y j . Además, la transformada de Laplace de la función $f(\cdot)$ es

$$\mathcal{L}\{f(n, t')\} = \tilde{f}(n, s) = \tilde{\psi}_{n-2}(s) [\tilde{\psi}'(s)]^2 \quad (2.72)$$

De una manera análoga podemos calcular $\langle t^2|n, \tau \rangle$ y también $\langle t|n, \tau \rangle$.

2.5.2 Distribución de Velocidades

El otro método que vamos a utilizar para estimar el tiempo de isotropización es el cálculo de la distribución de velocidades, es decir,

$$p(\hat{\Omega}, t) \equiv \int d\vec{r} p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t). \quad (2.73)$$

Para evaluar $p(\hat{\Omega}, t)$ integramos las ecuaciones (2.3) y (2.5) para todo el espacio y pasamos el tiempo al espacio de Laplace. De este modo encontramos las siguientes ecuaciones integrales

$$\tilde{\rho}(\hat{\Omega}, s) = \tilde{\psi}(s) \left[P_0(\hat{\Omega}) + \int d\hat{\Omega}' \beta(\hat{\Omega}|\hat{\Omega}') \tilde{\rho}(\hat{\Omega}', s) \right] \quad (2.74)$$

$$\tilde{p}(\hat{\Omega}, s) = \tilde{\Psi}(s) \left[P_0(\hat{\Omega}) + \int d\hat{\Omega}' \beta(\hat{\Omega}|\hat{\Omega}') \tilde{\rho}(\hat{\Omega}', s) \right], \quad (2.75)$$

de donde se deduce la siguiente relación entre $\tilde{p}(\hat{\Omega}, s)$ y $\tilde{\rho}(\hat{\Omega}, s)$:

$$\tilde{p}(\hat{\Omega}, s) = \frac{\tilde{\Psi}(s)}{\tilde{\psi}(s)} \tilde{\rho}(\hat{\Omega}, s). \quad (2.76)$$

Por lo tanto, basta con resolver la primera ecuación integral. Como ya hemos comentado, la función de fase depende únicamente del ángulo polar relativo entre las direcciones anterior y posterior a la colisión, θ (recordemos que estamos en dimensión tres), es decir,

$$\beta(\hat{\Omega}|\hat{\Omega}') = \beta(\hat{\Omega} - \hat{\Omega}') = \frac{1}{2\pi}\beta(\theta) \quad (2.77)$$

donde ahora $\beta(\theta)$ está normalizada con medida $\sin \theta d\theta$, es decir,

$$\int_0^\pi \beta(\theta) \sin \theta d\theta = 1. \quad (2.78)$$

Análogamente, los promedios para una función cualquiera $f(\theta)$ se hacen

$$\langle f(\theta) \rangle \equiv \int_0^\pi f(\theta) \beta(\theta) \sin \theta d\theta. \quad (2.79)$$

La función de fase se puede escribir en términos de armónicos esféricos

$$\beta(\hat{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2l+1}{2\pi}} \beta_l \mathcal{Y}_{l0}(\hat{\Omega}), \quad (2.80)$$

donde

$$\beta_l = \int_0^\pi \beta(\theta) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta \quad (2.81)$$

y donde $P_l(\cdot)$ son los polinomios de Legendre. De la definición de β_l podemos ver que

$$\beta_0 = 1, \quad (2.82)$$

que corresponde a la condición de normalización y

$$\beta_1 = \langle \cos \theta \rangle = g, \quad (2.83)$$

que corresponde al parámetro de anisotropía. Toda la complicación del problema radica en la forma de la integral de la ecuación (2.74). Sin embargo, como la función de fase depende sólo del ángulo relativo entre las direcciones anterior y posterior a la colisión, es decir,

$$\beta(\hat{\Omega}|\hat{\Omega}') = \beta(\hat{\Omega} - \hat{\Omega}'), \quad (2.84)$$

podemos utilizar la fórmula para desacoplar armónicos esféricos de ángulos relativos [14]

$$\mathcal{Y}_{l0}(\hat{\Omega} - \hat{\Omega}') = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \sum_{m=-l}^{m=l} \mathcal{Y}_{lm}^*(\hat{\Omega}) \mathcal{Y}_{lm}(\hat{\Omega}'). \quad (2.85)$$

El asterisco significa tomar el complejo conjugado. Con esta identidad y con el desarrollo que hemos hecho de la función de fase, (2.80), podemos poner la integral de la siguiente forma

$$\int \beta(\hat{\Omega}|\hat{\Omega}')\hat{\rho}(\hat{\Omega}, s)d\hat{\Omega}' = \sum_{l=0}^{\infty} \beta_l \sum_{m=-l}^{m=l} \mathcal{Y}_{lm}^*(\hat{\Omega})\hat{\rho}_{lm}^*, \quad (2.86)$$

donde

$$\hat{\rho}_{lm}(s) = \int \hat{\rho}(\hat{\Omega}, s)\mathcal{Y}_{lm}^*(\hat{\Omega})d\hat{\Omega}. \quad (2.87)$$

Ahora sólo falta poner el resto de términos que aparecen en la ecuación (2.74) en función de armónicos esféricos e igualando terminos podemos escribir

$$\hat{\rho}_{lm}(s) = \frac{\hat{\psi}(s)}{1 - \beta_l \hat{\psi}(s)} \langle \mathcal{Y}_{lm}(\hat{\Omega}) \rangle_0. \quad (2.88)$$

El subíndice 0 significa promediar con la distribución angular inicial; más explícitamente

$$\langle \mathcal{Y}_{lm}(\hat{\Omega}) \rangle_0 = \int d\hat{\Omega} P_0(\hat{\Omega}) \mathcal{Y}_{lm}(\hat{\Omega}). \quad (2.89)$$

Finalmente, haciendo uso de la relación (2.76) y volviendo al espacio real la variable temporal encontramos para la distribución de velocidades la expresión

$$p(\hat{\Omega}, t) = \frac{1}{4\pi} + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=-l}^{m=l} D_l(t) \langle \mathcal{Y}_{lm}(\hat{\Omega}) \rangle_0 \mathcal{Y}_{lm}(\hat{\Omega}) \quad (2.90)$$

donde se ha definido

$$D_l(t) \equiv \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1 - \hat{\psi}(s)}{s[1 - \beta_l \hat{\psi}(s)]} \right\}. \quad (2.91)$$

Cuando la distribución de tiempos entre colisiones es exponencial la función $D_l(t)$ toma la forma simple

$$D_l(t) = e^{-\lambda(1-\beta_l)t}. \quad (2.92)$$

Para cada valor de l tenemos un tiempo característico distinto

$$\tau_l = \frac{1}{\lambda(1-\beta_l)} \quad (2.93)$$

y, por lo tanto, el tiempo de isotropización será

$$\tau_{iso} = \max\{\tau_l\}. \quad (2.94)$$

No es posible, en general, decir cual de los $\{\tau_l\}$ será el máximo sin especificar que función de fase estamos usando. A pesar de esto, podemos hacer un análisis cualitativo para

los casos más relevantes. El caso más frecuente, tanto en la literatura como en los experimentos, es el llamado de dispersión *hacia adelante* (forward scattering). Para este tipo de colisiones las partículas, después de colisionar con el centro dispersor, salen en una dirección cercana a la incidente. Para este caso se cumple que

$$\tau_1 > \tau_l \quad \forall l > 1, \quad (2.95)$$

y el tiempo de isotropización coincide con el que se obtiene con el criterio del desplazamiento cuadrático medio, es decir

$$\tau_{iso} = \frac{1}{\lambda(1-g)}. \quad (2.96)$$

Sin embargo, cuando la dispersión es *hacia atrás* (backward scattering), es decir cuando las partículas tienden a salir rebotadas, ocurre que

$$\tau_2 > \tau_1 \quad (2.97)$$

y por lo tanto

$$\tau_{iso} = \frac{1}{\lambda(1-\beta_2)} \quad (2.98)$$

Aquí se ve claramente la ventaja de este método para evaluar el tiempo de isotropización respecto al que utilizamos primero. Otro caso interesante es el de una función de fase con simetría respecto a la dirección perpendicular a la incidente. En este caso es fácil demostrar que

$$\beta_l = 0 \quad (l \text{ impar}) \quad (2.99)$$

y el tiempo de isotropización coincide con el del caso anterior (2.98). Este caso puede inducir a confusión con el caso de colisiones completamente isotrópicas ya que en ese caso $\beta_l = 0 \quad \forall l$. Esto ocurre porque, normalmente, el único parámetro que se tiene en consideración es $\beta_1 = g$. Por lo tanto cuando $g = 0$ se habla de colisiones isotrópicas sin tener en cuenta este tipo particular de colisiones. Para casos más complejos de la función de fase es necesario hacer un análisis particular y estudiar en cada caso cual es el máximo de los tiempos $\{\tau_l\}$.

2.6 La Aproximación de las Fracciones Continuas

Ya hemos comentado que uno de los retos importantes en la teoría de transporte es encontrar aproximaciones para la concentración de partículas, proporcional a $p(\vec{r}, t)$. La

mayoría de las aproximaciones que se suelen utilizar son aproximaciones sobre el proceso global del transporte, es decir, aproximaciones hechas en la ecuación de transporte sobre la densidad $p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$ o sobre el flujo $\vec{j}(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$. Este es el caso de las aproximaciones P_N que, como hemos visto, sólo funcionan bien en el límite difusivo pero no antes [2]. En general, cualquier tipo de aproximación hecha en este sentido modifica la velocidad de propagación del sistema y es razonable pensar que sólo funcionen bien para tiempos largos.

La aproximación que vamos a desarrollar aquí tiene un planteamiento radicalmente distinto porque se basa en hacer aproximaciones sobre la función de fase. Desafortunadamente sólo se ha podido aplicar el método al caso bidimensional. Queda como un futuro trabajo la extensión de este al caso tridimensional. La esencia del método consiste en hacer aproximaciones sobre la función de fase $\beta(\theta)$ que permitan resolver el problema de manera exacta. Esto tiene la ventaja de que la propiedad de velocidad finita de propagación no se ve afectada, es decir, es la solución exacta de un problema con una función de fase aproximada. Como estamos en dimensión dos resulta más conveniente trabajar con desarrollos en serie de Fourier en lugar de los desarrollos en polinomios de Legendre. La función de fase se puede escribir

$$\beta(\theta - \theta') = \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} g_n \hat{\Omega}_n(\theta) \cdot \hat{\Omega}_n(\theta'). \quad (2.100)$$

El intervalo de la serie es $[-\pi, \pi]$ y además hemos supuesto que la función de fase es par. Para acortar la escritura definimos los vectores $\hat{\Omega}_n(\theta)$ como

$$\hat{\Omega}_n(\theta) \equiv \begin{pmatrix} \cos(n\theta) \\ \sin(n\theta) \end{pmatrix}, \quad (2.101)$$

y los coeficientes g_n son

$$g_n \equiv \langle \cos n\theta \rangle. \quad (2.102)$$

Del mismo modo podemos desarrollar la densidad $p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$, que puede escribirse de la forma

$$p(\vec{r}, \theta, t) = \frac{p(\vec{r}, t)}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \vec{j}_n(\vec{r}, t) \cdot \hat{\Omega}_n(\theta), \quad (2.103)$$

donde los flujos $\vec{j}_n(\vec{r}, t)$ están definidos como

$$\vec{j}_n \equiv \int_{-\pi}^{\pi} \hat{\Omega}_n(\theta) p(\vec{r}, \theta, t) d\theta. \quad (2.104)$$

Si introducimos los desarrollos (2.100), (2.103) en la ecuación de transporte obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales acopladas

$$\mathcal{D}_n \vec{j}_n(\vec{r}, t) = \mathcal{H} \vec{j}_{n+1}(\vec{r}, t) + \mathcal{H}^T \vec{j}_{n-1}(\vec{r}, t). \quad (2.105)$$

\mathcal{H} es un operador diferencial matricial definido del siguiente modo

$$\mathcal{H} \equiv -\frac{v}{2} \begin{pmatrix} \partial_x & \partial_y \\ -\partial_y & \partial_x \end{pmatrix}, \quad (2.106)$$

y \mathcal{D}_n es un operador diferencial (respecto al tiempo) definido como

$$\mathcal{D}_n \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \lambda(1 - g_n). \quad (2.107)$$

Naturalmente a estas ecuaciones hay que añadir la ecuación de continuidad (2.12). El sistema de ecuaciones (2.105) tiene el problema de que para cada orden es necesario conocer el orden anterior y el posterior. Esto hace que desacoplar el sistema sea complicado. Sin embargo, es posible hacerlo si suponemos que $\vec{j}_k(\vec{r}, t) = 0 \quad \forall k \geq i$ y despues de desacoplar el sistema hacemos el límite de $i \rightarrow \infty$. Vamos a suponer que la partícula empieza su recorrido en el origen de coordenadas con condiciones iniciales isotrópicas. Esto implica que la solución tendrá simetría cilíndrica y, por lo tanto, basta estudiar la proyección sobre una dirección y finalmente sustituir $x \rightarrow r \equiv |\vec{r}|$. En el espacio de Fourier-Laplace el sistema de ecuaciones (2.105) se escribe

$$\hat{j}_{n+1,x}(\omega_x, s) + \hat{j}_{n-1,x}(\omega_x, s) = \sigma_n \hat{j}_{n,x}(\omega_x, s), \quad (2.108)$$

y la ecuación de continuidad

$$\hat{p}(\omega_x, s) = \frac{1 + \alpha \hat{j}_{1,x}(\omega_x, s)}{s}, \quad (2.109)$$

donde

$$\alpha \equiv -iv\omega_x \quad (2.110)$$

y

$$\sigma_n \equiv \frac{2i}{v\omega_x} [s + \lambda(1 - g_n)]. \quad (2.111)$$

Naturalmente ω_x es la variable de Fourier y s la de Laplace. Con el método que acabamos

de explicar podemos poner la solución en términos de una fracción continua ¹

$$p(\omega_x, s) = \frac{1}{s - \frac{\alpha}{\sigma_1 - \frac{1}{\sigma_2 - \frac{1}{\sigma_3 - \frac{1}{\sigma_4 \dots}}}}} \quad (2.112)$$

Ahora basta sustituir ω_x por $\omega = |\bar{\omega}|$ para encontrar la solución que buscábamos.

2.6.1 Aplicaciones

En principio puede parecer que la solución que acabamos de encontrar es muy formal y sin utilidad. Sin embargo, haciendo ciertas hipótesis sobre los coeficientes σ_n podremos explotar las curiosas propiedades de las fracciones continuas.

Caso completamente Isotrópico

En este caso la función de fase es constante, es decir,

$$\beta(\theta) = \frac{1}{2\pi}. \quad (2.113)$$

Entonces es fácil ver que $g_n = 0$ para $n \geq 1$ y, por lo tanto, $\sigma_n = \sigma$ es independiente de n . Esto simplifica mucho las cosas porque ahora el problema se reduce a encontrar el valor de la siguiente fracción continua

$$\mathcal{M}_{india} \equiv \frac{1}{\sigma - \frac{1}{\sigma - \frac{1}{\sigma - \frac{1}{\sigma \dots}}}} \quad (2.114)$$

Si nos fijamos en la estructura de \mathcal{M}_{india} nos damos cuenta de que debe cumplir la siguiente relación

$$\mathcal{M}_{india} = \frac{1}{\sigma - \mathcal{M}_{india}} \quad (2.115)$$

y por lo tanto

$$\mathcal{M}_{india} = \frac{1}{2} \left(\sigma \pm \sqrt{\sigma^2 - 4} \right). \quad (2.116)$$

¹ Este tipo de fracciones continuas son lo que el matemático Srinavasa Ramanujan llamaba *melodías indias*[19].

Con este resultado y la ecuación (2.112) encontramos la solución que ya encontraron por otro método en [10]

$$\tilde{p}(\omega, s) = \frac{1}{\sqrt{(s + \lambda)^2 + v^2\omega^2} - \lambda}. \quad (2.117)$$

El signo se escoge de manera que $\tilde{p}(\omega = 0, s) = s^{-1}$. Este caso es doblemente interesante porque además es posible invertir la solución de forma exacta [10]. La solución en coordenadas cilíndricas es

$$p(r, t) = e^{-\lambda t} \left[\frac{\delta(r - vt)}{2\pi r} + \frac{\lambda}{2\pi v \sqrt{v^2 t^2 - r^2}} \exp\left(\frac{\lambda}{v} \sqrt{v^2 t^2 - r^2}\right) \Theta(vt - r) \right], \quad (2.118)$$

donde $\Theta(\cdot)$ es la función escalón de Heaviside.

Aproximación de $\mathcal{O}(1)$

Si la función de fase es una función suave podemos aproximarla bastante bien si truncamos su desarrollo en serie de Fourier en algún orden determinado. A modo de ejemplo estudiaremos el caso más simple que consiste en truncar la serie a primer orden, aunque el procedimiento para órdenes mayores será el mismo. Supongamos que

$$\beta(\theta) = \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{\pi} g \cos \theta. \quad (2.119)$$

Hemos sustituido $g_1 \rightarrow g$. Esto implica que $\sigma_n = \sigma$ para $n \geq 2$ y, por lo tanto,

$$\tilde{p}(\omega, s) = \frac{1}{s - \frac{\alpha}{\sigma_1 - \mathcal{M}_{india}}}. \quad (2.120)$$

De aquí se deduce que

$$\tilde{p}(\omega, s) = \frac{s + \lambda(1 - 2g) + \sqrt{(s + \lambda)^2 + v^2\omega^2}}{s \left[s + \lambda(1 - 2g) + \sqrt{(s + \lambda)^2 + v^2\omega^2} \right] + v^2\omega^2}. \quad (2.121)$$

Esta expresión es difícil de invertir, aunque puede servir como base para hacer inversiones numéricas. Lo importante es que conserva todas las propiedades de transporte a velocidad constante. Con este mismo procedimiento es posible hallar aproximaciones a cualquier orden y cada una de las aproximaciones conservará las propiedades reales del transporte.

2.7 Conclusiones

En este capítulo hemos dado una visión general de los caminos aleatorios persistentes a tiempo continuo como un modelo de transporte en medios desordenados. Hemos

comenzado formulando las ecuaciones integrales que nos dan la evolución del caminante. A partir de estas ecuaciones es posible encontrar una conexión con la teoría usual del transporte. Sin embargo, esta conexión sólo es exacta cuando los sucesos ocurren sin ninguna correlación temporal, es decir, siguen un proceso de Poisson. Cuando esto no es así, la teoría del transporte únicamente se muestra válida asintóticamente para tiempos mayores que el tiempo medio entre colisiones. Además, existen casos especiales en los que no es posible escribir una ecuación del transporte, ni siquiera asintóticamente! Es el caso de densidades de tiempos entre colisiones que siguen leyes de potencias. En estos casos, existe algún momento de la distribución a partir del cual todos los momentos sucesivos divergen. Esto provoca un comportamiento superdifusivo y que no sea posible encontrar tal ecuación diferencial para describir el transporte.

Una magnitud muy importante en estos sistemas es el tiempo de isotropización, es decir, el tiempo que tarda el sistema en comportarse difusivamente o, en otras palabras, el tiempo que debemos esperar para que la solución de la ecuación de difusión se ajuste a la solución real. Para encontrar este tiempo hemos utilizado dos métodos. El primero consiste en calcular el desplazamiento cuadrático medio y estimar el tiempo necesario para que $\sigma_x^2(t)$ sea lineal en el tiempo. El otro criterio consiste en calcular la distribución de velocidades del sistema y ver cual es el tiempo necesario para que el sistema se isotropice, es decir, que la probabilidad de encontrar un partícula moviéndose según una dirección determinada sea uniforme. Normalmente, los dos criterios coinciden, aunque para algunos casos especiales, como el de la dispersión hacia atrás, el criterio del desplazamiento cuadrático medio no funciona y hay que recurrir a la distribución de velocidades.

Finalmente, hemos desarrollado un método aproximado para evaluar la densidad de probabilidad de presencia que conserva la propiedad de propagación finita del transporte y, por tanto, puede ser aplicado a cualquier tiempo (no como la teoría difusiva). Desafortunadamente, sólo se ha podido aplicar el método al caso bidimensional. Dejamos para futuros trabajos la extensión al caso tridimensional.

Bibliografía

- [1] G. H. Weiss, *Aspects and Applications of the Random Walk* (North-Holland, Amsterdam, 1994).
- [2] J. J. Duderstadt y W. R. Martin, *Transport Theory* (J. Wiley, New York, 1979).
- [3] A. H. Gandjbakhche y G. H. Weiss, *Prog. Optics* **34**, 333 (1995).
- [4] G. H. Weiss, A. H. Gandjbakhche y J. Masoliver, *J. Mod. Optics* **42**, 1567 (1995).
- [5] A. H. Gandjbakhche, R. F. Bonner, y R. Nossal, *J. Stat. Phys.* **69**, 35 (1992).
- [6] D. R. Cox, *Renewal Theory* (John Wiley, New York, 1966).
- [7] A. Weinberg y E. Wigner, *The Physical Theory of Neutron Chain Reactors* (University of Chicago Press, 1958).
- [8] G. Bell y S. Glasston, *Nuclear Reactor Theory* (Van Nostrand, Princeton, N. J. 1979).
- [9] E. M. Gelbard, *In Computer Methods in Reactor Physics*, (Gordon y Breach, New York, 1968).
- [10] J. Masoliver, J. M. Porrà y G. H. Weiss, *Physica A* **193**, 469 (1993).
- [11] M. Boguñá, J. M. Porrà, J. Masoliver y G. H. Weiss, *Physica A* **230**, 149 (1996).
- [12] J. M. Porrà, J. Masoliver y G. H. Weiss, *Phys. Rev. E* **55**, 7771, (1997).
- [13] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and its Applications* (Wiley, New York, 1971) vol. 2.
- [14] M. Abramowitz y I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1967).

- [15] M. F. Shlesinger, *J. Stat. Phys.* **10**, 421 (1974).
- [16] R. Nossal y G. H. Weiss, *J. Stat. Phys.* **10**, 245 (1974).
- [17] W. J. Taylor, *J. Chem. Phys.* **16**, 257 (1948).
- [18] J. Masoliver, K. Lindenberg y G. H. Weiss, *Physica A* **157**, 891 (1989).
- [19] D. R. Hofstadter, *Gödel, Escher, Bach*, (Tusquets, Barcelona, 1987).

Capítulo 3

Caminos Aleatorios Persistentes en Dimensiones Arbitrarias

3.1 Introducción

Como hemos visto en el capítulo anterior, los caminos aleatorios persistentes a tiempo continuo y la ecuación de transporte nos proveen de un formalismo adecuado para el estudio de los fenómenos de transporte en medios desordenados [3]. Desgraciadamente, resolver este tipo de modelos con toda generalidad para problemas realistas (cambios de medio, barreras, etc) resulta una tarea, sinó imposible, sí demasiado compleja. Este es el motivo por el cual resulta enormemente interesante encontrar modelos de transporte que, sin renunciar a los ingredientes principales, resulten suficientemente simples como para poder ser resueltos analíticamente con la esperanza de que, a pesar de no ser totalmente realistas, nos proporcionen información acerca de los sistemas reales. El modelo que presentamos aquí no es más que una generalización natural a dimensiones arbitrarias del modelo que Goldstein propuso en una dimensión como una alternativa a la teoría de difusión al objeto de tener en cuenta la velocidad finita de propagación de las partículas [4]. El modelo que Goldstein estudió es el paso al límite continuo de un modelo de camino aleatorio persistente (CAP) en una red espacial discreta y a tiempo discreto que introdujeron primero Fürth [1] y poco después Taylor [2]. Como lo físicamente interesante para modelar fenómenos de transporte es el modelo en el continuo, a partir de ahora nos referiremos a este modelo continuo como modelo de Goldstein. Como es bien sabido, la teoría difusiva está descrita por una ecuación de tipo parabólico y, por lo tanto, la

velocidad de propagación de las soluciones es infinita, es decir, una perturbación realizada en un punto concreto del espacio se propaga instantáneamente al resto del espacio. Esto hace que no sea adecuada para tratar problemas donde los tiempos característicos sean muy pequeños. La virtud del modelo de Goldstein es justamente corregir este punto introduciendo una velocidad de propagación finita en el medio.

3.2 CAP en una Dimensión

Supongamos una partícula que se mueve en una red unidimensional de espaciado Δx a saltos de tiempo Δt . A diferencia de los caminantes aleatorios corrientes, suponemos que “nuestro” caminante tiene un cierto grado de inercia, es decir, recuerda en cada instante la dirección en la que viaja. Cuando el caminante llega a un nudo de la red, en el siguiente paso de tiempo tendrá una probabilidad α de continuar en la misma dirección y $1 - \alpha$ de salir en la dirección opuesta. Llamaremos a α probabilidad de persistencia y a esta clase de caminos aleatorios Caminos Aleatorios Persistentes (CAP) [6]. Esta nueva propiedad nos obliga a dar más información para caracterizar el estado de nuestro sistema; ya no basta con conocer la posición de la partícula; hay que decir en que dirección se está moviendo. Esto es una consecuencia de que el sistema no es markoviano respecto a la posición, es decir, la probabilidad de encontrar a la partícula en una posición en un paso de tiempo dado no depende únicamente de la posición que ocupaba en el paso de tiempo anterior; depende además de que velocidad tenía. A pesar de todo, el problema conjunto posición-velocidad sigue siendo markoviano.

Sea $P_n^+(i)$ la probabilidad de que en el paso de tiempo n -ésimo el caminante llegue a la posición i -ésima moviéndose en el sentido positivo del eje X y $P_n^-(i)$ en el sentido negativo. Es fácil comprobar que estas probabilidades satisfacen el siguiente sistema de ecuaciones en diferencias:

$$\left. \begin{aligned} P_{n+1}^+(i) &= \alpha P_n^+(i-1) + (1-\alpha)P_n^-(i-1) \\ P_{n+1}^-(i) &= (1-\alpha)P_n^+(i+1) + \alpha P_n^-(i+1) \end{aligned} \right\} \quad n \geq 0, \quad (3.1)$$

más una condición inicial para $n = 0$. Podemos razonar estas ecuaciones del siguiente modo: la probabilidad de que la partícula llegue al nudo i -ésimo moviéndose hacia la derecha depende de que en el paso anterior esté en la posición $i - 1$. Si llegó a esta posición también moviéndose hacia la derecha deberá conservar la dirección y de ahí que aparezca la probabilidad de persistencia $\alpha P_n^+(i - 1)$. Si llegó moviéndose hacia la izquierda deberá invertir su dirección y por lo tanto debemos poner $(1 - \alpha)P_n^-(i - 1)$.

La ecuación para P_n^- se deduce de idéntica forma.

3.2.1 Límite Continuo. Modelo de Goldstein

A pesar de que el modelo discreto es interesante desde el punto de vista de los caminos aleatorios o como algoritmo para hacer cálculo numérico, en general el límite continuo es más interesante ya que ofrece una visión más realista del transporte. Para pasar al continuo definimos $t \equiv n\Delta t$ y $x \equiv i\Delta x$ con la condición de que

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t} = v. \quad (3.2)$$

De este modo v representa de forma natural la velocidad de propagación de la partícula en el medio. Con estas prescripciones, las probabilidades $P_n^\pm(i)$ se transforman en:

$$P_{n+1}^\pm(i) \longrightarrow p^\pm(x, t) + \Delta t \frac{\partial p^\pm(x, t)}{\partial t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (3.3)$$

$$P_n^\pm(i \pm 1) \longrightarrow p^\pm(x, t) \pm \Delta x \frac{\partial p^\pm(x, t)}{\partial x} + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (3.4)$$

donde $p^\pm(x, t)dx$ es la probabilidad de encontrar a la partícula entre x y $x + dx$ moviéndose en el sentido positivo o negativo del eje X en el instante t . Para hacer el límite continuo de forma correcta aún debemos reescalar la probabilidad de persistencia. La única posibilidad es que $\alpha = 1 - \lambda\Delta t$. De este modo la probabilidad de que la partícula permanezca sin cambiar su dirección durante un tiempo mayor o igual que t , $\Psi(t)$, es:

$$\Psi(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (1 - \lambda\Delta t)^{t/\Delta t} = e^{-\lambda t}, \quad (3.5)$$

por tanto, la densidad de probabilidad del tiempo entre dos cambios consecutivos es $\psi(t) = \lambda e^{-\lambda t}$, es decir, los tiempos entre cambios de dirección siguen un proceso de Poisson de parámetro λ y, entonces, λ^{-1} no es más que el tiempo medio entre dos cambios de dirección o, en el lenguaje de la teoría de transporte, λ es la frecuencia de colisión. Tras todas estas consideraciones podemos finalmente escribir las ecuaciones del sistema en el continuo:

$$\frac{\partial p^+(x, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial p^+(x, t)}{\partial x} - \lambda [p^+(x, t) - p^-(x, t)] \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial p^-(x, t)}{\partial t} = v \frac{\partial p^-(x, t)}{\partial x} + \lambda [p^+(x, t) - p^-(x, t)]. \quad (3.7)$$

Si estamos interesados en la densidad de probabilidad de la posición de la partícula sin importarnos su dirección podemos desacoplar el sistema para la densidad marginal $p(x, t) = p^+(x, t) + p^-(x, t)$, que satisface la conocida ecuación del telegrafista(ET):

$$\frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = v^2 \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2}. \quad (3.8)$$

La ET es una ecuación de tipo hiperbólica con velocidad de propagación finita v . Para tiempos pequeños, es decir $t \ll \lambda^{-1}$, la derivada segunda domina sobre la primera y se recupera la ecuación de ondas mientras que, para tiempos largos, ocurre justamente lo contrario y se recupera la ecuación de difusión [24]

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2}, \quad (3.9)$$

con una constante de difusión $D = v^2/\lambda$.

La solución de la ET para una partícula que parte del origen con condiciones iniciales simétricas es [4, 6]:

$$\begin{aligned} p_{et}(x, t) &= \frac{e^{-\lambda t}}{2v} \delta(t - |x|/v) + \\ &+ \frac{\lambda e^{-\lambda t}}{2v} \left[I_0(\lambda \sqrt{t^2 - x^2/v^2}) + \frac{t}{\sqrt{t^2 - x^2/v^2}} I_1(\lambda \sqrt{t^2 - x^2/v^2}) \right] \Theta(t - |x|/v) \end{aligned} \quad (3.10)$$

donde $I_k(\cdot)$ son funciones de Bessel y $\Theta(\cdot)$ es la función escalón de Heaviside. El primer término de esta solución corresponde a las partículas que no han sufrido ninguna colisión hasta el tiempo t y el segundo a las que han sufrido como mínimo una colisión. A tiempos muy largos, este es el término dominante ya que cada vez hay menos partículas que no han sufrido cambios y la solución converge hacia una distribución gaussiana, tal como predice el teorema del límite central. Resulta fácil comprobarlo si tenemos en cuenta que el desarrollo de las funciones de Bessel para argumentos grandes, que en nuestro caso corresponde a tener $t \gg \lambda^{-1}$ y $x/v \ll t$, es [19]:

$$I_k(\lambda \sqrt{t^2 - x^2/v^2}) \sim \frac{e^{\lambda t}}{\sqrt{2\pi\lambda t}} e^{-\frac{\lambda x^2}{2v^2 t}} \quad \forall k, \quad (3.11)$$

y, por lo tanto,

$$p_{et}(x, t) \sim \sqrt{\frac{\lambda}{2\pi v^2 t}} e^{-\frac{\lambda x^2}{2v^2 t}} \quad t \gg \lambda^{-1}, \quad x/v \ll t \quad (3.12)$$

3.3 CAP en Dimensiones Arbitrarias

Como acabamos de ver, la ET en una dimensión representa una mejora a la teoría de difusión en el sentido de que converge hacia ésta a tiempos largos pero, al mismo tiempo, incorpora la velocidad de propagación finita de las partículas en el medio. Este hecho hizo pensar a muchos autores que la ET en dos y tres dimensiones sería también una mejora respecto a la teoría difusiva, aplicada a fenómenos de transporte reales [15]. Desgraciadamente esto no es así [10, 13]. La ET presenta problemas en dimensión dos (existen regiones donde las soluciones están definidas negativas [9]) amén que la ET que se deriva de la ecuación de transporte tiene una velocidad de propagación reducida en un factor que depende de la dimensión del espacio de la forma v/\sqrt{d} [9]. A pesar de todo, algunos autores sí han conseguido algunos éxitos con la ET especialmente para medios muy absorbentes en los cuales las partículas difusivas son casi siempre absorbidas por el medio y sólo sobreviven las balísticas [16, 17].

