

**Elementos de estadística de
no equilibrio y sus aplicaciones
al transporte en medios
desordenados**

Elementos de estadística de no equilibrio y sus aplicaciones al transporte en medios desordenados

Manuel O. Cáceres

Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro
Comisión Nacional de Energía Atómica, Universidad Nacional de Cuyo
8400, San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina.



EDITORIAL REVERTÉ, S. A.

Barcelona - Bogotá - Buenos Aires - Caracas - México - Rio de Janeiro

Propiedad de:

EDITORIAL REVERTÉ, S. A.

Loreto, 13-15, Local B

08029 Barcelona

Tel: (34) 93 419 33 36

Fax: (34) 93 419 51 89

E-mail: reverte@reverte.com

Internet: <http://www.reverte.com>

Reservados todos los derechos. La reproducción total o parcial de esta obra, por cualquier medio o procedimiento, comprendidos la reprografía y el tratamiento informático, y la distribución de ejemplares de ella mediante alquiler o préstamo públicos, queda rigurosamente prohibida sin la autorización escrita de los titulares del copyright, bajo las sanciones establecidas por las leyes.

Edición en español

© **EDITORIAL REVERTÉ, S. A., 2002**

Copyright © Manuel Osvaldo Cáceres

Impreso en España - Printed in Spain

ISBN: 84-291-5031-5

Depósito Legal:

Impreso por Domingraf Impressors

Pol. Ind. Can Magarola

808100 Mollet del Vallés (Barcelona)

A quienes me alentaron a realizar este trabajo.

“Como si se tratara de alguna finalidad práctica, los geómetras hablan siempre de cuadrar, prolongar, agregar, cuando en verdad la ciencia se cultiva con el único fin de conocer”.

PLATON (República, Libro VII, 527)

“Los científicos estudian la naturaleza no porque sea útil, sino porque encuentran placer en ello, y encuentran placer porque es hermosa. Si no lo fuera, no merecería la pena conocerla, y si la naturaleza no mereciera la pena, la vida tampoco. No me refiero, claro está, a la belleza que estimula los sentidos, la de las cualidades y las apariencias; no es que menosprecie tal belleza, nada más lejos de mi intención, mas ésta nada tiene que ver con la ciencia; me refiero a esa hermosura más profunda que emana del orden armonioso de las partes, susceptible de ser captada por una inteligencia pura”.

HENRI POINCARÉ

“De la geometría fractal de la naturaleza. La existencia de estas formas representa un desafío: el estudio de las formas que Euclides descarta por *informes*, la investigación de la morfología de lo *amorfo*. Los matemáticos, sin embargo, han desdeñado este desafío y, cada vez más, han optado por huir de lo natural, ideando teorías que nada tienen que ver con aquello que podemos ver o sentir”.

BENOÎT MANDELBROT

“Claramente algo más que pura matemática es necesario para entender porqué la naturaleza nos confronta sólo con procesos en los cuales la entropía aumenta, aunque los procesos inversos son igualmente consistentes con las ecuaciones de movimiento microscópicas. Justificar la mecánica estadística de los procesos irreversibles es el problema fundamental”.

N.G. van KAMPEN

Prólogo

Este texto es el resultado de varios cursos sobre estadística de no equilibrio, procesos estocásticos, ecuaciones diferenciales estocásticas, difusión anómala y desorden que he impartido durante los últimos doce años en el Instituto Balseiro del Centro Atómico Bariloche (Argentina). La clase de público a la que va dirigido incluye estudiantes de Física, Química, Matemáticas, Ciencias en general e Ingeniería de nivel universitario. Se considera que los lectores cuentan con la base de matemáticas y elementos de física de cuarto año de una carrera superior. No obstante, aquellos conceptos físicos y matemáticos poco conocidos se desarrollan en apartados y ejercicios especiales a lo largo de todo el texto, así como en apéndices. En especial, algunos de los conceptos de la mecánica cuántica, menos familiares para los estudiantes recién iniciados, se presentan brevemente en los apéndices F, G y en ejercicios guiados en función de la necesidad de los mismos.

Innovaciones

La motivación físico-matemática es el aspecto principal del desarrollo de este texto. Se presentan temas académicos de la teoría de la probabilidad y procesos estocásticos, así como nuevos aspectos pedagógicos en la presentación de la teoría estadística de no equilibrio, las ecuaciones diferenciales estocásticas y el desorden. Se tratan en detalle las dos posibles representaciones para los procesos estocásticos, y se presenta una teoría funcional para resolver ecuaciones diferenciales lineales con ruidos arbitrarios. En particular, en el capítulo 4 se comenta el problema de la irreversibilidad y se discute, en ese contexto, la dinámica de Fokker-Planck; se presenta la teoría de relajación de sistemas markovianos no estacionarios periódicos en el tiempo. En el capítulo 6 se introduce una presentación de la teoría del transporte en redes finitas e infinitas y, en general, en el capítulo 7 se aborda el tema de la difusión anómala. En el capítulo 8 se dan las bases para establecer la relación que existe entre los aspectos microscópicos de la teoría de respuesta lineal y el cálculo del coeficiente de difusión en sistemas amorfos.

Aplicaciones

Distintas aplicaciones y ejercicios se encuentran casi homogéneamente distribuidos a lo largo de todo el texto. En el capítulo 2, y como aplicación de la teoría de las variables aleatorias, se presenta la teoría de fluctuaciones en torno al equilibrio termodinámico, debida originalmente a Einstein y posteriormente desarrollada en detalle y con todo rigor por Callen y Landau. En el capítulo 3 se dan varias aplicaciones físicas de la teoría de los procesos estocásticos al estudio de la relajación en el área del estado sólido, y también el estudio de las ecuaciones diferenciales estocásticas y su relación con la ecuación de Fokker-Planck mediante el cálculo diferencial estocástico de Stratonovich. En el capítulo 4 se presentan aspectos generales sobre el concepto de irreversibilidad, debido a Onsager, y la teoría de las fluctuaciones temporales (primer teorema de fluctuación-disipación). Aquí también se presentan varias aplicaciones del teorema de fluctuación-disipación a sistemas simples, mecánicos, eléctricos y magnéticos. En el capítulo 5 se dan aspectos generales de la teoría de la respuesta lineal debida a Green y Callen, y del (segundo) teorema de fluctuación-disipación utilizando un sistema magnético

para introducir una presentación intuitiva del mismo. También se deducen otros teoremas fundamentales de la teoría de la respuesta lineal y se presentan algunas aplicaciones en el estado sólido. En el capítulo 6 se presenta la teoría del transporte difusivo en medios ordenados. En particular se pone énfasis en el análisis de caminatas aleatorias markovianas (*Random Walk*) de tiempo discreto y continuo y, en general, ecuaciones maestras con aplicaciones al estudio de sistemas finitos con condiciones de contorno especiales (absorbentes, reflectantes y periódicas); por último se presenta brevemente el problema de la estadística de los tiempos aleatorios de primer pasaje por una determinada frontera. En el capítulo 7 se presentan dos técnicas alternativas y complementarias para atacar el problema de la difusión en medios desordenados (amorfo). La primera de ellas está basada en la aproximación de medio efectivo (AME); mientras que la segunda, se basa en la teoría de caminatas aleatorias no markovianas (CTRW). Se hace hincapié en el cálculo del coeficiente de difusión en medios desordenados, el análisis de la variancia del desplazamiento como función del tiempo y sus leyes de escala, universales o no, que dependen del tipo de desorden; por último se presenta brevemente el problema de la superdifusión y el análisis de la difusión con estados internos. El capítulo 8 está dedicado a ciertos aspectos cuánticos del problema del transporte y la irreversibilidad. En particular, se discute en detalle la formulación de Kubo para el análisis de la respuesta lineal desde un punto de vista microscópico (tercer teorema de fluctuación-disipación) y el cálculo de la conductibilidad eléctrica (fórmula de Green-Kubo). También se discute, ampliamente, la fórmula de Scher y Lax para el cálculo, en el límite clásico, de la conductibilidad eléctrica en materiales desordenados (no metálicos); se presentan algunos ejemplos y aplicaciones en un gas de Lorentz; finalmente se discute la relación entre la difusión anómala y ciertas características de la geometría fractal.

Diseño del curso

Este libro de texto puede servir como curso de introducción al estudio de los procesos estocásticos y sus aplicaciones en física, ingeniería, química y biología. En este caso los capítulos 1 y 3 constituyen el núcleo de un curso sobre variables aleatorias, procesos estocásticos y su relación con las ecuaciones diferenciales estocásticas. El capítulo 2 sirve como presentación de la teoría de Einstein acerca de las fluctuaciones en torno al equilibrio termodinámico, mientras que los capítulos 4 y 5 finalizan el curso de estadística de no equilibrio con el análisis de la irreversibilidad en el contexto de la ecuación de Fokker-Planck y la teoría de respuesta lineal.

También se puede diseñar un curso de introducción al estudio de la difusión anómala en medios desordenados, o amorfo, y su relación con el cálculo de los coeficientes de transporte en el contexto de la teoría de respuesta lineal, cuyo estudio puede ser independiente de los capítulos 2, 3 y 4. En este curso los capítulos 6 y 7 dan una presentación detallada del problema de la difusión anómala. El capítulo 8 está dedicado a la presentación microscópica de la fórmula de Kubo para el cálculo de la conductibilidad eléctrica; en particular, en el apéndice G.1 se presenta una demostración alternativa de la fórmula de Kubo (o tercer teorema), la cual, desde el punto de vista pedagógico, es más sencilla que

la originalmente introducida por Kubo, puesto que en esta nueva presentación no se hace uso del álgebra de superoperadores (operador de Liouville-Neumann), sino, más bien, de conceptos elementales de la teoría de perturbación dependiente del tiempo de la mecánica cuántica.

En general, a lo largo del texto existen distintas opciones a la hora de realizar los ejercicios; en particular, los ejercicios rotulados como “optativos” deberían omitirse en una primera lectura. Por otro lado, las secciones y capítulos señalados con un asterisco son temas más avanzados que deberían postergarse a una segunda lectura del texto. Los apéndices A a H están escritos con la finalidad de presentar por completitud ciertos aspectos físico-matemáticos de algunos temas tratados en el texto. Por último, los apartados rotulados como “excursus” son comentarios especializados para aquellos lectores que quieran conocer más sobre el tema.

La historia de la ciencia muestra que el interés por el ruido (fluctuaciones) fue variando en función de su entendimiento. Durante el siglo XIX el ruido fue considerado una “molestia” tanto en la física teórica como en la experimental. A comienzos del siglo XX el estudio de las fluctuaciones en torno al equilibrio y sus simetrías daban origen a la teoría de la respuesta lineal, la cual abarca con majestuosa elegancia los pioneros trabajos de Onsager (fluctuación-disipación); mientras que en las últimas décadas del mismo siglo el ruido pasó a ocupar un lugar imprescindible para el entendimiento de las estructuras autoorganizadas fuera del equilibrio (sinérgica). Simultáneamente, en las últimas tres décadas, el desorden (ruido espacial) ocupó también un rol fundamental en la comprensión del problema del transporte anómalo.

En los últimos 25 años la estadística de no equilibrio ha logrado enormes avances en el complejo entendimiento de las fluctuaciones y los fenómenos mesoscópicos inducidos por ruido. Hoy en día los conceptos de fluctuaciones fuera del equilibrio, dinámica estocástica, transiciones de fase inducidas por ruido, resonancia estocástica, régimen caótico, transporte anómalo, desorden, geometría fractal, etc., se utilizan cada vez más en materias básicas de las ciencias exactas. Por este motivo es necesario introducir al estudiante en los elementos básicos de estos temas a fin de prepararlo para las grandes transformaciones que seguramente se producirán cuando se cuente con una teoría estadística unificada de no equilibrio. Este texto pretende dar las líneas generales para preparar al lector en el entendimiento de la estadística de no equilibrio y sus aplicaciones al transporte anómalo (localización, por ejemplo).

Agradecimientos

Me satisface expresar mi gratitud a alumnos, colegas, amigos y familia, que de una u otra forma han colaborado en la elaboración del presente libro. Muchos de sus nombres aparecen en las referencias bibliográficas que he usado a lo largo de este texto. A la Fundación Balseiro por el apoyo económico para concretar este esfuerzo. Mi agradecimiento también a la Comisión Nacional de Energía Atómica, y al Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, que durante más de veinte años me brindaron el hábitat indispensable para la formación e investigación científica.

we tripantu
(Inicio de un nuevo tiempo...)
ragiñkülewechi küyen mew,
fey wiñotuy tripan antü pige ke fuy
(Con las fases de la luna se cuenta un recorrido del sol...)

Contenidos

1	Elementos de probabilidad	1
1.1	Introducción a las variables aleatorias	1
1.2	Esquema axiomático*	1
1.2.1	Probabilidad condicionada	3
1.2.2	Teorema de Bayes	4
1.2.3	Independencia estadística	4
1.2.4	Variable aleatoria	5
1.3	Esquema frecuencial	6
1.3.1	Densidad de probabilidad	7
1.3.2	Propiedades de la densidad de probabilidad $P_X(\chi)$	8
1.4	Función característica	9
1.4.1	La más sencilla de las caminatas al azar (<i>Random Walk</i>)*	11
1.4.2	Ejemplos de $G(k)$ no desarrollables en serie de Taylor*	13
1.4.3	Función característica en una red toroidal*	15
1.4.4	Función de función característica	16
1.5	Desarrollo en cumulantes	18
1.6	Teorema central del límite	19
1.7	Transformación de variables aleatorias	21
1.8	Correlaciones entre variables aleatorias	22
1.8.1	Independencia estadística	23
1.9	Desarrollo en fluctuaciones	24
1.10	Función característica multidimensional	25
1.10.1	Desarrollos en diagramas (varias variables)	25
1.11	Cumulantes de Terwiel*	27
1.12	Distribución gaussiana (varias variables)	29
1.12.1	Distribución gaussiana con momentos impares nulos	30
1.12.2	Teorema de Novikov*	31
1.13	Transformación para densidades en n dimensiones	32
1.13.1	Densidad de probabilidad marginal	33
1.14	Densidad de probabilidad condicionada	35
2	Fluctuaciones en el equilibrio termodinámico	41
2.1	Correlaciones espaciales (distribución de Einstein)	41
2.1.1	Aproximación gaussiana	42
2.2	Trabajo mínimo*	47

2.2.1	Fluctuaciones en términos de $\Delta P, \Delta V, \Delta T, \Delta S$	50
2.3	Fluctuaciones en variables de carácter mecánico	51
2.3.1	Fluctuaciones de una cuerda tensa	52
2.4	Correlaciones temporales	55
3	Elementos de procesos estocásticos	59
3.1	Introducción	59
3.1.1	Variable aleatoria dependiente del tiempo	59
3.1.2	Funcional característica (representación en ensemble)	60
3.1.3	Jerarquía de Kolmogorov (representación multidimensional)	63
3.1.4	Generalidades sobre la representación multidimensional	65
3.1.5	Generalidades sobre la representación en ensemble	66
3.2	Probabilidad condicionada	66
3.3	Procesos de Markov	67
3.3.1	Ecuación de Chapman-Kolmogorov	68
3.4	Procesos estacionarios	70
3.5	Procesos no estacionarios 2π -periódicos*	72
3.6	Movimiento browniano (proceso de Wiener)	73
3.6.1	Incrementos del proceso de Wiener*	75
3.7	Incrementos de un proceso estocástico arbitrario*	75
3.8	Criterios de convergencia*	76
3.8.1	Teorema de Markov (ergodicidad)	78
3.8.2	Continuidad de las realizaciones	79
3.9	Ruido gaussiano blanco	80
3.10	Procesos gaussianos	82
3.10.1	Caso no singular	82
3.10.2	Caso singular (correlación blanca)*	82
3.11	Espectro de fluctuaciones de procesos escalantes*	83
3.12	Procesos markovianos y gaussianos	86
3.12.1	Caso no estacionario 2π -periódico	90
3.12.2	Proceso de Ornstein-Uhlenbeck	90
3.13	Relación de Einstein	92
3.14	Proceso de Ornstein-Uhlenbeck generalizado*	93
3.15	Difusión de la fase*	95
3.15.1	Relajación dieléctrica	96
3.16	Realizaciones estocásticas (desarrollo en autofunciones)	98
3.17	Ecuaciones diferenciales estocásticas	101
3.17.1	Ecuación de Langevin	101
3.17.2	Integrales de Wiener en el cálculo de Stratonovich	102
3.17.3	Ecuaciones diferenciales estocásticas de Stratonovich	103
3.18	La ecuación de Fokker-Planck	108
3.18.1	Perfiles estocásticos*	113
3.19	La ecuación de Fokker-Planck multidimensional*	116
3.19.1	Movimiento browniano esférico	117

4	Irreversibilidad, ecuación de Fokker-Planck	121
4.1	Simetrías de Onsager	122
4.2	Producción de entropía en la aproximación lineal	124
4.2.1	Efecto mecánico-calórico*	125
4.3	Relaciones de Onsager en un circuito eléctrico	127
4.4	Proceso de Ornstein-Uhlenbeck multidimensional	130
4.4.1	Primer teorema de fluctuación-disipación	131
4.5	Distribución canónica en estadística clásica	134
4.6	Solución estacionaria de Fokker-Planck	135
4.6.1	Problema inverso	137
4.6.2	Balance detallado	137
4.7	Corriente de probabilidad	140
4.7.1	Caso 1-dimensional	140
4.7.2	Caso multidimensional	142
4.7.3	Ecuación de Kramers	145
4.7.4	Teorema de Onsager generalizado*	147
4.7.5	Comentarios sobre el cálculo del potencial de no equilibrio*	147
4.8	Procesos de Fokker-Planck no estacionarios*	148
4.8.1	Teoría de autovalores	148
4.8.2	El operador de Kolmogorov	149
4.8.3	Evolución en un período de tiempo	151
4.8.4	Balance detallado periódico	154
4.8.5	Mezcla fuerte	155
5	Irreversibilidad, respuesta lineal	161
5.1	Teorema de Wiener-Khinchin	161
5.2	Respuesta lineal, susceptibilidad	164
5.2.1	Relaciones de Kramers-Kronig*	165
5.2.2	Relajación frente a una discontinuidad en $t = 0$	168
5.2.3	Disipación de energía	170
5.3	Disipación y correlaciones	171
5.3.1	Partícula browniana en un potencial armónico	171
5.3.2	Partícula browniana en presencia de campo magnético	173
5.4	Sobre el teorema de fluctuación-disipación	176
5.4.1	Teorema II, fórmula de Green-Callen	176
6	Introducción al transporte difusivo	183
6.1	Cadenas de Markov	183
6.1.1	Propiedades de \mathbf{T}_1	184
6.2	Caminata aleatoria (<i>Random Walk</i>)	186
6.2.1	Funciones generatrices	188
6.2.2	Momentos de una caminata aleatoria	189
6.2.3	Realizaciones de una caminata aleatoria*	192
6.3	La Ecuación Maestra (difusión en la red)	195
6.3.1	Solución formal (función de Green)	198
6.3.2	Transición a primeros vecinos	199
6.3.3	Solución del problema homogéneo en una dimensión	200

6.3.4	Densidad de estados, localización	202
6.4	Modelos de desorden	203
6.4.1	Solución estacionaria	205
6.4.2	Tiempos cortos	206
6.4.3	Tiempos largos	207
6.5	Condiciones de contorno en la Ecuación Maestra	209
6.5.1	Introducción	209
6.5.2	Problema equivalente	210
6.5.3	Estado limbo absorbente	211
6.5.4	Estado reflectante	212
6.5.5	Condiciones de contorno (método de las imágenes)	214
6.5.6	Método de las imágenes en sistemas finitos*	215
6.6	Tiempos aleatorios de primer pasaje*	221
6.6.1	Probabilidad de supervivencia	222
7	Difusión en medios desordenados	227
7.1	Desorden en la Ecuación Maestra	227
7.2	Aproximación de medio efectivo	229
7.2.1	El problema de una impureza	229
7.2.2	Cálculo de la función de Green con una impureza	231
7.2.3	El medio efectivo	232
7.2.4	Límite de tiempos cortos	234
7.2.5	Límite de tiempos largos	235
7.3	Difusión anómala y la aproximación CTRW	239
7.3.1	Relación entre un CTRW y la Ecuación Maestra generalizada	242
7.3.2	Retorno al origen*	244
7.3.3	Relación entre la función de espera y el desorden*	247
7.3.4	Superdifusión*	250
7.4	Difusión con estados internos	253
7.4.1	Caso ordenado	253
7.4.2	Caso desordenado	254
7.4.3	Caso no factorizable*	255
8	Conductividad eléctrica	261
8.1	Transporte y la mecánica cuántica	261
8.2	Transporte y la fórmula de Kubo	262
8.2.1	Teorema III (Kubo)	264
8.2.2	Fórmula de Kubo*	264
8.2.3	Aplicación a la conductividad eléctrica	266
8.3	Conductividad en el límite clásico	267
8.3.1	Conductividad usando un modelo de relajación exponencial	268
8.4	Fórmula de Scher y Lax para la conductividad	269
8.4.1	Susceptibilidad de un gas de Lorentz	272
8.4.2	Límite estático (ley de Fick)	277
8.5	Transporte difusivo anómalo (conclusión)	280
8.5.1	La aproximación de CTRW	280
8.5.2	La técnica autoconsistente (AME)	282

8.5.3	Difusión en coordenadas esféricas*	284
8.6	Acerca del vm sobre el desorden (epílogo)	285
A	Variables termodinámicas en mecánica estadística	289
A.1	El principio de Boltzmann	289
A.1.1	Sistemas en contacto	290
A.2	Primera y segunda ley de la termodinámica	291
B	Relajación al estado estacionario	295
B.1	Evolución temporal	295
B.2	Función de Lyapunov	298
C	La función de Green del problema de una impureza	301
C.1	Caso anisotrópico y asimétrico	301
C.2	Caso anisotrópico y simétrico	302
D	La función de espera $\psi(t)$ del CTRW	303
E	Efectos no markovianos frente a irreversibilidad	305
E.1	El núcleo $\Phi(t)$ y el cálculo diferencial generalizado	307
F	Matriz densidad	309
F.1	Propiedades de la matriz densidad	310
F.2	Matriz densidad reducida	311
F.3	Ecuación de von Neumann	311
F.4	Entropía de información	314
G	Fórmula de Kubo para la susceptibilidad	315
G.1	Derivación alternativa de la fórmula de Kubo	318
H	Fractales	321
H.1	Objetos autosimilares	321
H.2	Objetos estadísticamente autosimilares	324

Capítulo 1

Elementos de probabilidad

1.1 Introducción a las variables aleatorias

El rol principal de la estadística moderna es develar los misterios de la naturaleza macroscópica, ya sea al explicar o dar expectativas en situaciones de la vida real. Ninguna disciplina matemática ha tenido un espectro tan amplio de aplicación, desde la Biología a la Economía, pasando por la Física y la Química, como lo ha tenido la teoría de la probabilidad. En un universo dinámico como éste, a nadie se le escapan las diferencias que presentan los aspectos dinámicos (no equilibrio) de los estacionarios (equilibrio). Sin embargo, muchos de los tratados estadísticos están basados en el análisis de estructuras de equilibrio [1]. La teoría de los procesos estocásticos ocupa un rol fundamental en la descripción dinámica de los tratados estadísticos modernos. Allí el concepto de dinámica y el de probabilidad son los elementos fundamentales para la construcción de una teoría estadística de no equilibrio [2, 3, 4].