Ya que la ET en una dimensión se deriva del modelo de Goldstein, intentaremos generalizarlo a dimensiones mayores y estudiar que tipo de ecuaciones obtenemos en el límite continuo. Al igual que hicimos en una dimensión, comenzaremos nuestro análisis en el discreto para luego pasar al continuo. Supongamos una partícula que “habita” en una red cúbica d -dimensional. Cuando la partícula llega a un nudo de la red tiene una probabilidad α de continuar con el mismo sentido, β de invertirlo y γ de girar hacia algún sentido de las $d - 1$ direcciones restantes¹, donde α , β y γ cumplen la condición de normalización $\alpha + \beta + 2(d - 1)\gamma = 1$. Sea $P_n^{\pm k}(i_1, \dots, i_d)$ $k = 1, \dots, d$, la probabilidad de llegar al nudo de la red (i_1, \dots, i_d) en el paso de tiempo n -ésimo según el sentido positivo o negativo de la dirección k -ésima. De forma análoga al caso unidimensional, las ecuaciones de evolución quedan:

$$P_{n+1}^{(+k)}(i_1, \dots, i_d) = \alpha P_n^{(+k)}(i_1, \dots, i_k - 1, \dots, i_d) + \beta P_n^{(-k)}(i_1, \dots, i_k - 1, \dots, i_d) + \gamma \sum_{j \neq k} \left[P_n^{(+j)}(i_1, \dots, i_k - 1, \dots, i_d) + P_n^{(-j)}(i_1, \dots, i_k - 1, \dots, i_d) \right] \quad (3.13)$$

$$P_{n+1}^{(-k)}(i_1, \dots, i_d) = \beta P_n^{(+k)}(i_1, \dots, i_k + 1, \dots, i_d) + \alpha P_n^{(-k)}(i_1, \dots, i_k + 1, \dots, i_d) + \gamma \sum_{j \neq k} \left[P_n^{(+j)}(i_1, \dots, i_k + 1, \dots, i_d) + P_n^{(-j)}(i_1, \dots, i_k + 1, \dots, i_d) \right] \quad (3.14)$$

¹Nótese que aquí estamos utilizando las palabras *sentido* y *dirección* con el significado habitual de la cinemática.

con $k = 1, \dots, d$. Los dos primeros sumandos de estas ecuaciones son los mismos que en una dimensión mientras que el sumatorio para $j \neq k$ tiene en cuenta las incorporaciones a la dirección k -ésima de partículas que estaban moviéndose según el resto de direcciones.

3.3.1 Límite Continuo

El límite continuo se realiza de manera análoga al caso unidimensional. Supondremos que la velocidad de propagación es la misma para todas las direcciones del espacio, es decir:

$$\lim_{\Delta x_k, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x_k}{\Delta t} = v \quad \forall k. \quad (3.15)$$

Las probabilidades de transición reescalan de la siguiente forma:

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= 1 - \lambda \Delta t \\ \beta &= \tilde{\beta} \lambda \Delta t \\ \gamma &= \frac{\lambda(1 - \tilde{\beta})}{2(d-1)} \Delta t. \end{aligned} \right\} \quad (3.16)$$

Igual que antes, λ es la frecuencia de colisión y la única diferencia es que ahora aparece un nuevo parámetro, $\tilde{\beta}$, que no es más que la probabilidad de retroceso de la partícula condicionada a que haya una colisión. Tras estas consideraciones, el sistema de ecuaciones en el continuo queda:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p^{(+k)}(\vec{r}, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial p^{(+k)}(\vec{r}, t)}{\partial x_k} - \lambda p^{(+k)}(\vec{r}, t) + \lambda \tilde{\beta} p^{(-k)}(\vec{r}, t) + \\ &+ \frac{1}{2} a \sum_{j \neq k} \left[p^{(+j)}(\vec{r}, t) + p^{(-j)}(\vec{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p^{(-k)}(\vec{r}, t)}{\partial t} &= v \frac{\partial p^{(-k)}(\vec{r}, t)}{\partial x_k} - \lambda p^{(-k)}(\vec{r}, t) + \lambda \tilde{\beta} p^{(+k)}(\vec{r}, t) + \\ &+ \frac{1}{2} a \sum_{j \neq k} \left[p^{(+j)}(\vec{r}, t) + p^{(-j)}(\vec{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (3.18)$$

donde $a \equiv (1 - \tilde{\beta})\lambda/(d-1)$, $\vec{r} \equiv (x_1, \dots, x_d)$ y $p^{\pm k}(\vec{r}, t)$ son las densidades de probabilidad de encontrar a la partícula en la posición \vec{r} en el tiempo t moviéndose según el sentido positivo o negativo de la dirección k -ésima.

Este sistema de ecuaciones contiene toda la información del modelo y deberemos regresar a él cuando queramos resolver el problema con fronteras. Sin embargo, ahora

estamos interesados en encontrar la ecuación diferencial que satisface la densidad de probabilidad de la posición de la partícula, $p(\vec{r}, t)$. Si definimos

$$\left. \begin{aligned} U_k(\vec{r}, t) &\equiv p^{(+k)}(\vec{r}, t) + p^{(-k)}(\vec{r}, t) \\ V_k(\vec{r}, t) &\equiv p^{(+k)}(\vec{r}, t) - p^{(-k)}(\vec{r}, t), \end{aligned} \right\} \quad (3.19)$$

esta densidad quedará $p(\vec{r}, t) = \sum_{k=1}^d U_k(\vec{r}, t)$ y el sistema de ecuaciones (3.17,3.18) se convierte en:

$$\frac{\partial U_k(\vec{r}, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial V_k(\vec{r}, t)}{\partial x_k} - aD U_k(\vec{r}, t) + ap(\vec{r}, t) \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial V_k(\vec{r}, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial U_k(\vec{r}, t)}{\partial x_k} - bV_k(\vec{r}, t) \quad (3.21)$$

donde hemos puesto $b \equiv (1 + \tilde{\beta})\lambda$. Si definimos el siguiente operador temporal:

$$\mathcal{D}_\rho \equiv \partial_t + \rho, \quad (3.22)$$

donde ρ es una constante arbitraria, podemos desacoplar el sistema fácilmente para la dirección k -ésima, obteniendo:

$$\mathcal{D}_b [ap(\vec{r}, t) - \mathcal{D}_{ad} U_k(\vec{r}, t)] = -v^2 \frac{\partial^2 U_k(\vec{r}, t)}{\partial x_k^2} \quad k = 1, \dots, d \quad (3.23)$$

Estas ecuaciones se pueden escribir de forma más compacta si definimos el operador diferencial $\mathcal{S}_k \equiv \mathcal{D}_b \mathcal{D}_{ad} - v^2 \partial_{x_k}^2$, que transforma la ecuación (3.23) en:

$$\mathcal{S}_k U_k(\vec{r}, t) = a\mathcal{D}_b p(\vec{r}, t) \quad k = 1, \dots, d. \quad (3.24)$$

Tomando ahora la primera de estas ecuaciones ($k = 1$) y haciendo el cambio

$$U_1(\vec{r}, t) = p(\vec{r}, t) - \sum_{i \neq 1}^d U_i(\vec{r}, t) \quad (3.25)$$

la podemos reescribir como:

$$\mathcal{S}_1 p(\vec{r}, t) - \sum_{i \neq 1}^d \mathcal{S}_1 U_i(\vec{r}, t) = a\mathcal{D}_b p(\vec{r}, t). \quad (3.26)$$

Ahora no hay más que aplicar el operador $\mathcal{S}_2 \cdots \mathcal{S}_d$ a la expresión (3.26) y utilizar (3.24) para desacoplar el sistema que, finalmente, se escribe:

$$\prod_{i=1}^d \mathcal{S}_i p(\vec{r}, t) = a\mathcal{D}_b \sum_{k=1}^d \prod_{i \neq k} \mathcal{S}_i p(\vec{r}, t). \quad (3.27)$$

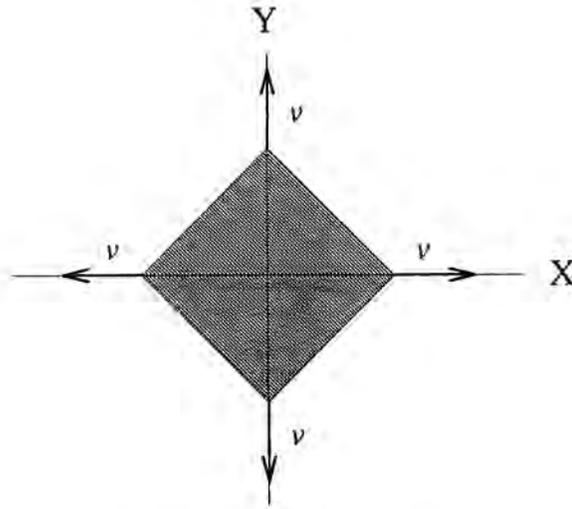


Figura 3.1. Dominio de definición del modelo de Goldstein en dos dimensiones. El dominio es un cuadrado cuyas aristas se alejan del origen a velocidad v .

Resulta conveniente poner esta ecuación de una forma más tratable. Si separamos todos los términos con derivadas espaciales hasta orden dos la podemos escribir de la forma:

$$\left[\partial_t (\partial_t + b)^d (\partial_t + ad)^{d-1} - (\partial_t + b)^{d-1} (\partial_t + ad)^{d-2} (\partial_t + a) v^2 \nabla^2 \right] p(\vec{r}, t) = \Phi_d, \quad (3.28)$$

donde Φ_d es un término que contiene todas las derivadas espaciales cruzadas de orden cuarto y superiores. En particular para $d = 2$ y $d = 3$ tenemos:

$$\Phi_2 = -v^4 \partial_{x^2 y^2}^4 p(\vec{r}, t) \quad (3.29)$$

$$\Phi_3 = \left[v^6 \partial_{x^2 y^2 z^2}^6 - v^4 (\partial_t + b) (\partial_t + 2a) (\partial_{x^2 y^2}^4 + \partial_{x^2 z^2}^4 + \partial_{y^2 z^2}^4) \right] p(\vec{r}, t). \quad (3.30)$$

Aunque esta ecuación puede parecer un tanto compleja y artificial, en realidad refleja el hecho de que el dominio de definición del modelo es un cubo d -dimensional cuyas aristas se propagan a velocidad v en lugar de la habitual esfera, véase la Fig-(3.1). Esto es debido a la particularidad del modelo que sólo admite cambios de dirección ortogonales y, por lo tanto, la partícula "recuerda" la dirección inicial. Es justamente el término Φ_d el que tiene en cuenta la geometría del dominio ya que el operador laplaciano tiene simetría esférica. Por lo tanto, para tiempos largos Φ_d es despreciable frente al término que contiene el operador laplaciano y la ecuación (3.28) tiende asintóticamente a una

ecuación de difusión con

$$D = \frac{2v^2}{\lambda_{ef}d}, \quad (3.31)$$

donde $\lambda_{ef} = (1 + \tilde{\beta})\lambda$. De este modo, recuperamos el resultado del capítulo 2 sin más que darse cuenta de que para este modelo $g \equiv \langle \cos \theta \rangle = -\tilde{\beta}$.

3.3.2 Densidad de Probabilidad Marginal. Un caso particular.

La ecuación (3.28) es complicada de resolver. Sin embargo, podemos obtener cierta información si nos conformamos con estudiar el transporte en una dirección, es decir, la densidad marginal

$$p(x, t) = \int p(\vec{r}, t) dy dz. \quad (3.32)$$

En este caso, $\int \Phi_d dy dz \equiv 0$ y la ecuación (3.28) se reduce a:

$$\partial_t(\partial_t + b)(\partial_t + ad)p(x, t) = v^2(\partial_t + a)\partial_{x^2}^2 p(x, t). \quad (3.33)$$

A esta ecuación se la conoce en la literatura como ecuación de Gurtin y Pipkin [18] y se introdujo como un modelo de transporte de calor en conductores rígidos. Es, igual que la ET, una ecuación de tipo hiperbólico con velocidad de propagación v . En el espacio de Fourier-Laplace resulta bastante sencillo resolverla si suponemos unas condiciones iniciales isótropas, es decir

$$p^{(+k)}(x, t=0) = p^{(-k)}(x, t=0) = \frac{1}{2d}\delta(x), \quad (3.34)$$

o equivalentemente

$$U_k(x, t=0) = \frac{1}{d}\delta(x) \quad (3.35)$$

y

$$V_k(x, t=0) = 0. \quad (3.36)$$

Al ser la ecuación de tercer orden necesitamos tres condiciones iniciales. La primera es:

$$p(x, t=0) = \sum_{k=1}^d U_k(x, t=0) = \delta(x). \quad (3.37)$$

La segunda se obtiene fácilmente de (3.20) y de (3.37) sin más que darse cuenta que:

$$\left. \frac{\partial U_k(x, t)}{\partial t} \right]_{t=0} = -ad\frac{1}{d}\delta(x) + a\delta(x) = 0, \quad (3.38)$$

luego

$$\left. \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} \right]_{t=0} = 0, \quad (3.39)$$

y la tercera se obtiene derivando la ecuación (3.20) respecto al tiempo y utilizando (3.21), (3.37) y (3.39); resultando:

$$\left. \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial t^2} \right]_{t=0} = \frac{v^2}{d} \delta''(x). \quad (3.40)$$

La solución con estas condiciones iniciales y en el espacio libre es:

$$\hat{p}(\omega, s) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-st} e^{-i\omega x} p(x, t) dx dt = \frac{(s + ad)(s + b) + v^2 \omega^2 (1 - 1/d)}{s(s + ad)(s + b) + v^2 \omega^2 (s + a)}. \quad (3.41)$$

Desafortunadamente, no es posible invertir esta expresión analíticamente excepto para un caso muy particular. Aunque sólo sea a modo de ejemplo ilustrativo, vamos a tratar este caso. Si suponemos que el sistema es bidimensional y que la probabilidad de retroceso de las partículas es nula (las partículas sólo pueden avanzar o bien girar noventa grados) entonces se puede comprobar que $a = b = \lambda$ y que la solución es:

$$\hat{p}(\omega, s) = \frac{s + 2\lambda}{s(s + 2\lambda) + v^2 \omega^2} + \frac{1}{2(s + \lambda)} \cdot \frac{v^2 \omega^2}{s(s + 2\lambda) + v^2 \omega^2}. \quad (3.42)$$

El primer término es directamente la solución de la ET y el segundo es una convolución entre una exponencial y la derivada temporal de la solución de la ET. Esto nos permite escribir la solución como:

$$p(x, t) = \frac{1}{2} e^{-\lambda t} \delta(x) + \frac{1}{2} p_{et}(x, t) + \frac{\lambda}{2} e^{-\lambda t} \int_0^t e^{\lambda \tau} p_{et}(x, \tau) d\tau, \quad (3.43)$$

donde $p_{et}(x, t)$ es la solución que encontramos en la sección (3.2.1). El primer término de esta expresión es poco relevante y sólo tiene en cuenta el hecho de que con probabilidad $1/2$ la partícula comienza moviéndose en la dirección del eje Y ; el factor $e^{-\lambda t}$ es la probabilidad de que continúe en este estado durante un tiempo t . Los otros términos son más interesantes; el segundo es directamente la solución de la ET y el tercero es un término que tiene en cuenta que las partículas pueden quedar atrapadas en una posición determinada (recuérdese que sólo estudiamos la proyección sobre el eje X) durante un tiempo aleatorio antes de recobrar el movimiento. En este sentido, este modelo no es más que un modelo de tres estados, a saber, moverse hacia la derecha, hacia la izquierda y estar en reposo con unas probabilidades de transición:

$$Prob\{i \rightarrow j\} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.44)$$

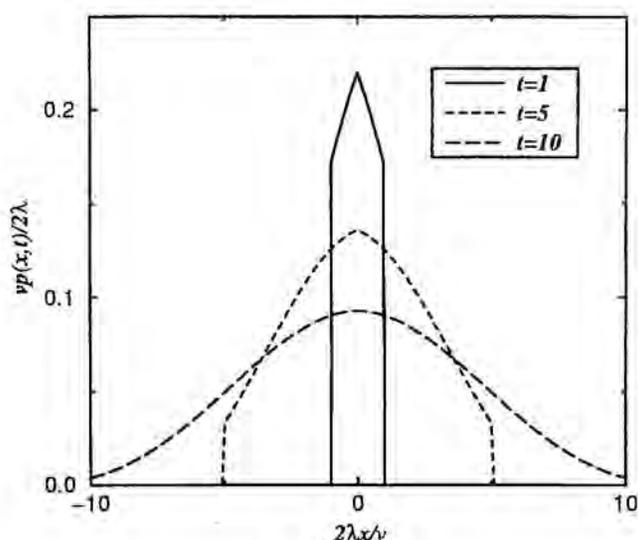


Figura 3.2. Solución de la proyección del modelo de Goldstein con condiciones iniciales simétricas para el caso particular de que $a = b = \lambda$ y $d = 2$. En la figura se muestran las soluciones para $t = 1, 5$ y 10 .

donde $i = 1$ representa moverse hacia la derecha, $i = 2$ hacia la izquierda y $i = 3$ estar en reposo. En la Fig-(3.2) se muestra esta solución para tiempos $t = 1, 5$ y 10 . La discontinuidad en la derivada de esta solución se debe a que el origen de coordenadas actúa como una fuente aleatoria de partículas debido a que las partículas que no comienzan moviéndose según el eje X en $t = 0$ se incorporan al cabo de un tiempo aleatorio t con probabilidad $\lambda e^{-\lambda t}$. Para tiempos largos la solución converge hacia la ecuación de difusión (3.12).

3.4 Modelo de Goldstein con Barreras Absorbentes.

Hasta ahora, únicamente nos hemos preocupado de una descripción formal del modelo respecto a sus propiedades de transporte en un espacio infinito. Sin embargo, son los problemas con contornos los realmente interesantes y los que pueden ser comparados con los experimentos reales. Aunque la aplicabilidad de esta clase de modelos es muy variada, el transporte de luz en medios desordenados (p.ej. tejidos biológicos, nubes o, recientemente, hielo profundo de la Antártida) destaca como uno de los más interesantes

[22, 26, 27, 28, 29, 30, 31]. Es pensando en esta clase de sistemas y en los experimentos que con ellos se realizan, que nos hemos inspirado para introducir contornos en nuestro modelo. La geometría más común en los experimentos es la de una lámina infinita de grosor L en la que se inyecta un haz de luz por una de sus caras y se mide la respuesta del sistema en la cara opuesta.

Antes de entrar en los detalles más técnicos del modelo resulta conveniente analizar un poco las condiciones del experimento. Sea $p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$ la densidad de probabilidad de este problema, es decir, la probabilidad de encontrar a la partícula en la posición \vec{r} , moviéndose en la dirección del vector $\hat{\Omega}$ en el instante t . Supongamos que tenemos un medio finito de contorno \mathcal{V} en el que inyectamos una partícula en la posición \vec{r}_0 con una dirección inicial distribuida según $\phi(\hat{\Omega})$, es decir, la condición inicial $p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t = 0) = \phi(\hat{\Omega})\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$. Si el medio es absorbente, con una frecuencia de absorción λ_a , la densidad de probabilidad se modifica de acuerdo con:

$$p_a(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) = e^{-\lambda_a t} p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t). \quad (3.45)$$

El subíndice a se refiere a que el medio es absorbente. Si en lugar de una partícula incidente tenemos una fuente que inyecta partículas con una intensidad $I_{in}(t)$, el flujo de partículas en un punto \vec{r} moviéndose en una dirección $\hat{\Omega}$ en el instante t será:

$$\vec{j}(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) = v \int_0^t I_{in}(\tau) \hat{\Omega} p_a(\vec{r}, \hat{\Omega}, t - \tau) d\tau. \quad (3.46)$$

En los experimentos únicamente se suelen utilizar dos tipos de fuentes, ó bien una fuente constante para estudiar el regimen estacionario (CWE²) o un pulso ultracorto (TRE³) (con la tecnología actual del orden del femtosegundo). En este último caso, una buena aproximación al flujo de partículas es directamente $v\hat{\Omega}p_a(\vec{r}, \hat{\Omega}, t)$. En el primer caso, si suponemos $I_{in}(t) = I_{in} = cte$ y hacemos el límite $t \rightarrow \infty$ para estudiar el estado estacionario, vemos que la solución no es más que la transformada de Laplace del problema sin absorción donde la variable de Laplace es justamente la frecuencia de absorción, es decir

$$\vec{j}_{st}(\vec{r}, \hat{\Omega}) = vI_{in}\hat{\Omega} \int_0^\infty e^{-\lambda_a t} p(\vec{r}, \hat{\Omega}, t) dt. \quad (3.47)$$

Esto nos indica que basta con tratar el problema sin absorción para una sola partícula para resolver ambos casos.

² *Continuous Wave Experiments*

³ *Time Resolved Experiments*

3.4.1 Planteamiento del Problema

En esta sección estudiaremos el problema de una partícula que penetra en una lámina de grosor L suponiendo que en el interior de la lámina evoluciona de acuerdo con el modelo de Goldstein. Como pretendemos resolver un problema "realista" nos centraremos directamente en el caso tridimensional, aunque el problema para dimensiones arbitrarias resulta análogo.

Supongamos una lámina infinita de grosor L en la que inyectamos una partícula en la dirección normal a la lámina. Suponemos que la dirección incidente coincide con el eje X y que la lámina es paralela al plano $Y-Z$, véase Fig-(3.3). Una de las ventajas del modelo de Goldstein frente a otros modelos es que tanto las condiciones iniciales como las condiciones de contorno son muy fáciles de implementar ya que se trata de un modelo con las velocidades discretizadas y, consecuentemente, los flujos de partículas también están discretizados. Si suponemos que la lámina está definida entre $[0, L]$ las condiciones de contorno son:

$$p^{(+x)}(x=0, y, z, t) \leq p^{(-x)}(x=L, y, z, t) = 0 \quad \forall y, z, t, \quad (3.48)$$

donde los superíndices $(\pm x)$ indican moverse en el sentido positivo o negativo de la dirección X , e igualmente para las direcciones Y y Z . Estas dos condiciones dan cuenta de que ninguna partícula pueda entrar desde el exterior de la lámina. Debemos ser más cuidadosos con las condiciones iniciales ya que no pueden estar en conflicto con las condiciones de contorno. La forma adecuada de implementarlas es suponer que la partícula empieza su recorrido desde el interior de la lamina a una profundidad x_0 y después de realizar todos los cálculos tomar $x_0 = 0$. Esto corresponde a las condiciones iniciales:

$$p^{(+x)}(x, y, z, t=0) = \delta(x-x_0)\delta(y)\delta(z) \quad (3.49)$$

$$p^{(-x)}(x, y, z, t=0) = 0. \quad (3.50)$$

$$p^{(\pm y)}(x, y, z, t=0) = 0. \quad (3.51)$$

$$p^{(\pm z)}(x, y, z, t=0) = 0. \quad (3.52)$$

El sistema de ecuaciones diferenciales que satisfacen las densidades $p^{(\pm)}$ (\vec{r}, t) es el que obtuvimos en la sección anterior, (3.17) y (3.18), pero particularizado a dimensión tres.

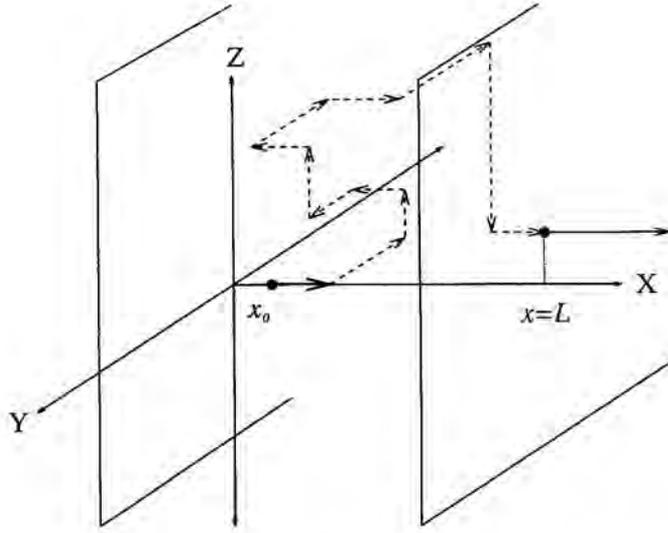


Figura 3.3. Esquema de la realización de una partícula según el modelo de Goldstein en dimensión tres. La partícula penetra en la lámina en x_0 y después de unas cuantas colisiones acaba saliendo por la cara opuesta.

Las ecuaciones para la dirección X son:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p^{(+x)}(\vec{r}, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial p^{(+x)}(\vec{r}, t)}{\partial x} - \lambda p^{(+x)}(\vec{r}, t) + \lambda \bar{\beta} p^{(-x)}(\vec{r}, t) + \\ &+ \frac{1}{4} \lambda (1 - \bar{\beta}) [U_y(\vec{r}, t) + U_z(\vec{r}, t)] \end{aligned} \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p^{(-x)}(\vec{r}, t)}{\partial t} &= v \frac{\partial p^{(-x)}(\vec{r}, t)}{\partial x} - \lambda p^{(-x)}(\vec{r}, t) + \lambda \bar{\beta} p^{(+x)}(\vec{r}, t) + \\ &+ \frac{1}{4} \lambda (1 - \bar{\beta}) [U_y(\vec{r}, t) + U_z(\vec{r}, t)], \end{aligned} \quad (3.54)$$

y análogamente para las direcciones Y y Z . Las funciones $U_y(\vec{r}, t)$ y $U_z(\vec{r}, t)$ son las que definimos en la sección (3.3.1). A partir de este punto trabajaremos en unidades naturales para simplificar la notación. Hacemos $v = 1$ y $\lambda = 1$ que es equivalente a reescalar el espacio y el tiempo del siguiente modo:

$$t \rightarrow \lambda t \quad (3.55)$$

$$\vec{r} \rightarrow \frac{\lambda \vec{r}}{v}. \quad (3.56)$$

Como suponemos que la lámina es infinita podemos pasar al espacio de Fourier las variables y y z y al espacio de Laplace la variable temporal. Esto permite hallar una relación algebraica entre $[\hat{U}_y(x, \vec{\omega}, s) + \hat{U}_z(x, \vec{\omega}, s)]$ y $[\hat{p}^{(+x)}(x, \vec{\omega}, s) + \hat{p}^{(-x)}(x, \vec{\omega}, s)]$ que nos permitirá encontrar un sistema de dos ecuaciones acopladas únicamente para la dirección X ; esta relación es:

$$[\hat{U}_y(x, \vec{\omega}, s) + \hat{U}_z(x, \vec{\omega}, s)] = 2F_{3d}(\vec{\omega}, s) [\hat{p}^{(+x)}(x, \vec{\omega}, s) + \hat{p}^{(-x)}(x, \vec{\omega}, s)], \quad (3.57)$$

donde $\vec{\omega} \equiv (\omega_y, \omega_z)$ es la variable de Fourier, s es la variable de Laplace,

$$F_{3d}(\vec{\omega}, s) \equiv \frac{F_{2d}(\omega_y, s) + F_{2d}(\omega_z, s) + F_{2d}(\omega_y, s)F_{2d}(\omega_z, s)}{4 - F_{2d}(\omega_y, s)F_{2d}(\omega_z, s)} \quad (3.58)$$

y

$$F_{2d}(\omega, s) \equiv \frac{(1 - \tilde{\beta})[s + (1 + \tilde{\beta})]}{[s + (1 - \tilde{\beta})][s + (1 + \tilde{\beta})] + \omega^2}. \quad (3.59)$$

Si sustituimos (3.57) en (3.53) y (3.54) finalmente podemos escribir:

$$\frac{d}{dx} \begin{pmatrix} \hat{p}^{(+x)}(x, \vec{\omega}, s) \\ \hat{p}^{(-x)}(x, \vec{\omega}, s) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h(\vec{\omega}, s) & g(\vec{\omega}, s) \\ -g(\vec{\omega}, s) & -h(\vec{\omega}, s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{p}^{(+x)}(x, \vec{\omega}, s) \\ \hat{p}^{(-x)}(x, \vec{\omega}, s) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta(x - x_0) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.60)$$

donde hemos definido

$$h(\vec{\omega}, s) \equiv \frac{1}{2}(1 - \tilde{\beta})F_{3d}(\vec{\omega}, s) - (s + 1) \quad (3.61)$$

$$g(\vec{\omega}, s) \equiv \frac{1}{2}(1 - \tilde{\beta})F_{3d}(\vec{\omega}, s) + \tilde{\beta}. \quad (3.62)$$

La ecuación (3.60), resuelta con las condiciones de contorno (3.48), contiene toda la información del problema. El problema general para dimensiones arbitrarias tiene la misma estructura aunque cambia la forma de la función $F(\cdot)$. Notese que hemos reducido el problema del transporte en una lámina tridimensional a un problema unidimensional análogo al resuelto por Masoliver *et al.* en [20, 21], donde resolvieron la ET en una dimensión con barreras absorbentes. En ese caso $F_{1d} \equiv 0$ y las funciones $h(\cdot)$ y $g(\cdot)$ toman la forma más simple

$$h(s) = -(s + 1) \quad g(s) = 1. \quad (3.63)$$

3.4.2 Solución Exacta en el Espacio de Fourier-Laplace

La solución de la ecuación (3.60) con las condiciones de contorno (3.48) se puede encontrar fácilmente si diagonalizamos la matriz del sistema y aplicamos el método de Green. Los autovalores de la matriz son $\pm\mu(\vec{\omega}, s)$, donde hemos definido

$$\mu(\vec{\omega}, s) \equiv \sqrt{h^2(\vec{\omega}, s) - g^2(\vec{\omega}, s)}. \quad (3.64)$$

Con este método La solución se puede poner como:

$$\begin{pmatrix} \hat{p}^{(+x)}(x, \vec{\omega}, s) \\ \hat{p}^{(-x)}(x, \vec{\omega}, s) \end{pmatrix} = \begin{cases} \Phi(x, \vec{\omega}, s) \begin{pmatrix} A_1(\vec{\omega}, s) \\ B_1(\vec{\omega}, s) \end{pmatrix} & x \leq x_0 \\ \Phi(x, \vec{\omega}, s) \begin{pmatrix} A_2(\vec{\omega}, s) \\ B_2(\vec{\omega}, s) \end{pmatrix} & x > x_0 \end{cases} \quad (3.65)$$

donde la matriz fundamental del sistema, $\Phi(x, \vec{\omega}, s)$, es:

$$\Phi(x, \vec{\omega}, s) = \frac{1}{g(\vec{\omega}, s)} \begin{pmatrix} [-h(\vec{\omega}, s) + \mu(\vec{\omega}, s)] e^{(-x)\mu(\vec{\omega}, s)} & [-h(\vec{\omega}, s) - \mu(\vec{\omega}, s)] e^{x\mu(\vec{\omega}, s)} \\ g(\vec{\omega}, s) e^{(-x)\mu(\vec{\omega}, s)} & g(\vec{\omega}, s) e^{x\mu(\vec{\omega}, s)} \end{pmatrix}. \quad (3.66)$$

Las constantes $A_1(\vec{\omega}, s)$, $B_1(\vec{\omega}, s)$, $A_2(\vec{\omega}, s)$ y $B_2(\vec{\omega}, s)$ se determinan aplicando las condiciones de contorno en $x = 0$ y $x = L$ más la condición de discontinuidad de las densidades $\hat{p}^{\pm x}(\cdot)$ en $x = x_0$, originada por la condición inicial. Para hallar el valor de la discontinuidad basta con integrar la ecuación (3.60) en un entorno de x_0 , es decir $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$ y tomar el límite $\epsilon \rightarrow 0$, con lo que obtenemos:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \begin{pmatrix} \hat{p}^{(+x)}(x = x_0 + \epsilon, \vec{\omega}, s) \\ \hat{p}^{(-x)}(x = x_0 + \epsilon, \vec{\omega}, s) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \hat{p}^{(+x)}(x = x_0 - \epsilon, \vec{\omega}, s) \\ \hat{p}^{(-x)}(x = x_0 - \epsilon, \vec{\omega}, s) \end{pmatrix} \right\} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.67)$$

Finalmente podemos escribir:

$$B_1(\vec{\omega}, s) = \frac{g(\vec{\omega}, s) [h(\vec{\omega}, s) - \mu(\vec{\omega}, s)]}{2\mu(\vec{\omega}, s)} \frac{\sinh[(x_0 - L)\mu(\vec{\omega}, s)]}{\mu(\vec{\omega}, s) \cosh[L\mu(\vec{\omega}, s)] - h(\vec{\omega}, s) \sinh[L\mu(\vec{\omega}, s)]}, \quad (3.68)$$

$$A_1(\vec{\omega}, s) = \frac{\mu(\vec{\omega}, s) + h(\vec{\omega}, s)}{\mu(\vec{\omega}, s) - h(\vec{\omega}, s)} B_1(\vec{\omega}, s), \quad (3.69)$$

$$B_2(\vec{\omega}, s) = B_1(\vec{\omega}, s) - \frac{g(\vec{\omega}, s)}{2\mu(\vec{\omega}, s)} e^{-x_0\mu(\vec{\omega}, s)}, \quad (3.70)$$

$$A_2(\vec{\omega}, s) = e^{2L\mu(\vec{\omega}, s)} \left[\frac{g(\vec{\omega}, s)}{2\mu(\vec{\omega}, s)} e^{-x_0\mu(\vec{\omega}, s)} - B_1(\vec{\omega}, s) \right]. \quad (3.71)$$

Lo que acabamos de escribir es la solución exacta del problema del transporte a través de una lámina para el modelo de Goldstein. Aunque este es el modelo de transporte más simple que se puede imaginar, nos da una idea de lo complicado que resulta tratar este tipo de problemas para casos más realistas. A pesar de lo complicado de estas expresiones, en las secciones siguientes trataremos de sacarles la máxima información y evaluar magnitudes físicas como el coeficiente de transmisión, el tiempo medio de escape o la concentración de partículas dentro de la lámina.

3.4.3 Probabilidad de Supervivencia. Tiempos Característicos

La probabilidad de supervivencia, $S(t)$, se define como la probabilidad de que la partícula continúe en el interior del sistema en el tiempo t . Estamos suponiendo que los contornos de la lámina son barreras absorbentes y, por lo tanto, si una partícula sale del sistema es imposible que vuelva a entrar. Si llamamos T al tiempo de vida de la partícula, teniendo en cuenta que la partícula puede "morir" bien si se escapa del sistema o bien si es absorbida por el medio, entonces podemos relacionar $S(t) = \text{Prob}\{T > t\}$ con la densidad de probabilidad de presencia de la partícula de la siguiente manera

$$S_a(t) = \int_{\mathcal{D}} d\vec{r} p_a(\vec{r}, t), \quad (3.72)$$

donde \mathcal{D} representa el dominio del sistema y el subíndice a indica que el medio es absorbente con una frecuencia de absorción λ_a . Para nuestra geometría particular y teniendo en cuenta que estamos en el espacio de Fourier-Laplace podemos poner:

$$\tilde{S}_a(s) = [1 + 2F_{3d}(\vec{\omega}, s)] \int_0^L dx \left[\tilde{p}^{(+x)}(x, \vec{\omega}, s) + \tilde{p}^{(-x)}(x, \vec{\omega}, s) \right] \Big|_{\vec{\omega}=0, s=\lambda_a} \quad (3.73)$$

Utilizando las expresiones de $\tilde{p}^{\pm x}(\cdot)$ que dimos en la sección anterior, (3.65), podemos ser más explícitos y escribir:

$$\tilde{S}_a(s) = \frac{2 \sinh(x_-) [h(\vec{\omega}, s') \cosh(x_+) - \mu(\vec{\omega}, s') \sinh(x_+)] + g(\vec{\omega}, s') \sinh(2x_-)}{s' \{ \mu(\vec{\omega}, s') \cosh[L\mu(\vec{\omega}, s')] - h(\vec{\omega}, s') \sinh[L\mu(\vec{\omega}, s')] \}} \Big|_{\vec{\omega}=0, s'=s+\lambda_a} \quad (3.74)$$

donde hemos puesto

$$x_{\pm} \equiv \frac{1}{2}(x_0 \pm L)\mu(\vec{\omega}, s). \quad (3.75)$$

La utilidad de esta expresión es que nos permite evaluar de una forma muy simple los momentos de la densidad del tiempo de supervivencia ya que están relacionados del siguiente modo

$$\tau_n(L, \lambda_a) \equiv \langle T^n \rangle = (-1)^{n-1} n! \left. \frac{d^{n-1} \tilde{S}_a(s)}{ds^{n-1}} \right|_{s=0} \quad (3.76)$$

Para $n = 1$ y poniendo $x_0 = 0$ tenemos el tiempo de vida medio de la partícula en el sistema

$$\tau_1(L, \lambda_a) = \frac{1}{s} \left[1 - \frac{\mu(\vec{\omega}, s) + g(\vec{\omega}, s) \sinh[L\mu(\vec{\omega}, s)]}{\mu(\vec{\omega}, s) \cosh[L\mu(\vec{\omega}, s)] - h(\vec{\omega}, s) \sinh[L\mu(\vec{\omega}, s)]} \right]_{\vec{\omega}=0, s=\lambda_a} \quad (3.77)$$

Hasta ahora teníamos dos escalas de tiempo distintas. El tiempo de isotropización, que como vimos en el Capítulo 2 es $\tau_{iso} = (1 + \tilde{\beta})^{-1}$ y el tiempo medio de absorción $\tau_a = \lambda_a^{-1}$ (recordemos que estamos trabajando en unidades adimensionales). El hecho de introducir contornos en nuestro sistema introduce una nueva escala temporal $\tau_1(L, \lambda_a)$ que depende, además de estos dos tiempos, del tamaño del sistema. En la Fig-(3.4) se muestra el comportamiento de $\tau_1(L, \lambda_a)$ frente a L . Para tamaños pequeños podemos despreciar la absorción y obtenemos el tiempo medio de escapar del sistema

$$\tau_1(L, \lambda_a) \sim 3L, \quad (3.78)$$

que resulta ser el triple del tiempo determinista de cruzar la lámina. Este resultado puede parecer un poco paradójico ya que, en principio, deberíamos recuperar el límite balístico, es decir, $\tau_1(L, \lambda_a) \sim L$. Esto es una peculiaridad del modelo y se debe a que con probabilidad no nula una partícula puede quedar moviéndose paralelamente a la lámina. Para entenderlo mejor vamos a hacer un pequeño cálculo. Queremos calcular la contribución a la probabilidad de supervivencia, $S(t)$, de las partículas que después de la primera colisión quedan moviéndose paralelamente a la lámina. Para ello descomponemos $S(t)$ del siguiente modo

$$S(t) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n(t), \quad (3.79)$$

donde $S_n(t)$ es la probabilidad de supervivencia a tiempo t y con n colisiones. El término $n = 0$ es

$$S_0(t) = e^{-t} \Theta(L - t). \quad (3.80)$$

Si transformamos por Laplace y tomamos $s = 0$ encontramos la contribución al tiempo medio de escape que, para $L \sim 0$, es L . Es decir, el valor determinista. Para $n = 1$ la

contribución a $S(t)$ de las partículas que se quedan en un plano paralelo a la lámina es

$$(1 - \tilde{\beta})e^{-t} \int_0^t \Theta(L - \tau) d\tau, \quad (3.81)$$

con una contribución al tiempo medio de escape cuando $L \sim 0$ de $(1 - \tilde{\beta})L$. Con un argumento similar se puede ver que la contribución a este tiempo medio para $n = i$ es

$$(1 - \tilde{\beta}) \left[\frac{1}{2}(1 + \tilde{\beta}) \right]^{i-1} L. \quad (3.82)$$

Por lo tanto, la contribución total al tiempo medio de salida de las partículas que se mueven paralelamente a la lámina es

$$(1 - \tilde{\beta}) \sum_{i=1}^{\infty} \left[\frac{1}{2}(1 + \tilde{\beta}) \right]^{i-1} L = 2L \quad L \sim 0. \quad (3.83)$$

En general para dimensión d y para $L \sim 0$ tenemos

$$\tau_1(L, \lambda_a) \sim dL. \quad (3.84)$$

Para tamaños grandes la absorción empieza a jugar un papel relevante y $\tau_1(L, \lambda_a)$ tiende a un valor constante

$$\tau_1(L, \lambda_a) \sim \frac{1}{\lambda_a} \left(1 + \frac{\sigma}{1 - \sqrt{1 - \sigma^2}} \right), \quad (3.85)$$

donde

$$\sigma \equiv \left. \frac{g(\vec{\omega}, s)}{h(\vec{\omega}, s)} \right|_{\omega=0, s=\lambda_a}. \quad (3.86)$$

Todo esto nos permitirá responder a la siguiente pregunta: ¿A partir de que valor de L la absorción empieza a ser relevante? La respuesta es simple si nos fijamos que L sólo aparece como argumento de funciones hiperbólicas en la forma $L\mu(\vec{\omega}, s)$ y por lo tanto el cambio de comportamiento se dará para un valor

$$L_c = \left. \frac{1}{\mu(\vec{\omega}, s)} \right|_{\omega=0, s=\lambda_a}. \quad (3.87)$$

Es bastante común en los experimentos que $\lambda_a \ll (1 + \tilde{\beta})$. En estas condiciones

$$\mu(\vec{\omega} = 0, s = \lambda_a) \sim \sqrt{3\lambda_a(1 + \tilde{\beta})}, \quad (3.88)$$

y definiendo la longitud de absorción y de isotropización como $l_a \equiv \lambda_a^{-1}$ y $l_{ef} \equiv (1 + \tilde{\beta})^{-1}$ podemos escribir

$$L_c = \sqrt{\frac{1}{3} l_a l_{ef}}. \quad (3.89)$$

Donde L_c es el valor puente entre los dos comportamientos. Si definimos $l_a \equiv \kappa l_{ef}$ podemos reescribirlo como

$$L_c = l_{ef} \sqrt{\frac{1}{3} \kappa}. \quad (3.90)$$

Este resultado es particularmente importante para los experimentos ya que el tamaño máximo que se puede utilizar sin tener en cuenta la absorción es más pequeño de lo que podríamos suponer *a priori*. Este hecho podría producir una subestimación del coeficiente de difusión que se mide experimentalmente ya que la teoría que se utiliza para interpretar los resultados es la teoría de difusión, la cual, justamente, funciona razonablemente bien sólo para tamaños grandes. Esto nos indica que hay que ser extremadamente cuidadosos con las condiciones en las que se realiza el experimento y con la teoría de transporte que se usa para interpretar los resultados. Sin embargo, la ecuación (3.90) la hemos obtenido con un modelo muy particular. Aunque podemos sospechar que este resultado tiene un rango de validez más amplio debemos ser reservados en este punto y dejar como un trabajo futuro el generalizarlo a modelos más realistas.

Otro tiempo importante desde el punto de vista experimental es el tiempo medio de atravesar la lámina, es decir, el tiempo de escape de la lámina condicionado a salir por la cara opuesta a la que se ha entrado. Este tiempo es más relevante ya que en los experimentos únicamente se cuentan los fotones que atraviesan la lámina mientras que los que salen reflejados no son tenidos en cuenta. Para calcular este tiempo característico supondremos que el tamaño de la lámina es tal que los efectos de la absorción son despreciables. El cálculo con absorción es, si bien más complicado, análogo. Sin embargo, ahora estamos interesados en estudiar las diferencias entre nuestro modelo (modelo con velocidad de propagación finita) y el modelo difusivo (con velocidad de propagación infinita) y para ello resulta más conveniente separar ambos efectos. Necesitamos conocer la densidad de probabilidad del tiempo de llegada a la cara opuesta a la de entrada, $p_{out}(t)$. Si llamamos $j_{out}(t)$ al flujo total de partículas que salen por esta cara es fácil convencerse de que

$$p_{out}(t) = \frac{j_{out}(t)}{\int_0^{\infty} j_{out}(t') dt'}. \quad (3.91)$$

Para nuestro modelo $j_{out}(t) = v \hat{p}^+(x = L, \bar{\omega} = 0, t)$, por lo tanto, en el espacio de laplace tenemos

$$\bar{p}_{out}(s) = \frac{\bar{p}^+(x = L, \bar{\omega} = 0, s)}{\bar{p}^+(x = L, \bar{\omega} = 0, s = 0)}. \quad (3.92)$$

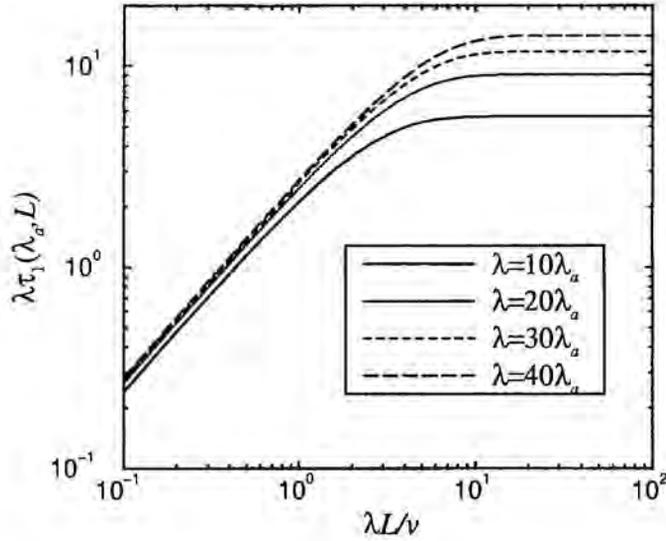


Figura 3.4. $\tau_1(\lambda_a, L)$ frente a L en escala $\log - \log$ para $\lambda = 10\lambda_a, 20\lambda_a, 30\lambda_a$ y $40\lambda_a$. Se observa claramente el cambio de comportamiento debido a los efectos de la absorción. $\tilde{\beta} = 0.5$.

Finalmente, sabiendo que

$$\tau_{out}(L) \equiv \langle t_{out} \rangle = - \left[\frac{d\tilde{p}_{out}(s)}{ds} \right]_{s=0} \quad (3.93)$$

podemos encontrar la expresión exacta para este tiempo característico

$$\tau_{out}(L) = \frac{L}{2} \frac{8 + 6(L/l_{ef}) + (L/l_{ef})^2}{2 + (L/l_{ef})}. \quad (3.94)$$

Para $L/l_{ef} \ll 1$ tiende a

$$\tau_{out}(\lambda, L) \sim 2L. \quad (3.95)$$

Este valor es el doble del tiempo determinista necesario para cruzar la lámina. Este es el mismo efecto que encontramos en el tiempo medio de salida y se debe a la contribución de las partículas que se mueven paralelamente a la lámina. Aunque este efecto es muy particular de este modelo se han encontrado anomalías semejantes, es decir, no convergencias con el valor determinista en el límite $L/l_{ef} \rightarrow 0$, en momentos de orden superior [32, 33]. Para $L/l_{ef} \gg 1$ tenemos

$$\tau_{out}(\lambda, L) \sim \frac{L^2}{2l_{ef}}, \quad (3.96)$$

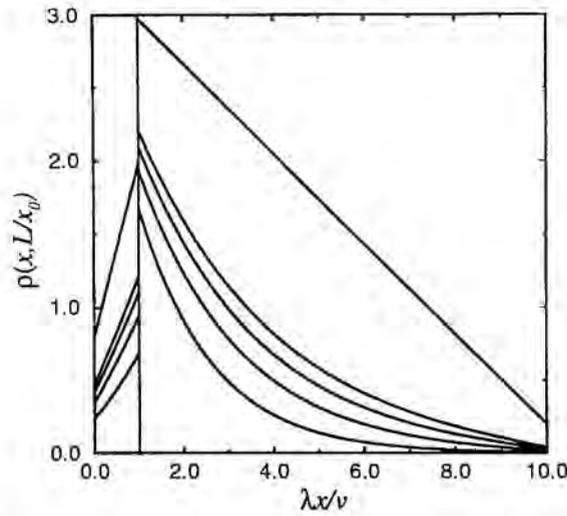


Figura 3.5. Perfil de la concentración de partículas en el interior de la lámina para $\tilde{\beta} = 0.5$, $\lambda = 10\lambda_a, 20\lambda_a, 30\lambda_a, 40\lambda_a, 10^4\lambda_a$, $x_0 = 1$ y $L = 10$. Se aprecia claramente la discontinuidad en $x = x_0$. Cuando la absorción es fuerte el comportamiento es exponencial y cuando es débil el comportamiento es lineal.

que concuerda con el resultado que se obtiene con la teoría de difusión. El cambio de comportamiento entre ambos límites se da cuando

$$\frac{L}{l_{ef}} \sim 6. \quad (3.97)$$

El tamaño mínimo a partir del cual funciona la teoría difusiva es, para este modelo, relativamente grande. Este hecho hace que el compromiso entre los tamaños necesarios para poder aplicar el modelo difusivo y para no tener en cuenta la absorción sea difícil de alcanzar y nos muestra la necesidad de estudiar modelos más realistas que incorporen la velocidad finita de propagación en el medio.

3.4.4 Densidad Estacionaria

En esta sección estudiaremos como queda la concentración de partículas dentro de la lámina en el estado estacionario. Como ya comentamos en la sección 3.4, para estudiar el estado estacionario suponemos que tenemos una fuente de partículas constante y que hacemos el límite $t \rightarrow \infty$. Esto es equivalente a estudiar el problema de una única partícula en el espacio de Laplace y tomar $s = 0$. Sea $\rho_a(x, L/x_0)$ la concentración de

partículas en el interior de la lámina para un medio absorbente condicionada a que las partículas penetren en $x = x_0$ moviéndose hacia la derecha. Esta concentración contiene un término procedente de las partículas que se mueven hacia las paredes de la lámina y otro término que da cuenta de las partículas que se mueven paralelamente a la lámina. Por lo tanto

$$\rho_a(x, L/x_0) = [1 + 2F_{3d}(\vec{\omega}, s)] \left[\bar{p}^{(+x)}(x, \vec{\omega}, s) + \bar{p}^{(-x)}(x, \vec{\omega}, s) \right]_{\vec{\omega}=0, s=\lambda_a} \quad (3.98)$$

Si usamos la solución que encontramos en la sección (3.60) juntamente con las expresiones para las constantes (3.68)-(3.71) podemos poner la concentración como

$$\rho_a(x, L/x_0) = \left. \begin{aligned} & \frac{2s + 3(1 - \tilde{\beta})}{2s + (1 - \tilde{\beta})} \Gamma_-(\vec{\omega}, s) \times \\ & \{ [h(\vec{\omega}, s) - g(\vec{\omega}, s)] \sinh[x\mu(\vec{\omega}, s)] - \\ & - \mu(\vec{\omega}, s) \cosh[x\mu(\vec{\omega}, s)] \} \end{aligned} \right]_{\vec{\omega}=0, s=\lambda_a} \quad x < x_0 \quad (3.99)$$

$$\rho_a(x, L/x_0) = \left. \begin{aligned} & \frac{2s + 3(1 - \tilde{\beta})}{2s + (1 - \tilde{\beta})} \Gamma_+(\vec{\omega}, s) \times \\ & \{ [g(\vec{\omega}, s) - h(\vec{\omega}, s)] \sinh[(x - L)\mu(\vec{\omega}, s)] - \\ & - \mu(\vec{\omega}, s) \cosh[(x - L)\mu(\vec{\omega}, s)] \} \end{aligned} \right]_{\vec{\omega}=0, s=\lambda_a} \quad x \geq x_0 \quad (3.100)$$

donde

$$\Gamma_-(\vec{\omega}, s) = \frac{g(\vec{\omega}, s) \sinh[(x_0 - L)\mu(\vec{\omega}, s)]}{\mu(\vec{\omega}, s) \{ \mu(\vec{\omega}, s) \cosh[L\mu(\vec{\omega}, s)] - h(\vec{\omega}, s) \sinh[L\mu(\vec{\omega}, s)] \}} \quad (3.101)$$

y

$$\Gamma_+(\vec{\omega}, s) = - \frac{\mu(\vec{\omega}, s) \cosh[x_0\mu(\vec{\omega}, s)] - h(\vec{\omega}, s) \sinh[x_0\mu(\vec{\omega}, s)]}{\mu(\vec{\omega}, s) \{ \mu(\vec{\omega}, s) \cosh[L\mu(\vec{\omega}, s)] - h(\vec{\omega}, s) \sinh[L\mu(\vec{\omega}, s)] \}} \quad (3.102)$$

En la Fig-(3.5) se muestran estas concentraciones para distintos valores de la frecuencia de absorción. Cuando el medio es absorbente el perfil es exponencial mientras que para medios poco absorbentes converge hacia un comportamiento lineal

$$\rho(x, L/x_0) = \frac{3(L - x_0)(1 + x)}{2l_{ef} + L} \quad x < x_0 \quad (3.103)$$

$$\rho(x, L/x_0) = \frac{3(2l_{ef} + x_0)(l_{ef} + L - x)}{l_{ef}(2l_{ef} + L)} \quad x \geq x_0 \quad (3.104)$$

La discontinuidad que aparece en $x = x_0$ es una consecuencia de inyectar las partículas desde esa posición únicamente en la dirección positiva. Para un problema realista basta con hacer $x_0 = 0$ y quedarse con la expresión para $x \geq x_0$. Esta discontinuidad también se observa cuando se utiliza la ET como modelo de transporte [17]. En realidad es una característica común a todos los modelos que mantienen la propiedad de velocidad finita de las partículas en el medio.

3.4.5 Coeficientes de Reflexión y de Transmisión

Para cerrar este capítulo vamos a calcular los coeficientes de transmisión y de reflexión de nuestro modelo. Estos coeficientes, y especialmente el de transmisión, son importantes para los experimentos ya que nos informan de la fracción de partículas que consiguen escapar del sistema. Concretamente, definimos el coeficiente de transmisión, $T(L, \lambda_a)$, como la probabilidad de que una partícula inyectada dentro de la lámina salga por la cara opuesta, independientemente del tiempo que tarde en conseguirlo. El coeficiente de reflexión, $R(L, \lambda_a)$, se define del mismo modo con la salvedad de que la partícula ahora debe salir por la misma cara por la que entró. Si el sistema es absorbente, la suma de estos dos coeficientes nos da la probabilidad de que la partícula sea absorbida en el interior de la lámina y por lo tanto asociando una cantidad de energía a cada partícula, nos informa del ritmo de absorción de energía por el sistema en el estado estacionario.

Para un modelo general, el coeficiente de transmisión está relacionado con el flujo total de partículas que salen por la cara opuesta, es decir

$$T(L, \lambda_a) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} dt \int d\hat{\Omega} \cdot \vec{j}_a(x = L, y, z, \hat{\Omega}, t). \quad (3.105)$$

Como el modelo de Goldstein tiene la propiedad de tener los flujos discretizados esta expresión se simplifica considerablemente de manera que podemos escribir

$$T(L, \lambda_a) = v\bar{p}^{(+x)}(x = L, \vec{\omega} = 0, s = \lambda_a) \quad (3.106)$$

y análogamente para el coeficiente de reflexión

$$R(L, \lambda_a) = v\bar{p}^{(-x)}(x = 0, \vec{\omega} = 0, s = \lambda_a). \quad (3.107)$$

Si suponemos que $x_0 = 0$ las expresiones que obtenemos para $T(L, \lambda_a)$ y $R(L, \lambda_a)$ son

$$T(L, \lambda_a) = \left. \frac{\mu(\vec{\omega}, s)}{\mu(\vec{\omega}, s) \cosh[L\mu(\vec{\omega}, s)] - h(\vec{\omega}, s) \sinh[L\mu(\vec{\omega}, s)]} \right]_{\vec{\omega}=0, s=\lambda_a} \quad (3.108)$$

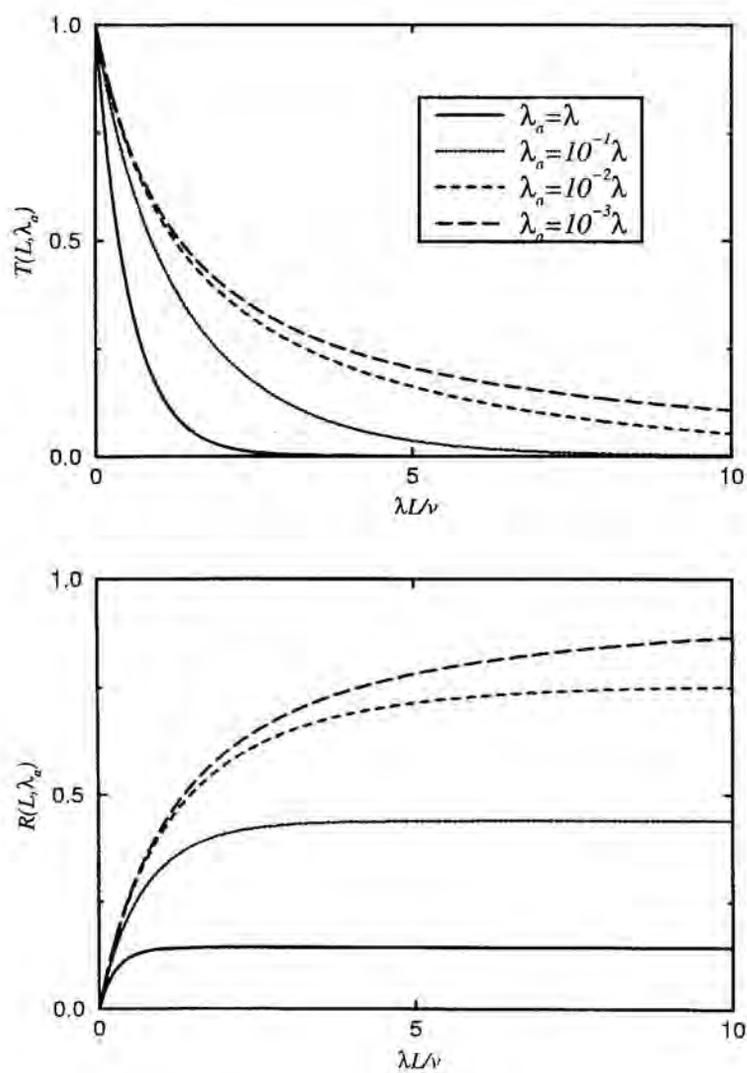


Figura 3.6. Coeficientes de transmisión y de reflexión frente al tamaño del sistema para $\bar{\beta} = 0.5$ y frecuencias de absorción $\lambda = \lambda_a, 10\lambda_a, 10^2\lambda_a, 10^3\lambda_a$.

$$R(L, \lambda_a) = \frac{g(\vec{\omega}, s) \sinh[L\mu(\vec{\omega}, s)]}{\mu(\vec{\omega}, s) \cosh[L\mu(\vec{\omega}, s)] - h(\vec{\omega}, s) \sinh[L\mu(\vec{\omega}, s)]} \Big|_{\vec{\omega}=0, s=\lambda_a} \quad (3.109)$$

Para el caso de absorción nula, estas expresiones se transforman en

$$T(L, \lambda_a = 0) = \frac{2l_{ef}}{2l_{ef} + L} \quad (3.110)$$

y

$$R(L, \lambda_a = 0) = \frac{\bar{L}}{2l_{ef} + L} \quad (3.111)$$

recuperando así el comportamiento clásico para estos coeficientes. Notese que ahora sí se verifica la condición de normalización $T(L, \lambda_a = 0) + R(L, \lambda_a = 0) = 1$. En la Fig-(3.6) se muestran los comportamientos de $T(L, \lambda_a)$ y $R(L, \lambda_a)$ frente al tamaño del sistema para distintos valores de λ_a .

3.5 Conclusiones

Durante la última década, los experimentos de transporte de luz en medios biológicos se han desarrollado enormemente y han puesto de manifiesto la necesidad de sustituir la teoría de transporte difusiva clásica por una teoría más realista que incorpore la velocidad de propagación finita de los fotones dentro de estos medios. Con este ánimo hemos estudiado el modelo de Goldstein. No puede decirse que el modelo de Goldstein sea un modelo completamente realista debido a la particularidad de sus colisiones aunque es justamente esta particularidad la que hace de él un modelo simple y lo que es más importante resoluble analíticamente. En este sentido, nos ha permitido encontrar una ecuación diferencial exacta que describe la densidad de probabilidad de la posición de las partículas y hemos podido comprobar que en dos y tres dimensiones no guarda ningún parecido con la ET (supuestamente mejor que la difusión). Aunque esta ecuación es ciertamente compleja, la proyección sobre una dirección está gobernada por una ecuación mucho más simple y en un caso particular hemos podido resolverla.

El modelo de Goldstein nos ha permitido también atacar un problema mucho más interesante como es el transporte a través de una lámina. En este sentido hemos visto que el grosor a partir del cual la absorción del medio es despreciable es sensiblemente menor de lo esperado *a priori* y en el otro extremo, que la teoría difusiva deja de funcionar mucho antes de lo esperado. Esto evidencia aún más si cabe la no idoneidad de esta teoría para casos reales donde el grosor típico de la lámina es de unas pocas longitudes de transporte. También hemos calculado magnitudes físicas relevantes como los tiempos

característicos, la concentración de partículas en el medio y los coeficientes de transmisión y de reflexión.

A pesar de los muchos defectos del modelo de Goldstein, tiene las virtudes de ser simple, exacto y resoluble lo que compensa con creces sus defectos. La principal conclusión que podemos sacar de este capítulo es la necesidad de estudiar modelos que corrijan estos defectos sin perder la simplicidad. Una extensión natural a este trabajo sería la construcción de modelos sobre redes no cúbicas que permitan un mayor número de direcciones de propagación. De este modo se podrían incluir los detalles más finos de las colisiones entre las partículas y los centros dispersores del medio y corregir así el principal problema que presenta el modelo de Goldstein.

Bibliografía

- [1] R. Fürth, *Ann. Phys. (leipzig)* **53**, 177 (1917).
- [2] G. I. Taylor, *Proc. London Math. Soc. (2)* **20**, 196 (1922).
- [3] J. J. Duderstadt y W. R. Martin, *Transport Theory* (J. Wiley, New York, 1979).
- [4] S. Goldstein, *Quart. J. Mech. Appl. Math.* **IV**, 129 (1951).
- [5] D. D. Joseph y L. Preziosi, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 41 (1989); **62**, 375 (1990).
- [6] G. H. Weiss, *Aspects and Applications of the Random Walks* (North-Holland, Amsterdam, 1994).
- [7] J. Masoliver y G. H. Weiss, *Eur. J. Phys.* **17**, 190 (1996).
- [8] M. Boguñá, J. M. Porrà, J. Masoliver, *Phys. Rev. E* **58**, xxxx (1998) (en prensa).
- [9] J. M. Porrà, J. Masoliver y G. H. Weiss, *Phys. Rev. E* **55**, 7771 (1997).
- [10] J. Masoliver, J. M. Porrà y G. H. Weiss, *Physica A* **182**, 593 (1992).
- [11] J. Masoliver, J. M. Porrà y G. H. Weiss, *Physica A* **193**, 469 (1993).
- [12] S. Godoy y L. S. García-Colín, *Phys. Rev. E* **55**, 2127 (1997).
- [13] J. Masoliver, J. M. Porrà y G. H. Weiss, *Physica A* **218**, 229 (1995).
- [14] A. J. Ishimaru, *Wave Propagation and Scattering in Random Media* (Academic, New York, 1978), Vol I.
- [15] A. J. Ishimaru, *Appl. Opt.* **28**, 2210 (1989).
- [16] D. J. Durian y J. Rudnick, *J. Opt. Soc. Am. A* **14**, 235 (1997).

- [17] P. A. Lemieux, M. U. Vera y D. J. Durian, *Phys. Rev. E* **57**, 4498 (1998).
- [18] M. E. Gurtin y A. C. Pipkin, *Arch. Ration. Mech. Anal* **31**, 113 (1968).
- [19] P. M. Morse y H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (Mc Graw-Hill, New York, 1953).
- [20] J. Masoliver, J. M. Porrà y G. H. Weiss, *Phys. Rev. A* **45**, 2222 (1992).
- [21] J. Masoliver, J. M. Porrà y G. H. Weiss, *Phys. Rev. E* **48**, 939 (1993).
- [22] B. B. Das, Feng Liu y R. R. Alfano, *Rep. Prog. Phys.* **60**, 227 (1997).
- [23] K. M. Yoo, Feng Liu y R. R. Alfano, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2647 (1990).
- [24] J. Masoliver, *Phys. Rev. A* **45**, 706 (1992).
- [25] J. Masoliver, J. M. Porrà y G. H. Weiss, *Phys. Rev. A* **45**, 2222 (1992).
- [26] A. H. Gandjbakhche y G. H. Weiss, *Prog. Opt.* **34**, 333 (1995).
- [27] P. Askebjerg *et al.*, *Science* **267**, 1147 (1995).
- [28] Rik H. J. Kop, P. de Vries, R. Sprik y A. Logendijk, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4369 (1997).
- [29] J. M. Drake y A. Z. Genack, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 259 (1989).
- [30] D. J. Durían, *Phys. Rev. E* **50**, 857 (1994).
- [31] J. H. Li *et al.*, *EuroPhys. Lett.* **22**, 675 (1993).
- [32] C. R. Doering, T. S. Ray y M. L. Glasser, *Phys. Rev. A* **45**, 825 (1992).
- [33] T. S. Ray, M. L. Glasser y C. R. Doering, *Phys. Rev. A* **45**, 8573 (1992).

Capítulo 4

Fenómenos de Activación Resonante

4.1 Introducción

Los fenómenos de no equilibrio inducidos por ruido en sistemas no lineales han atraído recientemente una gran atención en contextos muy variados [1]. En general, estos fenómenos involucran una respuesta del sistema que no sólo está producida o mejorada por la presencia del ruido sino que está optimizada para ciertos valores de los parámetros del ruido. Un ejemplo es el fenómeno de la resonancia estocástica [2], donde la respuesta de un sistema no lineal a una señal es mejorada por la presencia del ruido y maximizada para ciertos valores de los parámetros de este. Otro ejemplo involucra los denominados “*ratchets*” de no equilibrio¹, donde un movimiento Browniano sin deriva intrínseca en un potencial asimétrico estocástico conduce a un movimiento de deriva sistemático cuya magnitud y dirección pueden ser ajustados con los parámetros del ruido [3, 4]. Un tercer ejemplo, recientemente descubierto, son las transiciones de fase inducidas por ruido en sistemas no linealmente acoplados, es decir, una transición de fase que sólo se observa para un cierto rango finito de los parámetros del ruido [5]. El cuarto ejemplo, el de interés para nosotros en este capítulo, es el llamado “activación resonante” que fue primero identificado por Doering y Gadoua [6] y más tarde estudiado por otros autores. En este fenómeno, el tiempo medio de paso de una partícula movida por ruido (usualmente blanco) a través de una barrera que fluctúa de forma aleatoria presenta un mínimo como función de los parámetros de las fluctuaciones de la barrera.

Nuestro interés en este problema proviene del hecho de que parece que para poten-

¹La traducción literal de la palabra “*ratchet*” es *trinquete*. Un trinquete es un garfio que resbala sobre los dientes de una rueda, para impedir que esta se vuelva hacia atrás.

ciales suficientemente simples es posible encontrar dependencias analíticas de la frecuencia de escape con los parámetros del sistema (o, al menos, buenas aproximaciones) y, más específicamente, que se pueden encontrar expresiones analíticas para las combinaciones de parámetros que conducen a un mínimo en el tiempo medio de escape. Algunos resultados analíticos se pueden encontrar en las Refs-[6, 7, 8, 9, 10, 11], incluyendo los originales de Doering y Gadoua aplicados a un caso particular que nosotros discutiremos más adelante. Sin embargo, en general, la mayoría de resultados en este campo son numéricos [11]. Los resultados analíticos son escasos y normalmente se aplican o a un rango de parámetros o a otro rango, de manera que ninguno de estos resultados reproducen el mínimo en el tiempo medio de salida. Normalmente se estudia este mínimo por inferencia de ambos resultados y, por lo tanto, estas aproximaciones no son muy adecuadas para localizar la posición de este mínimo. Esto implica que con estos métodos no es posible encontrar la dependencia del mínimo con los parámetros del sistema.