La teoría de la probabilidad puede ser presentada en un contexto axiomático o frecuencial; y en las próximas secciones describiremos brevemente ambas presentaciones. Por otro lado, en el capítulo 3 veremos que la teoría de los procesos estocásticos describe los cambios temporales de la estadística.

1.2 Esquema axiomático*

Un *evento*¹ (algo no predecible con certeza) es simplemente un miembro de un cierto *espacio de muestra*. Por ejemplo, consideremos la posición del centro de masa, el momento angular, y la polarización como *elementos* del espacio de muestra \mathcal{S} de todas las moléculas de H_2O en un vaso de agua. Así, un evento A podría ser el encontrar 250 moléculas con igual polarización en un determinado volumen ΔV “alrededor” de un punto \mathbf{r} del espacio. Una situación más sencilla, al determinar el valor esperado² de un evento arbitrario A , se da cuando en el espacio de muestra \mathcal{S} hay una enumeración exhaustiva de los posibles eventos elementales. Por ejemplo, un dado “honesto” de seis lados puede mostrar cualquiera de sus caras, numeradas del 1 al 6, cuando lo lanzamos en un juego. En este caso el espacio de

¹Evento o suceso suelen ser nombrados indistintamente en el idioma español.

²En muchas ocasiones suele sencillamente llamarse *expectación* de A .

muestra es el conjunto $\mathcal{S} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, y un evento particular A podría ser, por ejemplo, el obtener un número *par* en una “tirada” del dado. Obviamente, como hay 3 posibilidades, la probabilidad de este evento será $P(A) = 1/2$. La teoría axiomática de la probabilidad está formulada de manera que sea lo más general posible para que abarque situaciones como las recién comentadas, y aún más complejas [5].

En el esquema axiomático los números $P(A), P(B), P(C), \dots$ dan las probabilidades de *todos* los posibles eventos A, B, C, \dots en un experimento dado. Si denotamos por \mathcal{S} el espacio de muestra, entonces todos los eventos cumplen que $A \in \mathcal{S}, B \in \mathcal{S}, C \in \mathcal{S}, \dots$. Luego, en una presentación axiomática, la probabilidad es el número (único) que se asigna a todo evento que pertenece al espacio de muestra. Además, el número $P(A)$ asignado a un evento arbitrario A cumple con los axiomas

$$\begin{aligned} P(A) &\geq 0 \\ P(\mathcal{S}) &= 1. \end{aligned} \tag{1.1}$$

Por otro lado, de la teoría de conjuntos se sabe que

- si $w \in A \cup B \implies w$ es un elemento de A o de B
- si $w \in A \cap B \implies w$ es un elemento que está en A y en B
- \tilde{A} indica el complemento de A , es decir: $A \cup \tilde{A} = \mathcal{S}, A \cap \tilde{A} = \emptyset, \tilde{\emptyset} = \mathcal{S}$ (\emptyset es el conjunto vacío)
- $A_i \cap A_j = \emptyset \implies$ son conjuntos disjuntos.

Entonces, en la teoría axiomática de la probabilidad se deduce que

- $P(A \cup B) =$ Probabilidad de que ocurra el evento A o el B , o ambos a la vez
- $P(A \cap B) =$ Probabilidad de que ambos eventos ocurran (Probabilidad Conjunta)
- si A_1, A_2, A_3, \dots son eventos mutuamente excluyentes³ (disjuntos) $\implies P(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n) = \sum_{n=1}^{\infty} P(A_n)$.

Entonces, para aplicar la teoría axiomática hay que definir el espacio de muestra \mathcal{S} y asignar la probabilidad P sobre ese espacio, es decir los axiomas (1.1).

Ejemplo. En el *ensemble*⁴ cuántico microcanónico el espacio de muestra está constituido por los distintos niveles de energía, y las probabilidades asignadas a cada elemento son iguales para cada uno de ellos (postulado de igual probabilidad a priori, ver apéndice A).

Ejercicio guiado. Probemos que para todo evento $A \in \mathcal{S}$ se cumple que $0 \leq P(A) \leq 1$. Puesto que A y \tilde{A} son mutuamente excluyentes y dado que $\tilde{A} \cup A = \mathcal{S}$, de (1.1) se deduce que $P(\tilde{A} \cup A) = P(\tilde{A}) + P(A) = P(\mathcal{S}) = 1$, entonces $0 \leq P(A) = 1 - P(\tilde{A}) \leq 1$.

Ejercicio. Si $A_1, A_2, A_3, \dots, A_N$ son eventos mutuamente excluyentes y además $A_1 \cup A_2 \cup A_3 \cup \dots \cup A_N = \mathcal{S}$, es decir, la unión de ellos representa el conjunto de todos los eventos posibles, muestre que $\sum_{n=1}^N P(A_n) = 1$.

³Aquí estamos suponiendo una colección *numerable* de subconjuntos A_n (eventos). Éste es un punto delicado de la teoría axiomática que no será tratado en el presente texto; ver por ejemplo [5, 6].

⁴En varios idiomas se usa el término *ensemble* y significa una cierta “colectividad”.

Ejercicio guiado. Muestre que un evento que *no puede ocurrir* tiene probabilidad nula. Dado que el complemento de \mathcal{S} es justamente el conjunto vacío \emptyset o no evento (el cual no puede ocurrir), se deduce que $\emptyset \cup \mathcal{S} = \mathcal{S}$, además dado que \emptyset, \mathcal{S} son mutuamente excluyentes se tiene $P(\emptyset \cup \mathcal{S}) = P(\emptyset) + P(\mathcal{S}) = P(\mathcal{S})$, de donde se deduce que $P(\emptyset) = 0$.

Ejercicio guiado. Muestre que si dos eventos A, B son mutuamente excluyentes entonces su probabilidad conjunta es nula. Usando que $P(A \cap B) \implies$ Probabilidad Conjunta $\equiv P(A; B)$, y del hecho de que $A \cap B = \emptyset$ y $P(\emptyset) = 0$, se deduce que $P(A; B) = 0$.

Ejercicio optativo. Si $B_1, B_2, B_3, \dots, B_N$ son *todos* los eventos posibles mutuamente excluyentes, es decir: $\bigcup_{n=1}^N B_n = \mathcal{S}$, muestre que $\sum_{n=1}^N P(A; B_n) = P(A)$. Primero comenzamos notando que $A \cap \left(\bigcup_{n=1}^N B_n\right) = A \cap \mathcal{S} = A$. Entonces, como $\{B_1, \dots, B_N\}$ son *todos* los eventos mutuamente excluyentes, se tiene que $A \cap B_j = \emptyset$ para todo j , y se deduce que

$$P\left(A \cap \left(\bigcup_{n=1}^N B_n\right)\right) = P\left(\bigcup_{n=1}^N A \cap B_n\right) = \sum_{n=1}^N P(A \cap B_n),$$

donde hemos usado que $\{A \cap B_1, A \cap B_2, \dots, A \cap B_N\}$ también es un conjunto mutuamente excluyente. Por otro lado,

$$P\left(A \cap \left(\bigcup_{n=1}^N B_n\right)\right) = P(A \cap \mathcal{S}),$$

de donde se deduce lo que se quería demostrar.

Ejemplo. Sea un dado “honesto” de 6 caras (equiprobables $P(A_i) = 1/6$, $i = 1, \dots, 6$, donde A_i representa cada uno de los eventos elementales), luego $\mathcal{S} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Considere ahora los siguientes subconjuntos (o eventos A, B, \dots): $\emptyset, \mathcal{S}, \{1, 3, 5\}, \{2, 4, 6\}$. Entonces un número positivo $P(A), P(B), \dots$ puede ser asignado a cada uno de los eventos antes mencionados.

1.2.1 Probabilidad condicionada

La probabilidad de que ocurra el evento A condicionado a que el evento B sea cierto, se denota comúnmente en la forma $P(A | B)$ y está dada por el cociente de dos probabilidades:

$$P(A | B) = \frac{P(A; B)}{P(B)}, \quad (1.2)$$

donde $P(A; B)$ es la probabilidad conjunta. Obviamente esta magnitud tiene sentido *sólo si* el evento $B \neq \emptyset$. Es decir: la *condición* B tiene que ser un evento posible.

Ejercicio optativo. Muestre que $P(A | B)$ es una probabilidad y cumple con todas las condiciones establecidas anteriormente.

Ejercicio optativo. Si $A_1, A_2, A_3, \dots, A_N$ son todos los posibles eventos mutuamente excluyentes, muestre que $\sum_{n=1}^N P(A_n | B) = 1$.

Ejercicio guiado. Considere una caja C_1 con 3 bolitas azules y 1 blanca, y otra segunda caja C_2 con 2 bolitas azules y 1 blanca. Se elige al azar una de las cajas y luego se extrae de ella 1 bolita. Calculemos cuál es la probabilidad de que salga una bolita azul. Obviamente, el resultado del experimento puede ser cualquiera de las $4 + 3$ bolitas, es decir $\mathcal{S} = \{a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, b_1, b_2\}$. Podemos representar el problema de la siguiente forma

esquemática

	caja C_1	caja C_2
evento A	$\boxed{a_1, a_2, a_3}$	$\boxed{a_4, a_5}$
evento B	$\boxed{b_1}$	$\boxed{b_2}$

Entonces podemos definir los siguientes subconjuntos

$$\begin{aligned} C_1 &= \{\text{bolitas de la caja 1}\} = \{a_1, a_2, a_3, b_1\} \\ C_2 &= \{\text{bolitas de la caja 2}\} = \{a_4, a_5, b_2\} \\ A &= \{\text{bolitas azules}\} = \{a_1, a_2, a_3, a_4, a_5\} \\ B &= \{\text{bolitas blancas}\} = \{b_1, b_2\}. \end{aligned}$$

Además damos por supuesto que elegir una u otra caja es absolutamente equivalente, es decir: $P(C_1) = P(C_2) = 1/2$. Supongamos que se elige la caja 1, como todas las bolitas tienen igual probabilidad de salir, entonces la probabilidad condicionada de sacar una bolita azul de la caja 1 es $P(A | C_1) = 3/4$. Por otro lado, si se elige la caja 2, la probabilidad condicionada de sacar una bolita azul de la caja 2 es $P(A | C_2) = 2/3$. Entonces, usando (1.2) para escribir la probabilidad conjunta $P(A; C_i)$ y sumando sobre los eventos C_i se deduce que la probabilidad de sacar una bolita azul es:

$$P(A) = P(A | C_1)P(C_1) + P(A | C_2)P(C_2) = \frac{3}{4} \cdot \frac{1}{2} + \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{2} = \frac{17}{24}.$$

1.2.2 Teorema de Bayes

Dado que $P(A \cap B) \implies P(A; B)$, y usando (1.2) se deduce que⁵

$$\begin{aligned} P(A; B) &= P(A | B)P(B) \\ P(A; B) &= P(B | A)P(A), \end{aligned}$$

donde $P(A | B)$ es la probabilidad “inversa” de $P(B | A)$. Luego esta probabilidad inversa viene dada en términos de $P(B | A)$ por

$$P(A | B) = \frac{P(B | A)P(A)}{P(B)}.$$

1.2.3 Independencia estadística

En el contexto de la teoría de la probabilidad, se definen eventos independientes si la probabilidad condicionada sobre algún evento (o eventos) no tiene ninguna influencia en el cálculo de dicha probabilidad. Es decir: $P(A | B_1, \dots, B_n) = P(A)$, de lo cual se deduce que la probabilidad conjunta $P(A \cap B_1 \cap \dots \cap B_n)$ puede expresarse

$$P(A; B_1; \dots; B_n) = P(A)P(B_1) \cdots P(B_n)$$

Ejercicios optativos. Sean A, B subconjuntos de un espacio de muestra \mathcal{S} . Si $P(A)$ y $P(B)$ designan las probabilidades que ocurran los eventos A y B respectivamente, interprete geoméricamente (con diagramas de Venn) los siguientes resultados:

⁵Note que la probabilidad conjunta satisface: $P(A; B) = P(B; A)$. Cuando introduzcamos el concepto de *proceso estocástico* utilizaremos esta misma propiedad, aunque en ese caso estaremos involucrando *eventos* en distintos instantes de tiempo (ver capítulo 3).

- $P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B)$. Pero si los eventos son excluyentes: $A \cap B = \emptyset$, se observa que
- $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$.

Definimos eventos independientes si y sólo si $P(A \cap B) = P(A)P(B)$.

- Muestre que eventos *excluyentes* y eventos *independientes* no son sinónimos.
- Calcule la probabilidad condicionada $P(A | B)$ para el caso en que A, B sean eventos independientes.

1.2.4 Variable aleatoria

Cuando los posibles eventos A_1, A_2, \dots de un espacio de muestra \mathcal{S} son los números reales, dichos eventos son evidentemente mutuamente excluyentes. Entonces es factible interpretar esos números⁶ como los posibles valores de una variable aleatoria (**va**). Es decir, una **va** X es una función desde el espacio de muestra \mathcal{S} en un espacio de estados (los reales en este caso), o sea $X : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{R}_e$.

Una de las ventajas de introducir el concepto de **va** radica en la simplificación del manejo de diferentes funciones de **va**, por ejemplo: e^{iX}, X^n , etc. Cuando se estudian ecuaciones algebraicas con coeficientes constantes y esos coeficientes son **va**, las raíces, en este caso, tendrán asociados diferentes valores de expectación o distribuciones de probabilidad. El estudio de ecuaciones diferenciales en presencia de **va** y la modelización del transporte en sistemas amorfos son algunos de los importantes campos de aplicación del concepto elemental de **va**. Usando este concepto es posible conocer⁷ el valor medio (**vm**) de la solución *formal*, dada ésta como función de las **va** involucradas en el problema.

Si los valores posibles de la **va** X consisten en un conjunto numerable de números x_1, x_2, \dots , decimos que la **va** X es discreta. Mientras que si los valores posibles de la **va** X consisten en los números dentro del intervalo $[a, b]$, decimos que la **va** X es continua. En general, llamaremos al espacio de muestra de una **va** X su dominio, soporte, etc. y lo denotaremos por \mathcal{D}_X . Entonces, en el contexto de la teoría axiomática de la probabilidad cada evento de la **va** X , es decir, los números x_1, x_2, x_3, \dots , tendrá asociado una probabilidad $P(x_1), P(x_2), P(x_3), \dots$; y por el análisis antes mencionado se cumple que

$$\sum_n P(x_n) = 1. \quad (1.3)$$

En el caso especial en que sólo *un evento* es cierto, por ejemplo el x_p , y ninguno del resto puede ocurrir tendremos que

$$P(x_n) = \delta_{n,p},$$

donde $\delta_{n,p}$ es la delta de Kronecker y simboliza que $\delta_{n,p} = 1$ si $n = p$, y es cero en cualquier otro caso.

En caso de que la **va** X sea continua y, por ejemplo, definida en un intervalo (cerrado o abierto) \mathcal{D}_X , aparecen nuevas dificultades en la teoría, pues la fórmula (1.3) no puede

⁶Los símbolos \mathcal{R}_e y \mathcal{C} representarán los números reales y complejos, respectivamente.

⁷Es decir formular su cálculo.

aplicarse.⁸ Es necesario entonces introducir una probabilidad $P(x_j) dx_j$, la cual tiende a cero cuando el elemento diferencial dx_j tiende a cero. En este caso el evento que contiene sólo un número aislado, por ejemplo x_0 , tiene probabilidad cero. Cuando la **va** X sea continua la normalización, en lugar de ser (1.3), adopta la forma generalizada

$$\int_{\mathcal{D}_X} P(x) dx = 1. \quad (1.4)$$

Entonces, la probabilidad de que la **va** X , con dominio $\mathcal{D}_X = [a, b]$, tome un valor menor que el número χ (donde $a \leq \chi \leq b$) viene dada por

$$\text{Prob.}[X \leq \chi] = \int_a^\chi P(x) dx.$$

Ejercicio. Muestre que la $\text{Prob.}[X \leq \chi]$ es una función creciente de χ , acotada a 1, y que la derivada de $\text{Prob.}[X \leq \chi]$ con respecto a χ es la densidad de probabilidad $P(\chi)$. En algunas ocasiones (cuando se necesite) denotaremos esta densidad de probabilidad en la forma $P_X(\chi)$, pero en la mayoría de los casos usaremos la notación abreviada.

Si la función $\text{Prob.}[X \leq \chi]$ es discontinua en algún lugar, la densidad de probabilidad $P(\chi)$ puede no existir.⁹ Si la **va** X es continua y sólo tiene el evento cierto x_p , es necesario introducir una nueva notación. Para esta clase de distribución de probabilidad denotaremos

$$P_X(\chi) = \delta(\chi - x_p),$$

donde $\delta(x - x_p)$ es la delta de Dirac; esta densidad será brevemente definida en la próxima sección. Su significado tiene sentido sólo bajo el signo de integral, es decir:

$$f(x_p) = \int \delta(x - x_p) f(x) dx,$$

y cumple con la propiedad de normalización (1.4).

Ejercicio optativo. Muestre que si X es una **va** discreta, su distribución de probabilidad puede ser *formalmente* descrita como una **va** continua usando la delta de Dirac, pues:

$$P(x) = \sum_n P(x_n) \delta(x - x_n). \quad (1.5)$$

1.3 Esquema frecuencial

La probabilidad es una medida para cuantificar nuestra *expectación* [7], después de hacer n experimentos idealmente idénticos, al intentar detectar un evento A . Entonces, $P(A)$ será su probabilidad si $nP(A)$ es un valor del número de veces que ocurre el evento A .

⁸El hecho de que el espacio de muestra no sea numerable, como ocurre con los números reales en un intervalo cerrado, introduce dificultades que sólo pueden ser salvadas si se incorpora el concepto de densidad de probabilidad. Los matemáticos resuelven esta dificultad definiendo el evento $A(x_j, dx_j)$ que significa el conjunto $[x_j \leq x \leq x_j + dx_j]$.

⁹Sin embargo, la singularidad introducida por alguna clase de discontinuidad no puede ser más abrupta que la delta de Dirac (ver próxima sección).

1.3.1 Densidad de probabilidad

La base de toda teoría estadística está centrada en el concepto de probabilidad. De acuerdo con el esquema *frecuencial*, si A es un evento que ocurre m veces en un experimento realizado n veces, en el límite $n \rightarrow \infty$ tendremos

$$m/n \rightarrow P(A),$$

donde $P(A)$ es la probabilidad de ocurrencia del evento A . El detalle de cuán grande ha de ser el número n es un problema que no puede ser contestado con rigor matemático.

Cuando decimos que una variable aleatoria (**va**) está dada, estamos significando que conocemos las propiedades estadísticas que la caracterizan.¹⁰ Una de las caracterizaciones más simple de una **va** X es su valor medio (**vm**). Si x_1, x_2, x_3, \dots son los valores “obtenidos”, “ocurridos”, “sucedidos” en un experimento dado, el **vm** de la **va** será:

$$\langle X \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n}, \quad (1.6)$$

aquí los números x_1, x_2, x_3, \dots representan los posibles eventos del dominio \mathcal{D}_X de la **va** X . O sea, $\langle X \rangle$ es el límite de la media aritmética de los valores *obtenidos* cuando este límite aumenta indefinidamente (¡en lo que sigue supondremos que este límite existe!). Otras características de una **va** pueden ser definidas, también, a partir de **vm** de funciones más complicadas, por ejemplo: $f(X) = X^2$, $g(X) = \exp(ikX)$, etc. En particular, consideremos en qué condiciones se cumple la desigualdad $X < \chi$; o sea, queremos conocer la

$$\text{Prob.}[X < \chi].$$

Esta probabilidad puede ser calculada considerando el **vm** de la siguiente función de la **va** X

$$\epsilon = \Theta(\chi - X), \quad \text{donde } \Theta(z) \begin{cases} = 1 & \text{si } z > 0 \\ = 0 & \text{si } z \leq 0, \end{cases} \quad (1.7)$$

entonces, si $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3, \dots$ son los valores obtenidos en el experimento, el **vm** de $\Theta(\chi - X)$ será:

$$\text{Prob.}[X < \chi] = \langle \Theta(\chi - X) \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} [\epsilon_1 + \epsilon_2 + \dots + \epsilon_n] / n. \quad (1.8)$$

Teniendo en cuenta la definición de la función escalón $\Theta(z)$, vemos que la $\text{Prob.}[X < \chi]$ es justamente el cociente m/n , donde m es el número de desigualdades válidas $x_i < \chi$, ($1 \leq i \leq n$) y n es el número de muestras o “tiradas”. Es decir,

$$\text{Prob.}[X < \chi] = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{m}{n}. \quad (1.9)$$

Si analizamos $\langle \Theta(\chi - X) \rangle$ como función del parámetro χ , podremos definir la función de distribución acumulativa $F_X(\chi)$ de la **va** X en la forma

¹⁰La teoría de la probabilidad axiomática da un tratamiento más abstracto que el esquema *frecuencial*. En el esquema *axiomático* el eje real x es reemplazado por el espacio de eventos $S \equiv \mathcal{D}_X$, el intervalo diferencial $x + dx$ por un subconjunto $A \subset S$ perteneciente a una familia de subconjuntos cerrados bajo unión e intersección (una σ -álgebra) [6, 5]. La función de distribución asigna un número no negativo $P(A)$ a cada subconjunto del álgebra de tal manera que $P(S) = 1$, donde P recibe el nombre de densidad de probabilidad. Además, cualquier otro conjunto $f(A)$ será también una **va**.

$$F_X(\chi) = \langle \Theta(\chi - X) \rangle. \quad (1.10)$$

Entonces su derivada es la llamada *densidad de probabilidad*

$$P_X(\chi) = \frac{dF_X(\chi)}{d\chi}; \quad F_X(\chi) = \int^{\chi} P_X(\chi') d\chi'. \quad (1.11)$$

Si aplicamos (1.10) en (1.11) y derivamos bajo el signo de **vm**, obtendremos una definición alternativa para la densidad de probabilidad

$$P_X(\chi) = \langle \delta(X - \chi) \rangle, \quad \text{pues} \quad \delta(z) = \frac{d\Theta(z)}{dz}, \quad (1.12)$$

donde $\delta(z)$ es la delta de Dirac. En lo que sigue estaremos más interesados en la densidad (o distribución) de probabilidad $P_X(\chi)$ que en el cálculo de la función de distribución acumulativa $F_X(\chi)$.

Notas sobre la delta de Dirac

Aquellos lectores que no estén familiarizados con esta distribución pueden pensar en ella como el objeto matemático (singular) que aparece en la transformada de Fourier de una función continua por trozos y absolutamente integrable en $[-\infty, \infty]$ (o sea, funciones lisas $f(x)$). El teorema de Fourier establece que

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du \int_{-\infty}^{\infty} dz f(z) \exp(iu(z-x)).$$

Intercambiando el orden de integración podemos definir el objeto $\delta(z-x)$ (el cual diverge para $z=x$). Este objeto *sólo* puede ser considerado bajo el signo de integración, además al multiplicar a éste por una función arbitraria $f(z)$, su integral da la misma función $f(z)$ evaluada en x , es decir,

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dz f(z) \delta(z-x),$$

de donde se deduce la definición de la delta de Dirac (δ -Dirac)

$$\delta(z-x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} du \exp(iu(z-x)). \quad (1.13)$$

1.3.2 Propiedades de la densidad de probabilidad $P_X(\chi)$

1. Se define positiva [se deduce inmediatamente de la definición (1.12)].
2. Está normalizada [se demuestra trivialmente pues $\langle 1 \rangle = 1$].
3. $P_X(\chi)$ caracteriza *completamente* a la **va** X . La densidad $P_X(\chi)$ permite calcular cualquier *momento*:

$$\langle X^m \rangle \equiv \int \chi^m P_X(\chi) d\chi \quad \text{para} \quad m = 1, 2, 3 \dots$$

En particular, al segundo momento centrado $\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle$ se le llama dispersión o variancia y da una idea del ancho de la distribución $P_X(\chi)$.

4. $P_X(\chi)$ permite calcular el **vm** de *cualquier función* de la **va** X . Dado que $f(x) = \int f(z)\delta(x-z) dz$, se ve inmediatamente que

$$\begin{aligned}\langle f(X) \rangle &= \left\langle \int f(z)\delta(X-z) dz \right\rangle \\ &= \int f(z) \langle \delta(X-z) \rangle dz = \int f(z)P_X(z) dz.\end{aligned}\tag{1.14}$$

En el caso de que la **va** X sea discreta, su probabilidad puede ser incorporada dentro del mismo formalismo de una densidad de probabilidad mediante la utilización de la delta de Dirac (ver ecuación 1.5), razón por la cual de ahora en adelante sólo trabajaremos suponiendo que la **va** X es continua, salvo indicación de lo contrario. Por otro lado, en ocasiones omitiremos la notación redundante y simplemente escribiremos $P(x)$ para indicar la densidad de probabilidad $P_X(\chi)$ de la **va** X .

1.4 Función característica

Alternativamente podemos caracterizar una **va** X mediante el desarrollo de Fourier de la densidad de probabilidad, es decir: a partir del **vm** de la función $\exp(ikX)$. El conocimiento de este **vm** permite, muchas veces, facilitar enormemente el análisis estadístico. Definimos

$$G_X(k) \equiv \langle \exp(ikX) \rangle = \int_{\mathcal{D}_X} \exp(ikx) P_X(x) dx,\tag{1.15}$$

entonces

$$P_X(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ikx) G_X(k) dk,\tag{1.16}$$

donde \mathcal{D}_X es el espacio de muestra (dominio) de la **va** X , y $G_X(k)$ es la *función característica*. Su conocimiento permite el cálculo de todos los momentos de la **va** X . Si estos momentos $\langle X^m \rangle$ existen, $G_X(k)$ es desarrollable en serie de Taylor alrededor de $k=0$, es decir:

$$\begin{aligned}\langle \exp(ikX) \rangle &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} M_m \\ M_m &\equiv \langle X^m \rangle = \frac{1}{i^m} \frac{d^m}{dk^m} G_X(k) \big|_{k=0}.\end{aligned}\tag{1.17}$$

Nota. La función $G_X(k)$ está bien definida para todo $k \in \mathcal{R}_e$, es continua y satisface $G_X(0) = 1$, $|G_X(k)| \leq 1$ (su prueba se deja como ejercicio para el lector). En ocasiones omitiremos notaciones redundantes y simplemente escribiremos $G(k)$ para indicar la función característica de la **va** X .

Ejercicio guiado. Si el espacio de muestra de la **va** S son los enteros¹¹ $\mathcal{D}_S = \mathcal{Z}$, y observando que (compare con la definición de la delta de Kronecker)

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-ik(s-s')} dk = \begin{cases} 1 & \text{si } s = s' \\ 0 & \text{si } s \neq s', \end{cases}$$

¹¹De ahora en adelante reservaremos el símbolo \mathcal{Z} para denotar los enteros y \mathcal{N} los naturales $\{1, 2, 3, \dots\}$, cuando no se preste confusión alguna.

muestre que la antitransformada de Fourier viene dada por

$$P(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-iks} G(k) dk = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-iks} G(k) dk.$$

Excursus. Un resultado interesante que realza la importancia de la función característica lo establece el siguiente teorema:¹² si una función arbitraria $G(k)$ cumple con las condiciones (1-3), entonces existe un espacio de muestra \mathcal{D}_1 , una distribución de probabilidad $P_1(\omega)$ sobre \mathcal{D}_1 y una variable aleatoria \mathfrak{l} tal que $G(k) = \langle \exp(ik\mathfrak{l}) \rangle$ es su función característica [8], donde:

1. $G(0) = 1$.
2. $G(k)$ es continua para todo $k \in \mathcal{R}_e$.
3. Si para todo conjunto de N números complejos $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$, y números reales k_1, k_2, \dots, k_N se cumple: $\sum_{i,j} \lambda_i^* \lambda_j G(k_i - k_j) \geq 0$.

Como corolario del teorema de Bochner se deduce que si $G(k)$ cumple con los puntos (1-3) y es analítica en el entorno de $k = 0$, entonces el desarrollo de potencia en serie de Taylor de $G(k)$ converge y sus coeficientes están relacionados con los momentos de la **va** \mathfrak{l} .

Ejercicio. Sea la probabilidad de Poisson:

$$P_N(n) = \frac{\lambda^n}{n!} \exp(-\lambda); \quad n \in [0, 1, 2, \dots], \lambda \in (0, \infty),$$

donde $P_N(n)$ da la probabilidad de que la **va** N tome algún valor natural n (o cero). Muestre que su función característica está dada por

$$G_N(k) = \exp[-\lambda(1 - \exp(ik))].$$

Calcule todos los momentos de la **va** N .

Ejercicio. Sea la probabilidad binomial:

$$P_B(n) = \frac{M!}{n!(M-n)!} p^n (1-p)^{M-n}; \quad n \in [1, \dots, M], M \in \mathcal{N}, p \in [0, 1].$$

Aquí el “experimento” tiene dos posibles eventos, \mathcal{A} y \mathcal{B} , con probabilidades intrínsecas $P(\mathcal{A}) = p$ y $P(\mathcal{B}) = 1 - p$ respectivamente; entonces, si realizamos M experiencias independientes y nos preguntamos por la posibilidad de obtener n eventos \mathcal{A} [en cualquier orden de salida], $P_B(n)$ da esa expectación. Obtenga su correspondiente función característica:

$$G_B(k) = (p \exp(ik) + (1-p))^M.$$

Ejercicio. Sea la distribución de probabilidad de Gauss:

$$P_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right); \quad x \in [-\infty, +\infty], \{\mu, \sigma\} \in \mathcal{R}_e,$$

¹²S. Bochner; ver también F. Riesz and B. St.-Nagy, *Functional Analysis*, New York, Frederick Ungar Publishing (1955).

donde $P_X(x) dx$ da la probabilidad de que la **va** X esté en el intervalo diferencial $[x, x + dx]$. Note que el dominio de la **va** X es el continuo de valores de la recta real. Obtenga su correspondiente función característica:

$$G_X(k) = \exp \left(ik\mu - \frac{\sigma^2}{2} k^2 \right).$$

Calcule todos los momentos de la **va** X .

Note que, en general, si la probabilidad (o distribución de la probabilidad) es simétrica, entonces $G(k) \in \mathcal{R}_e$.

Ejercicio. Usando la función característica de la probabilidad binomial obtenga, invocando un límite adecuado, la probabilidad de Poisson donde $\lambda = Mp$.

Ejercicio. Muestre que la función característica de la distribución de probabilidad gamma¹³

$$P_X(x) = \frac{c^b}{\Gamma(b)} x^{b-1} e^{-cx}; \quad x \in [0, \infty], \{b, c\} > 0,$$

es

$$G_X(k) = \frac{c^b}{(c - ik)^b}.$$

Note que en este caso la **va** X tiene soporte estrictamente no negativo; por otro lado, el caso $b = 1$ corresponde a la distribución exponencial. A partir de $G_X(k)$ demuestre que el momento de orden n de la **va** X es

$$\langle X^n \rangle = \frac{b(b+1) \cdots (b+n-1)}{c^n}.$$

Muestre que la dispersión viene dada por $\sigma_X^2 \equiv \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = b/c^2$.

Ejercicio. Calcule la normalización de una distribución gaussiana con soporte no negativo y valor más probable en x_p .

1.4.1 La más sencilla de las caminatas al azar (*Random Walk*)^{*}

Considere la suma de varias **va** X_i estadísticamente independientes¹⁴ e igualmente distribuidas

$$Y_r = X_1 + X_2 + \cdots + X_r,$$

donde cada una de las variables X_i puede tomar el valor ± 1 con probabilidad p, q , respectivamente ($p + q = 1$). La función característica de la **va** Y_r vendrá dada por

$$\begin{aligned} G_{Y_r}(k) &= \langle e^{ikY_r} \rangle_{P(Y_r)} = \langle e^{ikX_1} \rangle_{P(X_1)} \cdots \langle e^{ikX_r} \rangle_{P(X_r)} \\ &= \langle e^{ikX_i} \rangle_{P(X_i)}^r = (p e^{ik} + q e^{-ik})^r. \end{aligned}$$

Definiendo $Z \equiv e^{ik}$ y usando el desarrollo del binomio de Newton:

$$(A + B)^r = \sum_{n=0}^r \frac{r!}{n!(r-n)!} A^n B^{r-n},$$

¹³Aquí $\Gamma(b)$ es la función gamma con argumento b , ver por ejemplo [5].

¹⁴En la sección (1.2.3) se presenta el concepto de independencia estadística. El término *Random Walk* proviene del inglés y es equivalente a “caminata aleatoria”.

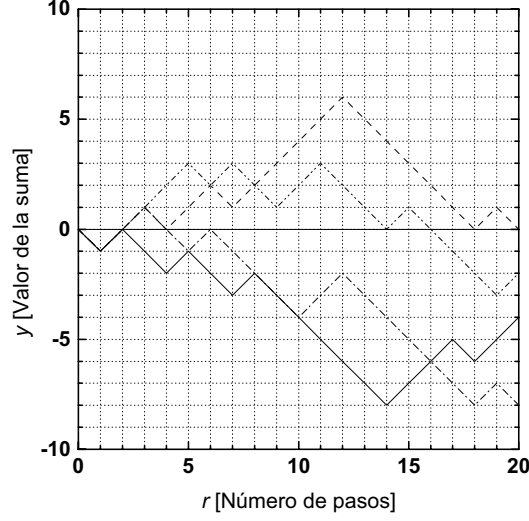


Figura 1.1: El valor aleatorio y corresponde a la distancia desde la posición de partida. El número de variables r corresponde al número de pasos efectuados por el “caminante”. La figura muestra la representación de cuatro posibles caminatas aleatorias.

se deduce que podemos escribir

$$G_{Y_r}(k) = \sum_{n=0}^r \frac{r!}{n!(r-n)!} p^n q^{r-n} Z^{2n-r}.$$

Definiendo una nueva variable “muda” $y = 2n - r$, podemos volver a escribir la sumatoria anterior en la forma:

$$G_{Y_r}(k) = \sum_{y=-r}^{y=r} \frac{r!}{\left(\frac{r+y}{2}\right)! \left(\frac{r-y}{2}\right)!} p^{(r+y)/2} q^{(r-y)/2} Z^y. \quad (1.18)$$

De la igualdad $Y_r = \sum_{i=1}^r X_i$ se deduce que los valores permitidos de la **va** Y_r pueden ser: $y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm r$. Entonces, de (1.18) es inmediato observar que

$$G_{Y_r}(k) = \sum_{y=-r}^{y=r} \mathcal{P}_r(y) e^{iky} \equiv \mathbf{1}_{e^{iky}} \rangle_{\mathcal{P}_r(y)},$$

donde

$$\mathcal{P}_r(y) = \frac{r!}{\left(\frac{r+y}{2}\right)! \left(\frac{r-y}{2}\right)!} p^{(r+y)/2} q^{(r-y)/2}. \quad (1.19)$$

A partir de lo cual se deduce que $\mathcal{P}_r(y)$ es la probabilidad de que la **va** Y_r tome el valor y si el número de variables aleatorias sumadas es r . Dicho de otra forma: $\mathcal{P}_r(y)$ es la probabilidad de que un “caminante borracho” esté en el sitio $y \in [-r, r]$ si ese “caminante” hace r pasos al azar (hacia atrás y hacia adelante) en línea recta; ver figura (1.1).

Ejercicio optativo. Obtenga de (1.19) [con $p = q = 1/2$ y parámetro de red a], en el límite de “tiempos” largos y “espaciamento” de la red pequeño $a \ll 1$, que $\mathcal{P}_r(y) \rightarrow 1/\sqrt{4\pi dt} \exp(-x^2/4dt)$, donde $x = ya, t = r\tau$. Entonces, en el límite en que $a \rightarrow 0, \tau \rightarrow 0$ se tiene que $\langle x(t)^2 \rangle = 2dt$, donde $d = a^2/2\tau$ es el coeficiente de difusión.

Ejercicio. (**Función característica de una probabilidad geométrica.**) Si se desea estudiar la distribución de saltos $|s - s'|$ de una caminata aleatoria cuando los pasos “elementales” están permitidos a todo alcance, pero con pesos estadísticos cada vez menores a medida que el salto es más largo, es útil considerar la siguiente probabilidad definida sobre los enteros:

$$P(s - s') = \mathcal{N} (1 - \gamma) \left(\gamma^{|s-s'|} - \delta_{s,s'} \right); \quad \gamma \in (0, 1), |s - s'| = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Note que esta probabilidad está construida de tal manera que no permite “pasos” de longitud nula. Muestre que la constante de normalización es $\mathcal{N} = 1/2\gamma$ y que la función característica es

$$G(k) = \frac{1 - \gamma}{\gamma} \left(\frac{1 - \gamma \cos k}{1 - 2\gamma \cos k + \gamma^2} - 1 \right). \quad (1.20)$$

En el capítulo 6 presentaremos un análisis exhaustivo de las distintas clases de “caminatas aleatorias” (*Random Walk*) que pueden aparecer, dependiendo de los diferentes modelos de saltos $|s - s'|$.

1.4.2 Ejemplos de $G(k)$ no desarrollables en serie de Taylor*

Mostramos aquí algunos ejemplos en los que la función característica no puede ser desarrollada en serie de Taylor alrededor de $k = 0$.

- Sea X una **va** (continua) caracterizada por la distribución de Lorentz, cuyos momentos no están definidos. A partir de la densidad de probabilidad

$$P(x) = \frac{\gamma/\pi}{[(x - a)^2 + \gamma^2]}, \quad x \in [-\infty, +\infty], a \in \mathcal{R}_e, \gamma > 0,$$

se obtiene que la función característica es $G(k) = \langle \exp(ikX) \rangle = \exp(ika - |k|\gamma)$. De aquí se observa que $G(k)$ no es diferenciable en $k = 0$; o sea, sus momentos no están rigurosamente definidos. No obstante, se puede decir que típicamente la distribución $P(x)$ estará centrada alrededor del valor a y tendrá un “ancho” caracterizado por γ .