En este capítulo nos centraremos en encontrar resultados analíticos para los momentos del tiempo de primer paso a través de una barrera fluctuante para un potencial particular (potencial triangular más fluctuaciones dicotómicas) que ha sido usado ampliamente en la literatura de activación resonante. En particular, obtendremos aproximaciones analíticas que, además de presentar explícitamente el mínimo en el tiempo medio de salida, nos permitirán estudiar la variabilidad de este tiempo en el espacio de parámetros. El proceso de obtención de estos resultados nos permitirá hacer algunas aclaraciones sobre la naturaleza de modelos que han sido presentados bajo el epígrafe de “activación resonante” y sobre el fenómeno de la “activación resonante” en sí misma. Algunos de estos modelos difieren de otros en aspectos esenciales. Intentaremos discutir estas diferencias con detalle y aclararemos el papel que juega el ruido blanco respecto a las fluctuaciones de la barrera en el proceso de activación.

4.2 Planteamiento del Problema

Consideremos un proceso que involucra un potencial biestable en presencia de ruido blanco Gaussiano débil. Por lo tanto, una partícula puede, ocasionalmente, cruzar desde un mínimo del potencial biestable al otro a causa del ruido. Cuando los parámetros del sistema están fijados en el tiempo, el cálculo de la frecuencia a la cual el sistema cruza de un pozo al otro es el conocido problema de Kramers. Supongamos ahora que la altura de la barrera que separa ambos mínimos del potencial biestable fluctúa en el

tiempo. Intentaremos entonces estudiar el efecto de las fluctuaciones de la barrera sobre la frecuencia de paso de un pozo a otro. Se sabe que hay una frecuencia de la fluctuación de la barrera que minimiza el tiempo medio de paso entre los estados estables del potencial [6, 7, 8, 9, 10, 11]. Este mínimo es el que identifica el fenómeno de la activación resonante. Nótese que las fluctuaciones de la barrera son tales que la diferencia de energía entre los mínimos del potencial permanece constante, es decir, sólo fluctúa la altura de la barrera entre los mínimos del potencial. Este hecho diferencia la activación resonante de la resonancia estocástica donde la diferencia de energía entre los mínimos está modulada por una señal periódica débil.

Suponemos que estamos en el régimen sobreamortiguado y, por lo tanto, el proceso $y(\tau)$ evoluciona de acuerdo con la siguiente ecuación de Langevin:

$$\dot{y}(\tau) = -V'(y) - g'(y)\eta(\tau) + \xi(\tau). \quad (4.1)$$

Aquí $\xi(\tau)$ es un ruido blanco Gaussiano de media cero y función de correlación

$$\langle \xi(\tau)\xi(\tau') \rangle = 2D\delta(\tau - \tau'). \quad (4.2)$$

Se puede pensar en el ruido blanco como proveniente de un baño térmico en el que el coeficiente de difusión, D , es proporcional a la temperatura, T . El tiempo se mide en unidades del coeficiente de rozamiento ya que este se ha tomado como unidad en la ecuación (4.1).

El potencial $V(y)$ es un potencial biestable, típicamente con mínimos isoenergéticos. Doering y Gadoua [6] introdujeron el potencial triangular mostrado en la Fig.4.1. La barrera de potencial se define como

$$V(y) = \begin{cases} v_0 y/L & 0 \leq y < L \\ -v_0 y/L + 2v_0 & L \leq y \leq 2L. \end{cases} \quad (4.3)$$

El potencial sube hasta infinito en $y = 0$ y en $y = 2L$. En ausencia del término $g'(y)\eta(\tau)$ en la ecuación (4.1), recuperamos un problema estandar donde la frecuencia, κ , a la cual el proceso cruza la barrera, en $x = L$, está relacionado con el tiempo medio de primer paso \tilde{T}_1 desde uno de los pozos, en $y = 0$, hasta lo alto de la barrera: $\kappa = 1/2\tilde{T}_1$. Para calcular el tiempo medio de primer paso asumimos una condición de contorno reflejante en $y = 0$ y una condición de contorno absorbente en $y = L$. En el problema de la activación resonante tenemos, además, la contribución de $g'(y)\eta(\tau)$. Aquí $\eta(\tau)$ es un ruido de no equilibrio que acoplado a $g'(y)$ causa la fluctuación de la barrera de potencial. Es un ruido de no equilibrio porque no hay una contribución disipativa en la ecuación del movimiento

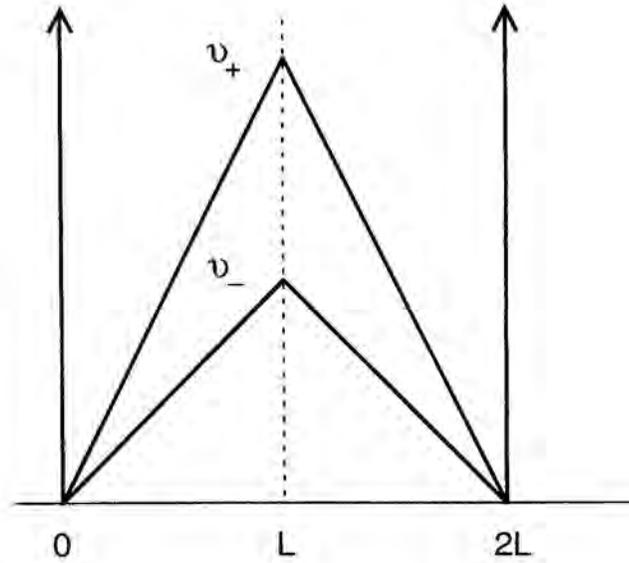


Figura 4.1. Esquema de la barrera de potencial fluctuante.

asociada a este término fluctuante, y, por tanto, el sistema es abierto. Se supone que el ruido $\eta(\tau)$ está correlacionado exponencialmente; en este caso, la elección más común es o bien el ruido Ornstein-Uhlenbeck [9, 10, 11] o el ruido dicotómico Markoviano [8, 11]. Nosotros sólo trabajaremos con el último: $\eta(\tau)$ toma entonces valores ± 1 , y el cambio entre uno y otro está distribuido temporalmente por una densidad exponencial

$$\phi(\tau) = \gamma e^{-\gamma\tau}, \quad (4.4)$$

por lo tanto, γ es la frecuencia entre cambios del ruido dicotómico. Las fluctuaciones de la barrera se darán para una elección de $g(y)$ de la forma

$$g(y) = \begin{cases} \alpha y/L & 0 \leq y < L \\ -\alpha y/L + 2\alpha & L \leq y \leq 2L \end{cases} \quad (4.5)$$

y cero en el resto. La adición de este término de potencial aleatorio provoca que la barrera oscile entre dos valores $v_+ = v_0 + \alpha$ y $v_- = v_0 - \alpha$.

Queremos calcular la frecuencia a la cual el proceso cruza el punto $y = L$, la cual está relacionada, como antes, con el tiempo medio de primer paso \tilde{T}_1 desde $y = 0$ hasta $y = L$ cuando una barrera reflejante está localizada en $y = 0$ y una absorbente en $y = L$. En particular, queremos establecer analíticamente la dependencia de \tilde{T}_1 con la frecuencia de cambios γ e identificar la frecuencia para la que \tilde{T}_1 es un mínimo.

Doering y Gadoua [6] calcularon el tiempo medio de primer paso para este modelo en ausencia del potencial $V(y)$, es decir, cuando la "barrera" oscila entre ser una verdadera barrera (de altura $+\alpha$) y ser un pozo (de profundidad $-\alpha$), y obtuvieron un fenómeno de resonancia, es decir, el tiempo medio de primer paso entre 0 y L presenta un mínimo para un valor particular de la frecuencia de cambios. Doering y Gadoua también presentaron resultados de simulaciones para el caso $v_0 = \alpha$, es decir, cuando la "barrera" oscila entre ser una barrera (de altura 2α) y ser una barrera totalmente plana. Bier y Astumian [7] estudiaron el caso de una barrera auténtica, es decir, el caso donde siempre existe barrera (tomaron $v_0 \gg \alpha$) y obtuvieron resultados numéricos que muestran resonancia. Sus resultados analíticos para la frecuencia de transición están obtenidos de forma separada para bajas frecuencias de cambios (γ pequeña) y para altas frecuencias de cambios. Ninguno de estos resultados presenta un mínimo. Sin embargo, se puede inferir la presencia de un mínimo combinando ambos resultados aunque no son capaces de encontrar la dependencia con los parámetros del sistema [11].

A partir de este punto vamos a trabajar con las variables adimensionales

$$t \equiv \tau D/L^2, \quad x \equiv y/L, \quad T_1 \equiv \tilde{T}_1 D/L^2, \quad (4.6)$$

y con los parámetros adimensionales

$$a \equiv \alpha/D, \quad V_0 \equiv v_0/D, \quad \lambda \equiv \gamma L^2/D, \quad (4.7)$$

La ecuación diferencial para el tiempo medio de primer paso en todos los casos que vamos a considerar es

$$\frac{d^4 T_1}{dx^4} - 2V_0 \frac{d^3 T_1}{dx^3} + (V_0^2 - a^2 - 2\lambda) \frac{d^2 T_1}{dx^2} + 2\lambda V_0 \frac{dT_1}{dx} = 2\lambda \quad (4.8)$$

con las condiciones de contorno

$$\left. \frac{dT_1}{dx} \right|_{x=0} = 0, \quad (4.9)$$

$$\left. \frac{d^2 T_1}{dx^2} \right|_{x=0} = -1, \quad (4.10)$$

en la frontera reflejante y

$$T_1(x=1) = 0, \quad (4.11)$$

$$\left[\frac{d^3 T_1}{dx^3} - 2V_0 \frac{d^2 T_1}{dx^2} + (V_0^2 - a^2) \frac{dT_1}{dx} \right]_{x=1} = V_0 \quad (4.12)$$

en la frontera absorbente.

La forma de como obtener esta ecuación y las correspondientes condiciones de contorno la daremos en la sección 4.7.

4.3 Solución Analítica del Modelo de Doering y Gadoua

Consideremos el tiempo medio de primer paso hasta $x = 1$ ($y = L$) cuando la altura media de la barrera es $V_0 = 0$. La solución en función de la posición inicial, x , puede ser calculada analíticamente:

$$T_1(x) = (x-1) \left[\frac{2\lambda a^2}{\mu^3} \frac{\mu - \sinh(\mu)}{a^2 + 2\lambda \cosh(\mu)} - \frac{\lambda}{\mu^2} (x+1) \right] - \frac{2a^2 \sinh[\mu(x-1)/2]}{\mu^4 a^2 + 2\lambda \cosh(\mu)} \\ \times \left\{ a^2 \sinh\left[\frac{\mu(x+1)}{2}\right] + 2\lambda \sinh\left[\frac{\mu(x-1)}{2}\right] + 2\mu\lambda \cosh\left[\frac{\mu(x+1)}{2}\right] \right\}, \quad (4.13)$$

donde hemos definido

$$\mu = \sqrt{a^2 + 2\lambda}. \quad (4.14)$$

Este resultado ya fue encontrado para el caso particular de una condición inicial $x = 0$ [6]. Sabemos de [6] que $T_1(x=0) \equiv T_1$ presenta resonancia respecto a λ ; vamos a intentar encontrar la frecuencia de resonancia, λ_{res} , y el comportamiento del tiempo medio de primer paso para esta frecuencia de resonancia. La expresión para el tiempo medio de primer paso se simplifica considerablemente cuando la cantidad adimensional μ es grande ($\mu \gg 1$), que justamente coincide con el régimen físicamente interesante de ruido blanco débil. La única forma de que μ sea pequeño es que a y λ sean pequeños, es decir, que la intensidad del ruido blanco, D , sea mayor que la altura de la barrera, a , y mayor que $2\gamma L^2$. La primera condición hace que el problema no sea interesante—si la barrera es, en promedio, más pequeña que el ruido entonces el problema es básicamente una difusión libre. La segunda condición requiere un sistema pequeño con una frecuencia de cambios muy pequeña, de nuevo una situación que no resulta interesante en este contexto. El caso físicamente interesante es el de un ruido pequeño comparado con la altura de la barrera, es decir, cuando $a \gg 1$ y, por lo tanto, $\mu \gg 1$. Cuando μ es suficientemente grande podemos hacer las siguientes aproximaciones:

$$\cosh \mu - 1 \sim \cosh \mu \sim \sinh \mu - \mu \sim \sinh \mu \sim \frac{1}{2} e^\mu. \quad (4.15)$$

Si, además,

$$\lambda \gg a^2 e^{-a} \quad (4.16)$$

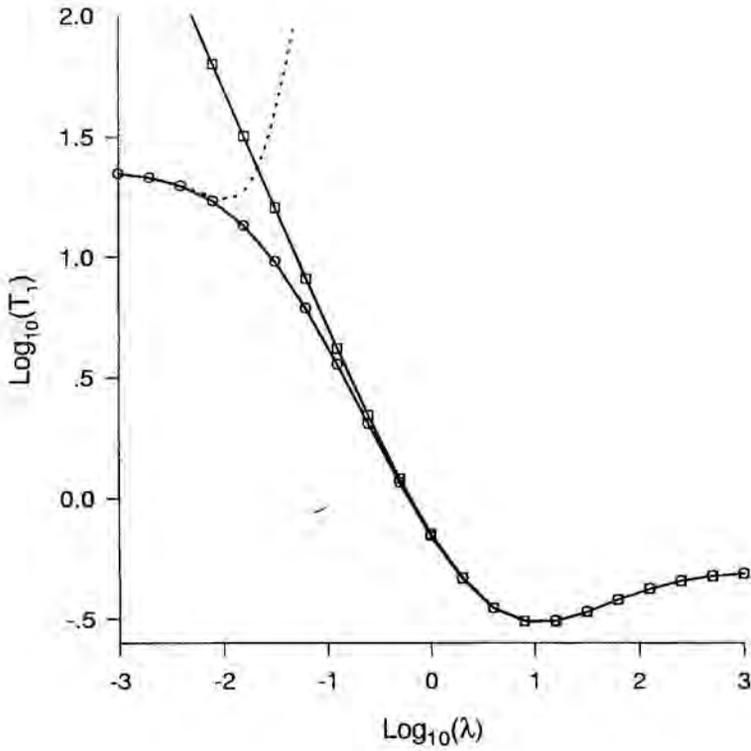


Figura 4.2. Tiempo medio de primer paso en función de la frecuencia de las fluctuaciones de la barrera para el modelo de Doering y Gadoua. La barrera fluctúa entre las posiciones "up" y "down" con valores a y $-a$ respectivamente. Línea continua con círculos: tiempo medio de primer paso exacto obtenido numéricamente. Línea continua con cuadrados: nuestro resultado analítico (4.18). Línea punteada: La aproximación de baja frecuencia (4.22). El parámetro $a = 8$.

entonces el resultado se simplifica y finalmente podemos escribir una expresión mucho más simple para el tiempo medio de primer paso

$$T_1(x) \sim \frac{a^2(a^2 - 2\lambda e^{-\mu x})}{2\lambda(a^2 + 2\lambda)^2} + \frac{a^2(2-x)}{(a^2 + 2\lambda)^{3/2}} + \frac{\lambda(1-x^2)}{a^2 + 2\lambda} + O(a^2 e^{-\mu}). \quad (4.17)$$

Es fácil demostrar que esta expresión presenta un mínimo en función de λ para un valor finito λ_{res} de la forma $\lambda_{res} \sim a$. Este mínimo se identifica a través de las raíces de $dT_1(x)/dx = 0$ como la que coincide con el mínimo de la expresión completa de $T_1(x)$, (4.13), cuando $a \rightarrow \infty$. Siguiendo la referencia [6], tomamos $x = 0$ para simplificar el cálculo

$$T_1 \sim \frac{(a^2 - 2\lambda)a^2}{2\lambda(a^2 + 2\lambda)^2} + \frac{2a^2}{(a^2 + 2\lambda)^{3/2}} + \frac{\lambda}{a^2 + 2\lambda} + O(a^2 e^{-\mu}). \quad (4.18)$$

El extremo de T_1 como función de λ obedece la ecuación

$$\frac{\lambda^2}{a^2}(a^2 + 2\lambda) - \frac{2\lambda}{a^2}(a^2 - 2\lambda) - \frac{1}{2}(a^2 + 2\lambda) - \frac{6\lambda^2}{a^2}(a^2 + 2\lambda)^{1/2} = 0. \quad (4.19)$$

Esta ecuación puede ser resuelta perturbativamente tomando $\lambda \sim a(\lambda_0 + \lambda_1 a^{-1} + \lambda_2 a^{-2})$, un desarrollo consistente con el hecho de que $a \gg 1$. Cuando este desarrollo se sustituye en la ecuación (4.19), se obtiene el siguiente resultado para la frecuencia de resonancia en función de a :

$$\lambda_{res} \sim \frac{1}{\sqrt{2}}a + \left(1 + \frac{3}{\sqrt{2}}\right) + \frac{3}{2}\left(3 + \frac{7}{\sqrt{2}}\right)\frac{1}{a}, \quad a \gg 1. \quad (4.20)$$

Nótese que la condición $\lambda \gg a^2 e^{-a}$ está entonces satisfecha. El valor de T_1 para la frecuencia de resonancia es

$$T_1(\lambda = \lambda_{res}) \equiv T_{res} \sim \left(2 + \sqrt{2}\right)\frac{1}{a} - \left(4 + 3\sqrt{2}\right)\frac{1}{a^2} + \left(\frac{3}{2} + \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\frac{1}{a^3} \quad (4.21)$$

para a grande. Para valores pequeños de λ ($\lambda \ll a^2 e^{-a}$) se puede encontrar, a partir de (4.13) con $x = 0$, que

$$T_1 \sim \frac{1}{2a^2}e^a - \frac{\lambda}{2a^4}e^{2a} + \frac{\lambda^2}{2a^6}e^{3a} + O\left(\frac{\lambda^3}{a^6}e^{4a}\right), \quad (4.22)$$

para $a \gg 1$.

En la Fig-(4.2), se compara la expresión exacta de T_1 con la aproximación (4.22) cuando $\lambda \rightarrow 0$ y con la aproximación (4.18) cuando $\lambda \rightarrow \infty$.

El segundo momento de la distribución del tiempo de primer paso, T_2 , también muestra un comportamiento resonante. Sin embargo, la frecuencia de resonancia de T_2 no

coincide con la de T_1 . Esto significa que no existe una única frecuencia de resonancia asociada con la distribución del tiempo de primer paso. T_2 puede ser calculado de una manera similar a T_1 . Sin embargo, la expresión exacta de $T_2(x)$ es demasiado larga para ser incluida aquí y, además, no presenta mayor interés. Por lo tanto, únicamente escribiremos la expresión para T_2 con $x = 0$ cuando $a \gg 1$,

$$T_2 \sim \frac{a^4(a^4 + a^2\lambda - 4\lambda^2)}{\lambda^2\mu^8} + \frac{4a^2(a^2 - \lambda^2)}{\lambda\mu^7} + \frac{2a^2(4a^2 - \lambda)}{\mu^6} + \frac{20\lambda a^2}{3\mu^5} + \frac{5\lambda^2}{3\mu^4} + O(a^4 e^{-\mu}). \quad (4.23)$$

En la Fig-(4.3) se muestra este resultado aproximado comparado con la expresión exacta de T_2 para $a = 8$. El comportamiento de la frecuencia de resonancia $\lambda_{res,2}$ de T_2 se obtiene a partir de la expresión de T_2 cuando $a \rightarrow \infty$. El resultado es

$$\lambda_{res,2} \sim b_0 a + b_1 + O(a^{-1}), \quad (4.24)$$

donde b_0 es la solución real positiva de la ecuación $5b_0^4 + 10b_0^3 - 6b_0 - 3 = 0$. Una solución numérica de esta ecuación nos da un valor de $b_0 = 0.825724 \dots$. Con este valor, el coeficiente b_1 puede, también, ser calculado y se obtiene $b_1 = 3.56057$. Nótese que $\lambda_{res,2} > \lambda_{res}$. Finalmente, T_2 a la frecuencia de resonancia tiene un comportamiento del tipo $1/a^2$ cuando $a \rightarrow \infty$:

$$T_2(\lambda_{res,2}) \sim \frac{c_0}{a^2} + \frac{c_1}{a^3} + O(a^{-4}), \quad (4.25)$$

con $c_0 = 20.9521 \dots$ y $c_1 = -104.244 \dots$. Las ecuaciones (4.18), (4.20), (4.21), y (4.22) son el principal resultado de esta sección—nos dan el tiempo medio de primer paso en función de la altura de la barrera (o profundidad del pozo) a , teniendo en cuenta que $a \ll e^a$, para todo valor de λ . Resulta útil explicitar estos resultados con las unidades originales para ver mejor la dependencia con los parámetros del sistema. Cuando la frecuencia de cambios es grande ($\lambda \gg a^2$ o $\gamma \gg \alpha^2/DL^2$) el tiempo medio de primer paso desde $y = 0$ hasta $y = L$ es

$$\tilde{T}_1 \rightarrow \tilde{T}_{white} = \frac{L^2}{2D_{eff}}, \quad (4.26)$$

como se ve de la ecuación (4.18). Aquí

$$D_{eff} \equiv D + \frac{\alpha^2}{2\gamma L^2}. \quad (4.27)$$

Este es el resultado ya conocido para el tiempo medio de primer paso desde $y = 0$ hasta $y = L$ para una partícula browniana libre con una constante de difusión D_{eff} . En este

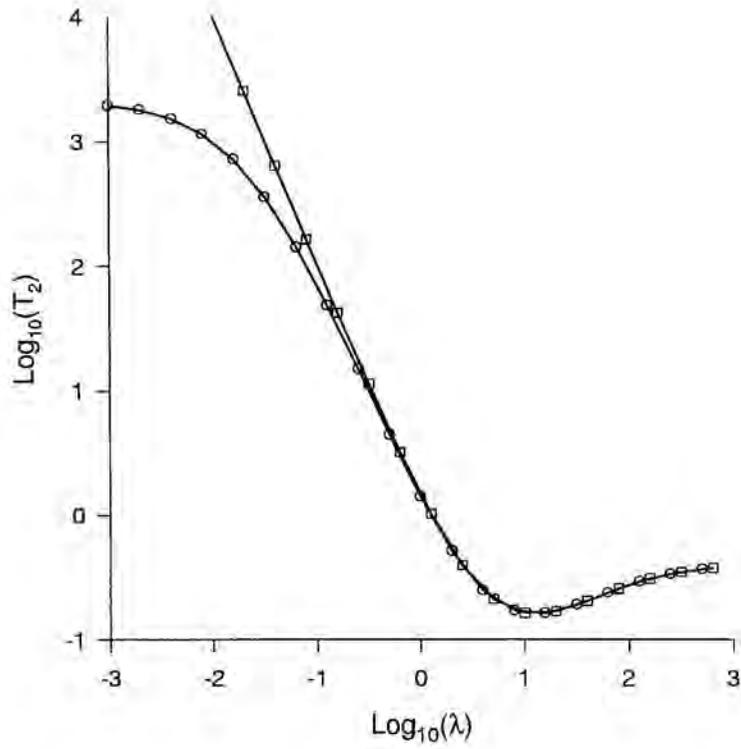


Figura 4.3. Segundo momento de la distribución del tiempo de primer paso para el modelo de Doering y Gadoua en función de la frecuencia de las fluctuaciones, con $a = 8$. Línea continua con círculos: segundo momento exacto obtenido numéricamente. Línea continua con cuadrados: nuestro resultado analítico (4.23).

límite la barrera fluctuante se comporta simplemente como una fuente adicional de ruido blanco de intensidad $\frac{\alpha^2}{2\gamma L^2}$. En el otro extremo, cuando la frecuencia de cambios es muy pequeña, $\lambda \rightarrow 0$, la barrera nunca cambia mientras el proceso se mueve desde $y = 0$ a $y = L$. Si la barrera estaba inicialmente “down” ($\eta(0) = -1$), permanece en este estado y el proceso es difusivo con una fuerza constante apuntando hacia la frontera absorbente; como $\alpha/D \rightarrow \infty$, el movimiento del sistema es básicamente balístico. Si la barrera estaba inicialmente “up” ($\eta(0) = 1$), por el mismo razonamiento permanece en este estado y el proceso se mueve entre la frontera reflejante en $y = 0$ y la frontera absorbente en $y = L$ en presencia de una fuerza constante que se opone al movimiento. El tiempo medio de primer paso para un sistema tal crece exponencialmente con la altura de la barrera como $D^2 e^{\alpha/D} / \alpha^2$ [12]. En nuestros cálculos las dos posibilidades son igualmente probables. El promedio de estas dos configuraciones es el término dominante en la ecuación (4.22) (la contribución balística es despreciable):

$$\tilde{T}_1 \rightarrow \tilde{T}_{static} = \frac{L^2 D}{2\alpha^2} e^{\alpha/D}. \quad (4.28)$$

Entre estos dos comportamientos existe una región en la que el tiempo medio de primer paso es mínimo. Este valor mínimo ocurre para la frecuencia de resonancia cuyo término dominante para valores grandes de α/D es

$$\gamma_{res} \sim \frac{\alpha}{\sqrt{2}L^2} \quad (4.29)$$

La contribución más importante al tiempo medio de primer paso para esta frecuencia es

$$\tilde{T}_{res} \sim (2 + \sqrt{2}) \frac{L^2}{\alpha} \quad (4.30)$$

y por lo tanto disminuye al aumentar α . Este resultado tiene la dependencia en L de un proceso difusivo, aunque el coeficiente de difusión efectivo es α y no D . Nótese que el producto $\gamma_{res} \tilde{T}_{res} = O(1)$.

4.4 Un Modelo Simple que Muestra Activación Resonante

Una observación sorprendente sobre los resultados del modelo de Doering y Gadoua es que, a orden más bajo en α , la frecuencia de resonancia γ_{res} y el tiempo medio de primer paso a esta frecuencia de resonancia, \tilde{T}_{res} , no dependen de la intensidad del ruido blanco.

Esto significa que cuando $\alpha/D \rightarrow \infty$, las propiedades resonantes se van haciendo cada vez más independientes de la intensidad del ruido. Por lo tanto, la resonancia parece no verse afectada por la presencia del ruido; en particular, el mínimo en el tiempo medio de primer paso en el modelo de Doering y Gadoua parece que no proviene del acoplamiento entre el ruido blanco y la dinámica aleatoria del potencial.

Hemos usado en algún momento un lenguaje equívoco en esta descripción porque la situación es, en efecto, algo más sutil. La resonancia en el modelo de Doering y Gadoua proviene de dos propiedades: 1) la dinámica aleatoria del potencial (es decir, los cambios aleatorios entre barrera y pozo) y, en particular, el promedio inicial sobre estas dinámicas, y 2) la naturaleza de la frontera reflejante en $x = 0$. Es esta última propiedad, sutilmente influenciada por el ruido blanco, la que es especialmente relevante: las características resonantes del modelo de Doering y Gadoua cuando $D \rightarrow 0$ no son reproducidas si tomamos $D = 0$ en las ecuaciones del modelo.

Para ver este punto con más detalle consideraremos el mismo modelo de Doering y Gadoua pero ahora en ausencia de ruido blanco. En lugar de la ecuación (4.1), el sistema evoluciona de acuerdo con la ecuación de Langevin más simple

$$\dot{y}(\tau) = -g'(y)\eta(\tau). \quad (4.31)$$

La solución de este problema para el tiempo medio de primer paso se encuentra más fácilmente si descomponemos $\tilde{T}(y)$ en dos componentes [13]: $\tilde{T}^+(y)$, el tiempo medio de primer paso hasta $y = L$ cuando $\eta(0) = +1$, y $\tilde{T}^-(y)$, el tiempo medio de primer paso hasta $y = L$ cuando $\eta(0) = -1$. La conveniencia de esta representación radica en la facilidad de expresar las condiciones de contorno en términos de \tilde{T}^\pm .

La condición de contorno (4.9) es completamente equivalente a la llamada condición de “reinyección inmediata” [14, 15]

$$\tilde{T}^+(y = 0) = \tilde{T}^-(y = 0). \quad (4.32)$$

En este caso, cuando el sistema alcanza la frontera en $y = 0$ la velocidad cambia inmediatamente su signo, es decir, el ruido $\eta(\tau)$ cambia su valor desde -1 a $+1$. Nótese que aquí la condición de contorno afecta directamente la dinámica de las fluctuaciones dicotómicas de la barrera ya que la llegada a la frontera provoca que el ruido cambie su valor. Es fácil ver que en términos de $\tilde{T}(y) = (\tilde{T}^+ + \tilde{T}^-)/2$, la condición de contorno reflejante de “reinyección inmediata” en realidad se traduce en la condición de Doering-Gadoua (4.9),

i.e.,

$$\left. \frac{d\tilde{T}(y)}{dy} \right|_{y=0} = 0. \quad (4.33)$$

Con esta condición de contorno (junto con la condición de contorno absorbente en $y = L$) el tiempo medio de primer paso desde $y = 0$ hasta $y = L$ si los valores iniciales de $\eta(0) = \pm 1$ son igualmente probables es [14]

$$\tilde{T}_{1,ri} = \frac{\gamma L^4}{\alpha^2} + \frac{L^2}{\alpha}. \quad (4.34)$$

Nótese que $\tilde{T}_{1,ri}$ es una función monótona creciente de γ y, por lo tanto, no presenta resonancia. Claramente, esta solución no es la misma que la del modelo de Doering y Gadoua cuando se toma D igual a cero.

Hay otra manera de pensar en una barrera reflejante, que es pensar que la frontera únicamente limita la región de movimiento del sistema sin interferir en la dinámica de las fluctuaciones de la barrera de potencial. El ruido dicotómico evoluciona de acuerdo con su propia dinámica cambiando de valores a tiempos aleatorios que son independientes de donde ocurra el proceso $y(\tau)$. Entonces, si el sistema alcanza la frontera $y = 0$ cuando $\eta = -1$, el ruido conserva su valor de acuerdo con sus propiedades estadísticas. El proceso simplemente espera en la frontera, hasta que el ruido cambia de valor a $\eta = 1$ de forma natural. A esta condición la llamaremos condición de contorno reflejante "natural". Este comportamiento se implementa a través de la siguiente condición de contorno para las componentes de tiempo medio de primer paso:

$$\tilde{T}^-(y=0) = \tilde{T}^+(y=0) + \frac{1}{\gamma} \quad (4.35)$$

o, en términos de $\tilde{T}(y)$,

$$\left. \frac{d\tilde{T}(y)}{dy} \right|_{y=0} = -\frac{L}{\alpha} \quad (4.36)$$

La solución para el tiempo medio de primer paso es ahora

$$\tilde{T}_{1,n} = \frac{\gamma L^4}{\alpha^2} + \frac{2L^2}{\alpha} + \frac{1}{2\gamma}. \quad (4.37)$$

Es fácil darse cuenta de que $\tilde{T}_{1,n}$ tiene un mínimo en $\gamma_{res} = \alpha/\sqrt{2}L^2$ (vease Eq. (4.29)). En la Fig-(4.4) hemos dibujado una realización del proceso $y(\tau)$ para las dos condiciones de contorno, la de "reinyección inmediata" y la "natural". A partir de esta figura se ve claramente que las dos condiciones de contorno conducen a resultados diferentes para

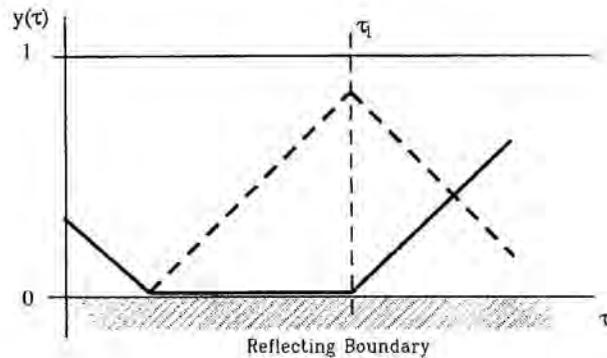


Figura 4.4. Trayectorias típicas cerca de la frontera reflejante para los dos tipos de condiciones de contorno discutidas en el texto. Línea discontinua: condición de “reinyección inmediata”. Línea continua: condición “natural”.

el tiempo medio de primer paso. El hecho interesante es que el límite $D \rightarrow 0$ en el modelo de Doering y Gadoua es $\tilde{T}_{1,n}$, con la condición “natural”, y no $\tilde{T}_{1,ri}$, a pesar de que la condición de contorno reflejante usada en el modelo de Doering y Gadoua es (4.9). En el modelo de Doering y Gadoua no importa lo débil que sea el ruido blanco, su efecto es dominante cerca de la frontera reflejante. El ruido blanco permite inversiones de la velocidad infinitesimalmente cerca de la frontera reflejante sin provocar un cambio en la barrera, eliminando entonces la interferencia entre la dinámica dicotómica de la barrera y la frontera. Existe, por lo tanto, una diferencia profunda entre la situación con ruido blanco presente y la situación en la que no hay ruido blanco —el límite $D \rightarrow 0$ es discontinuo. En el modelo de Doering y Gadoua hay resonancia en el tiempo medio de primer paso porque, a través de la acción del ruido blanco, el proceso puede retardar (de forma creciente cuando la intensidad del ruido blanco decrece) la llegada a la frontera absorbente si la barrera está “up” y no cambia de manera natural a través de su propia dinámica. Sin embargo, las características de la frecuencia de resonancia y el tiempo medio de primer paso en la resonancia no dependen explícitamente de la intensidad del ruido blanco.

En la Fig-(4.5) se muestran los dos tiempos medios de primer paso, $\tilde{T}_{1,ir}$ y $\tilde{T}_{1,n}$.

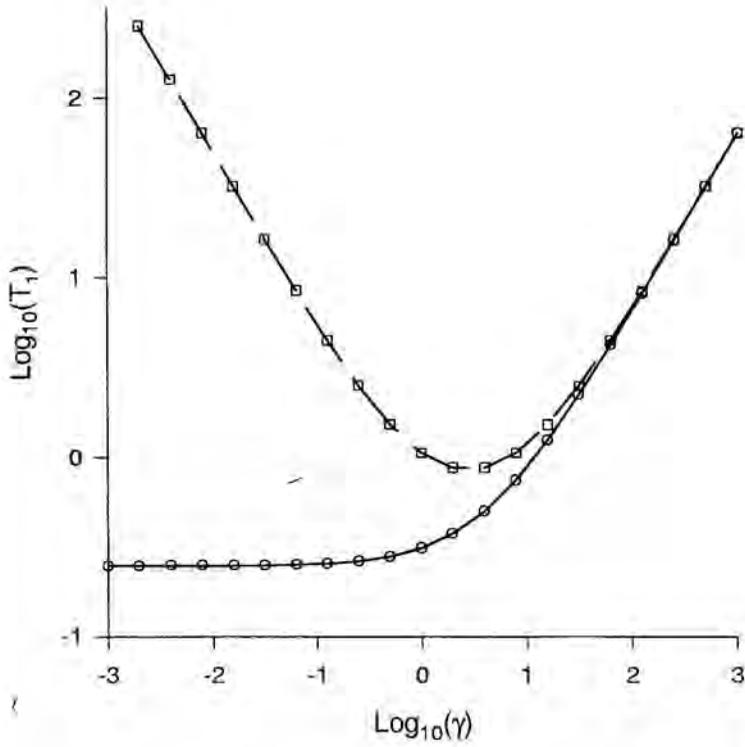


Figura 4.5. Tiempo medio de primer paso hasta $L = 1$ como función de la frecuencia de las fluctuaciones para los dos tipos de condiciones reflejantes discutidas en el texto. Línea discontinua con cuadrados: condición de "reinyección inmediata". Línea continua con círculos: condición "natural".

4.5 El Modelo de Bier y Astumian

La principal conclusión que se extrae de la discusión de la sección precedente es que el efecto resonante en el modelo de Doering y Gadoua no es de la misma naturaleza que la activación resonante en sistemas donde el proceso de activación es exclusivamente debido a la presencia de ruido blanco (es decir, temperatura distinta de cero). Para estudiar el fenómeno de la resonancia en esta última situación volvemos con el modelo introducido por Doering y Gadoua pero ahora con $V_0 > a$, es decir, cuando siempre existe una barrera. Este problema fue estudiado analíticamente por Bier y Astumian en la Ref-[7]. La aproximación desarrollada por estos autores coincide con la aproximación cinética introducida en [18]. La principal limitación de este método es que conduce a un tiempo medio de primer paso que no presenta un mínimo.

Nosotros hemos desarrollado una aproximación para el tiempo medio de primer paso hasta la frontera absorbente, cuando la altura promedio de la barrera es alta ($V_0 \gg 1$), que sí presenta un mínimo y, por lo tanto, nos servirá para describir el fenómeno de la resonancia de una forma analítica. Volvemos con la ecuación de Langevin (4.1) con (4.2)-(4.5). Ahora, sin embargo, tomamos $v_0 \pm a \gg D$ o, en cantidades adimensionales, $V_0 \pm a \gg 1$. La barrera oscila entonces entre dos valores grandes.

La solución general de la ecuación (4.8) es

$$T(x) = \frac{1}{V_0}(x-1) + A_1(e^{q_1 x} - e^{q_1}) + A_2(e^{q_2 x} - e^{q_2}) + A_3(e^{q_3 x} - e^{q_3}), \quad (4.38)$$

donde los coeficientes q_i son las tres raíces del polinomio característico

$$q^3 - 2V_0q^2 + (V_0^2 - a^2 - 2\lambda)q + 2\lambda V_0 = 0, \quad (4.39)$$

y las constantes A_i se encuentran a partir de las condiciones de contorno (4.9)-(4.12). Se puede demostrar que para $V_0 > a$ las raíces de (4.39) son todas reales, dos de ellas positivas y la tercera negativa. Las expresiones completas de las constantes A_i son demasiado complejas y largas para incluirlas aquí (y además no son muy útiles en su forma exacta). A pesar de todo, es posible deducir expresiones más cortas en forma de serie en λ . En este caso, las raíces q_i se pueden escribir como

$$\begin{aligned} q_1 &= -\frac{2V_0}{V_+V_-}\lambda + \frac{4V_0(a^2 + V_0^2)}{(V_+V_-)^3}\lambda^2 + O(\lambda^3), \\ q_2 &= V_- + \frac{\lambda}{V_-} - \frac{V_+}{2aV_-^3}\lambda^2 + O(\lambda^3), \\ q_3 &= V_+ + \frac{\lambda}{V_+} + \frac{V_-}{2aV_+^3}\lambda^2 + O(\lambda^3), \end{aligned} \quad (4.40)$$

donde

$$V_{\pm} \equiv V_0 \pm a. \quad (4.41)$$

Cuando estas expresiones se introducen en (4.38), se obtiene el siguiente resultado para el tiempo medio de primer paso a orden λ^2 :

$$T(x=0) = \frac{N_1 e^{V_-} + N_2 e^{V_+} + N_3 e^{2V_0}}{D_1 + D_2 e^{V_-} + D_3 e^{V_+}}, \quad (4.42)$$

donde los coeficientes del numerador son

$$\begin{aligned} N_1 &= V_+^2 - \lambda \left(\frac{V_- V_+}{V_0} - \frac{V_0^2}{a V_-} - \frac{3a V_+}{V_-} + \frac{a^2 V_+}{V_0 V_-} - \frac{a(V_0 - 5a)}{V_-^2} \right) \\ N_2 &= V_-^2 - \lambda \left(\frac{V_- V_+}{V_0} + \frac{V_0^2}{a V_+} + \frac{3a V_-}{V_+} + \frac{a^2 V_-}{V_0 V_+} + \frac{a(V_0 + 5a)}{V_+^2} \right) \\ N_3 &= 4\lambda \left\{ 1 + \lambda \left[\frac{(2V_0 - 1)}{V_+ V_-} - \frac{4a^2}{(V_+ V_-)^2} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.43)$$

y los del denominador

$$\begin{aligned} D_1 &= 2(V_+ V_-)^2 + 2\lambda(a^2 + 3V_0 - 2V_0 V_+ V_-) \\ D_2 &= 2\lambda \left[V_+^2 + \frac{\lambda}{a V_-^2} (a V_+^2 V_- - V_+ V_-^2 + 2a^3 - 6a^2 V_0) \right] \\ D_3 &= 2\lambda \left[V_-^2 + \frac{\lambda}{a V_+^2} (a V_-^2 V_+ + V_- V_+^2 + 2a^3 + 6a^2 V_0) \right]. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Esta aproximación es un orden mayor en λ que la derivada en [7], la cual es equivalente a la aproximación cinética [18]. La ventaja de nuestra aproximación es que presenta un mínimo en función de la frecuencia λ . Cuando $V_0 \gg 1$ la frecuencia de resonancia puede ser calculada explícitamente:

$$\lambda_{res} \sim \left[\frac{a(e^{2a} - 1)^2 V_0^3}{4e^{2a}(1 + a - e^{2a} + ae^{2a})} \right]^{1/2} \exp\left(-\frac{V_-}{2}\right) \quad (4.45)$$

y el mínimo asociado en el tiempo medio de primer paso es

$$T_{res} \sim \frac{2}{V_-^2 + e^{-2a} V_+^2} e^{V_-}. \quad (4.46)$$

Tal como hicimos con el modelo de Doering y Gadoua, resulta útil explicitar varios resultados límites en unidades originales para que la dependencia con los parámetros del sistema sea más clara.

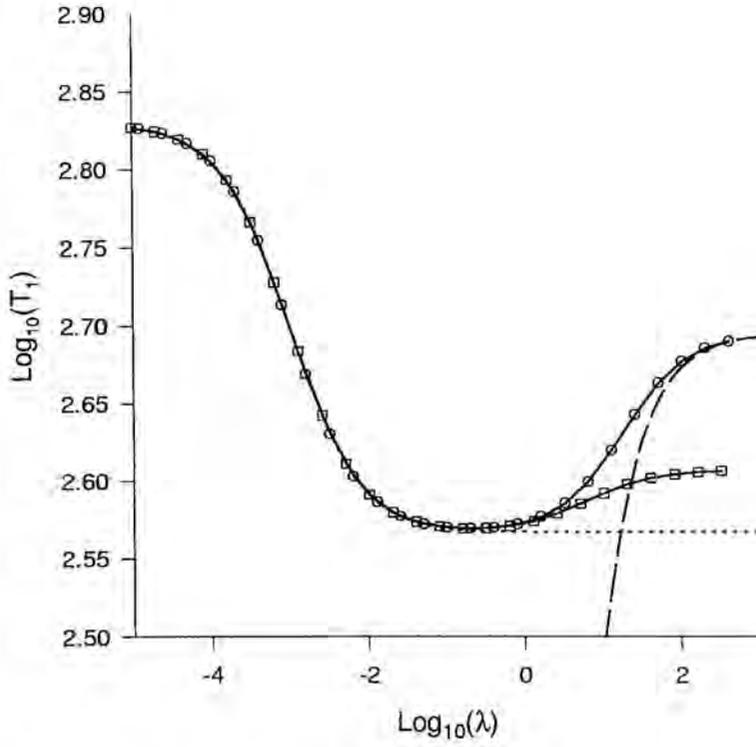


Figura 4.6. Tiempo medio de primer paso en función de la frecuencia de las fluctuaciones para el modelo de Bier y Astumian. La barrera fluctúa entre un valor alto $V_0 + a$ y otro bajo $V_0 - a$, con $V_0 = 11$ y $a = 1$. Línea continua con círculos: resultado exacto obtenido numéricamente. Línea punteada: aproximación cinética (4.49). Línea discontinua: aproximación de ruido blanco (4.47). Línea continua con cuadrados: nuestro resultado (4.42).

Cuando la frecuencia de cambios es grande ($\lambda \gg a^2$ o $\gamma \gg a^2/DL^2$) el resultado (4.42) se reduce a

$$T_1 \rightarrow T_{white} = \frac{2 + a^2/\lambda}{2V_0^2} \exp\left(\frac{2V_0}{2 + \frac{a^2}{\lambda}}\right). \quad (4.47)$$

o, en unidades originales

$$\tilde{T}_1 \rightarrow \tilde{T}_{white} = \frac{L^2 D_{eff}}{v_0^2} e^{v_0/D_{eff}} \quad (4.48)$$

donde D_{eff} es el coeficiente de difusión efectivo definido en (4.27). Este es el resultado familiar para la activación a través de una barrera de altura v_0 con coeficiente de difusión D_{eff} . En el otro extremo, cuando λ es pequeña, la aproximación cinética [7, 18] es válida y el tiempo medio de primer paso (4.42) se reduce a

$$T_1 \rightarrow T_{kin} = \frac{2\lambda + (k_+ + k_-)/2}{k_+ k_- + \lambda(k_+ + k_-)}, \quad (4.49)$$

donde

$$k_{\pm} = V_{\pm}^2 e^{-V_{\pm}}. \quad (4.50)$$

Si λ es tan pequeña que la escala de tiempo de las fluctuaciones de la barrera es mucho más pequeña que el tiempo de escape, entonces este se simplifica a

$$T_1 \rightarrow T_{kin} \sim \frac{1}{2} \left(\frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right) \quad (4.51)$$

que es justamente la media aritmética asociada a las dos posibles configuraciones iniciales de la barrera (vease la discusión sobre la ecuación (4.28)). En las unidades originales

$$\tilde{T}_1 \rightarrow \tilde{T}_{kin} = \frac{L^2 D}{2v_+^2} e^{v_+/D} + \frac{L^2 D}{2v_-^2} e^{v_-/D}, \quad (4.52)$$

Entre estos dos límites se encuentra el régimen de resonancia donde el tiempo medio de primer paso es menor que el de los casos de "ruido blanco" o "estático". En unidades originales, el tiempo medio de primer paso a la frecuencia de resonancia, (4.46), es

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{res} &\sim \frac{2L^2 D}{(v_-^2 + e^{-2a} v_+^2)} e^{v_-/D} \\ &\sim \frac{2L^2 D}{v_-^2} e^{v_-/D} \end{aligned} \quad (4.53)$$

donde la segunda línea, válida si $a \geq 1$, sirve para mostrar que el tiempo medio de primer paso resonante es esencialmente el tiempo medio de paso a través de la barrera

baja. No resulta muy instructivo mostrar la expresión completa (4.45) para la frecuencia de resonancia en las unidades originales, aunque si $a \geq 1$ es posible escribir una expresión más corta

$$\gamma_{res} \sim \frac{v_0^{3/2}}{2L^2 D^{1/2}} e^{-v_-/2D}. \quad (4.54)$$

Nótese que tanto el tiempo medio de primer paso resonante como la frecuencia de resonancia dependen de la intensidad del ruido blanco, así como su producto. Esta dependencia aparece tanto en los exponentes como en los prefactores.

Una propiedad general de nuestra solución y, más generalmente, del fenómeno de la activación resonante es que aumentando la altura de la barrera la resonancia se hace menos y menos brusca: aparece una región plana alrededor de la frecuencia de resonancia, un hecho que ha sido puesto de manifiesto explícitamente en un trabajo reciente [19]. Un análisis de la ecuación (4.42) permite estimar analíticamente el tamaño de esta región plana, que está acotada del siguiente modo:

$$\frac{V_+^2 e^{-2a} + V_-^2}{4} e^{-V_-} \ll \lambda \ll \frac{V_+ V_-}{2V_0}. \quad (4.55)$$

Entonces, más que remarcar el aspecto resonante del problema, sería más propio hablar de la escala temporal del proceso de activación como relativamente insensible a los parámetros del sistema excepto en el caso de fluctuaciones de la barrera o muy pequeñas o muy grandes. Como ya hemos comentado, si las fluctuaciones de la barrera son suficientemente pequeñas, una barrera inicialmente alta permanece esencialmente sin cambios y el sistema en promedio cruza la barrera antes de que esta cambie de estado. Por lo tanto, los pasos sobre la barrera alta dominan en el tiempo medio de primer paso. En el otro extremo, cuando las fluctuaciones de la barrera son muy rápidas, el paso se produce esencialmente sobre la barrera promedio. Sin embargo, sobre un rango muy grande de parámetros el tiempo medio de primer paso está esencialmente determinado por los pasos sobre la barrera baja – el sistema puede evitar pasar por la barrera alta esperando a que esta cambie de valor. Dado que el tiempo de espera es menor que el tiempo que el sistema emplearía en cruzar con la barrera alta, el cambio ocurre antes y el sistema cruza cuando la barrera está baja. Este proceso es más eficiente (aunque no mucho más eficiente– debido al comportamiento plano) en la frecuencia de resonancia.

En la Fig-(4.6) se han dibujado el tiempo medio de primer paso y las distintas aproximaciones explicadas anteriormente para $V_0 = 11$ y $a = 1$. Nuestra aproximación captura claramente el comportamiento resonante de una manera muy precisa así como el comportamiento del tiempo medio de primer paso para una región amplia de frecuencias de

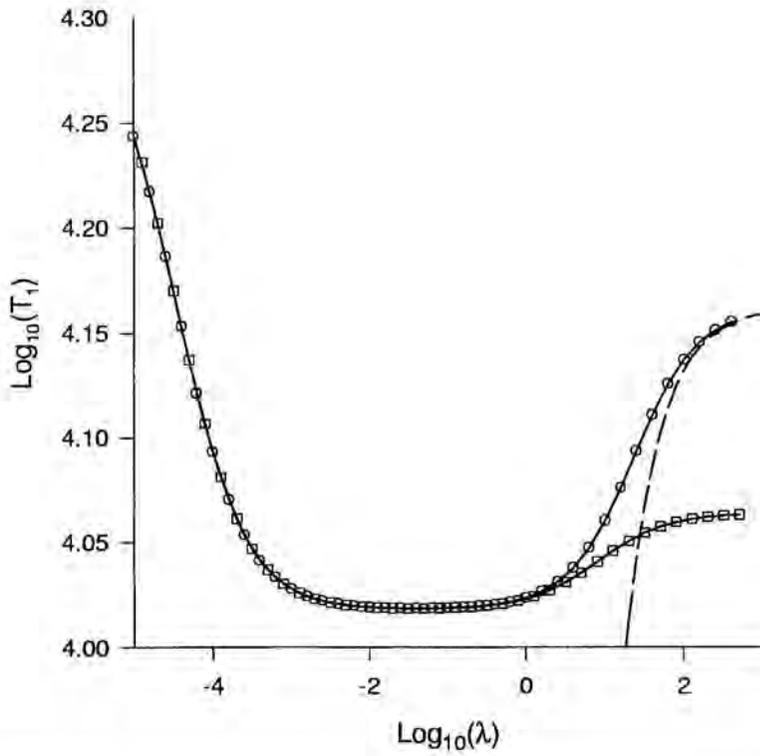


Figura 4.7. Tiempo medio de primer paso en función de la frecuencia de las fluctuaciones para el modelo de Bier y Astumian con $V_0 = 15$ y $a = 1$. Línea continua con círculos: resultado exacto numérico. Línea discontinua: aproximación de ruido blanco (4.47). Línea continua con cuadrados: nuestro resultado (4.42).

cambios de la barrera. La Fig-(4.7) muestra de nuevo el tiempo medio de primer paso aunque ahora con $V_0 = 15$ y $a = 1$. Esta figura nos sirve para confirmar el acuerdo entre nuestra aproximación y los resultados numéricos y también para ilustrar la región plana alrededor de la frecuencia de resonancia cuando la altura de la barrera se incrementa. La Fig-(4.8) muestra la frecuencia de resonancia como función de la altura de la barrera. De nuevo, nuestra aproximación captura el resultado exacto de forma muy precisa cuando la altura de la barrera es suficientemente alta.

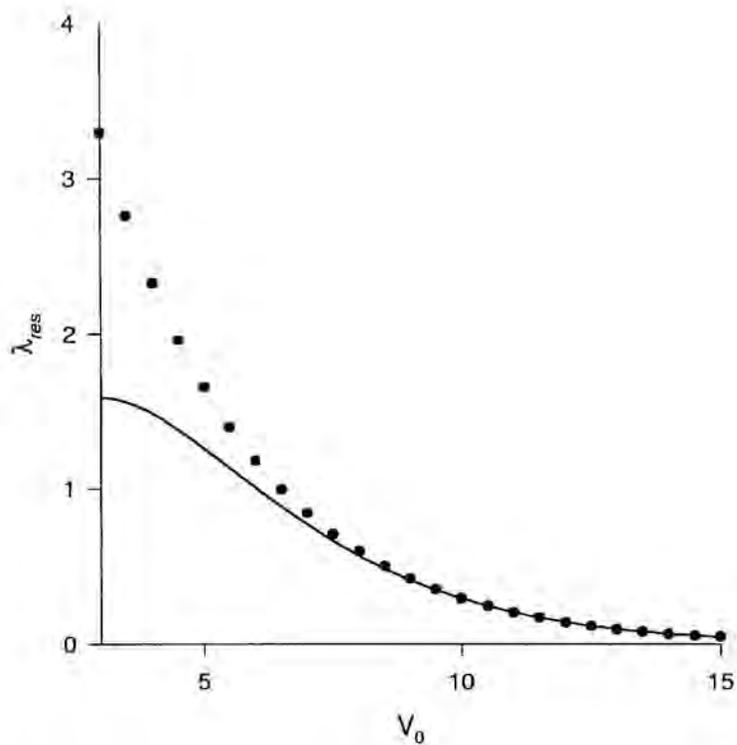


Figura 4.8. Frecuencia de resonancia en función de la altura promedio de la barrera para el modelo de Bier y Astumian con $a = 1$. Círculos: resultado numérico exacto. Línea continua: nuestro resultado (4.45).

4.6 Activación Generada por una Señal Periódica Cuadrada

Es interesante estudiar en que grado el fenómeno de la activación resonante necesita que la barrera fluctúe de una forma aleatoria o bien que las fluctuaciones sean periódicas. Es decir, queremos saber si las fluctuaciones aleatorias son una condición necesaria para que se produzca la activación resonante.

Para estudiar el proceso de activación cuando la barrera oscila periódicamente entre dos valores, reemplazamos el ruido dicotómico $\eta(\tau)$ en la ecuación (4.1) por una señal periódica cuadrada $w(\tau)$, que alternadamente toma los valores $+1$ y -1 . Los cambios de uno a otro ocurren a frecuencia constante γ . El período de esta función cuadrada es pues $2/\gamma$.

La ecuación de Fokker-Planck que describe la evolución de la probabilidad para el sistema incluye ahora un potencial periódico en el tiempo. El problema puede ser tratado analíticamente usando la teoría de Floquet. Nosotros nos limitaremos a dar los resultados cualitativos que se obtienen con este método aunque después seguiremos una aproximación más simple que nos permitirá llegar a algunas conclusiones cuantitativas.

Continuamos nuestra discusión en términos de variables y parámetros adimensionales. La solución exacta del problema también presenta activación resonante cuando la barrera oscila de forma determinista, con un comportamiento muy similar al del caso estocástico. En otras palabras, el tiempo medio de primer paso es grande cuando el período de oscilación es muy lento y también cuando es muy rápido. Como antes, y por las mismas razones físicas, en el primer caso el tiempo medio de primer paso está dominado por la barrera alta V_+ mientras que en el último caso está determinado por la barrera promedio V_0 . De nuevo, como antes, la región entre estos dos límites presenta una región plana donde el tiempo medio de primer paso está determinado principalmente por la barrera baja V_- . La única diferencia entre este problema y el problema estocástico radica en la forma detallada de como el tiempo medio de primer paso cambia desde un comportamiento a otro.

Para encontrar el tiempo medio de primer paso cuando las modulaciones de la barrera son muy lentas (que es cuando la diferencia entre una modulación estocástica y periódica es más pronunciada), debemos recordar que para una barrera fija de altura V la probabilidad de que el proceso no haya cruzado la barrera en el tiempo t (es decir, la probabilidad de supervivencia a tiempo t), es exponencial [20], e^{-kt} , donde la frecuencia

de paso es $k = V^2 e^{-V}$, véase la ecuación (4.50). Si la barrera no está fijada pero cambia muy lentamente de un valor a otro a intervalos de tiempo predeterminados $\Delta \equiv \lambda^{-1}$ con $\lambda \ll 1$, podemos seguir la trayectoria del sistema explícitamente y escribir una expresión para la probabilidad de supervivencia $S(t)$ de que el sistema no haya cruzado la barrera en en tiempo t . Si inicialmente la barrera es V_+ y el instante $t = 0$ se corresponde con el comienzo de un periodo, entonces

$$\begin{aligned} S^+ &= \text{Prob}\{T^+ > t\} = q_+^n q_-^n e^{-k_+(t-2n\Delta)}, & 2n\Delta < t \leq (2n+1)\Delta; \\ S^+ &= \text{Prob}\{T^+ > t\} = q_+^{n+1} q_-^n e^{-k_+[t-(2n+1)\Delta]}, & (2n+1)\Delta < t \leq (2n+2)\Delta \end{aligned} \quad (4.56)$$

donde $n = 0, 1, 2, \dots$, y q_+ y q_- son las probabilidades de que un suceso de cruce no ocurra cuando la barrera es, respectivamente, V_+ y V_- . La hipótesis sobre la estadística de la dinámica de las transiciones da

$$q_{\pm} = e^{-k_{\pm}/\lambda}. \quad (4.57)$$

El tiempo medio de primer paso, T^+ , puede ser calculado directamente como un momento de esta probabilidad. La probabilidad de supervivencia, S^- , y el tiempo medio de primer paso asociado, T^- , cuando la barrera inicialmente es V_- se puede obtener de forma similar. Para comparar con los resultados del caso estocástico suponemos que inicialmente la barrera toma los valores V_+ o V_- con la misma probabilidad. Un cálculo corto conduce al siguiente resultado para el tiempo medio de primer paso cuando $\lambda \ll 1$:

$$T = \frac{T^+ + T^-}{2} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{k_+} + \frac{1}{k_-} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{k_+} - \frac{1}{k_-} \right) \frac{q_+ - q_-}{1 - q_+ q_-}. \quad (4.58)$$

Este resultado corresponde al mismo nivel de aproximación que la aproximación cinética (4.49). Para frecuencias muy bajas, $\lambda \rightarrow 0$, el tiempo medio de escape es un promedio entre el tiempo medio de escape $1/k_+$ cuando la barrera es V_+ y $1/k_-$ cuando la barrera es V_- . Esta aproximación cinética tampoco muestra ningún mínimo porque no se comporta correctamente cuando $\lambda \rightarrow \infty$; en cambio, converge al mismo valor que en la aproximación cinética (4.49), es decir, a $(k_+ + k_-)/2$.

En la Fig-(4.9) se compara la aproximación (4.58) del tiempo medio de escape para el proceso de activación con una señal periódica con el tiempo de escape para el mismo sistema pero con ruido dicotómico. La diferencia entre los dos es notable en el decrecimiento del tiempo medio de primer paso cuando se incrementa la frecuencia de cambios — la dependencia con la frecuencia de cambios es considerablemente más pronunciada en el caso periódico que en el caso aleatorio. Un efecto similar se ha observado recientemente

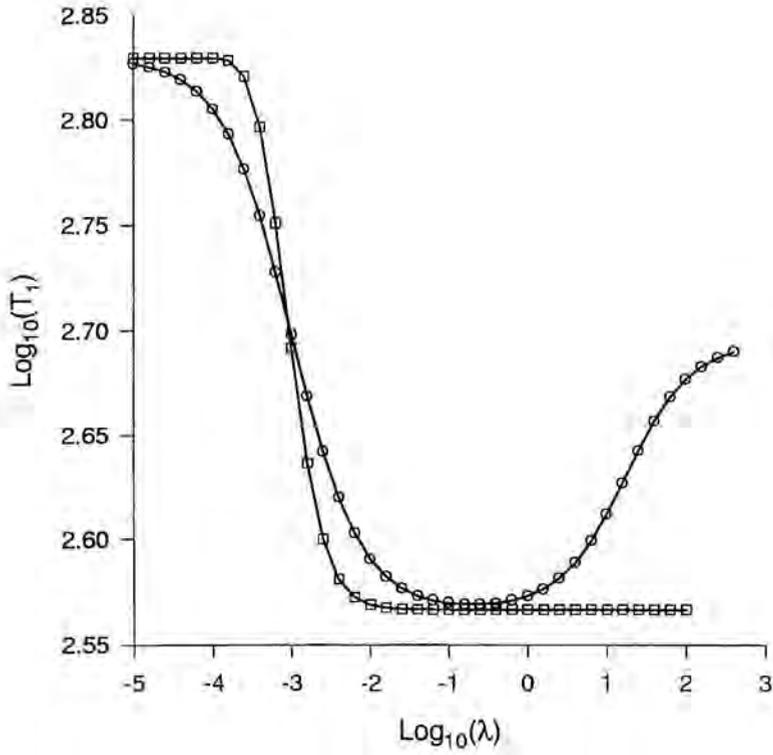


Figura 4.9. Tiempo medio de primer paso en función de la frecuencia de oscilación/fluctuación de la barrera. Cuadrados: aproximación cinética para oscilaciones de la barrera periódicas. Círculos: barrera fluctuante. Los parámetros son: $V_0 = 11$ y $u = 1$.

en sistemas que exhiben resonancia estocástica coherente [21]. El mínimo en el tiempo medio de primer paso y la frecuencia de resonancia son esencialmente iguales en ambos casos.

4.7 Probabilidad de Supervivencia y Momentos del Tiempo de Primer Paso

Los momentos del tiempo de primer paso desde $x = 0$ hasta $x = 1$ pueden ser obtenidos a partir de la probabilidad de supervivencia, $S(x, t)$, de que el sistema que evoluciona de acuerdo con la ecuación (4.1) (apropiadamente escalada a variables adimensionales), con una frontera reflejante en $x = 0$ y una absorbente en $x = 1$, no haya dejado el intervalo $(0, 1)$ en el tiempo t . Esta probabilidad de supervivencia obedece la siguiente ecuación diferencial en derivadas parciales

$$\mathcal{L}^2 S + 2\lambda \mathcal{L} S = a^2 \frac{\partial^2 S}{\partial x^2}, \quad (4.59)$$

donde \mathcal{L} es el operador diferencial

$$\mathcal{L} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + V_0 \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (4.60)$$

Nótese que la ecuación (4.59) es una ecuación en derivadas parciales de segundo orden en el tiempo y de cuarto orden en la variable espacial. Por lo tanto, se necesitan dos condiciones iniciales y cuatro condiciones de contorno para resolverla. Las condiciones iniciales son

$$S(x, 0) = 1, \quad (4.61)$$

$$\left. \frac{\partial S}{\partial t} \right|_{t=0} = 0. \quad (4.62)$$

Para la frontera absorbente en $x = 1$, las condiciones de contorno son

$$S(1, t) = 0, \quad (4.63)$$

$$\left(\mathcal{L} + V_0 \frac{\partial}{\partial x} - V_0^2 + a^2 \right) \left. \frac{\partial S}{\partial x} \right|_{x=1} = -V_0 \delta(t), \quad (4.64)$$

y para la frontera reflejante en $x = 0$

$$\left. \frac{\partial S}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad (4.65)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) S \Big|_{x=0} = 0. \quad (4.66)$$

Los momentos del tiempo de primer paso, T_n , están relacionados con la probabilidad de supervivencia de acuerdo con

$$T_n(x) = n \int_0^\infty t^{n-1} S(x, t) dt. \quad (4.67)$$

Naturalmente $T_0(x) = 1$ por normalización. $T_1(x)$ es el tiempo medio de primer paso hasta $x = 1$ para un proceso que comienza en $X(0) = x$; $T_2(x)$ es el segundo momento de la distribución, por lo tanto, la varianza de la distribución del tiempo de primer paso es $\sigma^2 \equiv T_2 - T_1^2$.

Las ecuaciones para los momentos del tiempo de primer paso se pueden obtener multiplicando la ecuación (4.59) por t^{n-1} e integrando en el tiempo por partes. De este modo se encuentran las siguientes ecuaciones diferenciales recursivas:

$$\mathcal{L}_D^2 T_n - 2\lambda \mathcal{L}_D T_n - a^2 \frac{d^2 T_n}{dx^2} = g_n, \quad (4.68)$$

donde

$$g_n \equiv n(2\lambda - 2\mathcal{L}_D)T_{n-1} - n(n-1)T_{n-2}, \quad (4.69)$$

y \mathcal{L}_D es el operador de Fokker-Planck

$$\mathcal{L}_D \equiv -V_0 \frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dx^2} \quad (4.70)$$

con $T_{-1} \equiv 0$. Las condiciones de contorno se obtienen directamente a partir de las de la probabilidad de supervivencia:

$$1. \quad T_n(1) = 0 \quad (4.71)$$

$$2. \quad \left(\mathcal{L}_D - V_0 \frac{d}{dx} + V_0^2 - a^2 \right) \left. \frac{dT_n}{dx} \right|_{x=1} = -n \left. \frac{dT_{n-1}}{dx} \right|_{x=1} + V_0 \delta_{n,1} \quad (4.72)$$

$$3. \quad \left. \frac{dT_n}{dx} \right|_{x=0} = 0 \quad (4.73)$$

$$4. \quad \left. \frac{d^2 T_n}{dx^2} \right|_{x=0} = -n T_{n-1}(0). \quad (4.74)$$

4.8 Conclusiones

En este capítulo hemos estudiado el problema de la activación resonante, es decir, el problema del tiempo medio de escape de una partícula movida por ruido blanco de intensidad D a través de una barrera de potencial cuya altura fluctúa de forma aleatoria. La distribución de las fluctuaciones de la barrera se toma normalmente o bien dicotómica (la barrera fluctúa entre dos valores) o bien Gaussiana. La función de correlación de las fluctuaciones de la barrera se toma exponencial y, por lo tanto, caracterizada por una frecuencia γ . La cantidad de interés es el tiempo medio de primer paso, \tilde{T}_1 , de la partícula a través de la barrera como función de γ . Se observa que \tilde{T}_1 frente a γ presenta un mínimo, es decir, existe una frecuencia para las fluctuaciones de la barrera que optimiza el tiempo medio de primer paso de la partícula. Este mínimo es el que define el fenómeno de la activación resonante.