- Sea S una **va** (discreta) caracterizada por la probabilidad de Weierstrass, a la cual en general llamaremos del tipo *Lévy*

$$P(s) = \frac{a-1}{2a} \sum_{n=0}^{\infty} 1/a^n (\delta_{s,b^n} + \delta_{s,-b^n}), \quad s \in \mathcal{D}_S, a > 1, b > 1.$$

Es decir: $1/a$ es la probabilidad de tomar el valor $s = \mp b$; $(1/a)^2$ es la probabilidad de tomar el valor $s = \mp b^2$, y así sucesivamente. Entonces, cuando la cantidad $1/a$ es pequeña, las probabilidades de tomar valores más grandes son también cada vez más pequeñas. En el contexto de una caminata aleatoria esta probabilidad conduce a una estructura de “saltos” en forma de cúmulos, muy interesantes, en el espacio real (es decir, no existe una longitud característica, única, para el tamaño de los “saltos”, sino más bien una peculiar autosemejanza a muchas escalas diferentes, que forma “lagunas” o “cúmulos” de puntos). En mecánica estadística de no equilibrio esta distribución de saltos da lugar a una serie de fenómenos críticos que pueden ser estudiados en el contexto de cadenas markovianas [9] (o caminatas aleatorias, ver capítulo 6). A partir de $P(s)$ se ve inmediatamente que el segundo momento de $P(s)$ es divergente si $b^2 > a$, pues

$$\langle s^2 \rangle = \sum_{\mathcal{D}_S} s^2 P(s) = \frac{a-1}{a} \sum_{n=0}^{\infty} (b^2/a)^n.$$

Note que la función característica de la probabilidad de Weierstrass está bien definida para todo $k \in \mathcal{R}_e$, y es continua en todo el eje real¹⁵

$$G(k) = \sum_{\mathcal{D}_S} \exp(iks) P(s) = \frac{a-1}{a} \sum_{n=0}^{\infty} 1/a^n \cos(b^n k). \quad (1.21)$$

No obstante ser continua vemos, de la expresión para su derivada segunda:

$$\frac{d^2 G(k)}{dk^2} = -\frac{a-1}{a} \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j / (2j)! k^{2j} \sum_{n=0}^{\infty} (b^{2j+2}/a)^n,$$

que $d^2 G(k)/dk^2|_{k=0} \rightarrow \infty$, si $b^2/a > 1$ (por ejemplo, considere el término $j = 0$ de la suma). De aquí se deduce que el segundo momento de la **va** s no está definido, pues éste diverge. La estructura matemática de la función de Weierstrass, $G(k)$, tiene propiedades extremadamente complicadas como función de k ; por ejemplo, $G(k)$ no tiene derivada en ningún punto si $0 < \ln a / \ln b < 1$.¹⁶

Excursus. (Cúmulos de puntos visitados.) La función característica (1.21) también puede escribirse en la forma

$$\begin{aligned} G(k) &= \frac{a-1}{a} \cos(k) + \frac{a-1}{a^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{a^m} \cos(b^{m+1}k) \\ &= \frac{a-1}{a} \cos(k) + \frac{1}{a} G(bk). \end{aligned}$$

Por otro lado, si descomponemos $G(k)$ en dos términos, $G(k) = G_S(k) + G_R(k)$, se puede comprobar por sustitución directa en $G(k) = \frac{a-1}{a} \cos(k) + \frac{1}{a} G(bk)$ que la parte analítica (regular) tiene la expresión:

$$G_R(k) = 1 + \frac{a-1}{a} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-k^2)^m}{(2m)! [1 - b^{2m}/a]}.$$

¹⁵Ésta es la función de K. Weierstrass presentada en (1872) y que posteriormente fue publicada en *Mathematische Werke*. II, 71-74, Berlin, Meyer & Muller (1895).

¹⁶Puede consultarse un análisis comprensible sobre esta función en: B.D. Hughes, E.W. Montroll and M.F. Shlesinger, *J. Stat. Phys.* **30**, 273, (1983).

Entonces, la contribución singular $G_S(k)$ es una función *no analítica* en k que satisface la relación de escala $G_S(k) = \frac{1}{a} G_S(bk)$. A partir de esta relación se puede comprobar que la parte singular es de la forma: $G_S(k) \propto |k|^\mu Q_\mu(k)$, donde $\mu = \ln a / \ln b$ y la función $Q_\mu(k)$ es periódica en $\ln b$, o sea, $Q_\mu(\ln k) = Q_\mu(\ln k + \ln b)$. Entonces es posible comprobar que cuando $k \rightarrow 0$ el comportamiento de la variable de Fourier k está controlado por $\propto |k|^\mu$, con $0 < \mu < 2$ si $b^2 > a$, donde el exponente μ caracteriza cierta dimensión fractal del conjunto (cúmulos) de puntos “visitados” en la caminata aleatoria (es decir, las posiciones instantáneas en una caminata aleatoria). Note que aproximadamente se harán a saltos de longitud b^m por cada salto de longitud b^{m+1} . Ésta es la idea básica por la cual μ puede ser asociada con la dimensión fractal en el sentido de Mandelbrot [10]. En la sección (6.2.3) del capítulo 6 se muestra una simulación numérica de este fenómeno. Por otro lado, un análisis sencillo del concepto de dimensión fractal se presenta en el apéndice H.

1.4.3 Función característica en una red toroidal*

El caso más simple de una red toroidal [9] con sitios enteros $\{s\}$ consiste en una red 1D circular (anillo donde $s \in \mathcal{D}_S \equiv [1, \dots, N]$). A partir de la definición de función característica, cuando el espacio de muestra es \mathcal{D}_S , se deduce que

$$G(k) = \sum_{s=1}^N \exp(iks) P(s). \quad (1.22)$$

Por otro lado, usando la condición de periodicidad de la probabilidad $P(s) = P(s + N)$, se observa que la variable conjugada de Fourier se discretiza según $kN = 2\pi\nu$, donde $\nu \in \mathcal{Z}$. Luego podemos concluir que la transformación inversa de Fourier (discreta) toma la forma:

$$P(s) = \frac{1}{N} \sum_{\nu=1}^{\nu=N} G(k = \frac{2\pi\nu}{N}) \exp(\frac{-i2\pi\nu s}{N}). \quad (1.23)$$

Esta fórmula puede ser interpretada como la aplicación de una transformación lineal \mathcal{Q} en un espacio vectorial de dimensión N , donde los elementos matriciales del operador \mathcal{Q} vienen dados por

$$\mathcal{Q}_{\nu s} = \frac{1}{N} \exp(\frac{-i2\pi\nu s}{N}) \quad \text{con} \quad \{\nu, s\} \in \mathcal{D}_S.$$

Es decir, usando la notación abreviada $P_s \equiv P(s)$, $G_\nu \equiv G(k = \frac{2\pi\nu}{N})$, la expresión (1.23) se escribe en la forma

$$P_s = \sum_{\nu} \mathcal{Q}_{s\nu} G_\nu,$$

entonces su relación inversa será $G_s = \sum_{\nu} \mathcal{Q}_{s\nu}^{-1} P_\nu$, donde \mathcal{Q}^{-1} es la matriz inversa de \mathcal{Q} .

Otra forma alternativa de probar la fórmula (1.23) se basa en el uso del método de las imágenes [11] para construir la probabilidad en una red *finita* con condiciones de contorno periódicas en \mathcal{D}_S [9].

Ejercicio guiado. (Suma de Poisson.) Si $\mathcal{P}(s)$ representa la probabilidad en la red infinita, mostremos que la probabilidad $P(s)$ en la red toroidal 1D viene dada por la suma:

$$P(s) = \sum_{l=-\infty}^{l=+\infty} \mathcal{P}(s + lN). \quad (1.24)$$

Note que se cumple la condición de periodicidad $P(s) = P(s + N)$. Por otro lado, a partir de esta expresión y el empleo de la suma de Poisson [5]:

$$\sum_{q=-\infty}^{q=+\infty} \exp(i2\pi mq) = \sum_{q=-\infty}^{q=+\infty} \delta(m + q), \quad (1.25)$$

podemos también obtener (1.23). Dado que $\mathcal{P}(s)$ está definida sobre la recta, se deduce que su función característica es $G(k) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \exp(iks) \mathcal{P}(s)$, entonces la transformada inversa viene dada por

$$\mathcal{P}(s + lN) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dk G(k) \exp[-ik(s + lN)].$$

Introduciendo esta expresión en (1.24) se deduce que

$$P(s) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dk G(k) \sum_{l=-\infty}^{l=+\infty} \exp[-ik(s + lN)],$$

ahora bien, usando la suma de Poisson (1.25) se obtiene

$$P(s) = \frac{1}{N} \int_0^{2\pi} dk G(k) \exp(-iks) \sum_{l=-\infty}^{l=+\infty} \delta(k + \frac{2\pi l}{N}),$$

pero puesto que la integración en dk sólo se efectúa en la zona $[0, 2\pi]$, se deduce inmediatamente que las únicas contribuciones vienen de los sumandos con $l = \{1, \dots, N\}$, de donde se obtiene la expresión buscada (1.23). La extensión de esta fórmula a redes toroidales nD es análoga [9].

Ejercicio optativo. A partir de (1.23) vuelva a obtener la fórmula para $P(s)$ cuando la red es infinita (o sea, $N \rightarrow \infty$). Muestre que en este caso la suma (1.23) se convierte en una integración sobre dk en la primera zona de Brillouin: $k \in [-\pi, \pi]$.

1.4.4 Función de función característica

De particular interés es el cálculo de la distribución de probabilidad de la suma de un conjunto numerable de variables aleatorias estadísticamente independientes¹⁷ entre sí (**vaei**).

Sea r un número aleatorio entero positivo caracterizado con la probabilidad P_r , y $\{X_j\}$ un conjunto de r **vaei** con igual distribución $P(X_j)$. Entonces, la suma

$$Y = X_1 + X_2 + \dots + X_r \quad \text{con} \quad r = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

es una nueva variable aleatoria, tanto por el carácter de cada una de las **vaei** X_j como por el carácter aleatorio del número r de variables. La función característica de la **va** Y está dada por

$$\begin{aligned} G_Y(k) &\equiv \langle e^{ikY} \rangle \\ &= \sum_{r=0}^{\infty} P_r \int \dots \int dX_1 \dots dX_r \prod_{j=1}^r P(X_j) \exp[ik(X_1 + \dots + X_r)], \end{aligned}$$

¹⁷Ver sección (1.2.3).

donde hemos usado el hecho de que X_j son **vai** con igual distribución¹⁸, entonces $G_{X_j}(k)$ es la misma para cada una de las **va** X_j . Luego, la función característica de la **va** Y viene dada por

$$G_Y(k) = \sum_{r=0}^{\infty} P_r \left[\int dX P(X) \exp(ikX) \right]^r.$$

Si usamos el concepto de función generatriz (para la variable aleatoria r), o sea:

$$f_r[Z] = \sum_{r=0}^{\infty} P_r Z^r,$$

se observa que podemos escribir $G_Y(k)$ en la forma

$$G_Y(k) = f_r[G_X(k)], \quad (1.26)$$

que es la expresión buscada. Note que en general la función generatriz y la función característica están relacionadas por $f_r[Z = e^{ik}] = \sum_{r=0}^{\infty} P_r e^{ikr} = \langle e^{ikr} \rangle_{P_r} \equiv G_r(k)$.

Ejercicio. (Caminata aleatoria.) Suponga que $Y = X_1 + X_2 + \dots + X_r$, pero donde r no es aleatoria, es decir, su probabilidad es certeza para cierto valor de r , digamos en $r = t$. En este caso $P_r = \delta_{r,t}$, luego la función generatriz de P_r es $f_r[Z] = \sum_{r=0}^{\infty} P_r Z^r = Z^t$. Usando (1.26) vuelva a obtener (1.19).

Ejercicio. (Suma aleatoria de variables gaussianas.) Suponga que X_j es una **va** gaussiana de media nula y variancia 1. Calcule la función característica de la suma de variables X_j suponiendo que el número de sumandos está caracterizado por una probabilidad de Poisson $P_r = \frac{\lambda^r}{r!} \exp(-\lambda)$. En este caso la función generatriz de P_r será

$$f_r(Z) = \exp(-\lambda[1 - Z]),$$

y, puesto que $G_X(k) = \langle e^{ikX} \rangle = e^{-k^2/2}$, finalmente se obtiene que

$$G_Y(k) = f_r[Z]|_{Z=G_X(k)} = \exp(-\lambda[1 - \exp(-k^2/2)]).$$

Muestre que el **vm** de la **va** $Y = \sum_{j=0}^r X_j$ es cero mientras que para el segundo momento se tiene

$$\langle Y^2 \rangle = \lambda.$$

Ejercicio optativo. (Suma aleatoria de variables geoméricamente distribuidas.) Suponga que X_j es una **va** geoméricamente distribuida (en (1.20) se dio su correspondiente función característica). Calcule la función característica de la suma $Y = \sum_{j=0}^r X_j$ suponiendo que el número aleatorio de sumandos r tiene una probabilidad de Poisson. Calcule la dispersión $\langle Y^2 \rangle$. ¿Qué diferencia tiene esta dispersión comparada con el modelo convencional de caminata aleatoria?

¹⁸Aquí usamos una notación abreviada, pues cada una de la **va** X_j tiene una distribución de probabilidad $P_{X_j}(x)$, pero hemos denotado simplemente $P(X_j)$.

1.5 Desarrollo en cumulantes

Alternativamente podemos caracterizar una **va** definiendo sus cumulantes. Estas magnitudes están relacionadas con los momentos mediante el siguiente vínculo:

$$\ln G(k) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} K_n. \quad (1.27)$$

Es posible relacionar de forma sencilla K_n con M_n . Así, por ejemplo, mediante el cálculo de un “simple” determinante se tiene que

$$K_n = (-1)^{n-1} \det \mathbf{A},$$

donde \mathbf{A} viene dada por la matriz de $n \times n$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} M_1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ M_2 & M_1 & 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ M_3 & M_2 & \binom{2}{1} M_1 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ M_4 & M_3 & \binom{3}{1} M_2 & \binom{3}{2} M_1 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ M_5 & M_4 & \binom{4}{1} M_3 & \binom{4}{2} M_2 & \binom{4}{3} M_1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}^E.$$

Aquí $\binom{p}{q} = p! / ((p-q)! q!)$ son los coeficiente binomiales. También es posible obtener una relación inversa entre M_n y K_n , la cual se deja como ejercicio al lector.

Excursus. Es posible relacionar diagramáticamente M_n con K_n ; ver sección (1.10). El desarrollo en cumulantes es útil cuando estamos interesados en calcular valores medios, y éstos se pueden obtener mediante perturbaciones alrededor de la longitud de correlación de las **va** implicadas en el problema [12].

Ejercicio. Muestre que los cumulantes de una **va** X no son sus momentos centrados. Por ejemplo, los primeros cuatro cumulantes vienen dados por

$$\begin{aligned} K_1 &= M_1 \\ K_2 &= M_2 - M_1^2 = \langle (X - M_1)^2 \rangle \\ K_3 &= M_3 - 3M_1 M_2 + 2M_1^3 = \langle (X - M_1)^3 \rangle \\ K_4 &= M_4 - 3M_2^2 - 4M_1 M_3 + 12M_1^2 M_2 - 6M_1^4 \neq \langle (X - M_1)^4 \rangle \end{aligned}$$

Ejercicio optativo. Estudie un esquema para representar el cálculo de M_n en función de los cumulantes.

Ejercicio. Muestre que los cumulantes de una probabilidad de Poisson son todos iguales.

Ejercicio. Muestre que toda **va** X que tenga variancia nula será determinista (o sea, singular o deltiforme).

Excursus. Existe un resultado muy interesante que dice que si los cumulantes K_n se anulan para todo $n \geq N \in \mathcal{N}$, entonces se anulan para todo $n > 2$ y la **va** es gaussiana [J. Marcinkiewicz, Mathematisches Zeitschrift **44**, 612, (1939)].

1.6 Teorema central del límite

Se trata de caracterizar la distribución de probabilidad de una suma *infinita* de variables aleatorias igualmente distribuidas. Sea, por ejemplo, la siguiente suma

$$X = X_1 + X_2 + \cdots + X_N, \quad (1.28)$$

donde se supone que cada una de las **va** X_i tiene primer y segundo momento bien definido

$$\langle X_i \rangle \equiv M_1^{(i)} < \infty, \quad \langle X_i^2 \rangle \equiv M_2^{(i)} < \infty.$$

Aquí se ha usado la misma notación que en los apartados anteriores, el supraíndice (i) indica la i -ésima **va**. Si las **va** X_i son estadísticamente independientes entre sí,¹⁹ de la suma (1.28) se deduce que

$$\sigma^2 \equiv \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_N^2, \quad (1.29)$$

donde $\sigma_i^2 \equiv K_2^{(i)}$ es el segundo cumulante de la **va** X_i .

El teorema central del límite afirma que cuando $N \rightarrow \infty$

$$P_X(x) \rightarrow \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[-(x - M)^2 / 2\sigma^2 \right], \quad (1.30)$$

aquí $M \equiv \langle X \rangle = M_1^{(1)} + M_1^{(2)} + \cdots + M_1^{(N)}$. Para demostrar este teorema tomemos (sin pérdida de generalidad) $M_1^{(i)} = 0$ para toda **va** X_i . Definiendo la nueva **va** Z en la forma

$$Z = \frac{X_1 + X_2 + \cdots + X_N}{\sigma}, \quad (1.31)$$

usando la independencia estadística y el hecho de que cada una de las **va** X_i está igualmente distribuida, se tiene que

$$\sigma^2 = N\sigma_i^2. \quad (1.32)$$

Entonces, la función característica de la **va** Z viene dada por la expresión

$$\begin{aligned} G_Z(k) &= \langle \exp(ikZ) \rangle = \langle \exp(ik(X_1 + X_2 + \cdots + X_N)/\sigma) \rangle \\ &= \left(\left\langle \exp\left(ik\frac{X_i}{\sqrt{N}\sigma_i}\right) \right\rangle \right)^N \equiv \left(G_{X_i}\left(\frac{k}{\sqrt{N}\sigma_i}\right) \right)^N. \end{aligned} \quad (1.33)$$

En el límite de $N \rightarrow \infty$ podemos desarrollar la función $\exp\left(ik\frac{X_i}{\sqrt{N}\sigma_i}\right)$, que está bajo el signo de **vm**, y quedarnos con el término dominante:

$$G_Z(k) = \left(1 + \left(i\frac{k}{\sqrt{N}\sigma_i} \right)^2 M_2^{(i)}/2 + \mathcal{O}(N^{-3/2}) \right)^N \simeq \left(1 - \frac{k^2}{2N} \right)^N. \quad (1.34)$$

¹⁹Ver sección (1.2.3).

En esta última expresión hemos usado nuevamente el hecho de que $\sigma_i^2 \equiv M_2^{(i)}$; entonces, utilizando la conocida fórmula asintótica $\lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{1}{N}\right)^N = e^{-1}$, se tiene que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} G_Z(k) \rightarrow \exp\left(-\frac{k^2}{2}\right), \quad (1.35)$$

con lo cual el teorema queda demostrado.

Excursus. (Ley de la atracción gaussiana.) Existe una versión más refinada del teorema anterior, que permite afirmar que la restricción $\langle X_i^2 \rangle \equiv M_2^{(i)} < \infty$ es sólo una condición suficiente [6]. De esta manera, en el contexto del teorema central del límite, se puede probar la existencia de una familia más amplia de distribuciones que está dentro de la *base de atracción* gaussiana. Por ejemplo, si asintóticamente $P(X_i) \sim |X_i|^{-3}$ para $X_i \rightarrow \infty$ se obtiene $\langle X_i^2 \rangle = \infty$; sin embargo, $P(X_i)$ cumple la versión generalizada del teorema central del límite; así como también otras distribuciones que decaigan más rápido.

Ejercicio. A partir de la función característica (1.35) obtenga la distribución de probabilidad (1.30).