Nosotros nos hemos concentrado en fluctuaciones dicotómicas en una barrera de potencial triangular, por lo tanto, nuestros resultados cuantitativos están restringidos a este caso. Sin embargo, creemos que estos resultados nos dan información más allá de estas condiciones específicas. En particular, nos dan información cualitativa en el caso de barreras cuyas fluctuaciones están acotadas entre un valor máximo v_+ y otro mínimo v_- . La aplicabilidad de nuestras conclusiones a fluctuaciones Gaussianas no está tan clara. Este es un punto a tratar en futuros trabajos sobre la activación resonante.

Existen varias aproximaciones al problema de escape a través de una barrera fluctuante que dan buenos resultados para la frecuencia de escape en el límite de fluctuaciones muy lentas o muy rápidas de la barrera. En el caso de fluctuaciones lentas, la llamada aproximación cinética [18] reproduce el comportamiento del sistema de forma satisfactoria. En el límite de fluctuaciones muy lentas ($\gamma \rightarrow 0$) la barrera conserva su altura inicial durante todo el proceso y el tiempo medio de primer paso es justamente el tiempo medio de primer paso promediado sobre la distribución inicial de la altura de la barrera.

En el otro extremo, cuando las fluctuaciones de la barrera son muy rápidas ($\gamma \rightarrow \infty$), el principal efecto de las fluctuaciones de la barrera es incrementar la intensidad efectiva del ruido blanco. El escape ocurre entonces sobre una barrera promedio, con un coeficiente de difusión D_{eff} , que excede a D en una cantidad determinada por los detalles de la distribución de las fluctuaciones de la barrera.

En la literatura, cada una de estas aproximaciones se han llevado lo suficientemente lejos como para deducir el comportamiento del tiempo medio de primer paso aunque nos apartemos de los límites estrictos de estas aproximaciones. De la aproximación

cinética se puede ver que el tiempo de escape decrece al crecer γ . En el otro extremo, el tiempo de escape decrece al decrecer γ . Estos dos resultados claramente apuntan a la existencia de, al menos, un mínimo para algún valor finito de γ , aunque ninguna de las aproximaciones es suficientemente fina para capturar este mínimo. El mérito de nuestro trabajo es justamente desarrollar una aproximación simple que captura este mínimo.

Durante el desarrollo de esta aproximación nos hemos dado cuenta de la necesidad de hacer una distinción entre dos casos que tienen orígenes físicos distintos, a pesar de mostrar ambos resonancia. Estos dos casos han sido tratados en la literatura como uno solo porque ambos involucran fluctuaciones dicotómicas, aunque son en realidad muy diferentes. Uno de estos casos es el de un potencial que oscila entre ser una barrera de altura $v_+ = \alpha$ y ser un pozo de profundidad $v_- = -\alpha$. A este caso lo hemos llamado modelo de Doering y Gadoua [6]. En el otro caso, la barrera fluctúa entre un valor alto $v_+ = v_0 + \alpha$ y uno bajo (aunque siempre positivo) $v_- = v_0 - \alpha$. A este caso lo llamamos modelo de Bier y Astumian [7]. Para cada uno de estos modelos hemos encontrado una expresión simple para el tiempo medio de primer paso que tiene un mínimo, y hemos comparado nuestros resultados con los resultados exactos obtenidos numéricamente. El acuerdo en ambos es bueno para un rango grande de frecuencias de cambios y, en particular, sobre una región grande alrededor de la resonancia.

El aspecto que distingue al modelo de Doering y Gadoua es el hecho de que parte del tiempo la barrera es realmente un pozo y la partícula puede “caer” más que “subir” la distancia L durante ese tiempo. Para este modelo hemos encontrado una expresión explícita para la frecuencia de resonancia y para el tiempo medio de primer paso. Lo importante de estos resultados es que ni la frecuencia de resonancia ni el tiempo de escape resonante dependen explícitamente de la intensidad del ruido blanco. Este hecho no se vió en los trabajos previos sobre este modelo. Intentamos, entonces, explorar como aparece resonancia en el modelo de Doering y Gadoua cuando no hay ruido blanco, y encontramos que no hay resonancia para este modelo! Esta aparente contradicción se explica si nos fijamos en que hay una discontinuidad en el límite $D \rightarrow 0$ del modelo y notando que hay que modificar las condiciones de contorno para reproducir la resonancia en ausencia de ruido blanco.

Para obtener resultados para el tiempo de escape en el modelo de Bier y Astumian que conserven el mínimo hemos tenido que conservar en nuestra solución un orden mayor en γ del que se había tomado anteriormente (que conduce a la aproximación cinética) [7]. A este orden es posible identificar la frecuencia de resonancia y el tiempo de escape. En este caso tanto la frecuencia de resonancia como el tiempo de escape resonante dependen de la

intensidad del ruido blanco. En la resonancia, el escape se produce principalmente cuando la barrera está baja. Además hemos encontrado que la dependencia en la frecuencia de cambios, especialmente para barreras altas, es muy plana: hay un rango de frecuencias para las que domina el paso a través de la barrera baja. En este rango de frecuencias, el tiempo de escape sobre la barrera alta es tan grande que la barrera cambia a su valor bajo antes de que la partícula pueda escapar.

También hemos discutido la no necesidad de fluctuaciones estocásticas para que se de el fenómeno de la resonancia. Existe resonancia si la barrera oscila de forma periódica entre dos valores. El comportamiento para frecuencias altas y bajas es el mismo que en el caso estocástico.

Finalmente, hacemos notar que nuestro análisis no se puede, en principio, aplicar al caso de fluctuaciones de la barrera Gaussianas, es decir, fluctuaciones del tipo Ornstein-Uhlenbeck [11]. Los resultados para este tipo de fluctuaciones con varianza fija [10] deberían ser similares a nuestros resultados con ruido dicotómico. En particular, el tiempo de escape para el modelo análogo al de Doering y Gadoua ($V_0 = 0$) tendrá un mínimo incluso en ausencia de ruido blanco.

Bibliografía

- [1] M. Millonas, ed., *Noise and Order: The New Synthesis* (Springer Verlag, New York, 1996).
- [2] A. R. Bulsara y L. Gammaitoni, *Physics Today* **49**, 39 (1996).
- [3] M. O. Magnasco, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1477 (1993).
- [4] T. E. Dialynas, K. Lindenberg, y G. P. Tsironis, *Phys. Rev. E* **56**, 3976 (1997).
- [5] C. Van den Broeck, J. M. R. Parrondo, y R. Torral, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3395-8 (1994); C. Van den Broeck, J. M. R. Parrondo, y R. Kawai, *Phys. Rev. E* **55**, 4084 (1997).
- [6] C. R. Doering y J. C. Gadoua, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2318 (1992).
- [7] M. Bier y R. D. Astumian, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1649 (1993).
- [8] U. Zürcher y C. R. Doering, *Phys. Rev. E* **47**, 3862 (1993); P. Pechukas y P. Hänggi, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2772 (1994)
- [9] R. Bartussek, A. J. R. Madureira y P. Hänggi, *Phys. Rev. E* **52**, R2149 (1995); A. J. R. Madureira, P. Hänggi, V. Buonomano, y W. A. Rodrigues Jr., *Phys. Rev. E* **51**, 3849 (1995); F. Marchesoni et al., *Physics Lett. A* **201**, 275 (1995).
- [10] J. Iwaniszewski, *Phys. Rev. E* **54**, 3173 (1996).
- [11] M. Marchi et al., *Phys. Rev. E* **54**, 3479 (1996).
- [12] K. Lindenberg y V. Seshadri, *J. Chem. Phys.* **71**, 4075 (1979).
- [13] J. Masoliver, K. Lindenberg, y B.J. West, *Phys. Rev. A* **34**, 2351 (1986).
- [14] V. Balakrishnan, C. Van den Broeck, y P. Hänggi, *Phys. Rev. A* **38**, 4213 (1988).

- [15] J. Masoliver, J. M. Porrà, y G. H. Weiss, *Phys. Rev. E* **48**, 939 (1993).
- [16] M. Boguñá, J. M. Porrà, J. Masoliver y K. Lindenberg, *Phys. Rev. E*, **57**, 3990 (1998).
- [17] M. Boguñá, J. M. Porrà, J. Masoliver y K. Lindenberg, *Anales de Física, Monografías RSEF Vol. 4*, 167 (1998)
- [18] C. Van den Broeck, *Phys. Rev. E* **47**, 4579 (1993).
- [19] P. Reimann y T. C. Elston, *Phys. Rev. Let.* **77**, 5328 (1997).
- [20] K. Lindenberg, B. J. West, *J. Stat. Phys.* **42**, 201 (1986).
- [21] J. M. Porrà, *Phys. Rev. E* **55**, 6533 (1997).
- [22] J. M. Porrà, A. Robinson, y J. Masoliver, *Phys. Rev. E* **53**, 3240 (1996); **56**, 2331 (1997).

Capítulo 5

Transporte en una Pila Granular Crítica Auto-Organizada

5.1 Introducción

Durante los últimos diez años el panorama de los fenómenos de no equilibrio ha cambiado sustancialmente gracias a una nueva teoría sobre los sistemas no lineales fuera del equilibrio propuesta por Bak, Tang y Wiesenfeld [1, 2]: la criticalidad autoorganizada (SOC)¹. Esta teoría surgió como una explicación a la gran cantidad de sistemas (físicos o no) que de una forma espontánea están, fuera del equilibrio, en un estado crítico. Ejemplos de estos sistemas son, por ejemplo, los terremotos [3], los mercados de valores (o en general, la evolución económica) [4], la evolución de las especies biológicas [5, 6, 7] y, como no, los medios granulares [8]. La propiedad común a todos estos sistemas es la invarianza de escala, es decir, la ausencia de escalas características en el sistema [4, 9]. Sabemos de la mecánica estadística de equilibrio que una de las propiedades de un punto crítico es, justamente, la ausencia de escalas características. En este sentido se habla de un sistema crítico fuera del equilibrio –consideraremos que un sistema fuera del equilibrio está en un estado crítico, o que es crítico, si presenta invarianza de escala.

El tipo de sistemas a los que se puede aplicar la teoría de la criticalidad autoorganizada son sistemas no lineales fuera del equilibrio muy disipativos (la disipación juega un papel crucial en la SOC). Para sacar al sistema del equilibrio se le perturba muy lentamente añadiéndole “energía”. Naturalmente el sistema debe ser disipativo si quere-

¹Del inglés *Self Organized Criticality*

mos llegar a un estado estacionario y abierto si las perturbaciones implican la adición de materia al sistema. La dinámica de estos sistemas está gobernada por avalanchas. Las perturbaciones externas provocan avalanchas que se propagan por el sistema. Cuando el sistema está en un estado crítico los tamaños de estas avalanchas no tienen escala característica. Se puede producir una microavalancha o bien una avalancha que “arrase” gran parte del sistema. En este sentido estos sistemas son invariantes de escala. La distribución de la energía disipada por las avalanchas sigue una ley de potencias del tipo

$$p(E) \sim \frac{1}{E^\phi}, \quad (5.1)$$

donde $\phi > 1$ es el exponente crítico que define la clase de universalidad del sistema. Este tipo de ley es la única compatible con la invarianza de escala. Otra característica de los sistemas que presentan SOC es la separación de escalas temporales entre la dinámica interna y la externa. Si llamamos τ_{ex} al tiempo característico asociado a las perturbaciones externas y τ_{in} al tiempo asociado a las avalanchas internas, la separación de escalas implica que $\tau_{in} \ll \tau_{ex}$ y, por lo tanto, podemos pensar en las avalanchas como sucesos puntuales en el tiempo.

A pesar de todo esto, sólo muy recientemente se ha podido encontrar un sistema granular real que, lejos de toda duda razonable, presente criticalidad autoorganizada. El sistema en cuestión es una pila de arroz a la que se le minimizan los efectos inerciales [8]². Se perturba a la pila añadiendo granos uno a uno. Estos provocan avalanchas cuya distribución sigue una ley de potencias de exponente

$$\phi = 2.05. \quad (5.2)$$

Este es el motivo del porqué las pilas granulares se han convertido en el paradigma de la SOC y en una buena metáfora para sistemas más complejos.

En este capítulo nos concentraremos en estudiar las propiedades de transporte en una pila de arroz que presenta criticalidad autoorganizada. Dejamos para otros autores el estudio profundo de los orígenes de la SOC. Por otro lado, entender el comportamiento complejo de los medios granulares tiene interés en sí mismo. Además de otras interesantes propiedades, los medios granulares se pueden comportar simultáneamente como líquidos y como sólidos y muestran una dinámica vítrea con una relajación extremadamente lenta

²Se escoge arroz con una elongación grande para evitar que los granos puedan rodar y acumular, así, energía cinética. De este modo la dinámica viene caracterizada por deslizamientos destacando el papel de la fricción.

[10]. Las propiedades de transporte en medios granulares que presentan SOC son muy similares a las que se dan en semiconductores amorfos y polímeros [14].

Nosotros tenemos la ventaja de que recientemente el grupo de Oslo realizó un experimento con una pila de arroz que presenta SOC para estudiar sus propiedades de transporte [11]. Sus resultados nos servirán como base para construir nuestro modelo. Este es un camino poco usual en física donde primero se construye una teoría de primeros principios y luego se prueba con experimentos. Nosotros construiremos un modelo (que no teoría –no pretendemos dar explicaciones de la aparición de la SOC) que compatibilice el comportamiento microscópico (por individual) del transporte con el comportamiento macroscópico (por colectivo) [16].

5.2 El Experimento de Oslo

El sistema experimental que vamos a estudiar es una pila de arroz construida entre dos placas de metacrilato separadas por una distancia algo mayor que el tamaño de un grano de arroz. La base tiene una longitud L (medida en unidades de la longitud de un grano). Los granos son añadidos por el lado izquierdo donde una pared rígida evita que salgan del sistema. En contraste, el lado derecho está abierto de modo que al ir añadiendo granos la pila crecerá hasta que el perfil alcance el lado abierto. En las Fig-(5.1,5.3) se muestran fotografías del dispositivo experimental y un detalle del empaquetamiento de granos en la pila de arroz.

Después de un período transitorio la pila llega a un estado casi-estacionario donde el flujo de granos que entran al sistema se iguala, en promedio, con el flujo de salida por el lado abierto. La adición de granos cuando el sistema está en el estado estacionario provoca avalanchas que se propagan a través de la pila. El grupo de Oslo midió la energía disipada por estas avalanchas y demostró que si los granos de arroz son suficientemente alargados (para evitar los efectos inerciales) la distribución de tales energías es compatible con una ley de potencias de exponente [8]:

$$\phi = 2.05, \quad (5.3)$$

Este resultado demuestra el importante papel que juega la disipación en cualquier sistema que presente SOC. Sin embargo, no estamos interesados en la distribución de energías sino en las propiedades de transporte. Christensen *et al.* [11] aprovecharon este experimento para estudiar por primera vez las propiedades de transporte en un sistema que presentaba SOC. Concretamente se interesaron por el tiempo de tránsito del sistema, es decir, el

tiempo que un grano tarda en cruzar la pila. Para ello intercalaron granos trazadores marcados con códigos de colores y midieron la distribución de tiempos de tránsito $P_{tr}(T)$. Los resultados que obtuvieron son: una región dominada por una ley de potencias (para tiempos grandes) precedida por una región plana, es decir,

$$P_{tr}(T) \sim \begin{cases} \text{constante para } T \text{ pequeño,} \\ 1/T^\alpha \text{ para } T \text{ grande,} \end{cases} \quad (5.4)$$

donde $\alpha = 2.4 \pm 0.2$ [11]. Además, encontraron que cuando se varía el tamaño del sistema, la distribución verifica un escalado con el tamaño del tipo

$$P_{tr}(T, L) = L^{-\nu'} f(T/L^\nu), \quad (5.5)$$

con $\nu = 1.5 \pm 0.2$ y $\nu' = 1.4 \pm 0.2$ [11]. El hecho de que $\nu \simeq \nu'$ es una consecuencia de la condición de normalización. Del resultado (5.5) se puede deducir fácilmente que el tiempo medio de tránsito escala con el tamaño del sistema de un modo un tanto anómalo,

$$\langle T \rangle \sim L^\nu. \quad (5.6)$$

Decimos anómalo porque, por ejemplo, para un camino aleatorio el tiempo medio escala como $\langle T \rangle \sim L^2$ mientras que si este tiene un término de deriva lo hace como $\langle T \rangle \sim L$. Por lo tanto, estamos ante un caso claro de difusión anómala. En la Fig-(5.2) se muestra la distribución de tiempos de tránsito experimental escalada con el tamaño del sistema.

5.3 CATC como un Modelo de Transporte en una Pila de Arroz Crítica Auto-Organizada

Comenzaremos considerando el movimiento de un solo grano o partícula a través de la pila esencialmente unidimensional. Esto puede hacerse porque en el experimento el camino de las partículas está acotado entre dos puntos, comienzan su movimiento en lo alto de la pila, en el lado izquierdo de la pared, y lo finalizan en el extremo derecho del soporte. Cuando un grano entra en el sistema, eventualmente puede quedar atrapado en una posición x durante un intervalo de tiempo aleatorio t hasta que alguna avalancha lo alcanza y lo pone en movimiento de nuevo. En este momento, el grano realiza un salto instantáneo, o vuelo, de longitud l , después del cual queda nuevamente atrapado en la posición $x + l$. Por lo tanto, la dinámica de una partícula está descrita en términos

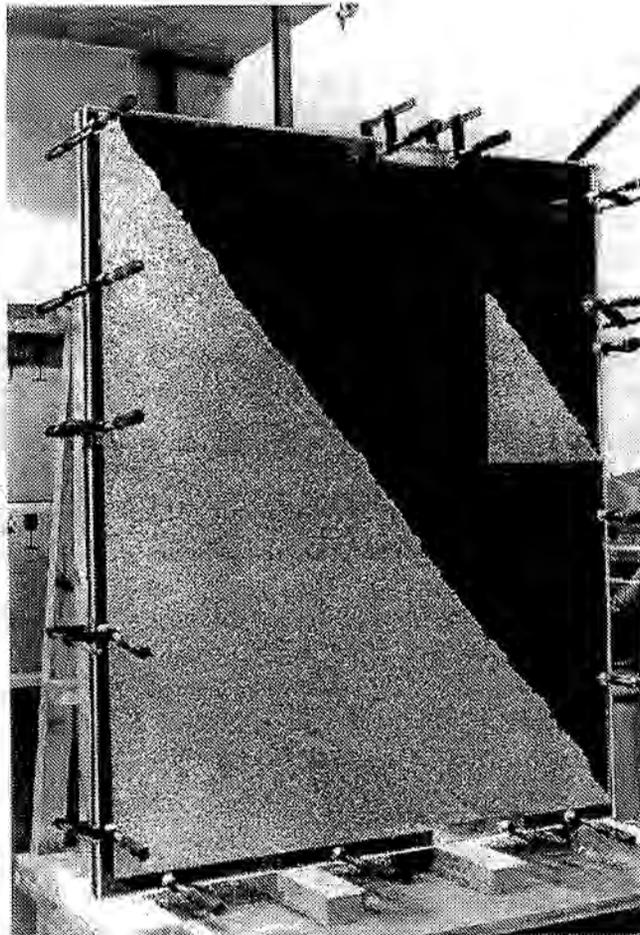


Figura 5.1. *Dispositivo experimental del experimento de Oslo. Fotografía cortesía de los autores de la referencia [11].*

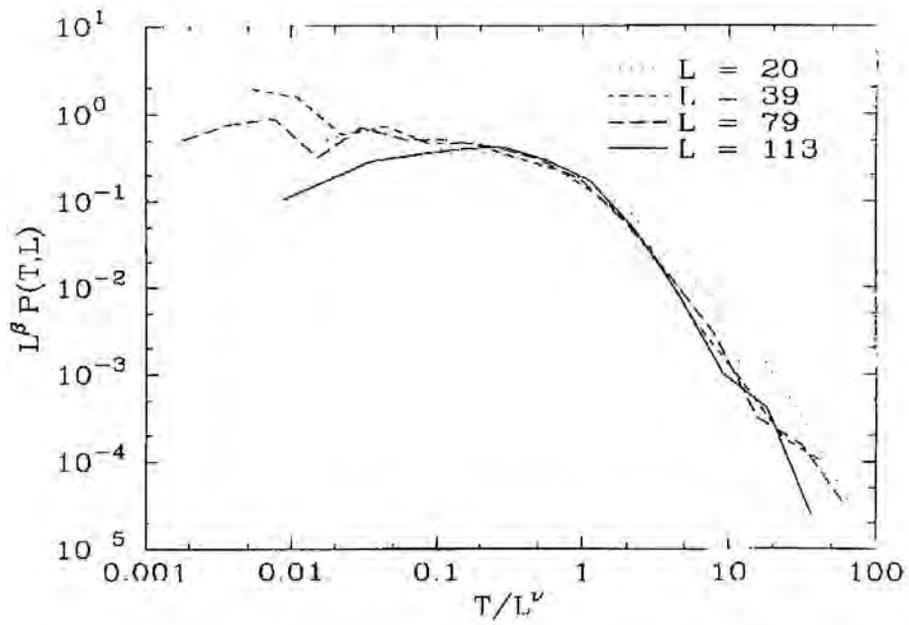


Figura 5.2. Distribución de tiempos de tránsito $P_w(T, L)$ obtenida en el experimento de Oslo. El escalado con el tamaño del sistema se obtuvo para $\nu = 1.5 \pm 0.2$ y $\nu' = 1.4 \pm 0.2$. Cortesía de los autores de la referencia [11].

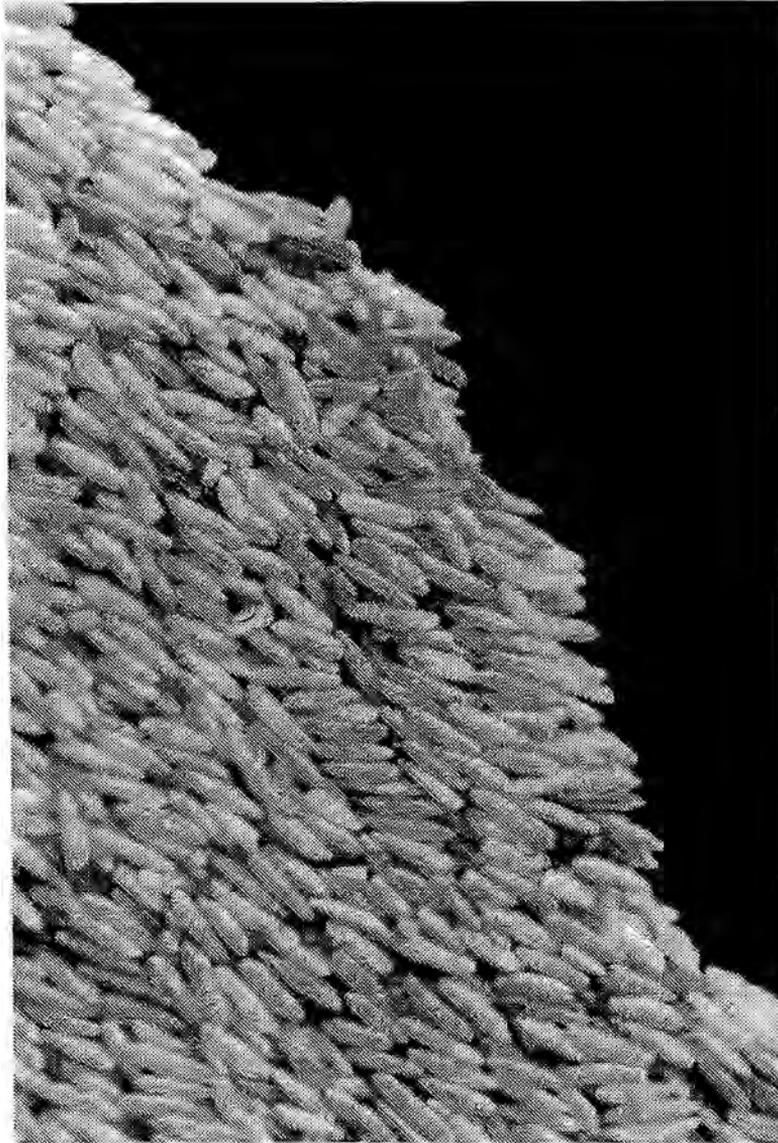


Figura 5.3. Detalle de los granos trazadores que se utilizaron para medir la distribución de tiempos de tránsito. Fotografía cortesía de los autores de la referencia [11]

de un camino aleatorio a tiempo continuo (CATC), con una distribución de tiempos de atrapamiento

$$\psi(t), \quad (5.7)$$

y una distribución de vuelos

$$\phi(l). \quad (5.8)$$

Para ser precisos, $\psi(t)dt$ es la probabilidad de que una partícula permanezca atrapada en una posición durante un tiempo entre t y $t+dt$, mientras que $\phi(l)dl$ nos da la probabilidad de que una partícula salte una distancia entre l y $l+dl$ durante una avalancha. Hay que hacer notar que podemos asumir que $l > 0$ siempre, ya que en el experimento no hay ningún mecanismo que permita a los granos subir a través de la pila, siempre se mueven en el mismo sentido. Esto provoca una simplificación en los cálculos en comparación con los modelos de difusión en semiconductores amorfos [17]. Los motivos son, por un lado, que al estar l definido en el intervalo $(0, \infty)$ nos permite trabajar tanto con la variable temporal como con la variable espacial en el espacio de Laplace y aprovecharnos así de los teoremas Abelianos y Tauberianos para la transformada de Laplace [19] (vease también el apéndice) y, por otro lado, podemos relacionar la función de distribución de la posición de la partícula con la probabilidad de supervivencia de una manera inmediata. Además, supondremos que la longitud del vuelo l no está limitada por el tamaño del sistema. Las variables t y l se toman como procesos aleatorios independientes. Esta hipótesis de independencia estadística ha sido utilizada con éxito en reproducir otros resultados experimentales en sistemas similares, ver Ref. [18] por ejemplo. Finalmente, nótese que la suposición de que los vuelos son instantáneos no es más que la condición usual de la SOC de separación de escalas temporales, es decir, la escala temporal asociada con la perturbación externa es mucho mayor que la escala temporal asociada a la dinámica de las avalanchas.

La magnitud de interés medida en el experimento es la distribución de tiempos de tránsito $P_{tr}(T, \mathcal{L})$, donde $P_{tr}(T, \mathcal{L})dT$ nos da la probabilidad de que la partícula tarde un tiempo entre T y $T+dT$ en recorrer la distancia entre el origen y $x = \mathcal{L} \leq L$. En el contexto de los procesos estocásticos, el tiempo de tránsito no es más que el tiempo de primer paso hasta la posición \mathcal{L} . Esta distribución se puede relacionar fácilmente con $p(x, t)$, la densidad de probabilidad de presencia en la posición x en el tiempo t , definida de tal modo que $p(x, t)dx$ es la probabilidad de que en el tiempo t una partícula esté en una posición entre x y $x+dx$, donde el tiempo se mide desde la adición de la partícula al sistema. La probabilidad de estar en $x \leq \mathcal{L}$ en el tiempo t es igual que la probabilidad

de tener un tiempo de tránsito $T > t$, es decir,

$$\text{Prob}\{x \leq \mathcal{L} \text{ en } t\} = \text{Prob}\{T > t\} = 1 - \text{Prob}\{T \leq t\}, \quad (5.9)$$

o equivalentemente

$$\int_0^{\mathcal{L}} p(x, t) dx = 1 - \int_0^t P_{tr}(T, \mathcal{L}) dT. \quad (5.10)$$

Recordemos que esta igualdad es cierta porque $l > 0$ y, por lo tanto, la función de distribución es equivalente a la probabilidad de supervivencia. Por otro lado, como ya vimos en la introducción general $p(x, t)$ verifica una ecuación integral relacionada con la densidad de renovación $h(x, t)$, donde $h(x, t)dx$ es la probabilidad por unidad de tiempo de que un salto tenga lugar en una posición entre x y $x + dx$. Al mismo tiempo, $h(x, t)$ también verifica una ecuación integral (esta vez cerrada para $h(x, t)$) relacionada con las densidades del tiempo de atrapamiento y de vuelos de los granos $\psi(t)$ y $\phi(l)$:

$$h(x, t) = [\mu\phi(x) + (1 - \mu)\delta(x)]\psi(t) + \int_0^t \int_0^x h(x', \tau)\phi(x - x')\psi(t - \tau)dx'd\tau, \quad (5.11)$$

$$p(x, t) = [\mu\phi(x) + (1 - \mu)\delta(x)]\Psi(t) + \int_0^t \int_0^x h(x', \tau)\phi(x - x')\Psi(t - \tau)d\tau dx', \quad (5.12)$$

donde

$$\Psi(t) \equiv \int_t^\infty \psi(t') dt' \quad (5.13)$$

es la probabilidad de que una partícula sobreviva atrapada en una posición durante un tiempo mayor o igual que t . μ es la probabilidad de que en $t = 0$ el grano comience moviéndose. Las ecuaciones (5.10), (5.11), y (5.12) contienen la solución de nuestro problema, relacionando una magnitud medible experimentalmente, $P_{tr}(T, \mathcal{L})$, con las magnitudes que definen la dinámica microscópica del transporte, $\psi(t)$ y $\phi(l)$. Como las integrales que aparecen en las ecuaciones (5.11) y (5.12) están en convolución resulta más útil trabajar en el espacio de Laplace,

$$\frac{\hat{p}(\omega, s)}{\omega} = \frac{1}{\omega s} - \frac{\hat{P}_{tr}(s, \omega)}{s}, \quad (5.14)$$

$$\hat{h}(\omega, s) = [\mu\hat{\phi}(\omega) + (1 - \mu)]\hat{\psi}(s) + \hat{h}(\omega, s)\hat{\psi}(s)\hat{\phi}(\omega), \quad (5.15)$$

$$\hat{p}(\omega, s) = \left[(1 - \mu) + (\hat{h}(\omega, s) + \mu)\hat{\phi}(\omega) \right] \frac{1 - \hat{\psi}(s)}{s}, \quad (5.16)$$

donde definimos la transformada doble de Laplace de una magnitud $f(x, t)$ como

$$\hat{f}(\omega, s) \equiv \int_0^\infty dx \int_0^\infty dt e^{-\omega x} e^{-st} f(x, t) \quad (5.17)$$

(sustituyendo x por \mathcal{L} en el caso de la ecuación (5.10)). Finalmente, en el espacio de Laplace las ecuaciones (5.11) y (5.12) se han convertido en un sistema de ecuaciones lineal para \hat{P}_{tr} , \hat{h} y \hat{p} que puede ser fácilmente resuelto. Después de un poco de álgebra elemental obtenemos para las funciones $\hat{h}(\omega, s)$, $\hat{p}(\omega, s)$ y $\hat{P}_{tr}(s, \omega)$ las expresiones

$$\hat{h}(\omega, s) = \frac{\mu + (1 - \mu)\hat{\psi}(s)}{1 - \hat{\psi}(s)\hat{\phi}(\omega)}, \quad (5.18)$$

$$\hat{p}(\omega, s) = \frac{[1 - \hat{\psi}(s)][1 - \mu + \mu\hat{\phi}(\omega)]}{s[1 - \hat{\psi}(s)\hat{\phi}(\omega)]} \quad (5.19)$$

y

$$\hat{P}_{tr}(s, \omega) = \frac{1}{\omega} \left[1 - \frac{(1 - \hat{\psi}(s))[1 - \mu(1 - \hat{\phi}(\omega))]}{1 - \hat{\psi}(s)\hat{\phi}(\omega)} \right]. \quad (5.20)$$

De la expresión para $\hat{P}_{tr}(s, \omega)$ es posible, sin más que derivar respecto a s , encontrar los momentos de la distribución del tiempo de tránsito, en particular para el tiempo medio de tránsito $\langle T(\mathcal{L}) \rangle$ tenemos

$$\langle T(\omega) \rangle = - \left[\frac{\partial}{\partial s} \hat{P}_{tr}(s, \omega) \right]_{s=0} = \frac{1 - \mu(1 - \hat{\phi}(\omega))}{\omega(1 - \hat{\phi}(\omega))} \langle t \rangle, \quad (5.21)$$

donde podemos comprobar que la existencia de $\langle T(\omega) \rangle$ depende directamente de la existencia del primer momento de $\psi(t)$, obtenido como

$$\langle t \rangle \equiv \int_0^\infty t\psi(t)dt = - \left[\frac{d\hat{\psi}}{ds} \right]_{s=0}. \quad (5.22)$$

Como en el experimento se encontró que $\langle T(\mathcal{L}) \rangle$ era finito, podemos concluir que $\langle t \rangle$ también es finito. Se puede hacer un razonamiento similar para el segundo momento

$$\langle T^2(\omega) \rangle = \left[\frac{\partial^2}{\partial s^2} \hat{P}_{tr}(s, \omega) \right]_{s=0} = \frac{\langle T(\omega) \rangle}{\langle t \rangle} \left[\langle t^2 \rangle + \frac{2\hat{\phi}(\omega)}{1 - \hat{\phi}(\omega)} \langle t \rangle^2 \right], \quad (5.23)$$

que como en el experimento se encontró que era infinito, nos permite afirmar que el segundo momento $\langle t^2 \rangle$ de la distribución de tiempos de atrapamiento es también infinito. La posibilidad más sencilla de que la densidad de tiempos de atrapamiento tenga primer momento definido pero segundo momento infinito es que tenga un comportamiento asintótico de la forma

$$\psi(t) \sim \frac{B}{t^{2+\beta}}, \quad \text{para } t \rightarrow \infty, \quad \text{con } 0 < \beta \leq 1, \quad (5.24)$$

que en el espacio de Laplace se transforma en [19]

$$\hat{\psi}(s) \sim 1 - \langle t \rangle s + B\Gamma(-1 - \beta)s^{1+\beta} \text{ para } s \rightarrow 0, \quad (5.25)$$

donde $\Gamma(\cdot)$ es la función Gamma³. Sustituyendo esta expresión en la ecuación para \hat{P}_{tr} (5.20) e invirtiendo la transformada de Laplace para s obtenemos

$$\hat{P}_{tr}(T, \omega) \sim \frac{1 - \mu(1 - \hat{\phi})}{\omega(1 - \hat{\phi})} \frac{B}{T^{2+\beta}}, \text{ para } T \rightarrow \infty. \quad (5.26)$$

Comparando (5.24) y (5.26) podemos ver cómo la distribución de tiempos de tránsito, que es una magnitud macroscópica, está relacionada con la distribución de tiempos de atrapamiento, una magnitud microscópica. Ambas distribuciones tienen el mismo comportamiento asintótico con una ley de potencias con el mismo exponente. A partir del resultado experimental (5.4) podemos inferir que los tiempos de atrapamiento en la pila real están distribuidos según una ley de potencias de exponente

$$2 + \beta = \alpha, \quad (5.27)$$

en el límite de tiempos grandes. Nótese que el comportamiento asintótico de la distribución de tiempos de tránsito sólo depende de la distribución de tiempos de atrapamiento y no de la distribución de vuelos. Alternativamente, podemos hacer primero el límite de distancias largas, es decir, $\omega \rightarrow 0$ en la ecuación (5.20). Para ello es necesario conocer el comportamiento asintótico de la distribución de vuelos. De los resultados experimentales (5.4) y (5.5) se puede inferir que

$$\lim_{T \rightarrow 0} P_{tr}(T, L) \sim \frac{1}{L^{\nu'}}, \quad (5.28)$$

donde ν' es un exponente acotado en el intervalo $[1, 2]$. El límite (5.28) no es más que la probabilidad por unidad de tiempo de que un grano que entra en la pila salga directamente, es decir, la probabilidad de que el salto que realiza el grano sea mayor o igual que el tamaño de la pila. Esto nos permite escribir

$$\int_L^\infty \phi(l) dl \sim \frac{C}{L^{\nu'}}, \quad (5.29)$$

o equivalentemente

$$\phi(l) \sim \frac{C}{l^{2+\gamma}} \text{ para } l \rightarrow \infty, \text{ con } 0 < \gamma \leq 1, \quad (5.30)$$

³En el apéndice se pueden encontrar los teoremas Abelianos que permiten escribir los desarrollos asintóticos de la transformada de Laplace de una función arbitraria.

con

$$2 + \gamma = 1 + \nu'. \quad (5.31)$$

De este modo comprobamos como los resultado experimentales (5.4) y (5.5) nos determinan los comportamientos asintóticos de las magnitudes microscópicas. Tras todas estas consideraciones, podemos afirmar que el escalamiento de P_{tr} dado por (5.5) significa que la distribución de saltos tiene el primer momento finito ($\langle l \rangle$) pero varianza infinita. Sustituyendo la transformada de Laplace de $\phi(l)$ (que verifica una relación similar a (5.25)) en la ecuación (5.20) podemos encontrar el comportamiento asintótico de la distribución de tiempos de tránsito para tamaños grandes,

$$\hat{P}_{tr}(s, \mathcal{L}) \sim \frac{C}{1 + \gamma} \left(\mu + \frac{\hat{\psi}}{1 - \hat{\psi}} \right) \frac{1}{\mathcal{L}^{1+\gamma}}, \text{ para } \mathcal{L} \rightarrow \infty. \quad (5.32)$$

Este comportamiento corresponde a tiempos “menores” que \mathcal{L} . Para tiempos pequeños, el movimiento de los granos es superficial (casi no hay atrapamientos) y la probabilidad del tiempo de tránsito hasta la posición \mathcal{L} será independiente del tamaño del sistema; en otras palabras, la ecuación (5.32) no depende de L . Si tomamos $\mathcal{L} = L$ podemos pensar que el escalamiento con el tamaño del sistema es el mismo que con la posición. Si denotamos a este último escalamiento con los subíndices ν_x y ν'_x , es decir,

$$P_{tr}(T, \mathcal{L}) = \mathcal{L}^{-\nu'_x} \mathcal{F}(T/\mathcal{L}^{-\nu_x}), \quad (5.33)$$

podemos afirmar que $\nu' = \nu'_x$ y comparando con el escalamiento encontrado en el experimento tenemos

$$1 + \gamma = \nu', \quad (5.34)$$

como ya habíamos visto anteriormente. Si en la ecuación (5.32) hacemos el límite $s \rightarrow 0$ encontramos el comportamiento para tiempos largos pero “menores” que \mathcal{L} , que resulta ser independiente de T :

$$P_{tr}(T, \mathcal{L}) \sim \frac{C}{(1 + \gamma)\langle l \rangle} \frac{1}{\mathcal{L}^{1+\gamma}}, \text{ para } T < \frac{\langle l \rangle}{\langle l \rangle} \mathcal{L}. \quad (5.35)$$

Esto se corresponde con la región plana observada en la distribución de tiempos de tránsito antes del decaimiento potencial. En efecto, la aparición de una región plana en P_{tr} es una consecuencia de la existencia de $\langle l \rangle$.

Como ahora ya conocemos el comportamiento asintótico de $\phi(l)$ podemos volver a las ecuaciones (5.26) y (5.21) y realizar el límite de largas distancias para obtener el escalado de P_{tr} con \mathcal{L} para tiempos largos y el escalado del tiempo medio de tránsito:

$$P_{tr}(T, \mathcal{L}) \sim \frac{B}{\langle l \rangle} \frac{\mathcal{L}}{T^{2+\beta}} \quad \text{para } T \gg \frac{\langle t \rangle}{\langle l \rangle} \mathcal{L}, \quad (5.36)$$

$$\langle T(\mathcal{L}) \rangle \sim \frac{\langle t \rangle}{\langle l \rangle} \mathcal{L} \quad \text{para } \mathcal{L} \rightarrow \infty. \quad (5.37)$$

En este punto nos encontramos con la primera aparente contradicción con el experimento, ya que en nuestro modelo $\nu_x = 1$, en contraste con las ecuaciones (5.5) y (5.6). La razón es que no estamos estudiando el escalado de $\langle T \rangle$ con el tamaño de sistema L , sino que estamos fijando L y estudiando el tiempo de tránsito hasta una posición interior del sistema $\mathcal{L} \leq L$. El motivo de la distinción es que la distribución de tiempos de atrapamiento de los granos dentro de la pila depende del tamaño total del sistema. Esto se debe a que el tiempo que un grano queda atrapado depende de lo profundo que quede enterrado. Esto nos permite definir el concepto de zona activa de la pila como la zona de la pila donde un grano puede quedar atrapado o, equivalentemente, la zona de actividad de la pila. Los granos que están fuera de esta zona activa siempre están en reposo. La clave está entonces en que el tamaño de esta zona activa se incrementa al incrementar L . Además, nótese que las ecuaciones (5.35) y (5.36) dan el escalado de la distribución de tiempos de tránsito sólo para una región $T < \mathcal{L}\langle t \rangle / \langle l \rangle$ y para $T \gg \mathcal{L}\langle t \rangle / \langle l \rangle$, es decir, la solución del modelo no presenta escalamiento con el tamaño del sistema para todo T y \mathcal{L} , únicamente de forma asintótica. Esta es la razón de que $\nu_x \neq \nu'_x$. Como veremos más adelante, con simulaciones numéricas en un autómata celular, se puede comprobar que este resultado es correcto y se puede esperar que en el experimento $\langle T(\mathcal{L}) \rangle \sim \mathcal{L}$ igualmente. Si imponemos una condición de continuidad de P_{tr} en el punto de cambio entre ambos comportamientos $T_c \sim \mathcal{L}$ obtenemos la siguiente relación entre los exponentes de las distribuciones de vuelos y de atrapamientos:

$$\beta = \gamma, \quad (5.38)$$

es decir, $\psi(t)$ y $\phi(l)$ tienen el mismo comportamiento asintótico. Usando también las ecuaciones (5.27) y (5.34) obtenemos

$$\alpha = 1 + \nu'_x \quad (5.39)$$

y teniendo en cuenta $\nu' \simeq \nu'_x$, entonces

$$\alpha = 1 + \nu'. \quad (5.40)$$

Esta ecuación relaciona el exponente de la ley de potencias de la distribución de tiempos de tránsito P_{tr} con su escalado con el tamaño del sistema. Con los resultados experimentales (5.4) y (5.5) se puede apreciar que el acuerdo entre teoría y experimento es muy bueno ya que en el experimento

$$\alpha = 2.4 \pm 0.2 = 1 + 1.4 \pm 0.2 = 1 + \nu', \quad (5.41)$$

que como se puede comprobar entra dentro de los márgenes de error del experimento.

Las distribuciones de vuelos con el comportamiento asintótico dado por la ecuación (5.30) corresponden a lo que en la literatura se conoce como vuelos de Lévy⁴ [20]. Estas distribuciones de Lévy conducen a comportamientos superdifusivos. Esto se puede comprobar a partir de la expresión que hemos encontrado para $\tilde{p}(\omega, s)$ sin más que darse cuenta que

$$\langle x(t) \rangle \sim \frac{\langle l \rangle}{\langle t \rangle} t, \quad (5.42)$$

y

$$\langle x^2(t) \rangle \propto \langle l^2 \rangle = \infty, \quad (5.43)$$

donde hemos usado que la transformada de Laplace de $\phi(l)$ verifica una relación similar a (5.25). Además, para ver explícitamente el comportamiento superdifusivo de este tipo de caminos aleatorios, es posible encontrar el comportamiento asintótico de $p(x, t)$ a grandes distancias. El límite de grandes distancias se puede hacer de dos formas distintas, es decir, primero hacer el límite de grandes distancias sin especificar el tiempo o bien hacer primero el límite de tiempos grandes y luego el de distancias grandes. Estos dos límites están separados por la condición

$$x \gg \frac{\langle l \rangle}{\langle t \rangle} t \text{ o bien } x \ll \frac{\langle l \rangle}{\langle t \rangle} t. \quad (5.44)$$

Entonces, suponiendo que usamos las distribuciones microscópicas compatibles con el experimento, podemos escribir

$$p(x, t) \sim \frac{B'}{\langle l \rangle t^{1+\gamma}}, \text{ para } x \ll \frac{\langle l \rangle}{\langle t \rangle} t \quad (5.45)$$

y

$$p(x, t) \sim \frac{Ct}{\langle t \rangle x^{2+\beta}}, \text{ para } x \gg \frac{\langle l \rangle}{\langle t \rangle} t. \quad (5.46)$$

Nuevamente encontramos que para grandes distancias el comportamiento es el mismo que el de la distribución de vuelos microscópica, mientras que para distancias cortas aparece una región plana independiente de la posición.

⁴También llamadas leyes estables de Lévy

5.4 Simulaciones

El problema que nos encontramos ahora es que resulta difícil contrastar nuestro modelo de transporte con resultados experimentales. Es cierto que nuestros resultados teóricos concuerdan bien con el experimento de Oslo, pero estamos limitados a un solo experimento. Esto nos induce a contrastar nuestras conclusiones con resultados de simulaciones. Seguiremos dos caminos alternativos. El primero consiste en simular el modelo de CATC con unas distribuciones microscópicas como “input” y estudiar la distribución de tiempos de tránsito y la densidad de probabilidad de la partícula. La otra vía consiste en utilizar un autómata celular. El autómata celular que utilizaremos es el que usaron en la Ref-[11]. Este autómata se basa en reproducir la dinámica microscópica de los granos, de una manera un poco simplificada, definiendo unas reglas de evolución que involucren interacción con los primeros vecinos y, entonces, dejar que evolucione por sí mismo. De este modo tenemos un nuevo sistema con un comportamiento similar al de la pila real pero con la ventaja de que nos permite medir magnitudes muy difíciles de medir en una pila real. En particular mediremos las distribuciones microscópicas para comprobar si, efectivamente, son las que nuestro modelo teórico predice.

5.4.1 Simulaciones del Modelo de CATC

Para realizar las simulaciones del modelo de CATC hemos utilizado como “input” dos distribuciones potenciales para los vuelos y para los tiempos de espera. Concretamente, las distribuciones que hemos utilizado son

$$\phi(\ell) = \frac{C_\ell}{(\ell_c + \ell)^{2+\gamma}} \quad (5.47)$$

y

$$\psi(t) = \frac{C_t}{(t_c + t)^{2+\beta}}, \quad (5.48)$$

con $\ell_c = 10$, $t_c = 100$ y *cutoffs* mínimos $\ell_{min} = 1$ y $t_{min} = 1$. Los valores de β y γ se toman 0.23 en lugar de 0.4 para poder comparar con el autómata celular de la referencia [11] que estudiaremos en la siguiente sección.

En la figura 5.4 se muestra el escalado incompleto con el tamaño del sistema de la distribución de tiempos de tránsito, con \mathcal{L} tomando valores entre 100 y 10^5 . Efectivamente, esta distribución presenta una región plana seguida de una región con una ley de potencias con el mismo exponente que el de la distribución de tiempos de atrapamiento. Además, el cambio de comportamiento se produce en $T_c \sim \mathcal{L}$, como sugiere la ecuación

(5.36) y, por lo tanto, $\langle T(\mathcal{L}) \rangle \sim \mathcal{L}$. El escalado se ha hecho usando $\nu' = 0.96$ y $\nu = 1.36$. Nótese que $\nu \neq \nu' \simeq 1$. Esto se debe a que nuestro modelo no presenta *finite size scaling* para todo T , únicamente de forma asintótica. Obsérvense también los picos para $T \sim T_c$ que se incrementan con el tamaño del sistema \mathcal{L} , aunque no contradicen nuestros resultados. El mejor ajuste de las colas de la distribución se da con un exponente 2.25.

La figura (5.5) muestra los resultados de las simulaciones para la densidad de probabilidad de presencia de la partícula. Igualmente se puede comprobar la existencia de la región plana y la posterior ley de potencias con el exponente esperado.

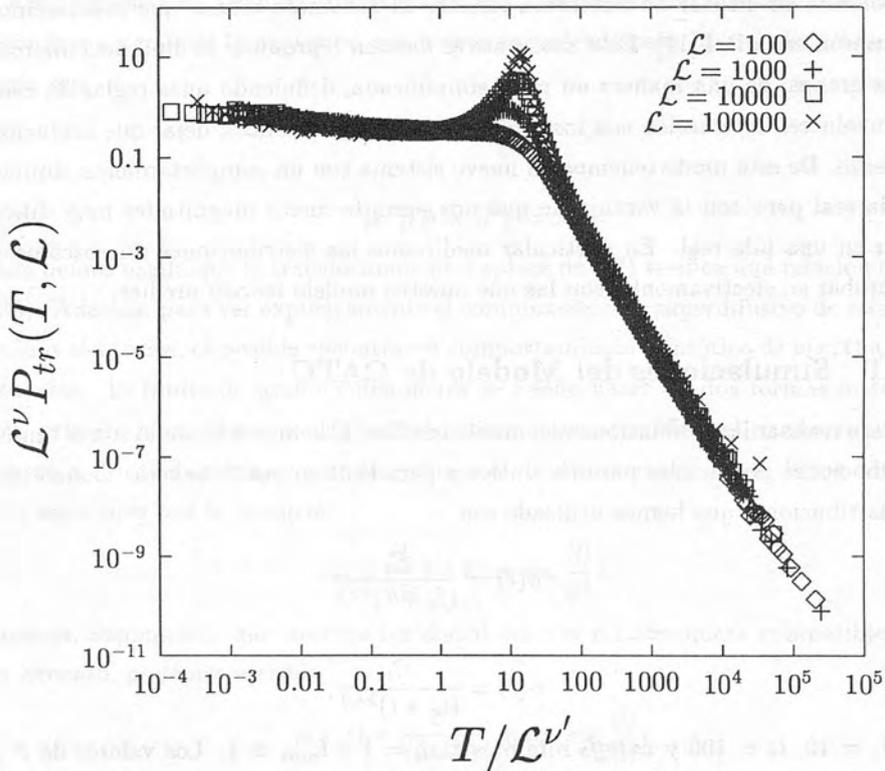


Figura 5.4. Simulaciones del modelo de camino aleatorio a tiempo continuo. En la figura se muestra la distribución de los tiempos de tránsito desde el origen hasta una posición \mathcal{L} escalada con el tamaño \mathcal{L} . Los exponentes son $\nu' = 0.96$ y $\nu = 1.36$.

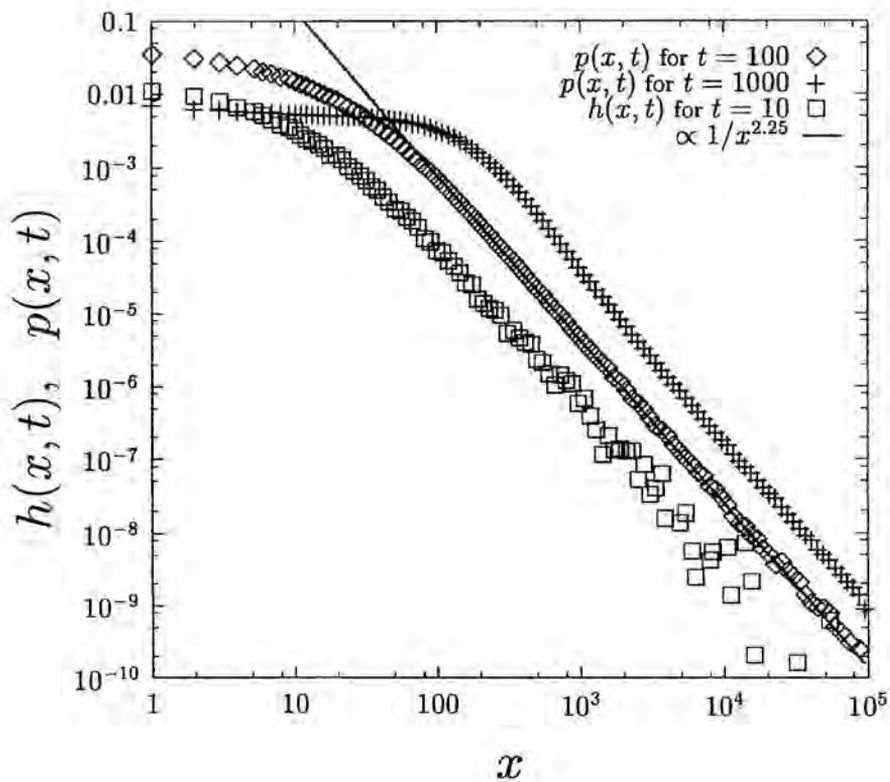


Figura 5.5. Densidad de probabilidad de la posición de la partícula y densidad de renovación. Se observa claramente la zona plana y la ley de potencias posterior.

5.4.2 El Autómata Celular

Resulta bastante complicado diseñar un experimento para medir las distribuciones de tiempos de atrapamiento y de saltos, que son magnitudes microscópicas, a pesar de que en los medios granulares las escalas microscópicas y macroscópicas no están tan bien separadas como ocurre en los estados usuales de la materia [10]. Una alternativa a los experimentos para apoyar nuestras conclusiones es trabajar con un autómata celular. Utilizaremos el autómata introducido en [11], que demostró reproducir las propiedades de transporte de los granos bastante bien. Además, las propiedades de transporte no son muy sensibles a los detalles técnicos del autómata y, por lo tanto, los resultados son los mismos independientemente del autómata utilizado [21].

El autómata está definido en una red unidimensional, desde $x = 1$ hasta $x = L$, donde definimos una variable entera h_x que representará la altura de la pila en la posición x . Más que la altura de la pila, la variable relevante es la pendiente local, definida como la diferencia entre las alturas de dos posiciones adyacentes, es decir,

$$z_x \equiv h_x - h_{x+1}. \quad (5.49)$$

Además de la pendiente, en cada posición definimos una variable interna, la pendiente crítica, z_c , de tal modo que una posición es estable sólo si la pendiente es menor o igual a la pendiente crítica. La pendiente crítica no es una cantidad estática, cada vez que un grano pasa por una posición, la pendiente crítica toma uno de sus posibles valores equiprobablemente. De este modo, la dinámica de ambas variables está acoplada y se garantiza así la no trivialidad del modelo. La dinámica del autómata está descrita en términos de estas variables. Las reglas de evolución son:

$$\begin{aligned} & \text{si } z_x \leq z_x^c \quad \forall x \Rightarrow z_1 \rightarrow z_1 + 1 \quad (\text{se añade un grano}) \\ & \text{si } z_x > z_x^c \text{ y } x < L \Rightarrow \begin{cases} z_{x-1} \rightarrow z_{x-1} + 1 \\ z_x \rightarrow z_x - 2 \\ z_{x+1} \rightarrow z_{x+1} + 1 \\ z_x^c \rightarrow \text{rand}(1, 2) \end{cases} \\ & \text{si } z_L > z_L^c \Rightarrow \begin{cases} z_{L-1} \rightarrow z_{L-1} + 1 \\ z_L \rightarrow z_L - 1 \\ z_L^c \rightarrow \text{rand}(1, 2), \end{cases} \end{aligned} \quad (5.50)$$

donde todas las posiciones deben ser actualizadas en paralelo y $\text{rand}(1, 2)$ significa 1 o 2 aleatoriamente, con igual probabilidad. La adición de granos externos en $x = 1$ marca la unidad de tiempo. En la Fig-(5.6) se muestra un esquema del autómata.

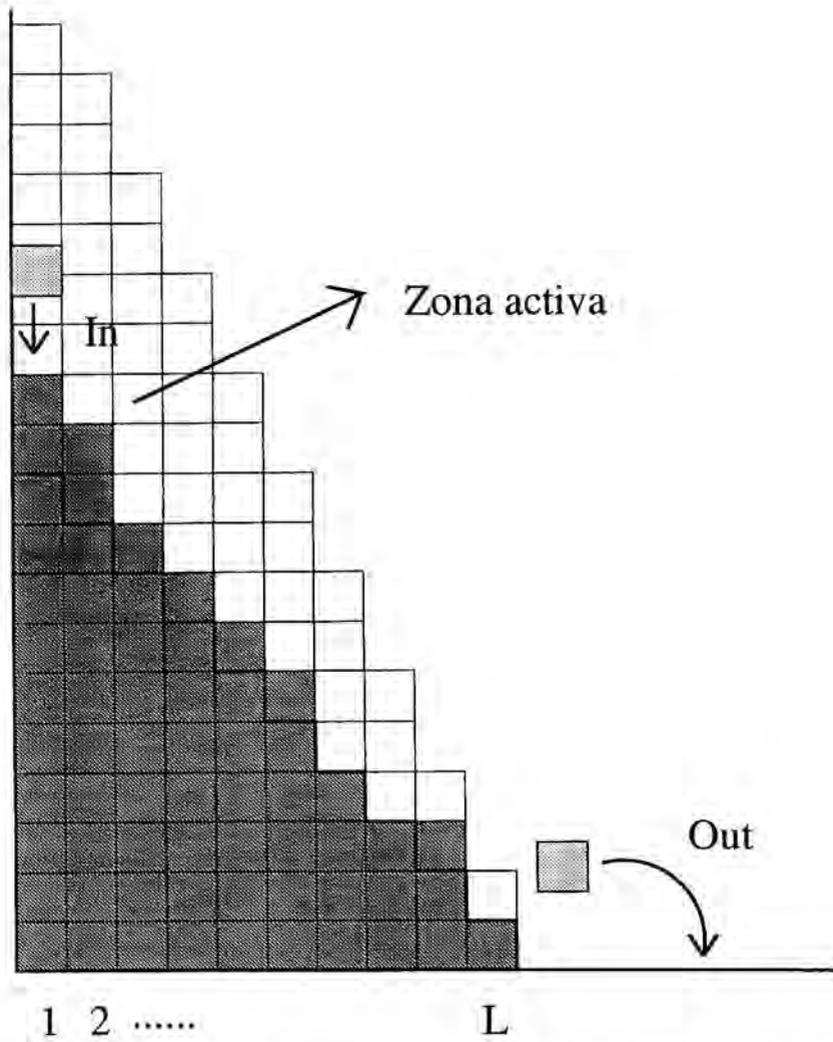


Figura 5.6. Esquema del autómata celular utilizado. Los granos son añadidos por la izquierda y salen por la derecha. Cuando un grano llega a una posición inestable continua su recorrido y provoca un cambio aleatorio en la pendiente crítica de esa posición pudiendo inducir la inestabilidad de otros granos. La zona activa se define como la zona en la que, tras superar el período transitorio, tienen lugar las avalanchas.

Los resultados de la Ref. [11] muestran que las ecuaciones (5.4), (5.5), y (5.6) son aún válidas, aunque los exponentes se pueden calcular con más precisión. Los exponentes que se obtienen son:

$$\alpha = 2.21 \pm 0.05, \quad (5.51)$$

$$\nu = 1.25 \pm 0.10, \text{ y } \nu' = 1.25 \pm 0.10, \quad (5.52)$$

en acuerdo con nuestra relación de escala (5.40). La distribución de tiempos de atrapamiento puede ser obtenida a partir de las simulaciones con el autómata como el número de atrapamientos de una duración determinada dividido por el número total de atrapamientos. Los resultados se muestran en la Fig-(5.7). El resultado es una ley de potencias para tiempos largos con un exponente

$$2 + \beta = 2.20 \pm 0.05, \quad (5.53)$$

que está también en buen acuerdo con nuestra predicción (5.27) si comparamos con la medida independiente de α . También es posible medir la distribución de la longitud de los vuelos. El comportamiento para grandes distancias sigue de nuevo una ley de potencias cuyo exponente es

$$2 + \gamma = 2.13 \pm 0.05. \quad (5.54)$$

Nos hemos restringido a la medida de los vuelos desde una posición inicial fija. Como se puede comprobar, ν' , β , y γ son perfectamente compatibles con los resultados que hemos derivado (5.34) y (5.38).

Las simulaciones nos permiten además estudiar el tiempo de tránsito para alcanzar una posición $x = \mathcal{L}$ menor que el tamaño del sistema L . Manteniendo L fijo, los exponentes del escalado de P_{tr} con \mathcal{L} son

$$\nu_x = 1.0 \pm 0.1 \text{ y } \nu'_x = 1.2 \pm 0.1, \quad (5.55)$$

tal como se predice en las ecuaciones (5.35) y (5.36) mientras que el exponente de la ley de potencias es $\alpha = 2.18 \pm 0.05$ de acuerdo con (5.40), véase la Fig-(5.9).

Para finalizar, podemos encontrar una relación de escala adicional para nuestro modelo. En la Ref-[11] se encontró que $\chi = \nu - 1$, siendo χ el exponente de rugosidad del perfil de la pila, es decir, las fluctuaciones del perfil de la pila escalan con el tamaño del sistema como L^χ . Por otro lado, en la Ref-[15] se demostró que $D = 2 + \chi$, con D la dimensión fractal de las avalanchas, es decir, el tamaño de las avalanchas escala como L^D . Como sabemos, por la condición de normalización, que $\nu \simeq \nu'$, combinando estas relaciones con (5.40) obtenemos

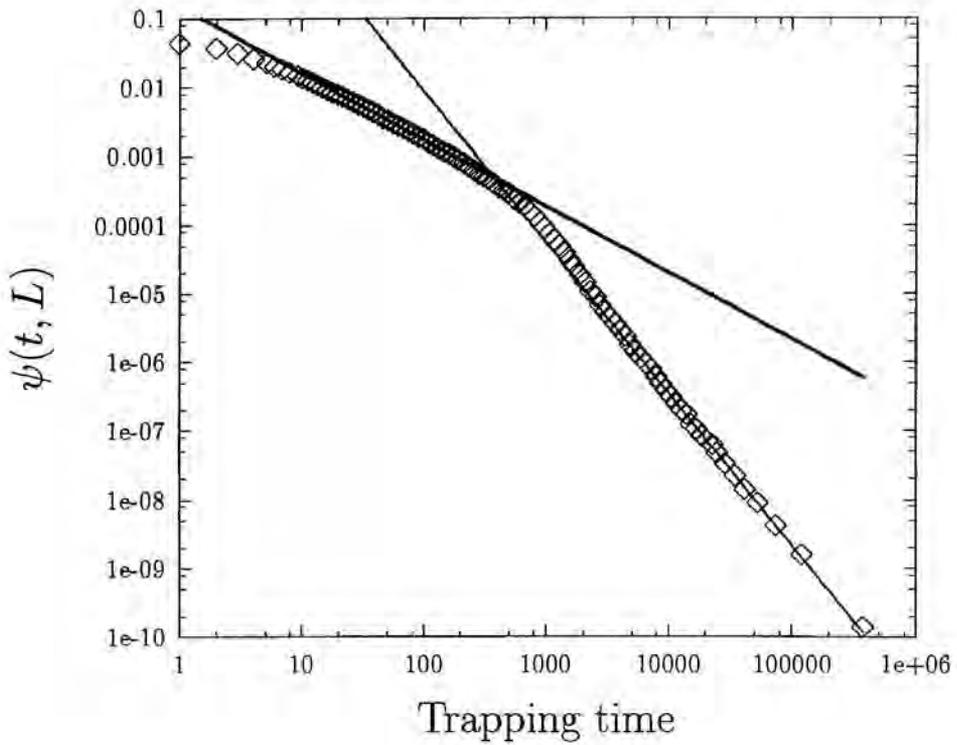


Figura 5.7. Distribución de tiempos de atrapamiento en un sistema de tamaño $L = 400$. Las dos líneas rectas son leyes de potencias con exponentes -0.97 ± 0.05 y -2.20 ± 0.05 .

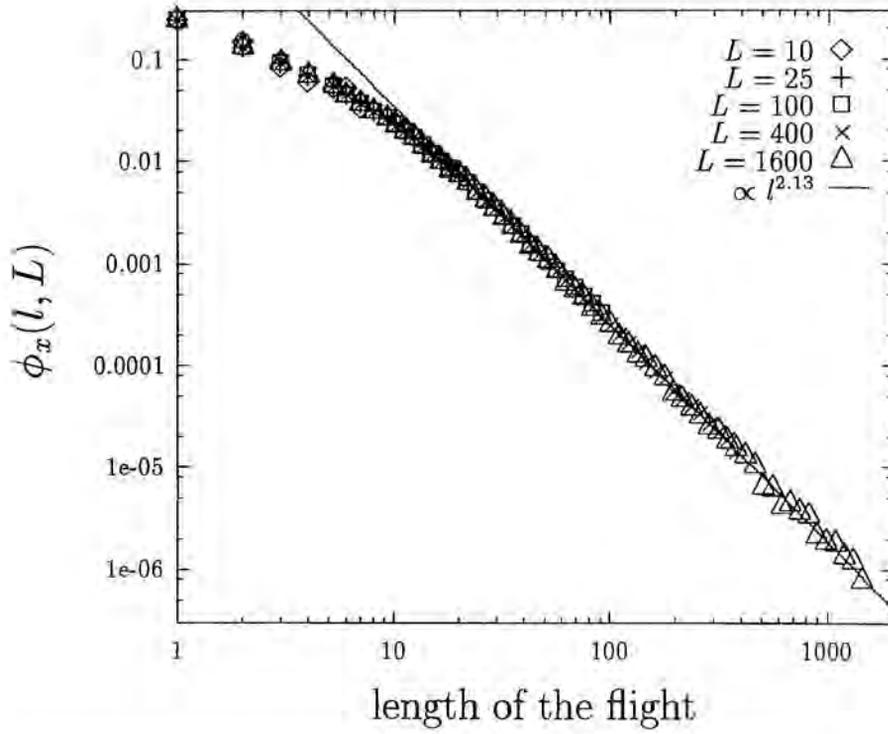


Figura 5.8. Distribución de longitudes de los vuelos comenzando en la posición $x = 2$ para diferentes tamaños del sistema. La longitud de un vuelo no depende del tamaño del sistema como se ve claramente en la gráfica. El comportamiento asintótico está caracterizado por un exponente -2.13 ± 0.05 .