Ejercicio guiado. (Aproximación gaussiana.) Considere el teorema central del límite para obtener una aproximación a la distribución de probabilidad de la suma de *varias* **va** X_i igualmente distribuidas, con probabilidad uniforme en el intervalo $[0, T]$. En el caso de usar *solamente* dos **va** represente gráficamente y compare la aproximación $P_{\text{Gauss}}(X)$ a partir de (1.30) con el resultado exacto, que se obtiene de la transformación $X = X_1 + X_2$. Dado que $P(X_i) = 1/T$ se deduce inmediatamente

$$\langle X_i \rangle = \frac{T}{2}; \quad \langle X_i^2 \rangle = \frac{T^2}{3},$$

entonces $M = \langle X \rangle = T$ y $\sigma^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 = T^2/6$. Introduciendo estas magnitudes en (1.30) se tiene que

$$P_{\text{Gauss}}(X) = \sqrt{\frac{3}{\pi T^2}} \exp\left(-\frac{3(X-T)^2}{T^2}\right).$$

Por otro lado, la expresión exacta para $P(X)$ se puede obtener a partir de su función característica:

$$G_X(k) = \langle \exp ik(X_1 + X_2) \rangle = \frac{-(e^{ikT} - 1)^2}{k^2 T^2}.$$

La inversión de Fourier de $G_X(k)$ permite obtener la distribución $P(X)$; sin embargo, este cálculo no es trivial, razón por la cual damos aquí su resultado:

$$\begin{aligned} P(X) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(e^{ikT} - 1)^2}{-k^2 T^2} \exp(-ikX) dk \\ &= \frac{X}{T^2} \Theta(X) \Theta(T - X) + \frac{2T - X}{T^2} \Theta(X - T) \Theta(2T - X), \end{aligned}$$

donde $\Theta(X)$ es la función escalón. Alternativamente, y como se verá próximamente en la sección (1.13.1), se puede obtener $P(X)$ de forma muy sencilla usando la ley de transformación para la suma de variables aleatorias.

1.7 Transformación de variables aleatorias

Veamos cómo se transforma la densidad de probabilidad $P_X(x)$, de la **va** X , bajo una ley dada: $Y = g(X)$. La función $g(X)$ se supone conocida y su inversa, en general, podría no ser única.

Si la ley de transformación es monótona ($x = h(y)$, $h = g^{-1}$), la ley de transformación para la densidad de probabilidad es sencilla y viene dada por el Jacobiano de la transformación:

$$P_Y(y) = P_X(h(y)) \mid dx/dy \mid. \quad (1.36)$$

En el caso general procedemos de la siguiente forma: primero notamos de (1.12) que podemos escribir

$$P_Y(y) = \langle \delta(Y - y) \rangle = \langle \delta(g(X) - y) \rangle. \quad (1.37)$$

Luego, aplicando la ecuación (1.14) obtenemos

$$P_Y(y) = \int \delta(g(X) - y) P_X(x) dx, \quad (1.38)$$

o, simplificando la notación redundante,

$$P(y) = \int \delta(g(x) - y) P(x) dx. \quad (1.39)$$

Finalmente, usando las propiedades de la delta de Dirac²⁰ podemos efectuar la integración en (1.39). Entonces si $x = h_j(y)$, donde h_j es una de las transformaciones inversas, de la expresión (1.39) se obtiene

$$P(y) = \sum_{j=1}^r P(h_j(y)) \mid dx/dy \mid_{x=h_j(y)}, \quad (1.40)$$

que es la generalización de la ecuación (1.36) para el caso de tener r funciones inversas $h_j(y)$.

Ejemplo. Sea $P_V(v)$ la distribución de probabilidad de Boltzmann para la velocidad de una partícula libre. Calculemos la distribución de probabilidad en energía $P(E)$. Puesto que $E = \frac{1}{2}mv^2 \equiv g(v)$, se observa que tenemos dos raíces

$$v_{1,2}(E) = g_{1,2}^{-1}(E) = \pm \sqrt{2E/m},$$

entonces $\mid g'(v) \mid_{v=v_j} = \mid mv_j \mid = +\sqrt{2mE}$. Por otro lado, dado que

$$P_V(v) = \sqrt{m/2\pi k_B T} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right),$$

²⁰Para aquellos lectores que no estén familiarizados con la δ de Dirac resumimos aquí una de sus propiedades fundamentales:

$$\delta(g(x) - y) = \sum_n \delta(x - x_n) \frac{1}{\mid g'(x) \mid_{x=x_n}},$$

donde $x_n = g_n^{-1}(y)$ es la n -ésima raíz (simple) de la ecuación: $g(x) = y$.

y usando $P(E) = \sum_{j=1,2} P_V(g_j^{-1}(E)) |g'(v)|_{v_j}^{-1}$ se obtiene finalmente la siguiente expresión:

$$P(E) = 2\sqrt{m/2\pi k_B T} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) \frac{1}{\sqrt{2mE}} = \frac{1}{\sqrt{\pi E k_B T}} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right),$$

donde $\mathcal{D}_E = [0, \infty]$.

Ejemplo. Sea la transformación de coordenada $t_e = (A\mathfrak{t})^{-2/3}$ entre el tiempo t_e y la **va** gaussiana \mathfrak{t} de media nula y segundo momento $1/3$. Calculemos la distribución de probabilidad del tiempo t_e , donde $\mathcal{D}_{t_e} = [0, \infty]$. En este caso la transformación inversa no es unívoca:

$$h_j(t_e) = \frac{\pm 1}{A\sqrt{t_e^3}}.$$

Entonces, de (1.40) se observa que

$$P(t_e) = \sum_{j=1}^2 P_{\mathfrak{t}}(h_j(t_e)) \left| \frac{-3}{2A} t_e^{-5/2} \right|,$$

y dado que la distribución de la **va** \mathfrak{t} es

$$P_{\mathfrak{t}}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{1/3}}} \exp\left(\frac{-\omega^2}{2/3}\right),$$

se obtiene finalmente que

$$P(t_e) = \frac{3^{3/2}}{t_e^{5/2} A \sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-3}{2} \left(\frac{1}{A t_e^{3/2}}\right)^2\right) \quad \text{con } A > 0.$$

Excursus. Note del ejemplo anterior que, asintóticamente, $P(t_e \gg A^{-2/3}) \sim t_e^{-5/2}$. Este tipo de distribución de probabilidad con una ley de potencia suele llamarse de *cola larga* ($\mathcal{O}(t_e^{-5/2})$), y aparece en el estudio de inestabilidades inducidas por ruido (en el capítulo 3 se define el concepto de ruido o proceso estocástico); es decir, en el análisis del tiempo de escape de un cierto “dominio”. Es factible relacionar esta **va** t_e con el “instante” aleatorio en que se produce el primer pasaje por un determinado lugar [13]; ver sección (6.6).

1.8 Correlaciones entre variables aleatorias

Supongamos ahora que tenemos un conjunto de **va** $(X_1, X_2, \dots, X_n) \equiv \{X_j\}$. El conjunto $\{X_j\}$ estará completamente caracterizado si conocemos la densidad de probabilidad conjunta n dimensional $P_n(\{X_j\})$, es decir:²¹

$$P_{X_1, X_2, \dots, X_n}(x_1; x_2; \dots; x_n) = \langle \delta(X_1 - x_1) \delta(X_2 - x_2) \dots \delta(X_n - x_n) \rangle. \quad (1.41)$$

El **vm** de una función del conjunto $\{X_j\}$ se calculará de la manera habitual (similar al caso 1 dimensional) utilizando la densidad de probabilidad conjunta n dimensional $P_n(\{X_j\})$.

²¹En general, cuando se trate de muchas variables usaremos la notación abreviada

$P_{X_1, X_2, \dots, X_n}(x_1; x_2; \dots; x_n) = P_n(X_1; X_2; \dots; X_n) = P_n(\{X_j\})$

En particular, la correlación entre dos **va** se define como

$$\langle\langle X_1 X_2 \rangle\rangle = \langle X_1 X_2 \rangle - \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle,$$

o sea, el segundo cumulante entre las dos variables.

1.8.1 Independencia estadística

Si $\{X_j\}$ es un conjunto de n **va** estadísticamente independientes (**ei**) entre sí, entonces $P_n(\{X_j\})$ se reduce a un producto de n densidades de probabilidad. De aquí se observa, inmediatamente, que el segundo cumulante se anula idénticamente, pues

$$\langle X_1 X_2 \rangle = \int \int X_1 X_2 P_2(X_1; X_2) dX_1 dX_2, \quad (1.42)$$

y si X_1, X_2 son **vai**,

$$\begin{aligned} \langle X_1 X_2 \rangle &= \int X_1 P_1(X_1) dX_1 \int X_2 P_1(X_2) dX_2 \\ &= \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle. \end{aligned} \quad (1.43)$$

Ejercicio. Sea X una **va** uniformemente distribuida en el intervalo $[0, L]$; considere la transformación monoparamétrica de coordenada

$$Y_a = \ln(X/a).$$

Caracterice completamente la **va** Y_a . Calcule la Prob. $[Y_a \in (0, 1)]$. Muestre que el **vm** $\langle Y_1 Y_2 \rangle$ es

$$\langle Y_1 Y_2 \rangle = 2 + \ln(L/2) \ln(L) - \ln(L/2) - \ln(L).$$

Generalice este resultado para el cálculo de la correlación $\langle\langle Y_1 Y_{1+\alpha} \rangle\rangle$.

Ejercicio guiado. (**Acotando la función de correlación.**) Sean \mathfrak{l} y Θ dos **va** con distribución de probabilidad conjunta $P(\mathfrak{l}; \Theta)$. Mostremos que se satisface la siguiente desigualdad

$$\left| \int \int (\mathfrak{l} - \langle \mathfrak{l} \rangle) (\Theta - \langle \Theta \rangle) P(\mathfrak{l}; \Theta) d\mathfrak{l} d\Theta \right|^2 \leq \langle\langle \mathfrak{l}^2 \rangle\rangle \langle\langle \Theta^2 \rangle\rangle.$$

También podemos escribir esta desigualdad en una forma más conveniente

$$\frac{|\langle\langle \Theta \mathfrak{l} \rangle\rangle|}{\sqrt{\langle\langle \Theta^2 \rangle\rangle \langle\langle \mathfrak{l}^2 \rangle\rangle}} \leq 1.$$

Para demostrar esta última relación nos basamos en que $\left\langle [a(\mathfrak{l} - \langle \mathfrak{l} \rangle) + (\Theta - \langle \Theta \rangle)]^2 \right\rangle \geq 0$ para todo valor de $a \in \mathcal{R}_e$. Si desarrollamos el cuadrado de cada uno de los términos se obtiene fácilmente

$$\begin{aligned} a^2 \langle\langle \mathfrak{l}^2 \rangle\rangle + 2a \langle\langle \mathfrak{l} - \langle \mathfrak{l} \rangle \rangle (\Theta - \langle \Theta \rangle) \rangle + \langle\langle \Theta - \langle \Theta \rangle \rangle^2 \rangle &= \\ a^2 \langle\langle \mathfrak{l}^2 \rangle\rangle + 2a \langle\langle \Theta \mathfrak{l} \rangle\rangle + \langle\langle \Theta^2 \rangle\rangle &\geq 0. \end{aligned}$$

Por otro lado, ésto es cierto $\forall a$, es decir: el discriminante de esta ecuación cuadrática tiene que ser negativo

$$\langle\langle \Theta \mathfrak{l} \rangle\rangle^2 - \langle\langle \mathfrak{l}^2 \rangle\rangle \langle\langle \Theta^2 \rangle\rangle < 0.$$

De donde se deduce lo que se quería demostrar. Note que la igualdad se da solamente cuando $\langle \langle \Theta | \rangle \rangle = \langle \langle 1^2 \rangle \rangle = \langle \langle \Theta^2 \rangle \rangle = 0$.

Ejercicio. Sean 1 y Θ dos **va** con distribución de probabilidad conjunta $P(1; \Theta)$. Muestre que

$$\langle \langle 1 \rangle \rangle^2 \leq \langle \langle \Theta^2 \rangle \rangle \langle \langle 1^2 \rangle \rangle.$$

Habitualmente a esta desigualdad se le llama *Inecuación del Coseno*, y se demuestra de forma análoga a la del ejercicio anterior. Ayuda: use la positividad de $\langle \langle (a1 - \Theta)^2 \rangle \rangle$ para todo valor de $a \in \mathcal{R}_e$.

1.9 Desarrollo en fluctuaciones

Existen circunstancias en las cuales es conveniente introducir alguna aproximación para evaluar el **vm** de una función de variable aleatoria. Por ejemplo, sea X una **va** caracterizada por una distribución de probabilidad $P_X(x)$. Supongamos que se desea conocer $\langle f(X) \rangle$, donde $f(X)$ es una función no lineal. Si las fluctuaciones de la **va** X , con respecto a su **vm**, son pequeñas, podemos considerar que la magnitud de los momentos centrados de la **va** X es pequeña, entonces un desarrollo en serie de Taylor del **vm** de la función $f(X)$ es de utilidad:

$$\langle f(X) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\frac{d^n f}{dX^n} \right]_{X=\langle X \rangle} \langle (X - \langle X \rangle)^n \rangle. \quad (1.44)$$

Ejemplo. Aquellos casos en los cuales (1.44) se corta en un determinado valor n^* son particularmente útiles. Sea, por ejemplo, $f(X) = X^3$. A partir de (1.44) es fácil observar que se obtiene el siguiente polinomio

$$\langle X^3 \rangle = \langle X \rangle^3 + 3 \langle X \rangle \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle + \langle (X - \langle X \rangle)^3 \rangle. \quad (1.45)$$

Si $\langle X \rangle = 0$, (1.45) es una identidad. Es de hacer notar que (1.45) es válida cualquiera que sea la distribución $P_X(x)$.

Ejercicio. Considere en (1.45) las fluctuaciones de hasta el segundo orden y muestre que

$$\langle X^3 \rangle \simeq 3 \langle X \rangle \langle X^2 \rangle - 2 \langle X \rangle^3 + \mathcal{O} \left(\langle (X - \langle X \rangle)^3 \rangle \right). \quad (1.46)$$

De este resultado se deduce que es posible escribir la siguiente aproximación *operacional* para la **va** X^3

$$X^3 \simeq \langle X \rangle^3 + 3X \langle X^2 \rangle - 3 \langle X \rangle^3 + \mathcal{O} \left(\langle (X - \langle X \rangle)^3 \rangle \right). \quad (1.47)$$

Si $\langle X \rangle = 0$, obtenemos la aproximación $X^3 \simeq 3X \langle X^2 \rangle$, a la cual se la suele llamar aproximación gaussiana.

Ejercicio. Considere el ejercicio anterior, pero ahora con $\langle X \rangle \neq 0$. Usando la aproximación operacional (1.47) muestre que el tercero y cuarto cumulantes son idénticamente cero; de ahí que a la aproximación (1.47) se le llame aproximación gaussiana.

Ejercicio optativo. Estudie los cumulantes de mayor orden considerando la aproximación operacional (1.47).

1.10 Función característica multidimensional

La función característica de una probabilidad multidimensional se define de manera análoga a lo presentado en (1.15). Sea $\{X_l\}$ un conjunto de n **va**. Entonces

$$G_n(\{k_l\}) = \langle \exp(ik_1 X_1 + ik_2 X_2 + \cdots + ik_n X_n) \rangle, \quad (1.48)$$

y su desarrollo en serie de Taylor, en n -dimensiones, da la expresión para los momentos

$$G_n(\{k_l\}) = \sum_0^\infty \frac{(ik_1)^{m_1} (ik_2)^{m_2} \cdots (ik_n)^{m_n}}{m_1! m_2! \cdots m_n!} \langle X_1^{m_1} \cdots X_n^{m_n} \rangle. \quad (1.49)$$

Ejercicio. Muestre que el desarrollo en cumulantes viene dado por

$$\ln[G_n(\{k_l\})] = \sum_0^\infty \frac{(ik_1)^{m_1} (ik_2)^{m_2} \cdots (ik_n)^{m_n}}{m_1! m_2! \cdots m_n!} \langle\langle X_1^{m_1} \cdots X_n^{m_n} \rangle\rangle. \quad (1.50)$$

Note que el doble paréntesis angular define el cumulante de orden $m_1 \cdots m_n$ entre n -variables aleatorias. La suma primada indica la ausencia del término donde todos los m_l son nulos. Entonces, de (1.50) se deduce que

$$\langle\langle X_1^{m_1} \cdots X_n^{m_n} \rangle\rangle = \left(\frac{\partial}{\partial ik_1} \right)^{n_1} \left(\frac{\partial}{\partial ik_2} \right)^{n_2} \cdots \left(\frac{\partial}{\partial ik_n} \right)^{n_n} \ln[G_n(\{k_l\})] \Big|_{\{k_l\}=0}. \quad (1.51)$$

Ejemplo. Mostremos que si hay al menos una **va** X_j estadísticamente independiente de las restantes $n-1$, entonces todos los cumulantes

$$\langle\langle X_1^{m_1} \cdots, X_j^{m_j}, \cdots, X_n^{m_n} \rangle\rangle$$

se anulan idénticamente para $m_j \neq 0$. Si X_j es la **vai** de las restantes $\{X_l\}$, entonces

$$P_n(\{X_l\}) \equiv P_n(X_1; X_2; \cdots; X_n) = P_1(X_j) P_{n-1}(X_1; \cdots; X_{j-1}; X_{j+1}; \cdots; X_n), \quad (1.52)$$

de lo cual se deduce que

$$G_n(\{k_l\}) \equiv G_n(k_1, k_2, \cdots, k_n) = G_1(k_j) G_{n-1}(k_1, \cdots, k_{j-1}, k_{j+1}, \cdots, k_n). \quad (1.53)$$

Luego, en general,

$$\begin{aligned} & \langle\langle X_1^{m_1}, \cdots, X_j^{m_j}, \cdots, X_n^{m_n} \rangle\rangle = \\ & = \left(\frac{\partial}{\partial ik_1} \right)^{m_1} \cdots \left(\frac{\partial}{\partial ik_j} \right)^{m_j} \cdots \left(\frac{\partial}{\partial ik_n} \right)^{m_n} [\ln[G_1(k_j)] + \ln[G_{n-1}(\{k_l\})]] \Big|_{\{k_l\}=0} = 0. \end{aligned} \quad (1.54)$$

1.10.1 Desarrollos en diagramas (varias variables)

Sabemos que el segundo cumulante de una **va** se relaciona con sus momentos inferiores de la siguiente manera:

$$K_2 = M_2 - M_1^2.$$

$$(\bullet \equiv \bullet) = (\bullet - \bullet) - (\odot \quad \odot) \quad (a)$$

$$\begin{aligned} (\text{triangle with double lines}) &= (\text{triangle with single lines}) - (\text{triangle with double lines and isolated vertices}) \\ &\quad - (\text{triangle with double lines and isolated vertices}) - (\text{triangle with double lines and isolated vertices}) \end{aligned} \quad (b)$$

Figura 1.2: Diagramas representativos de los cumulantes de segundo (a) y tercer orden (b).

Entonces, para dos **va** tenemos la siguiente generalización:

$$\langle\langle X_1 X_2 \rangle\rangle = \langle X_1 X_2 \rangle - \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle.$$

Esta relación se puede representar diagramáticamente de forma sencilla, ver figura 1.2.(a). Para el caso del tercer cumulante se tiene

$$\begin{aligned} \langle\langle X_1 X_2 X_3 \rangle\rangle &= \langle X_1 X_2 X_3 \rangle - \{\langle\langle X_1 X_2 \rangle\rangle \langle X_3 \rangle + \langle\langle X_1 X_3 \rangle\rangle \langle X_2 \rangle + \\ &\quad + \langle\langle X_2 X_3 \rangle\rangle \langle X_1 \rangle\} - \{\langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle \langle X_3 \rangle\}. \end{aligned}$$

De la misma manera se puede confeccionar un diagrama para este cumulante.

Reglas de construcción

En general tenemos las siguientes reglas para la construcción de todos los diagramas [14]:

1. Por cada variable aleatoria X_i se introduce un vértice \bullet en el gráfico.
2. Cada ligadura doble indica un cumulante del orden del número de vértices involucrados.
3. Cada ligadura simple indica un momento del orden del número de vértices involucrados.
4. Cada vértice aislado (encerrado) indica el primer momento del vértice.
5. El cumulante de orden n se construye restando del momento de orden n todas las combinaciones (gráficos) posibles con cumulantes de órdenes menores hasta agotar todas las posibilidades.

Ejercicio. Obtenga los diagramas para representar el cálculo de otros cumulantes de orden superior en función de los cumulantes y momentos inferiores.