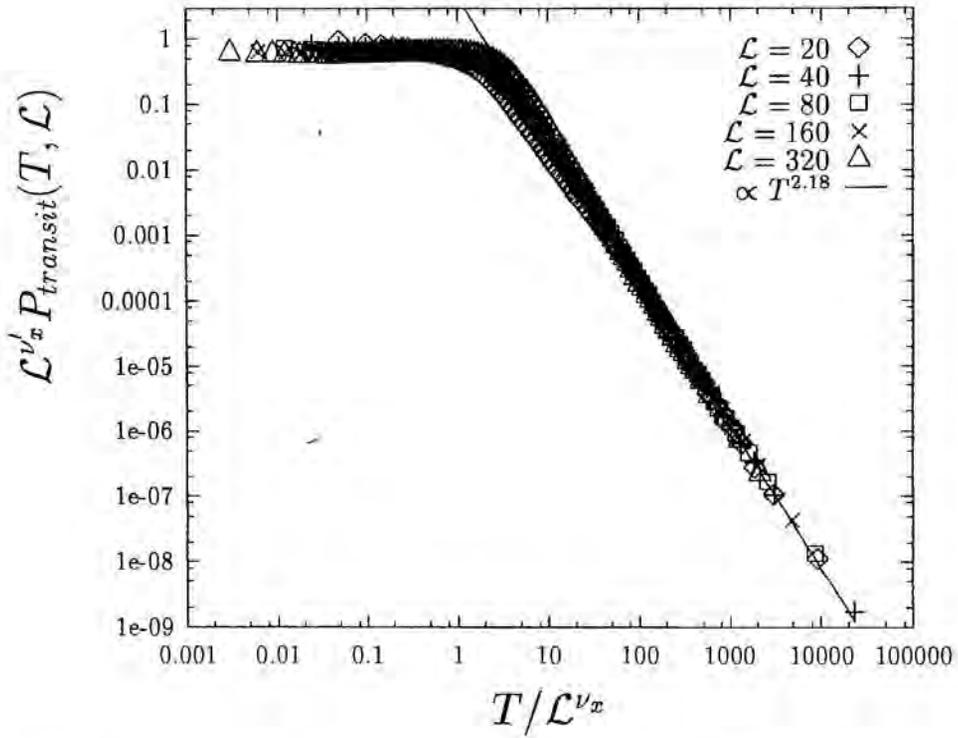


Figura 5.9. Distribución escalada del tiempo de tránsito desde $x = 1$ hasta $x = L$ en un sistema de tamaño $L = 400$ para diferentes valores de L . El escalado funciona bien para $T \gg L$ y $T < L$, con unos exponentes $\nu_x = 1.0$ y $\nu'_x = 1.2$, mientras que el exponente de la ley de potencias es 2.18 ± 0.05 . Nótese que la región con T ligeramente mayor que L no escala bien.

$$\alpha = D \quad (5.56)$$

Tomando $D = 2.25 \pm 0.10$ [15], este último resultado está en un buen acuerdo con el valor de α medido.

5.5 Conclusiones

Vamos a resumir brevemente todos los resultados obtenidos en este capítulo. Hemos estudiado el transporte en un sistema granular crítico autoorganizado partiendo de un experimento realizado por el grupo de Oslo en el que se obtuvo la distribución de tiempos de tránsito así como la dependencia con el tamaño del sistema. Nuestras pretensiones eran intentar conectar la dinámica microscópica de cada grano con una magnitud macroscópica como es la distribución de tiempos de tránsito. Para ello hemos considerado la dinámica microscópica de un grano como un camino aleatorio con una densidad de tiempos de atrapamiento y otra densidad de longitudes de vuelos. Los resultados experimentales nos exigen que el comportamiento asintótico de estas distribuciones sea leyes de potencias de exponente comprendido en el intervalo $(2, 3]$.

El modelo conduce a una distribución de tiempos de tránsito con una región plana para tiempos pequeños y una ley de potencias para tiempos largos

$$P_{tr}(t, \mathcal{L}) \sim \frac{C}{(1+\gamma)t} \frac{1}{\mathcal{L}^{1+\gamma}}, \quad \text{para } t < \frac{\langle t \rangle}{\langle l \rangle} \mathcal{L}, \quad (5.57)$$

$$P_{tr}(t, \mathcal{L}) \sim \frac{B}{\langle l \rangle} \frac{\mathcal{L}}{t^{2+\beta}} \quad \text{para } t \gg \frac{\langle t \rangle}{\langle l \rangle} \mathcal{L}. \quad (5.58)$$

La primera conclusión interesante es que el exponente de la distribución de tiempos de atrapamiento es el mismo que el de la distribución de tiempos de tránsito. Además, imponiendo una condición de continuidad en el punto de cambio entre los dos comportamientos se demuestra que el exponente de la distribución de vuelos es, a su vez, igual que los dos últimos, es decir,

$$\alpha = 2 + \beta = 2 + \gamma. \quad (5.59)$$

Una contradicción aparente respecto al experimento es el escalado del tiempo medio de tránsito, que en nuestro modelo es de orden \mathcal{L} . El problema se resuelve si pensamos que lo que en realidad hacemos es fijar el tamaño de la pila L y estudiar el tránsito hasta una posición interna $\mathcal{L} < L$. El motivo de hacer esta distinción es que la distribución de tiempos de atrapamiento depende del tamaño del sistema ya que al aumentar el tamaño

también lo hace la zona de actividad de la pila y, por lo tanto, un grano puede quedar enterrado muy profundamente. Nótese que no ocurre lo mismo con la distribución de vuelos, ya que esta es una magnitud superficial, es decir, la longitud de vuelo depende de la forma del perfil (independiente del tamaño del sistema). Como curiosidad, recordamos que la existencia de una zona plana es una consecuencia de la existencia del primer momento de la distribución de tiempos de atrapamiento.

Para comprobar todos estos resultados hemos trabajado con un autómata celular que reproduce correctamente las propiedades de transporte de la pila real. Esto nos ha permitido medir directamente las distribuciones de tiempos de atrapamiento y de vuelos y hemos podido comprobar que los resultados obtenidos se ajustan muy bien con nuestras predicciones. Efectivamente, ambas distribuciones son leyes de potencias con el mismo exponente. Además, el tiempo medio de tránsito hasta una posición \mathcal{L} es, efectivamente, $\mathcal{O}(\mathcal{L})$.

Finalmente, en el caso del autómata, hemos encontrado una nueva relación entre exponentes que relaciona el exponente α de la distribución de tiempos de tránsito con la dimensión fractal de las avalanchas D ,

$$\alpha = D. \tag{5.60}$$

Esta relación de escala nos conecta las propiedades de transporte de los granos individuales con las propiedades colectivas en términos de avalanchas.

Bibliografía

- [1] P. Bak, C. Tang, y K. Wiesenfeld, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 381 (1987); *Phys. Rev. A* **38**, 364 (1988).
- [2] P. Bak, *How Nature Works* (Springer-Verlag, New York, 1996).
- [3] B. Gutenberg y C. F. Richter, *Bull. Seismol. Soc. Amer.* **34**, 185 (1944); *Seismicity of the Earth* (Princeton University Press, Princeton, 1949).
- [4] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (W. H. Freeman, New York, 1983).
- [5] D. M. Raup, *Science* **231**, 1528 (1986).
- [6] K. Sneppen, P. Bak, H. Flyvberg y M. H. Jensen, *Proc. Natl. Am. Soc. USA* **92**, 5209 (1995).
- [7] R. V. Solé, S. C. Manrubia, M. J. Benton, y P. Bak, *Nature* (1997).
- [8] V. Frette, K. Christensen, A. Malthe-Sørensen, J. Feder, T. Jøssang, y P. Meakin, *Nature (London)* **379**, 49 (1996); ver también M. Kardar, *Nature (London)* **379**, 22 (1996).
- [9] J. Feder, *Fractals* **3**, 431 (1995).
- [10] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, y R. P. Behringer, *Phys. Today* **49**, No. 4, 32, (1996); *Rev. Mod. Phys.* **68**, 1259, (1996).
- [11] K. Christensen, A. Corral, V. Frette, J. Feder, y T. Jøssang, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 107 (1996).
- [12] M. Boguñá y A. Corral, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4950-4953 (1997).

- [13] M. Boguñá y A. Corral, *Anales de Física, Monografías RSEF* Vol. 4, 101 (1998).
- [14] H. Scher, M. F. Schlesinger, y J. T. Bendler, *Phys. Today* **44**, No 1, 26 (1991).
- [15] M. Paczuski y S. Boettcher, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 111 (1996).
- [16] E. W. Montroll y G. H. Weiss, *J. Math. Phys.* **6**, 167 (1965).
- [17] M. F. Schlesinger, *J. Stat. Phys* **10**, 421 (1974); H. Scher y E. W. Montroll, *Phys. Rev. B* **12**, 2455 (1975).
- [18] E. Morales-Gamboa, J. Lomnitz-Adler, V. Romero-Rochín, R. Chicharro-Serra, y R. Peralta-Fabi, *Phys. Rev. E* **47**, R2229 (1993).
- [19] N. Bleistein y R. A. Handelsman, *Asymptotic Expansions of Integrals*, Dover, New York, (1986), p. 134.
- [20] J. Klafter, M. F. Shlesinger, y G. Zumofen, *Phys. Today* **49**, No. 2, 33, (1996).
- [21] L. N. Amaral y K. B. Lauritsen, *Physica A* **231**, 608 (1996).

Capítulo 6

Conclusiones y Perspectivas

6.1 Conclusiones

A lo largo de los capítulos de esta tesis nos hemos adentrado en el fascinante mundo de los fenómenos de transporte en medios desordenados. Existen gran cantidad de estos medios, cada uno con sus peculiaridades. Nosotros nos hemos concentrado en tres sistemas muy distintos. Sin embargo, sus propiedades de transporte pueden ser estudiadas con el mismo formalismo. Estos sistemas son el transporte de luz en medios desordenados, los sistemas que presentan activación resonante y los medios granulares con criticalidad autoorganizada.

El transporte de luz en medios desordenados lo hemos modelado mediante un camino aleatorio persistente a tiempo continuo. La persistencia es lo que distingue a esta clase de caminos aleatorios del resto. En suma no es más que introducir en el modelo el hecho de que cuando una partícula sufre una colisión sale desviada un ángulo relativo a la dirección incidente con una probabilidad medida por la función de fase. Para este modelo hemos formulado las ecuaciones integrales correspondientes. No es posible, en general, encontrar una equivalencia con la ecuación de transporte, aunque para tiempos grandes sí que lo es (siempre y cuando la distribución de tiempos entre colisiones tenga todos los momentos definidos). El paso siguiente ha sido encontrar el tiempo de isotropización del sistema definido como el tiempo necesario para que el transporte sea difusivo. A este fin hemos utilizado dos métodos distintos: el cálculo de la desviación cuadrática media y el cálculo de la distribución de velocidades. El primer método consiste en calcular el tiempo necesario para que la desviación cuadrática media crezca linealmente

con el tiempo. Este método tiene el inconveniente de que no podemos asegurar que los momentos de orden superior de la distribución se comporten también difusivamente. Para evitar este problema hemos calculado la distribución de velocidades. De este modo hemos comprobado que cuando en el proceso de colisión domina la dispersión hacia adelante ambos métodos coinciden pero cuando domina la dispersión hacia atrás el cálculo de la desviación cuadrática media no nos da el tiempo correcto. En este caso es necesario calcular la distribución de velocidades. Finalmente hemos desarrollado un método aproximado para encontrar la densidad de probabilidad de la posición de la partícula (aunque sólo en dimensión dos) distinto de las aproximaciones que existen en la literatura. Se basa en hacer la aproximación directamente sobre la función de fase que define el tipo de colisiones y, entonces, resolver el problema exactamente. De este modo es posible encontrar aproximaciones hasta el orden que deseemos.

Todo lo visto hasta este momento se refiere al espacio libre. Sin embargo, los problemas interesantes siempre involucran la presencia de fronteras que limitan el sistema. Nosotros nos hemos concentrado en una geometría laminar de grosor L . La razón es que muchos de los experimentos se realizan con muestras de materiales con esta geometría. Nosotros hemos introducido un modelo particular, el modelo de Goldstein, con una función de fase muy simple que permite resolver el problema exactamente. Con este modelo hemos calculado los tiempos característicos asociados al tamaño del sistema y hemos calculado, también, los coeficientes de reflexión y de transmisión.

La activación resonante es el segundo tema estudiado en esta tesis. Resumiendo sobremanera, se trata de estudiar el tiempo medio que un sistema movido por ruido blanco necesita para pasar de un pozo de potencial a otro de un potencial biestable cuando la barrera que separa ambos pozos fluctúa en el tiempo. Decimos que el sistema presenta resonancia cuando existe una frecuencia de oscilación de la barrera que minimiza este tiempo. En realidad, esto no es más que el problema de Kramers con un potencial fluctuante. Resolverlo de un modo general es una tarea ardua y complicada. Sin embargo, es posible extraer información de modelos muy simplificados extrapolable a sistemas más generales, a condición, naturalmente, de no obviar ninguno de los ingredientes principales. Siguiendo este camino hemos estudiado en primer lugar el modelo más sencillo que muestra resonancia, el modelo de Doering y Gadoua. Este fue el primer modelo donde se detectó este fenómeno. Paradójicamente la resonancia en este modelo no tiene nada que ver con la presencia de ruido blanco. Este hecho nos ha servido para dar una explicación cualitativa del fenómeno y del importante papel que juegan las condiciones de contorno. El siguiente modelo a estudiar es el modelo de Bier y Astumian. Este

modelo es más realista y está más de acuerdo con la filosofía del problema original. Aquí sí juega un papel crucial la presencia de ruido blanco, es decir, la resonancia se da gracias a un acoplamiento entre el ruido blanco, las condiciones de contorno y la dinámica de las fluctuaciones del potencial. Hemos podido dar también una explicación cualitativa de la resonancia y el papel que juegan cada uno de estos ingredientes. Además, hemos encontrado aproximaciones analíticas que capturan el comportamiento resonante y que permiten estudiar la dependencia de la frecuencia de resonancia con los parámetros del sistema. Finalmente hemos estudiado un modelo donde las fluctuaciones aleatorias de la barrera de potencial se sustituyen por oscilaciones deterministas. La conclusión es que, en esencia, la resonancia no depende de la naturaleza, determinista o estocástica, de las fluctuaciones de la barrera de potencial.

Una última conclusión, aunque no por ello la menos importante, es que no existe una frecuencia de resonancia intrínseca, es decir, asociada a la distribución de tiempos de primer paso. Cada momento de esta distribución tiene una frecuencia de resonancia distinta. Sin embargo, en ciertas condiciones el fenómeno resonante es muy poco sensible a la frecuencia concreta de las fluctuaciones de la barrera y se puede hablar, más que de una frecuencia de resonancia, de un rango de frecuencias de resonancia. En este sentido la resonancia sí es un fenómeno intrínseco.

El último sistema estudiado en esta tesis es una pila de arroz con un comportamiento crítico autoorganizado. Concretamente hemos estudiado la distribución de tiempos de tránsito de los granos a través de la pila. Hemos partido de un experimento reciente realizado en Oslo donde midieron, justamente, esta distribución. Nosotros hemos construido un modelo de camino aleatorio a tiempo continuo para estudiar el transporte de granos a través de la pila. El objetivo era estudiar la relación entre las propiedades microscópicas de transporte de un grano con el transporte global a través de la pila. Las distribuciones que rigen el transporte microscópico están fuertemente ligadas a las macroscópicas, hasta el punto de que los resultados experimentales de la distribución de tiempos de tránsito fijan el comportamiento asintótico de las distribuciones microscópicas. Curiosamente todas las distribuciones tienen un comportamiento asintótico tipo ley de potencias con el mismo exponente. Para comprobar los resultados de nuestro modelo teórico hemos realizado simulaciones, directamente del modelo y a través de un autómata celular, que corroboran nuestras conclusiones teóricas.

6.2 Perspectivas

Hasta aquí hemos hablado de las pocas aportaciones que hemos realizado en el campo de los fenómenos de transporte en medios desordenados. Ahora intentaremos resumir brevemente las perspectivas de posibles futuros trabajos derivados de esta tesis. Sin lugar a duda, el formalismo y las técnicas empleadas a lo largo de nuestro trabajo son perfectamente aplicables a otro tipo de sistemas desordenados. Esto abre de por sí grandes perspectivas, aunque tanta generalidad no aporta mucha información, de modo que resulta preferible concentrarse en los tres sistemas estudiados.

Respecto a los modelos de CAPTC utilizados para modelar el transporte de luz, una perspectiva a corto plazo es la extensión a dimensión tres del método de las fracciones continuas. Ya hemos comentado las ventajas de este método, y esta generalización sería altamente conveniente ya que los problemas reales casi siempre se dan en dimensión tres. Además, a partir de las soluciones en el espacio de Fourier-Laplace obtenidas por este método debería ser posible encontrar ecuaciones diferenciales para la concentración de partículas que mejorasen a la ecuación de difusión. Encontrar una ecuación de este tipo sería muy interesante ya que nos permitiría resolver problemas con contornos. El modelo de Goldstein estudiado en el capítulo 3 nos ha permitido resolver, justamente, un problema de este tipo. Sin embargo, la función de fase de este modelo resulta poco física. Una extensión de este modelo a redes no cúbicas permitiría minimizar este problema aunque el cálculo, ciertamente, se complica notablemente. Sin embargo, con la capacidad de cálculo de los ordenadores actuales esto no debería representar ningún problema.

En cuanto al problema de la activación resonante, sería muy interesante estudiar el caso de fluctuaciones Gaussianas del potencial. Nosotros, por simplicidad, nos hemos limitado al caso de fluctuaciones dicotómicas, pero en caso de encontrar un sistema real que presente activación resonante, probablemente tales fluctuaciones serán Gaussianas.

Los medios granulares representan un campo muy vasto de investigación. Ello se debe, principalmente, a que se trata de un campo en el que aún hay pocos trabajos teóricos que traten sobre el transporte en estos medios. En cuanto a nuestro modelo particular de la pila de arroz, debería ser mejorado incorporando la inhomogeneidad de la pila. Nosotros hemos construido un modelo homogéneo pero el hecho de añadir los granos únicamente desde una posición hace que la pila real no sea homogénea. Aunque creemos que los resultados esenciales de nuestro modelo son correctos, un modelo que tenga en cuenta esta inhomogeneidad permitiría tener en cuenta de un modo más efectivo el efecto del tamaño de la pila.

Apéndice A

En este apéndice daremos una colección bastante amplia de teoremas Abelianos y Tauberianos para la transformada de Laplace. El nombre se debe a que estos teoremas son generalizaciones de los teoremas originados de Abel y Tauber [14]. Estos teoremas nos permiten encontrar el comportamiento asintótico de una función a partir del comportamiento asintótico de su transformada de Laplace o a la inversa. Los teoremas Abelianos funcionan en sentido directo, es decir, si $f(t)$ es una función de la cual conocemos el comportamiento a tiempos largos ó cortos y $\hat{f}(s)$ es su transformada de Laplace, entonces los teoremas Abelianos nos proporcionan el comportamiento de $\hat{f}(s)$ para $s \rightarrow 0$ ó $s \rightarrow \infty$ respectivamente. Los teoremas Tauberianos funcionan en sentido inverso. Este apéndice es un extracto del *report* de la Ref-[1].

A.1 Teoremas Abelianos

Como ya hemos dicho, los teoremas Abelianos nos permiten conocer el comportamiento de la transformada de Laplace de una función a partir de la función original. Para poder incluir en los teoremas funciones que contengan funciones delta trabajaremos con la integral de Stieljes [14]. Representamos la transformada de Laplace de una función $f(t)$ como

$$\hat{f}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} d\alpha(t). \quad (\text{A.1})$$

Cuando $\alpha(t)$ sea una función absolutamente continua, es decir, [7],

$$\alpha(t) = \int_0^t f(x) dx, \quad (\text{A.2})$$

recuperaremos la expresión normal de la transformada de Laplace de la función $f(t)$,

$$\hat{f}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt. \quad (\text{A.3})$$

El primero de estos teoremas dice

Teorema 1

Si para algún $\gamma \geq 0$

$$\alpha(t) \sim \frac{At^\gamma}{\Gamma(\gamma+1)} \quad \begin{array}{l} (t \rightarrow \infty) \\ (t \rightarrow 0^+), \end{array} \quad (\text{A.4})$$

entonces

$$\tilde{f}(s) \sim \frac{A}{s^\gamma} \quad \begin{array}{l} (s \rightarrow 0^+) \\ (s \rightarrow \infty). \end{array} \quad (\text{A.5})$$

(Véase [14], p. 182). En el caso de que $\alpha(t)$ sea absolutamente continua y $f(t)$ finalmente monótona, podemos deducir el siguiente teorema:

Teorema 2

Supongamos que una función, real o compleja, $f(t)$ tiene el siguiente comportamiento asintótico

$$f(t) \sim At^\lambda \quad (t \rightarrow \infty), \quad (\text{A.6})$$

con A compleja y $\mathcal{R}[\lambda] > -1$. Entonces $\tilde{f}(s)$ existe para $\mathcal{R}[s] > 0$; tiene, para $A \neq 0$, un punto singular en $s = 0$ y asintóticamente se comporta como

$$\tilde{f}(s) \sim A \frac{\Gamma(\lambda+1)}{s^{\lambda+1}}, \quad (\text{A.7})$$

cuando $s \rightarrow 0$ en una región angular definida por $|\arg(s)| \leq \psi < \pi/2$.

(Véase [5], p. 235, t. 34.1). Relacionado con este teorema tenemos

Teorema 3

Supongamos que $f(t)$ tiene límite A cuando $t \rightarrow \infty$. Entonces, su transformada de Laplace $\tilde{f}(s)$ existe para $\mathcal{R}[s] > 0$, tiene un punto singular en $s = 0$ y su desarrollo asintótico es

$$\tilde{f}(s) \sim \frac{A}{s} \quad (\text{A.8})$$

para la región angular $|\arg(s)| \leq \psi < \pi/2$.

(Véase [5], p. 232, t. 34.2).

Teorema 4 (Teorema del Valor Final)

Cuando el límite de $f(t)$ para $t \rightarrow \infty$ existe, se puede determinar su valor utilizando $\tilde{f}(s)$ mediante

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = \lim_{s \rightarrow 0} s \tilde{f}(s). \quad (\text{A.9})$$

Nótese que la existencia del límite de $s \tilde{f}(s)$ no implica la existencia del límite de $f(t)$ [5].

Para enunciar el siguiente teorema es preciso definir la transformada de Mellin de la función $f(t)$ [2]. Se define como

$$M[f, z] = \int_0^{\infty} t^{z-1} f(t) dt. \quad (\text{A.10})$$

Cuando $z = n + 1$ con n entero, la transformada de Mellin coincide con el momento de orden n de la función $f(t)$, siempre que este exista.

Teorema 5

Sea $f(t)$ una función con un desarrollo asintótico de la forma

$$f(t) \sim \sum_{m=0}^{\infty} c_m t^{-r_m} \quad (t \rightarrow \infty), r_m \uparrow \infty, \quad (\text{A.11})$$

donde la flecha vertical indica que es una serie creciente. Si ningún r_m es un entero positivo, entonces

$$\tilde{f}(s) \sim \sum_{m=0}^{\infty} c_m s^{r_m-1} \Gamma(1-r_m) + \sum_{m=0}^{\infty} s^m \frac{(-1)^m}{m!} M[f, m+1] \quad (s \rightarrow 0^+), \quad (\text{A.12})$$

donde $M[f, m+1]$ es la transformada de Mellin de $f(t)$ para $z = m+1$.

Teorema 6

Sea $f(t)$ una función con el siguiente desarrollo asintótico

$$f(t) \sim At^{-1} \quad (t \rightarrow \infty), \quad (\text{A.13})$$

entonces,

$$\tilde{f}(s) \sim -A \ln s \quad (s \rightarrow 0^+). \quad (\text{A.14})$$

A.2 Teoremas Tauberianos

Los teoremas Tauberianos son los recíprocos de los Abelianos y nos permiten conocer el comportamiento de la función en el espacio real si conocemos el equivalente en el espacio de Laplace. Sin embargo, las condiciones que debe satisfacer la función $f(t)$ son más restrictivas que para los teoremas Abelianos. Esto hace que muchas veces se apliquen estos teoremas de manera incorrecta.

Para enunciar los siguientes teoremas necesitamos definir lo que entendemos por $f = o(\phi)$ y $f = \mathcal{O}(\phi)$.

- Si $f(x)/\phi(x) \rightarrow 0$, entonces diremos que

$$f(x) = o[\phi(x)] \quad (x \rightarrow \infty). \quad (\text{A.15})$$

En este caso decimos que f es de orden inferior que ϕ .

- Si $|f(x)/\phi(x)|$ está acotado, entonces

$$f(x) = \mathcal{O}[\phi(x)] \quad (x \rightarrow \infty). \quad (\text{A.16})$$

En este caso decimos que f no es de orden superior a ϕ .

Teorema 7

Si $f(t)$ es una función localmente integrable en $(0, R)$ para todo R y si la integral

$$\tilde{f}(s) = \int_0^{\infty} f(t)e^{-st} dt \quad (\text{A.17})$$

converge para $s > 0$, entonces las condiciones

$$\lim_{s \rightarrow 0^+} \tilde{f}(s) = A \quad (\text{A.18})$$

$$f(t) = o(t^{-1}) \quad (t \rightarrow \infty) \quad (\text{A.19})$$

implican

$$\lim_{s \rightarrow 0^+} \tilde{f}(s) = \int_0^{\infty} f(t) dt = A. \quad (\text{A.20})$$

(Véase [14], p. 186).

Teorema 8*Sea*

$$\tilde{f}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} d\alpha(t) \quad (\text{A.21})$$

convergente para $s > 0$, y sea

$$\lim_{s \rightarrow 0^+} \tilde{f}(s) = A. \quad (\text{A.22})$$

Entonces

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \alpha(t) = A \quad (\text{A.23})$$

si y sólo si

$$\int_0^t u d\alpha(u) = o(t) \quad (t \rightarrow \infty). \quad (\text{A.24})$$

(Véase [14], p. 187).

Teorema 9*Si $\alpha(t)$ es una función no decreciente y tal que la integral*

$$\hat{f}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} d\alpha(t) \quad (\text{A.25})$$

converge para $s > 0$, y si para algún γ no negativo

$$\hat{f}(s) \sim \frac{A}{s^\gamma} \quad \begin{array}{l} (s \rightarrow 0^+) \\ (s \rightarrow \infty), \end{array} \quad (\text{A.26})$$

entonces

$$\alpha(t) \sim \frac{At^\gamma}{\Gamma(\gamma + 1)} \quad \begin{array}{l} (t \rightarrow \infty) \\ (t \rightarrow 0^+). \end{array} \quad (\text{A.27})$$

(Véase [14], p. 192). Para enunciar el siguiente teorema es preciso que definamos lo que entendemos por una función de variación lenta. Diremos que la función L , definida positiva en $(0, \infty)$, es una función de variación lenta en ∞ si para cada c fija,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{L(ct)}{L(t)} = 1. \quad (\text{A.28})$$

Un ejemplo de función de variación lenta es $\log t$. El siguiente teorema dice:

Teorema 10

Sea $\alpha(t)$ una medida tal que la integral

$$\hat{f}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} d\alpha(t) \quad (\text{A.29})$$

converge para $s > 0$. Si L es una función de variación lenta en el infinito y $\gamma \geq 0$, entonces cada una de las relaciones

$$\hat{f}(s) \sim s^{-\gamma} L(1/s) \quad (s \rightarrow 0^+), \quad (\text{A.30})$$

y

$$\alpha(t) \sim \frac{t^\gamma}{\Gamma(\gamma+1)} L(t) \quad (t \rightarrow \infty), \quad (\text{A.31})$$

implica la otra. (Véase [7], p. 498). Cuando $\alpha(t)$ es absolutamente continua el siguiente teorema nos proporciona el comportamiento de $f(t)$.

Teorema 11

Sea $\gamma > 0$. Si $\alpha(t)$ tiene derivada finalmente monótona $f(t)$, entonces

$$\hat{f}(s) \sim s^{-\gamma} L(1/s) \quad (s \rightarrow 0^+), \quad (\text{A.32})$$

si y sólo si

$$f(t) \sim \frac{t^{\gamma-1}}{\Gamma(\gamma)} L(t) \quad (t \rightarrow \infty). \quad (\text{A.33})$$

(Véase [7], p. 499).

Teorema 12

Sea

$$\hat{f}(s) = \frac{A}{s^2} + \frac{B}{s} + \kappa(s) \quad (\text{A.34})$$

la transformada de Laplace de la función $f(t)$, donde A y B son constantes y κ una función racional de variable compleja s acotada en el infinito y con todos sus polos con parte real negativa. Entonces

$$f(t) = At + B + o(1) \quad (t \rightarrow \infty). \quad (\text{A.35})$$

(Véase [3], p. 14). Finalmente daremos un teorema muy general que incluye a muchos de los teoremas anteriores. Previamente debemos definir lo que es una función **MAR(0)**.

Diremos que una función $f(t)$ es **MAR(0)** si es localmente integrable en $[0, \infty)$ y admite un desarrollo tipo Mellin,

$$f(t) \sim \sum_{m,n=0}^{\infty} a_{mn} t^{a(m)} (\ln t)^n \quad (t \rightarrow \infty), \tag{A.36}$$

donde $a_{mn} \neq 0$ es finito para cada m y $\mathcal{R}[a(m)] \downarrow -\infty$ cuando $m \rightarrow \infty$. La misma definición con $\mathcal{R}[a(m)] \uparrow \infty$ sirve para t en el entorno de 0^+ .

Teorema 13

Si $f(t)$ es un elemento de **MAR(0)**, entonces el desarrollo de Mellin de $f(t)$ cuando $t \rightarrow \infty$ está determinado únicamente y linealmente por el desarrollo de Mellin de su transformada de Laplace, $\hat{f}(s)$, cuando $s \rightarrow 0$. Si $C(\theta)$ es el contorno que va desde $\infty e^{-i\theta}$, rodea en el sentido contrario a las agujas del reloj el origen y vuelve a $\infty e^{-i\theta}$, entonces la serie de Mellin para $f(t)$ se puede recuperar orden a orden mediante las siguientes substituciones, con $\pi/2 < \theta \leq \pi$:

$$s^b \rightarrow (2\pi i)^{-1} \int_{C(\theta)} e^{ts} s^b ds = \frac{t^{-(1+b)}}{\Gamma(-b)} \tag{A.37}$$

para todo b complejo (incluyendo $b = 0, 1, 2, \dots$ para los que $1/\Gamma(-b) = 0$);

$$s^b (\ln s)^n \rightarrow (2\pi i)^{-1} \int_{C(\theta)} e^{ts} s^b (\ln s)^n ds = \frac{\partial^n}{\partial b^n} \frac{t^{-(1+b)}}{\Gamma(-b)} \tag{A.38}$$

para todos los enteros $n = 0, 1, 2, \dots$ y todos los complejos $b \neq 0, 1, 2, \dots$;

$$\begin{aligned} s^b (\ln s)^n &\rightarrow (2\pi i)^{-1} \int_{C(\theta)} e^{ts} s^b (\ln s)^n ds \\ &= (-1)^{b+1} \sum_{j=0}^{(n-1)/2} (-\pi^2)^j \binom{n}{2j+1} \frac{\partial^{n-2j-1}}{\partial b^{n-2j-1}} \Gamma(b+1) t^{-(1+b)} \end{aligned} \tag{A.39}$$

para todos los enteros $n, b = 0, 1, 2, \dots$.

(Véase [8], p. 435).

Bibliografía

- [1] *“Recull de Teoremes Abelians i Tauberians per a la Transformada de Laplace”*, Josep M. Porrà, 1995.
- [2] N. Bleistein y R. A. Handelsman, *Asymptotic expansions of Integrals*, (Dover, New York, 1986).
- [3] D. R. Cox, *Renewal Theory*, (John Wiley y Sons Inc, New York, 1962).
- [4] N. G. de Bruijn, *Asymptotic methods in Analysis* , (Dover, New York, 1981).
- [5] G. Doetsch, *Introduction to the Theory and Applications of the Laplace Transformation* , (Springer Verlag, New York, 1974).
- [6] A. Erdélyi, *Asymptotic Expansions*, (Dover, New York, 1956).
- [7] W. Feller, *Introducción a la Teoría de Probabilidades y sus Aplicaciones*, (Editorial Limusa, México, 1985), Vol. 2.
- [8] R. A. Handelsman y J. S. Lew, *SIAM J. Math. Anal.* **5**, 425-451 (1974).
- [9] W. R. LePage, *Complex Variables and the Laplace Transform For Engineers* , (Dover, New York, 1961).
- [10] R. Muralidhar *et al.*, *Phys. Rev. A* **43**, 6503-6517 (1991).
- [11] F. W. J. Olver, *Asymptotics and Special Functions*, (Academic Press, New York, 1974).
- [12] M. F. Shlesinger, *J. Stat. Phys.* **10**, 421-433 (1974).
- [13] G. H. Weiss y R. J. Rubin, *Adv. Chem. Phys.* **52**, 363-505 (1983).

- [14] D. V. Widder, *The Laplace Transform*, (Princeton University Press, Princeton, 1946).
- [15] R. Wong, *Asymptotic Approximations of Integrals*, (Academic Press, New York, 1989).

Lista de Publicaciones

- M. Boguñá, J. M. Porrà, J. Masoliver y G. H. Weiss,
"Isotropization Time for Non-Markovian Continuous Time Random Walks",
Physica A **230**, 149-155 (1996).
- M. Boguñá y A. Corral,
"Long-Tailed Trapping Times versus Levy Flights in a Self-Organized Critical Granular System",
Phys. Rev. Lett. **78**, 4950-4953 (1997).
- M. Boguñá, J. M. Porrà, J. Masoliver y K. Lindenberg,
"Resonant Activation Induced by Dichotomous Noise",
Proceedings of the VIII Spanish Meeting on Statistical Physics FISES'97. Anales de Física, Monografías RSEF Vol. 4, 167 (1998).
- M. Boguñá y A. Corral,
"Continuous Time Random Walk Model for Anomalous Transport in Granular Piles",
Proceedings of the VIII Spanish Meeting on Statistical Physics FISES'97. Anales de Física, Monografías RSEF Vol. 4, 101 (1998)
- M. Boguñá, J. M. Porrà, J. Masoliver y K. Lindenberg,
"Properties of Resonant Activation Phenomena",
Phys. Rev. E, **57**, 3990 (1998).
- M. Boguñá, J. M. Porrà y J. Masoliver,
"Generalization of the persistent random walk to dimensions greater than 1",
Phys. Rev. E, **58**, (1998) (en prensa).