Ejercicio guiado. (Correlación entre variables aleatorias.) Sea X una **va** uniformemente distribuida en el intervalo $[0, 2\pi]$ y sea $Y_t(X)$ la transformación de coordenada

$$Y_t(X) = \text{sen}[t + X].$$

Entonces Y_t define una familia monoparamétrica de **va** (por supuesto, no uniformemente distribuidas en $[0, 2\pi]$). Es fácil notar que los momentos impares $\langle Y_1 Y_2 \cdots Y_{2m+1} \rangle$ se anulan idénticamente y que, por otro lado, los momentos pares son invariantes ante la traslación continua $t \rightarrow t + \tau$ para todo τ . Para la correlación de dos “puntos” obtenemos:

$$\langle Y_{t_1} Y_{t_2} \rangle \equiv \langle Y_{t_1}(X) Y_{t_2}(X) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \text{sen}[t_1 + X] \text{sen}[t_2 + X] dX = \frac{1}{2} \cos(t_2 - t_1),$$

y para el momento de cuatro orden:

$$\begin{aligned} \langle Y_{t_1} Y_{t_2} Y_{t_3} Y_{t_4} \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \text{sen}[t_1 + X] \text{sen}[t_2 + X] \text{sen}[t_3 + X] \text{sen}[t_4 + X] dX = \\ &= \frac{1}{8} (\cos(t_1 + t_2 - t_3 - t_4) + \cos(t_1 + t_3 - t_2 - t_4) + \cos(t_1 + t_4 - t_2 - t_3)). \end{aligned}$$

Es fácil obtener de forma análoga una expresión general para el momento $\langle Y_1 Y_2 \cdots Y_{2m} \rangle$ y sus respectivos cumulantes. El hecho de que las funciones de correlación sólo dependan de las diferencias (simetrizadas) de los parámetros t_j será de fundamental importancia en la definición de procesos estocásticos estacionarios. Note también que estas correlaciones no decaen asintóticamente a cero para grandes separaciones de sus “puntos”, $|t_j - t_m| \rightarrow \infty$; este hecho es de importancia en la definición de procesos estocásticos no ergódicos [ver capítulo 3]. Por último, note que una función de correlación no tiene por qué ser siempre positiva. Interprete el significado de una correlación negativa.

1.11 Cumulantes de Terwiel*

Otra clase de cumulantes sumamente importante y de gran utilidad en teoría de perturbaciones de ecuaciones diferenciales son los cumulantes de Terwiel [15]. Para definirlos es necesario pensar en el **vm** de una función como el resultado de aplicar sobre ella un operador de proyección²² $\mathcal{P} = \mathcal{P}^2$. Entonces, si X es una **va** caracterizada por la distribución de probabilidad $P_X(x)$ sobre \mathcal{D} , definimos los siguiente operadores de proyección \mathcal{P} y $\mathcal{Q} \equiv \mathbf{1} - \mathcal{P}$:

$$\mathcal{P}f(X) \equiv \langle f(X) \rangle, \quad (1.55)$$

y

$$\mathcal{Q}f(X) = [\mathbf{1} - \mathcal{P}]f(X) \equiv f(X) - \langle f(X) \rangle, \quad (1.56)$$

donde, por supuesto, $\langle f(X) \rangle = \int_{\mathcal{D}} f(x) P_X(x) dx$, y es sencillo comprobar que $\mathcal{P}\mathcal{Q}f(X) = \mathcal{Q}\mathcal{P}f(X) = 0$.

²²Sea el espacio vectorial $\mathbf{V} = \mathbf{S} \oplus \mathbf{W}$, todo $z \in \mathbf{V}$ puede expresarse unívocamente como $z = x + y$ donde $x \in \mathbf{S}$ y $y \in \mathbf{W}$. El operador proyección $\mathcal{P} : \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V}$ definido por $\mathcal{P}z = x$ se llama proyector de \mathbf{V} sobre \mathbf{S} paralelo a \mathbf{W} . Entonces, \mathcal{P} es proyector si y sólo si $\mathcal{P} = \mathcal{P}^2$; además en una representación matricial (espacio vectorial finito) es fácil observar que este tipo de matrices \mathcal{P} sólo pueden tener dos autovalores: $\lambda_0 = 0$ y $\lambda_1 = 1$ (posiblemente múltiples).

Si $\{X_j\}$ es un conjunto de n **va** caracterizadas por la distribución conjunta $P_n(\{X_j\})$, el cumulante de Terwiel de tales variables se define según:

$$\langle X_1 \cdots X_n \rangle_T = \mathcal{P} X_1 (\mathbf{1} - \mathcal{P}) X_2 (\mathbf{1} - \mathcal{P}) X_3 \cdots (\mathbf{1} - \mathcal{P}) X_n. \quad (1.57)$$

Note que este cumulante preserva el orden de las n **va** X_j , $\{j = 1, \dots, n\}$. En general, puede ocurrir que estas variables representen operadores aleatorios, motivo por lo cual el orden de los mismos es de suma importancia, pues ellos podrían no conmutar. Es interesante establecer una relación entre los cumulantes de Terwiel y los momentos habituales. Para ello presentamos la siguiente relación

$$\langle X_1 \cdots X_n \rangle_T = \sum_{j=0}^{n-1} (-1)^j \sum_{1 \leq p_1 < p_2 < \dots < p_j \leq n} \langle X_1 \cdots X_{p_1} \rangle \langle X_{p_1+1} \cdots X_{p_2} \rangle \cdots \langle X_{p_{j-1}+1} \cdots X_n \rangle. \quad (1.58)$$

Como ejemplo, escribamos aquí algunos cumulantes de Terwiel no triviales

$$\begin{aligned} \langle X_1 X_2 X_3 \rangle_T &= \langle X_1 X_2 X_3 \rangle - \langle X_1 \rangle \langle X_2 X_3 \rangle - \langle X_1 X_2 \rangle \langle X_3 \rangle + \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle \langle X_3 \rangle \\ \langle X_1 X_2 X_3 X_4 \rangle_T &= \langle X_1 X_2 X_3 X_4 \rangle - \langle X_1 \rangle \langle X_2 X_3 X_4 \rangle - \langle X_1 X_2 \rangle \langle X_3 X_4 \rangle - \langle X_1 X_2 X_3 \rangle \langle X_4 \rangle + \\ &\quad + \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle \langle X_3 X_4 \rangle + \langle X_1 X_2 \rangle \langle X_3 \rangle \langle X_4 \rangle + \langle X_1 \rangle \langle X_2 X_3 \rangle \langle X_4 \rangle - \langle X_1 \rangle \langle X_2 \rangle \langle X_3 \rangle \langle X_4 \rangle. \end{aligned} \quad (1.59)$$

Ejercicio. Muestre, explícitamente, la diferencia entre un cumulante “habitual” de orden tres y el cumulante de Terwiel $\langle X_1 X_2 X_3 \rangle_T$.

Note que si todas las **va** X_j son estadísticamente independientes entre sí, entonces es fácil observar que el cumulante de Terwiel se anula idénticamente. En los siguientes ejercicios se establecen otras propiedades interesantes.

Ejercicio. Muestre que los cumulantes de Terwiel tienen la propiedad de “partición”. O sea, si el conjunto de n **va** está ordenado de forma tal que las s primeras **va** forman un conjunto de **va** independientes de las restantes $n - s$, el cumulante de Terwiel se anula idénticamente. (Ayuda: use el hecho que $\mathcal{P} = \mathcal{P}^2$.)

$$\langle X_1 \cdots X_s X_{s+1} \cdots X_n \rangle_T = 0. \quad (1.60)$$

Ejercicio. Muestre que si los primeros momentos son nulos, entonces la expresión para los cumulantes de Terwiel $\langle X_1 \cdots X_j \cdots X_n \rangle_T$ se simplifica notablemente.

Excursus. Considere la siguiente sumatoria de cumulantes de Terwiel de cuarto orden

$$\sum_{j,k,l,m=-\infty}^{\infty} \langle X_j X_k X_l X_m \rangle_T,$$

donde $\{j, k, l, m\} \in \mathcal{Z}$, y analice el caso cuando todos los primeros momentos son nulos. Considere la situación cuando la sumatoria excluye índices contiguos iguales. Si para cada valor de $\{j, k, l, m\}$ las **va** son estadísticamente independientes entre sí, estudie la clase de cumulantes de Terwiel

$$\langle X_j X_k X_l X_m \rangle_T,$$

que dará una contribución no nula a la sumatoria mencionada. Trate de dibujar “diagramas” para caracterizar estas contribuciones [16].

1.12 Distribución gaussiana (varias variables)

De la definición (1.50) se deduce que si todos los cumulantes, excepto aquellos donde se cumple

$$m_1 + m_2 + \cdots + m_n \leq 2, \quad (1.61)$$

se anulan idénticamente, estamos en presencia de una distribución gaussiana n dimensional. Entonces, a partir de la definición de función característica se tiene que

$$G_n(\{k_p\}) = \exp \left(\sum_{j=1}^n ia_j k_j + \frac{1}{2} \sum_{j,l=1}^n \sigma_{jl} (ik_j)(ik_l) \right). \quad (1.62)$$

Luego, los primeros momentos se obtienen en la forma

$$\langle X_j \rangle = \left(\frac{\partial}{\partial ik_j} \right) [G_n(\{k_p\})] \Big|_{\{k_p\}=0} = a_j \quad (1.63)$$

$$\langle X_j X_l \rangle = \left(\frac{\partial}{\partial ik_j} \right) \left(\frac{\partial}{\partial ik_l} \right) [G_n(\{k_p\})] \Big|_{\{k_p\}=0} = \sigma_{jl} + a_j a_l, \quad (1.64)$$

con lo cual la matriz de variancia (covariancia si $j \neq l$) queda caracterizada por

$$\langle (X_j - \langle X_j \rangle)(X_l - \langle X_l \rangle) \rangle = \sigma_{jl}. \quad (1.65)$$

La función de distribución de probabilidad viene dada por la transformada inversa de Fourier de $G_n(\{k_p\})$, es decir:

$$\begin{aligned} P_n(\{X_p\}) &\equiv P_n(X_1; \cdots; X_n) \\ &= (2\pi)^{-n} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(\sum_{j=1}^n ia_j k_j + \frac{1}{2} \sum_{j,l=1}^n \sigma_{jl} (ik_j)(ik_l) \right) \\ &\quad \times \exp \left(-i \sum_{j=1}^n X_j k_j \right) \prod_{j=1}^n dk_j. \end{aligned} \quad (1.66)$$

Puesto que σ_{lj} es una matriz de covariancia (*definida positiva*²³) y por lo tanto es simétrica, se deduce que

$$\begin{aligned} \sigma_{lj}^{-1} &= \sigma_{jl}^{-1} \quad (\text{existe inversa}) \\ \sigma_{lj}^{1/2} &= \sigma_{jl}^{1/2} \quad (\text{existe } \sqrt{\sigma}) \\ \sigma_{lj}^{-1/2} &= \sigma_{jl}^{-1/2} \quad (\text{existe } (\sqrt{\sigma})^{-1}). \end{aligned} \quad (1.67)$$

²³En general, una matriz $a \in \mathcal{C}$ es *definida semipositiva* si la forma cuadrática asociada es *definida semipositiva*. Es decir, si los elementos a_{jl} cumplen las condiciones $a_{ll} \geq 0$ y $a_{ll} \cdot a_{jj} - |a_{lj}|^2 \geq 0$, $\forall j, l$. Este hecho asegura que los autovalores de la matriz a serán $\lambda_i \geq 0$. Se dice que una matriz es *definida positiva* si cumple estrictamente la condición mayor que cero. Ver también secciones (4.2.1) y (6.1.1).

Introduciendo el cambio de variable

$$\alpha_j = \sum_{l=1}^n \left[\sigma_{jl}^{1/2} k_l + i \sigma_{jl}^{-1/2} (X_l - a_l) \right] \quad (1.68)$$

en el integrando (1.66), el término de la forma $e^{[\cdots]}$ se puede volver a escribir notando que

$$[\cdots] = \frac{-1}{2} \sum_j \alpha_j \alpha_j - \frac{1}{2} \sum_{j,l} \sigma_{jl}^{-1} (X_j - a_j)(X_l - a_l). \quad (1.69)$$

Es decir, hemos “diagonalizado” la matriz en el nuevo sistema de coordenadas $\{\alpha_p\}$. El Jacobiano de la transformación viene dado por la expresión²⁴

$$\frac{dk_1 dk_2 \cdots dk_n}{d\alpha_1 d\alpha_2 \cdots d\alpha_n} = \left(\frac{d\alpha_1 d\alpha_2 \cdots d\alpha_n}{dk_1 dk_2 \cdots dk_n} \right)^{-1} = \left[\det \left(\sigma^{1/2} \right)_{jl} \right]^{-1}, \quad (1.70)$$

con lo cual la integración se reduce simplemente a

$$\int \cdots \int \exp \left(\frac{-1}{2} \sum_{j=1}^n \alpha_j \alpha_j \right) \prod_{j=1}^n d\alpha_j = \left(\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha^2/2) d\alpha \right)^n = (2\pi)^{n/2}. \quad (1.71)$$

Finalmente, la distribución de probabilidad conjunta queda expresada en la forma:

$$P_n(X_1; \cdots; X_n) = (2\pi)^{-n/2} [\det \sigma_{jl}]^{-1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{j,l} \sigma_{jl}^{-1} (X_j - a_j)(X_l - a_l) \right), \quad (1.72)$$

que es la distribución gaussiana multidimensional buscada.

1.12.1 Distribución gaussiana con momentos impares nulos

Sean n **va** $Y_j = X_j - a_j$, donde X_j son gaussianas de media a_j ; entonces la función característica de las nuevas variables Y_j vendrá dada por²⁵

$$\begin{aligned} G_Y(\{k_p\}) &\equiv \langle \exp(ik_1 Y_1 + \cdots + ik_n Y_n) \rangle \\ &= \langle \exp(ik_1 X_1 + \cdots + ik_n X_n) \exp(-ik_1 a_1 - \cdots - ik_n a_n) \rangle \\ &= \exp(-ik_1 a_1 - \cdots - ik_n a_n) G_X(\{k_p\}) \\ &= \exp \left(\frac{-1}{2} \sum_{j,l} \sigma_{jl} k_j k_l \right), \end{aligned} \quad (1.73)$$

pues $G_X(\{k_p\})$ está dada por (1.62). A partir de lo cual se observa que para $m \in \mathcal{N}$

$$\langle Y_1 Y_2 \cdots Y_{2m+1} \rangle = 0. \quad (1.74)$$

Ejercicio. Muestre que una transformación lineal de coordenadas

$$X'_l = \sum_m \beta_{lm} X_m + B_l,$$

preserva la estructura gaussiana en la distribución de probabilidad.

²⁴En general, usaremos la expresión “diagonalizar” para indicar que hemos reducido la matriz a su forma diagonal.

²⁵Note que aquí queremos enfatizar el tipo de **va**, por ello denotamos $G_Y(\{k_p\})$ para significar $G_n(\{k_p\}) \equiv G_{Y_1, Y_2, \dots, Y_n}(\{k_p\})$.

1.12.2 Teorema de Novikov*

Sean r **va** $(X_1, \dots, X_r) \equiv \{X_p\}$ gaussianas de media nula (su generalización al caso de $a_j \neq 0$ es inmediata), entonces se cumple que²⁶

$$\langle X_l f(\{X_p\}) \rangle = \sum_j \langle X_l X_j \rangle \left\langle \frac{\partial f(\{X_p\})}{\partial X_j} \right\rangle. \quad (1.75)$$

Para probar (1.75) notemos que si la distribución conjunta es gaussiana

$$P_r(X_1; \dots; X_r) = (2\pi)^{-r/2} [\det \sigma_{jl}]^{-1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{j,l} \sigma_{jl}^{-1} X_j X_l \right), \quad (1.76)$$

se cumple que $\langle X_j X_l \rangle = \sigma_{jl}$; entonces de (1.75) tenemos

$$\langle X_l f(\{X_p\}) \rangle = \sum_j \sigma_{lj} \left\langle \frac{\partial f(\{X_p\})}{\partial X_j} \right\rangle, \quad (1.77)$$

y multiplicando (1.77) por σ^{-1} obtenemos:

$$\sum_l \sigma_{ml}^{-1} \langle X_l f(\{X_p\}) \rangle = \sum_l \sum_j \sigma_{ml}^{-1} \sigma_{lj} \left\langle \frac{\partial f(\{X_p\})}{\partial X_j} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial f(\{X_p\})}{\partial X_m} \right\rangle.$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned} \sum_l \sigma_{ml}^{-1} \langle X_l f(\{X_p\}) \rangle = \\ \frac{(\det \sigma)^{-1/2}}{(2\pi)^{r/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \Pi_{n=1}^r dX_n f(\{X_p\}) \sum_l \sigma_{ml}^{-1} X_l \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{j,k} \sigma_{jk}^{-1} X_j X_k \right). \end{aligned}$$

Esta integral se puede escribir en notación matricial en la forma

$$\begin{aligned} \sum_l \sigma_{ml}^{-1} \langle X_l f(\{X_p\}) \rangle = \\ \frac{-(\det \sigma)^{-1/2}}{(2\pi)^{r/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \Pi_{n=1}^r dX_n f(\{X_p\}) \frac{\partial}{\partial X_m} \exp \left(-\frac{1}{2} X \cdot \sigma^{-1} \cdot X \right), \end{aligned}$$

entonces integrando por partes se obtiene finalmente

$$\sum_l \sigma_{ml}^{-1} \langle X_l f(\{X_p\}) \rangle = \left\langle \frac{\partial f(\{X_p\})}{\partial X_m} \right\rangle, \quad (1.78)$$

lo cual completa la prueba.

²⁶En el caso continuo (infinito dimensional) se tiene la generalización:

$$\langle X(r) f[X(\bullet)] \rangle = \int^1 X(r) X(r') \left\langle \frac{\delta f[X(\bullet)]}{\delta X(r')} \right\rangle dr'.$$

En el capítulo 3 se define con detalle el significado del objeto $\frac{\delta f(X(\bullet))}{\delta X(r')}$, el cual se puede considerar como la generalización de una derivada.

Nota. Este teorema permite obtener reglas (diagramas) para la confección de todos los momentos de funciones de r **va** gaussianas.

Ejercicio. Muestre que si $\{X_p\}$ son r **va** gaussianas con media $\langle X_p \rangle \neq 0$, la fórmula de Novikov (1.75) se generaliza de la siguiente manera:

$$\langle X_l f(\{X_p\}) \rangle = \sum_j \langle \langle X_l X_j \rangle \rangle \left\langle \frac{\partial f(\{X_p\})}{\partial X_j} \right\rangle + \langle X_l \rangle \langle f(\{X_p\}) \rangle,$$

donde $\langle \langle X_l X_j \rangle \rangle$ es el segundo cumulante.

Ejercicio. Muestre que si $\{X_p\}$ son r **va** gaussianas de media nula entonces los momentos de orden par se obtienen, fácilmente, de la fórmula:

$$\langle X_1 \cdots X_{2m} \rangle = \sum_{\text{simetrizado}} \langle X_i X_j \rangle \langle X_l X_p \rangle \cdots \langle X_k X_q \rangle \quad \text{con } m \in \mathcal{N}.$$

Por ejemplo: $\langle X_1 X_2 X_3 X_4 \rangle = \langle X_1 X_2 \rangle \langle X_3 X_4 \rangle + \langle X_1 X_3 \rangle \langle X_2 X_4 \rangle + \langle X_1 X_4 \rangle \langle X_2 X_3 \rangle$.

Ejercicio. Sea X una **va** gaussiana de media nula y variancia 1 (distribución normal). Muestre que para $a \gg 1$ el **vm** de $1/(a + X^2)$ se aproxima según

$$\left\langle \frac{1}{a + X^2} \right\rangle \approx \frac{1}{a + 1} + \mathcal{O}(1/a^3),$$

mientras que para el límite $a \rightarrow 0$ el **vm** de $1/(a + X^2)$ no está definido. Ayuda: use el teorema de Novikov en la identidad $1 = \left\langle (a + X^2) \frac{1}{(a + X^2)} \right\rangle$ para mostrar que $\left\langle \frac{1}{X^2} \right\rangle$ no está definido.

1.13 Transformación para densidades en n dimensiones

En el estudio de las fluctuaciones tanto en termodinámica de equilibrio como en sistemas disipativos fuera del equilibrio, el problema matemático se puede formular en términos de un conjunto de variables aleatorias. Cabe entonces preguntarse cómo se modifica la densidad de probabilidad conjunta de n variables $P_n(\{X_j\})$ cuando se aplica una transformación de coordenadas. Supongamos que conocemos las leyes de transformación:

$$\begin{aligned} Y_1 &= g_1(X_1, X_2, \dots, X_n) \\ Y_2 &= g_2(X_1, X_2, \dots, X_n) \\ &\dots \\ Y_n &= g_n(X_1, X_2, \dots, X_n), \end{aligned} \tag{1.79}$$

aquí g_1, \dots, g_n son funciones supuestamente continuas. Suponiendo que el sistema (1.79) es invertible, o sea: $x_1 = h_1(y_1, y_2, \dots, y_n)$, etc. (suponemos que las funciones h_1, \dots, h_n son todas univalueadas), entonces $P_n(\{Y_j\})$ se transforma según

$$P_{Y_1, Y_2, \dots, Y_n}(y_1; y_2; \dots; y_n) = P_{X_1, X_2, \dots, X_n}(h_1; h_2; \dots; h_n) |D_n|, \tag{1.80}$$

donde D_n es el jacobiano de la transformación $X \rightarrow Y$. Vemos, entonces, que (1.80) es la generalización multidimensional de (1.36).

Excursus. Sea $A(\mathbf{r})$ un campo vectorial en R^3 caracterizado por una distribución de probabilidad gaussiana. Sea $B(\mathbf{r}) = \mathbf{Rotor} A(\mathbf{r})$ un campo asociado. ¿Qué se puede decir de la distribución de probabilidad del campo magnético aleatorio $B(\mathbf{r})$? Una colección de resultados interesantes, obtenidos a partir del teorema de transformación de \mathbf{va} , se presenta en D.T. Gillespie, Am. J. Phys. **51**, 520, (1983).

1.13.1 Densidad de probabilidad marginal

Sea el conjunto de dos \mathbf{va} $\{X_1, X_2\}$ caracterizadas por la densidad de probabilidad conjunta $P_2(X_1; X_2)$. Entonces, definimos la *densidad de probabilidad marginal* de la \mathbf{va} X_1 en la siguiente forma:

$$P_1(X_1) = \int_{\mathcal{D}_{X_2}} P_2(X_1; X_2) dX_2. \quad (1.81)$$

Obviamente, (1.81) se puede generalizar a un número arbitrario de \mathbf{va} , donde la integración será $n - 1$ dimensional. En general, una densidad de probabilidad marginal, s dimensional, se define de forma completamente análoga:

$$P_s(X_1; \dots; X_s) = \int_{\mathcal{D}_{X_{s+1}}} \dots \int_{\mathcal{D}_{X_n}} P_n(X_1; \dots; X_s; X_{s+1}; \dots; X_n) dX_{s+1} \dots dX_n.$$

Ejercicio guiado. Sean X_1, X_2 dos \mathbf{va} caracterizadas por la distribución de probabilidad conjunta $P_2(X_1, X_2)$ con dominios \mathcal{D}_{X_1} y \mathcal{D}_{X_2} . Calculemos la distribución de probabilidad de la suma $s = X_1 + X_2$. Tomando

$$\begin{aligned} Y_1 &= g_1(X_1, X_2) = X_1 \\ Y_2 &= g_2(X_1, X_2) = X_1 + X_2, \end{aligned}$$

y su relación inversa:

$$\begin{aligned} X_1 &= h_1(Y_1) = Y_1 \\ X_2 &= h_2(Y_1, Y_2) = Y_2 - Y_1, \end{aligned}$$

implica el siguiente jacobiano

$$|D_2| = \begin{vmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial Y_1} & 0 \\ \frac{\partial h_2}{\partial Y_1} & \frac{\partial h_2}{\partial Y_2} \end{vmatrix} = \left| \frac{\partial h_2}{\partial Y_2} \right|.$$

Luego, de (1.80) se tiene que²⁷

$$P_Y(Y_1; Y_2) = P_X(Y_1; h_2(Y_1, Y_2)) \left| \frac{\partial h_2}{\partial Y_2} \right|.$$

²⁷Note que aquí es conveniente enfatizar la variable aleatoria involucrada, razón por la cual usaremos indistintamente la notación: $P_r(Y_1; \dots; Y_r) = P_Y(Y_1; \dots; Y_r)$

Entonces la densidad de probabilidad (marginal) de la *suma* viene dada (con $Y_2 \equiv s = X_1 + X_2$) por

$$\begin{aligned} P_1(Y_2) &= P(s) = \int_{\mathcal{D}_{Y_1}} P_Y(Y_1; Y_2) dY_1 \\ &= \int_{\mathcal{D}_{Y_1}} P_X(Y_1; Y_2 - Y_1) dY_1 = \int_{\mathcal{D}_{X_1}} P_X(X_1; s - X_1) dX_1. \end{aligned}$$

En general, los límites de integración se deben tomar de acuerdo con la ley de transformación y los dominios \mathcal{D}_{X_1} y \mathcal{D}_{X_2} .

Ejemplo. Considere la situación cuando dos **vaei** tienen distribución uniforme en el intervalo $\mathcal{D}_X = [0, T]$. En este caso la distribución de la suma $s = X_1 + X_2$ viene dada por

$$\begin{aligned} P(s) &= \int_{\mathcal{D}_{X_1}} P_X(X_1; s - X_1) dX_1 \\ &= \frac{1}{T^2} \int_0^T \Theta(X_1) \Theta(T - X_1) \Theta(s - X_1) \Theta(T - s + X_1) dX_1, \end{aligned}$$

donde $\Theta(z)$ es la función escalón introducida en (1.7). De aquí se observa que existen dos situaciones diferentes: si $s < T$, se tiene que

$$P(s) = \frac{1}{T^2} \int_0^s dX_1 = \frac{s}{T^2},$$

mientras que si $s > T$, se deduce que

$$P(s) = \frac{1}{T^2} \int_{s-T}^T dX_1 = \frac{2T - s}{T^2}.$$

Por otro lado, la suma está acotada a $s < 2T$. Muestre que la transformada de Fourier de $P(s)$ viene dada por

$$G_s(k) = \int_0^{2T} e^{iks} P(s) ds = \frac{-(e^{ikT} - 1)^2}{k^2 T^2}$$

y compárela con el ejercicio guiado de la sección (1.6).

Ejercicio. Demuestre que la densidad de probabilidad (marginal) de la diferencia, producto y cociente de las **va** X_1, X_2 , están dadas por

$$\begin{aligned} P_1(X_1 - X_2) &= P(d) = \int_{\mathcal{D}_{X_1}} P_X(X_1; X_1 - d) dX_1 \\ P_1(X_1 \cdot X_2) &= P(p) = \int_{\mathcal{D}_{X_1}} P_X(X_1; p/X_1) \frac{1}{|X_1|} dX_1 \\ P_1(X_2/X_1) &= P(c) = \int_{\mathcal{D}_{X_1}} P_X(X_1; cX_1) |X_1| dX_1. \end{aligned}$$

Ejercicio guiado. Considere el caso en el cual los dominios \mathcal{D}_{X_1} y \mathcal{D}_{X_2} son no negativos semiinfinitos, es decir: $X_i \in [0, \infty]$. Muestre que la distribución de probabilidad de la suma $P(s)$ adopta la forma:

$$P(s) = \int_0^s P_X(Y_1; s - Y_1) dY_1. \quad (1.82)$$

Ayuda: para obtener este resultado, simplemente use la expresión del ejercicio guiado considerando que $P_X(X_1, X_2) = 0$ si $X_1 < 0$ y/o $X_2 < 0$, entonces podrá escribir:

$$P(s) = \int_{\mathcal{D}_{Y_1}} P_X(Y_1; s - Y_1) \Theta(Y_1) \Theta(s - Y_1) dY_1,$$

de donde se deduce (1.82).

Ejercicio. Considere el caso en el cual los dominios \mathcal{D}_{X_1} y \mathcal{D}_{X_2} son no negativos semi-infinitos. Muestre que la distribución de probabilidad de la diferencia $d = X_1 - X_2$ de dos **vai** adopta la forma:

$$P(d) = \int_d^\infty P_{X_1}(Y_1) P_{X_2}(Y_1 - d) dY_1.$$

Ejercicio. Considere dos **vai** con distribuciones de probabilidad (monótonamente decrecientes) de la forma $P(X_i) = \alpha_i \exp(-\alpha_i X_i)$ con dominios \mathcal{D}_{X_1} y \mathcal{D}_{X_2} no negativos semi-infinitos. Pruebe que la distribución de probabilidad de la suma $s = X_1 + X_2$ tiene un máximo, en $s^* \in (0, \infty)$, y viene dada por la expresión:

$$P(s) = \int_0^s P_{X_1}(Y_1) P_{X_2}(s - Y_1) dY_1 = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_2 - \alpha_1} (e^{-\alpha_1 s} - e^{-\alpha_2 s}).$$

1.14 Densidad de probabilidad condicionada

A veces también suele ser necesario trabajar con otra densidad de probabilidad: *la probabilidad condicionada*.²⁸ Supongamos que dividimos el conjunto de n **va** $\{X_j\}$ en dos grupos,

$$\{X_1, \dots, X_s\} \quad \text{y} \quad \{X_{s+1}, \dots, X_n\},$$

y que al segundo grupo lo caracterizamos con valores predeterminados $\{X_{s+1}, \dots, X_n\}$; entonces, en estas condiciones, las restantes **va** estarán caracterizadas por la probabilidad condicionada

$$P(X_1; \dots; X_s \mid X_{s+1}, \dots, X_n).$$

Esta densidad de probabilidad contiene mayor información que la densidad de probabilidad conjunta $P_s(X_1; \dots; X_s)$. La relación entre esta densidad de probabilidad y la densidad de probabilidad conjunta n dimensional viene dada por la regla de Bayes (ver sección 1.2):

$$P(X_1; \dots; X_s \mid X_{s+1}, \dots, X_n) = \frac{P_n(X_1; \dots; X_s; X_{s+1}; \dots; X_n)}{P_{n-s}(X_{s+1}; \dots; X_n)}. \quad (1.83)$$

Note que en estas ecuaciones hemos omitido toda notación redundante. Por otro lado, es fácil reconocer que el denominador del segundo miembro de la ecuación (1.83) no es más que la densidad marginal de las **va** (X_{s+1}, \dots, X_n) .

Ejercicio guiado. Considere la distribución de probabilidad conjunta de dos **va**, con dominio en $[-a, a]$, dada por

$$P_2(X_1; X_2) = \pi^{-1} \delta(X_1^2 + X_2^2 - a^2).$$

²⁸Luego veremos, en el contexto de los procesos estocásticos, que la probabilidad condicionada de dos tiempos es equivalente al propagador de un sistema dinámico; ver capítulo 3.

Esta probabilidad representa una distribución de certeza, es decir “determinista”, para el radio del vector $\vec{X} = (X_1, X_2)$. Calculemos las distribuciones marginal y condicionada. De la definición de probabilidad condicionada se observa que si X_1, X_2 fuesen **vaei**, entonces la probabilidad condicionada $P(X_2 | X_1)$ sería una función independiente de X_1 . Calculemos esta distribución de probabilidad. Primero necesitamos conocer la distribución marginal $P_1(X_1)$:

$$\begin{aligned} P_1(X_1) &= \int_{-a}^a P_2(X_1; X_2) dX_2 = \int_{-a}^a \pi^{-1} \delta(X_1^2 + X_2^2 - a^2) dX_2 = \\ &= \int_{-a}^a \delta(X_2 - \sqrt{a^2 - X_1^2}) \frac{dX_2/\pi}{|2\sqrt{a^2 - X_1^2}|} + \int_{-a}^a \delta(X_2 + \sqrt{a^2 - X_1^2}) \frac{dX_2/\pi}{|-2\sqrt{a^2 - X_1^2}|} = \\ &= \frac{1/\pi}{\sqrt{a^2 - X_1^2}}. \end{aligned}$$

Note que ambos integrandos contribuyen en la misma cantidad (recuerde que $X_2 \in [-a, a]$). Es inmediato comprobar que esta distribución marginal, $P_1(X_1)$, está correctamente normalizada en el intervalo $[-a, a]$. De (1.83) se deduce que la probabilidad condicionada viene dada por

$$P(X_2 | X_1) = \frac{\pi^{-1} \delta(X_1^2 + X_2^2 - a^2)}{P_1(X_1)} = \delta(X_1^2 + X_2^2 - a^2) \sqrt{a^2 - X_1^2},$$

o lo que es equivalente a

$$P(X_2 | X_1) = \frac{1}{2} \left(\delta(X_2 - \sqrt{a^2 - X_1^2}) + \delta(X_2 + \sqrt{a^2 - X_1^2}) \right).$$

A partir de esta expresión se ve trivialmente que X_1, X_2 no son **ei**.

Ejercicio. Sean X_1, X_2 dos **vaei** y uniformemente distribuidas en el intervalo $[0, 1]$. Considere la transformación no lineal:

$$G_1 = \sqrt{-2 \ln(X_1)} \cos(2\pi X_2), \quad G_2 = \sqrt{-2 \ln(X_1)} \sin(2\pi X_2).$$

Demuestre que la distribución conjunta $P_2(G_1; G_2)$ corresponde a una densidad de probabilidad gaussiana de dos **vaei** con media nula y variancia 1.

Ejercicio. Sea b una **va** uniformemente distribuida en el intervalo $[0, 1]$. Considere el número aleatorio complejo $Z = (1 + i)b$. ¿Cuál es la distribución de probabilidad asociada al número complejo $Z = Z_1 + iZ_2$? Calcule los momentos $\langle Z^n \rangle$ usando la distribución de probabilidad conjunta $P_2(Z_1, Z_2)$ y compare los resultados con los que se obtienen a partir del cálculo directo: $\langle Z^n \rangle = (1 + i)^n \langle b^n \rangle$. En general, ¿en qué condiciones es imprescindible el conocimiento de la distribución conjunta $P_2(Z_1, Z_2)$ [17]?

Ejercicio. (Momentos condicionados.) Sean X_1, X_2 dos **va** igualmente distribuidas y caracterizadas por $P(X_1; X_2)$ en un cierto dominio \mathcal{D}_X . Estudie la posibilidad de considerar los momentos condicionados $\langle (X_1 - X_2)^m \rangle$ a que la **va** X_2 tome un valor fijo X' . Es decir, para el primer momento se tiene

$$\langle X_1 - X' \rangle = \int_{\mathcal{D}_X} (X_1 - X') P(X_1 | X') dX_1.$$

Compruebe que todos los momentos condicionados se obtienen, fácilmente, definiendo una función característica condicionada, es decir:

$$G_{X_1}(k, X') = \int_{\mathcal{D}_X} e^{ik(X_1 - X')} P(X_1 | X') dX_1,$$

donde

$$P(X_1 | X') = P(X_1; X') / P(X').$$

Excursus. (Teoría de perturbación aleatoria.) Considere la ecuación diferencial $\frac{d}{dt}F(t) = (H + B)F(t)$, donde H y B son constantes y B tiene carácter aleatorio. Mediante la transformada de Laplace [ver sección (3.17.3)] se puede convertir esta ecuación diferencial en una ecuación algebraica para la incógnita $F(u)$, es decir:

$$uF(u) - F(0) = (H + B)F(u). \quad (1.84)$$

En particular, interesa estudiar esta ecuación cuando la cantidad $F(0)$ no es aleatoria. Si usamos el concepto de proyector [ver sección (1.11)] podemos calcular, en forma muy general, el **vm** de $F(u)$. Primero aplicamos \mathcal{P} a la ecuación (1.84) y obtenemos:²⁹

$$u\mathcal{P}F - F(0) = H\mathcal{P}F + \mathcal{P}BF = H\mathcal{P}F + \mathcal{P}B\mathcal{P}F + \mathcal{P}B\mathcal{Q}F. \quad (1.85)$$

Luego aplicamos \mathcal{Q} a la ecuación (1.84) y obtenemos:

$$u\mathcal{Q}F = H\mathcal{Q}F + \mathcal{Q}BF = H\mathcal{Q}F + \mathcal{Q}B\mathcal{P}F + \mathcal{Q}B\mathcal{Q}F. \quad (1.86)$$

La solución formal de (1.86) es $\mathcal{Q}F = (u - H)^{-1} [\mathcal{Q}B\mathcal{P}F + \mathcal{Q}B\mathcal{Q}F]$. Esta solución se puede resolver mediante un proceso iterativo; entonces, la solución adopta la forma

$$\mathcal{Q}F = \sum_{k=1}^{\infty} (G\mathcal{Q}B)^k \mathcal{P}F \quad \text{donde} \quad G \equiv (u - H)^{-1}.$$

Si introducimos esta expresión en (1.85), obtenemos finalmente una ecuación “cerrada” para el **vm** de $F(u)$, es decir:

$$u\mathcal{P}F - F(0) = H\mathcal{P}F + \mathcal{P}B \sum_{k=0}^{\infty} (G\mathcal{Q}B)^k \mathcal{P}F. \quad (1.87)$$

Muestre que esta ecuación se puede volver a escribir en la forma:

$$u \langle F \rangle - F(0) = H \langle F \rangle + \left\langle \sum_{k=0}^{\infty} \{BG(\mathbf{1} - \mathcal{P})\}^k B \right\rangle \langle F \rangle.$$

A partir de este desarrollo en serie es posible observar la estructura de los cumulantes de Terwiel [15]. Esta ecuación es el punto de partida para formular una teoría de perturbación para el cálculo del valor medio condicionado de la función $F(t)$, cualquiera que sea la distribución de probabilidad asociada a la cantidad B . En los capítulos 6 y 7 se verá que el estudio del transporte en medios desordenados está relacionado con este ejemplo, es

²⁹Por simplicidad en la notación escribimos $F \equiv F(u)$.

decir: una ecuación diferencial con coeficientes aleatorios. A partir de (1.87) muestre que si en la serie $\sum_{k=0}^{\infty} (GQB)^k$ se desprecian todos los términos con $k \geq 1$, la solución en la representación “temporal” viene dada por

$$\langle F(t) \rangle = F(0) \exp[(H + \langle B \rangle)t] \quad \text{con } t \geq 0.$$

Por otro lado, si B tiene carácter gaussiano, el teorema de Novikov es de gran utilidad y permite un desarrollo de perturbación alternativo para calcular $\mathcal{P}F$; este teorema da origen a uno de los posibles métodos para estudiar el problema de las fluctuaciones térmicas en sistemas dinámicos [2], el análisis de las fluctuaciones térmicas será tratado en los capítulos 3 y 4. Cabe mencionar que en el caso en que B sea simultáneamente una función del tiempo y de una \mathbf{va} , el problema da origen al estudio de las perturbaciones estocásticas [12], este tema será presentado con detalle en el capítulo 3. Por último cabe destacar que la expresión (1.87) también es válida en el caso en que tanto H como B sean operadores.

Bibliografía

- [1] L.D. Landau y E.M. Lifshitz, *Física Estadística*, Barcelona, Ed. Reverté S.A. (1969).
- [2] N.G. van Kampen, *Stochastic Process in Physics and Chemistry*, Second Edition, Amsterdam, North-Holland (1992).
- [3] R. Kubo, M Toda and N. Hashitsume, *Statistical Physics II: Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Berlin, Springer-Verlag (1985).
- [4] L.E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, Second Edition, Austin, Edward Arnold Publ. Ltd. (1992).
- [5] A. Papoulis, *Probability Random Variables and Stochastic Process*, 3rd Edition, New York, McGraw-Hill (1991).
- [6] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, Second Edition, New York, John Wiley and Sons (1971).
- [7] R.L. Stratonovich, *Topics in the Theory of Random Noise, Vols. 1 and 2*, New York, Gordon and Breach, Science Publishers (1963).
- [8] S. Bochner, *Lectures on Fourier Integrals*, Princenton, NJ, Princenton University Press (1959); R.R. Goldberg, *Fourier Transform*, Cambridge, Cambridge University Press (1961).
- [9] E.W. Montroll and B.J. West, *Fluctuation Phenomena*, Eds. E.W. Montroll and J.L. Lebowitz, Amsterdam, North-Holland (1987).
- [10] M.F. Shlesinger and B.D. Hughes, *Physica* **A 109**, 597, (1981).
- [11] S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.* **15**, 1, (1943).
- [12] N.G. van Kampen, *Phys. Rep.* **24 C**, 171, (1976).
- [13] M.O. Cáceres, C.E. Budde and G.J. Sibona, *J. Phys. A Math. Gen.* **28**, 3877, (1995); idem **28**, 7391, (1995); M.O. Cáceres, M.A. Fuentes and C.E. Budde **30**, 2287, (1997); M.O. Cáceres, M.A. Fuentes, **32**, 3209, (1999).
- [14] M.O. Cáceres and A.A. Budini, *J. Phys. A Math. Gen.* **30**, 8427, (1997).
- [15] R.H. Terziel, *Physica* **A 74**, 248, (1974).

- [16] E. Hernández-García, M.A. Rodríguez, L. Pesquera and M. San Miguel, Phys. Rev. **B** **42**, 10653, (1990).
- [17] M.O. Cáceres, D. Strier and E.R. Reyes, Rev. Mex. de Física **45**, 608, (1999).

Capítulo 3

Elementos de procesos estocásticos

3.1 Introducción

El estudio de la evolución temporal de la probabilidad es uno de los temas centrales de la estadística moderna. Tanto el análisis de la relajación como de la inestabilidad de un sistema dinámico pueden ser puestos en correspondencia directa con el estudio de trayectorias $X(t)$ de **va** que evolucionan en el tiempo; de aquí la importancia de la definición del concepto de procesos estocásticos [1, 2, 3].

3.1.1 Variable aleatoria dependiente del tiempo

Una variable aleatoria dependiente del tiempo o un proceso estocástico (**pe**) es una función aleatoria $X_I(t)$ de un argumento real¹ (continuo o discreto) $t \in [t_i, t_f]$ y una **va** I sobre \mathcal{D}_I . En lo que sigue supondremos que el **pe** es un escalar, por lo que su generalización a vectores o matrices es obvia. Entonces podemos interpretar un **pe** como una función f de dos variables: t (el tiempo²) y I (la **va**).

$$X_I(t) = f(t, I). \quad (3.1)$$

Existen dos “representaciones” para definir un **pe**:

(I) Representación en *ensemble* de realizaciones. Para cada valor ω del dominio \mathcal{D}_I de la **va** I , $X_\omega(t) = f(t, \omega)$ es una función ordinaria del tiempo, comúnmente llamada función aleatoria o *realización* del **pe** $X_I(t)$. Luego, caracterizar un **pe** es equivalente a dar el *ensemble* de todas las realizaciones³ $\{X_\omega(t)\}$, $\forall \omega \in \mathcal{D}_I$.

¹La generalización a d argumentos introduce el concepto de campo estocástico.

²En general, si $X_I(z) = f(z, I)$, donde I es una **va** y $z \in \mathcal{R}_e$ es cualquier variable ordinaria, la relación $X_I(z)$ también permite definir un **pe** (un **pe** espacial, por ejemplo). Es decir, no es restrictivo que z sea el tiempo para poder definir correctamente un **pe**. Sin embargo, el hecho de que z sea la variable temporal permite una presentación muy didáctica del concepto de **pe** [como contraejemplo ver ejercicio guiado de la sección (2.3.1)].

³En ocasiones, a una realización del **pe** la denotaremos simplemente en la forma $X(t)$.

(II) Representación en un conjunto numerable de variables aleatorias (representación m -dimensional). Para cada tiempo fijo t' , $X_{\mathfrak{l}}(t')$ es una nueva **va** [en realidad $X_{\mathfrak{l}}(t')$ es una transformación de coordenada de la **va** \mathfrak{l} en $X_{\mathfrak{l}}(t')$]. Entonces, para un conjunto arbitrario de tiempos $\{t_i\}$, el **pe** $X_{\mathfrak{l}}(t)$ caracteriza completamente el conjunto de **va** $\{X_{\mathfrak{l}}(t_i)\}$.

Nota. En general, para cada t_i , estas **va** no tienen por qué ser **ei**. Por otro lado, el dominio de la **va** $X_{\mathfrak{l}}(t_i)$ puede ser continuo o discreto; además, \mathfrak{l} puede representar una o varias **va**.

3.1.2 Funcional característica (representación en ensemble)

En la representación (I) podemos calcular valores medios sobre las realizaciones (obteniendo así funciones ordinarias de t) simplemente promediando con la distribución de probabilidad⁴ $P_{\mathfrak{l}}(\omega)$, es decir:

$$\langle X_{\mathfrak{l}}(t) \rangle = \int_{\mathcal{D}_{\mathfrak{l}}} X_{\omega}(t) P_{\mathfrak{l}}(\omega) d\omega. \quad (3.2)$$

Esta expresión es válida para todo $t \in [t_i, t_f]$. En general, los momentos en distintos tiempos (arbitrarios) se calculan según la fórmula:

$$\langle X_{\mathfrak{l}}(t_1) X_{\mathfrak{l}}(t_2) \cdots X_{\mathfrak{l}}(t_n) \rangle = \int_{\mathcal{D}_{\mathfrak{l}}} X_{\omega}(t_1) X_{\omega}(t_2) \cdots X_{\omega}(t_n) P_{\mathfrak{l}}(\omega) d\omega. \quad (3.3)$$

Entonces podemos definir una funcional característica para generar los momentos del **pe** $X_{\mathfrak{l}}(t)$, con $t \in [t_i, t_f]$, en la forma

$$\begin{aligned} G([k]) &\equiv \left\langle \exp \left[i \int_{t_i}^{t_f} k(t) X_{\mathfrak{l}}(t) dt \right] \right\rangle_{P_{\mathfrak{l}}(\omega)} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \int_{t_i}^{t_f} \cdots \int_{t_i}^{t_f} k(t_1) \cdots k(t_m) \langle X_{\mathfrak{l}}(t_1) \cdots X_{\mathfrak{l}}(t_m) \rangle \prod_{j=1}^m dt_j. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Esta notación enfatiza que $G([k])$ depende de *toda* la función de “prueba” $k(t)$, y no solamente del valor que $k(t)$ tome en un tiempo particular t' (note la similitud con la definición de transformada de Fourier). La convergencia de la integral en (3.4) está asegurada, pues el tipo de funciones de prueba $k(t)$ que están permitidas, son aquellas que se anulan para t suficientemente grande. De (3.4) se deduce que todos los momentos se obtienen por diferenciación⁵ de la funcional $G([k])$, entonces esta funcional caracteriza completamente al **pe** $X_{\mathfrak{l}}(t)$. Es decir, dada una funcional $G([k])$, si podemos desarrollarla en la forma:

$$G([k]) = 1 + i \int_{t_i}^{t_f} k(t_1) \langle X_{\mathfrak{l}}(t_1) \rangle dt_1 + \frac{i^2}{2!} \int_{t_i}^{t_f} \int_{t_i}^{t_f} k(t_1) k(t_2) \langle X_{\mathfrak{l}}(t_1) X_{\mathfrak{l}}(t_2) \rangle dt_1 dt_2 + \cdots, \quad (3.5)$$

reconocemos fácilmente todos los momentos $\langle X_{\mathfrak{l}}(t_1) \cdots X_{\mathfrak{l}}(t_m) \rangle$ del **pe** $X_{\mathfrak{l}}(t)$ como los coeficientes proporcionales a los términos $k(t_1) \cdots k(t_m)$ que aparecen en el desarrollo en serie (3.5).

⁴En general supondremos que la **va** es continua; para los casos en que sea discreta ya hemos mostrado que ambas presentaciones son equivalentes [ver ecuación (1.5) en la sección (1.2.4)].

⁵En el próximo ejercicio optativo se presenta de manera “sencilla” la definición de derivada funcional. En la sección (3.10.2) se dan pautas para poder entender el concepto de derivada funcional como una derivada “discreta”.

Alternativamente, también se puede definir una funcional “partición” que es la que genera los cumulantes⁶ del **pe** $X_{\mathfrak{l}}(t)$

$$\ln G([k]) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \int_{t_i}^{t_f} \cdots \int_{t_i}^{t_f} k(t_1) \cdots k(t_m) \langle\langle X_{\mathfrak{l}}(t_1) \cdots X_{\mathfrak{l}}(t_m) \rangle\rangle \prod_{j=1}^m dt_j. \quad (3.6)$$

Ejemplo. Note que en el límite determinista⁷ el logaritmo de la funcional característica es lineal en $k(t)$, pues

$$G([k]) \equiv \left\langle \exp \left[i \int_{t_i}^{t_f} k(t) X_{\mathfrak{l}}(t) dt \right] \right\rangle = \exp \left[i \int_{t_i}^{t_f} k(t_1) X_{\omega_d}(t_1) dt_1 \right].$$

Esta expresión se obtiene de (3.4) considerando que en el mencionado límite se tiene

$$\langle X_{\mathfrak{l}}(t_1) \cdots X_{\mathfrak{l}}(t_m) \rangle \rightarrow X_{\omega_d}(t_1) \cdots X_{\omega_d}(t_m);$$

o bien, a partir de (3.6) notando que

$$\langle\langle X_{\mathfrak{l}}(t_1) \cdots X_{\mathfrak{l}}(t_m) \rangle\rangle \rightarrow 0 \quad \text{si } m \neq 1,$$

y que el único cumulante no nulo es

$$\langle\langle X_{\mathfrak{l}}(t_1) \rangle\rangle \rightarrow X_{\omega_d}(t_1).$$

Ejercicio. Calcule la funcional característica⁸ $G_X([k])$ para el **pe** $X_{\mathfrak{l}}(t) = \psi(t)\mathfrak{l}$, $t \in [t_i, t_f]$. En general, si la **va** \mathfrak{l} está caracterizada por $P_{\mathfrak{l}}(\omega)$ sobre $\mathcal{D}_{\mathfrak{l}}$, muestre que la funcional $G_X([k])$ se escribe en la forma:

$$G_X([k]) = G_{\mathfrak{l}} \left(\int_{t_i}^{t_f} k(t) \psi(t) dt \right), \quad t \in [t_i, t_f],$$

donde $G_{\mathfrak{l}}(q) = \langle e^{iq\mathfrak{l}} \rangle$ es la función característica de la **va** \mathfrak{l} . Muestre que cuando \mathfrak{l} deja de ser una **va** y se comporta como un parámetro (determinista) ω_d , la funcional característica toma una estructura, en el argumento de la exponencial, que es *lineal*

$$G_X([k]) = \exp \left[i \omega_d \int_{t_i}^{t_f} k(t) \psi(t) dt \right], \quad t \in [t_i, t_f].$$

Ejercicio. Considere el **pe** del ejercicio anterior, pero ahora caracterice la **va** \mathfrak{l} con una probabilidad de Poisson y calcule la funcional característica haciendo uso de un desarrollo en cumulantes de \mathfrak{l} .

Ejercicio. (Ruido⁹ de Poisson.) Considere el **pe** $\psi(t) = \sum_{\sigma=1}^n A \delta(t - t_{\sigma})$, donde los tiempos aleatorios $\{t_{\sigma}\}$ están uniformemente distribuidos en el intervalo $[0, T]$, y el número

⁶Sobre la definición habitual de cumulante, ver sección (1.10). Dependiendo del tipo de **va**, suele convenir definir otra clase de cumulante, y por lo tanto su función generadora será diferente. Ver, por ejemplo, las referencias [1, 5].

⁷En ese límite, $P_{\mathfrak{l}}(\omega) \rightarrow \delta(\omega - \omega_d)$.

⁸En ocasiones, cuando sea necesario enfatizar el **pe** $X_{\mathfrak{l}}(t)$, denotaremos la funcional característica en la forma $G_X([k])$.

⁹El término ruido o **pe** es equivalente.

n de tiempos (para una realización del **pe**) también es una **va** y está caracterizada por una probabilidad de Poisson $P_n = e^{-\lambda} \lambda^n / n!$, donde $n = 0, 1, 2, \dots$. Muestre que la funcional característica del **pe** $\psi(t)$ es

$$G_\psi([k]) = \exp \left[\int_0^T \lambda e^{iAk(s)} \frac{ds}{T} - \lambda \int_0^T \frac{ds}{T} \right], \quad t \in [0, T].$$

Muestre que si $T \rightarrow \infty$ y $\lambda \rightarrow \infty$, de manera tal que $\frac{\lambda}{T} \rightarrow q$, la funcional característica del “ruido de Poisson” adopta una forma más sencilla:

$$G_\psi([k]) = \exp \left[q \int_0^\infty \left(e^{iAk(s)} - 1 \right) ds \right], \quad t \in [0, \infty].$$

Ejercicio. Considere la suma de dos ruidos de Poisson estadísticamente independientes entre sí con amplitudes $A = \pm 1$, respectivamente. Muestre que la funcional de la suma de dos ruidos de Poisson $\varphi = \psi_+ + \psi_-$ viene dada por

$$G_\varphi([k]) = \exp \left[2q \int_0^\infty (\cos k(s) - 1) ds \right], \quad t \in [0, \infty].$$

Ejercicio. Considere ahora la suma de dos ruidos de Poisson ψ_1, ψ_2 estadísticamente independientes entre sí, pero con amplitudes aleatorias $A = \pm 1$ equiprobables. Calcule la funcional del ruido $\phi = \psi_1 + \psi_2$. Estudie la diferencia entre esta funcional $G_\phi([k])$ y la del ejercicio anterior $G_\varphi([k])$.

Ejercicio optativo. Sea $F([\phi])$ una funcional arbitraria. Usando la definición generalizada de derivada en el cálculo funcional [4]

$$\frac{\delta F([\phi])}{\delta \phi(\tau)} = \left. \frac{dF[\phi(t) + \lambda \delta(t - \tau)]}{d\lambda} \right|_{\lambda=0},$$

muestre los siguientes resultados:

1. Si $F([\phi]) = f(\phi(t))$, entonces:

$$\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(\tau)} = \frac{\partial f}{\partial \phi} \delta(t - \tau).$$

2. Si $F[\phi] = f(g(\phi))$, entonces

$$\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(\tau)} = \frac{\partial f}{\partial g} \frac{\delta g}{\delta \phi(\tau)}.$$

3. Si $F[\phi] = f(\phi(t), \dot{\phi}(t))$, entonces

$$\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(\tau)} = \frac{\partial f}{\partial \phi} \delta(t - \tau) - \frac{\partial f}{\partial \dot{\phi}} \frac{d}{d\tau} \delta(t - \tau).$$

4. Si $F[\phi] = \int f(\phi, \dot{\phi}) dt$, entonces

$$\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(\tau)} = \frac{\partial f}{\partial \phi(\tau)} - \frac{d}{d\tau} \frac{\partial f}{\partial \dot{\phi}(\tau)}.$$

Ejercicio. (Correlaciones deltiformes.) Considere un **pe** $\psi(t)$ tal que todos sus cumulantes vengan dados por la expresión:

$$\langle\langle\psi(t_1)\cdots\psi(t_m)\rangle\rangle = \Lambda_m \delta(t_1 - t_2)\delta(t_1 - t_3)\cdots\delta(t_1 - t_m), \quad m = 1, 2, 3, \dots;$$

es decir, todas sus correlaciones son deltiformes. Muestre que la funcional característica es

$$G_\psi([k]) = \exp \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{i^m}{m!} \Lambda_m \int_{t_i}^{t_f} (k(t))^m dt \right\}, \quad t \in [t_i, t_f].$$

A estos **pe** se les llama ruidos blancos. El caso $\Lambda_m = 0, \forall m \geq 3$ define el ruido gaussiano blanco. Usando $\Lambda_m = q, \forall m \geq 1$, vuelva a obtener la funcional del ruido de Poisson.

3.1.3 Jerarquía de Kolmogorov (representación multidimensional)

A partir de la representación (II) se observa que para caracterizar completamente al **pe** $X_1(t)$ necesitamos especificar un conjunto infinito de densidades de probabilidad conjunta:

$$\begin{aligned} &P_1(x_1, t_1) \\ &P_2(x_2, t_2; x_1, t_1) \\ &P_3(x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1) \\ &\dots \text{etc.} \end{aligned} \tag{3.7}$$

Ésta es la jerarquía de Kolmogorov del **pe**. Note que esta jerarquía es “sobre completa”, pues P_i se puede obtener marginando¹⁰ P_{i+1} . La jerarquía debe satisfacer las condiciones fundamentales de Kolmogorov [1]:

1. positividad: $P_n \geq 0, n \in \mathcal{N}$;
2. simetría de permutación: $(x_k, t_k) \longleftrightarrow (x_j, t_j)$;
3. marginalidad: $P_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = \int P_{n+1}(x_{n+1}, t_{n+1}; \dots; x_1, t_1) dx_{n+1}; y$
4. normalización: $\int P_1(x_1, t_1) dx_1 = 1$.

La jerarquía de Kolmogorov permite, por ejemplo, calcular la probabilidad

$$P_2(x_1, t_1; x_2, t_2) dx_1 dx_2$$

de que el **pe** $X_1(t)$ tenga el valor $[x_1, x_1 + dx_1]$ en el instante t_1 y $[x_2, x_2 + dx_2]$ en el instante t_2 . Entonces, para todo t_1 , el momento o **vm** del **pe** viene dado por la fórmula¹¹

$$\langle X(t_1) \rangle = \int_{\mathcal{D}_x} x_1 P_1(x_1, t_1) dx_1. \tag{3.8}$$

La correlación a dos tiempos distintos se calcula en términos del segundo momento:

$$\langle X(t_1)X(t_2) \rangle = \int_{\mathcal{D}_x} \int_{\mathcal{D}_x} x_1 x_2 P_2(x_2, t_2; x_1, t_1) dx_1 dx_2; \tag{3.9}$$

¹⁰Sobre la definición de distribución marginal, ver sección (1.13.1).

¹¹En lo que sigue estaremos siempre suponiendo que el dominio del **pe** es continuo, salvo que especifiquemos lo contrario.

es decir, evaluando

$$\langle\langle X(t_1)X(t_2) \rangle\rangle = \langle X(t_1)X(t_2) \rangle - \langle X(t_1) \rangle \langle X(t_2) \rangle.$$

Comparando ambas *representaciones* se observa que

$$P_1(x, t) = \langle \delta(x - X_1(t)) \rangle_{P_1(\omega)}. \quad (3.10)$$

Esta aseveración puede fácilmente ser demostrada como sigue. De la representación en ensemble (I) se observa que el **vm** sobre todas las realizaciones es

$$\langle X_1(t) \rangle = \int_{\mathcal{D}_1} X_\omega(t) P_1(\omega) d\omega.$$

Por otro lado, utilizando la representación multidimensional (II) y la ecuación (3.10) se tiene para un t' fijo arbitrario

$$\begin{aligned} \langle X(t') \rangle &\equiv \int_{\mathcal{D}_x} x P_1(x, t') dx = \int_{\mathcal{D}_x} x \langle \delta(x - X_1(t')) \rangle_{P_1(\omega)} dx \\ &= \left\langle \int x \delta(x - X_1(t')) dx \right\rangle_{P_1(\omega)} = \langle X_1(t') \rangle_{P_1(\omega)}, \end{aligned}$$

lo cual demuestra la equivalencia.

Análogamente, también podemos escribir la distribución de probabilidad conjunta de n -tiempos en la forma:

$$P_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = \langle \delta(x_1 - X_1(t_1)) \dots \delta(x_n - X_1(t_n)) \rangle_{P_1(\omega)}. \quad (3.11)$$

Dependiendo de los procesos físicos que se quieran modelar, puede ocurrir que sea más conveniente usar una representación que la otra. La primera representación, en *ensemble*, se utiliza frecuentemente en cálculos matemáticos y de perturbaciones, mientras que la segunda representación recuerda más la noción intuitiva de la densidad de probabilidad usada en la mecánica estadística del equilibrio.

Ejemplos

1. Supongamos que un sistema físico (dependiente del tiempo) puede ser modelado por un **pe** “multiplicativo” de la forma

$$X_1(t) = \psi(t)\mathfrak{l},$$

donde $\psi(t)$ es una función arbitraria del tiempo y \mathfrak{l} es una **va** arbitraria caracterizada por su distribución de probabilidad $P_1(\omega)$ sobre \mathcal{D}_1 . Aquí se observa que los momentos del **pe** están determinados por los momentos de la **va** \mathfrak{l}

$$\begin{aligned} \langle X_1(t) \rangle &= \psi(t) \langle \mathfrak{l} \rangle \\ \langle X_1(t_1)X_1(t_2) \rangle &= \psi(t_1)\psi(t_2) \langle \mathfrak{l}^2 \rangle \\ &\dots \text{etc.} \end{aligned}$$

Entonces, en este caso particular es evidente que resulta considerablemente más sencillo calcular todas las propiedades estadísticas del **pe** utilizando la representación en *ensemble* (I).

2. Supongamos que modelamos un **pe** $X_l(t)$ a partir de cierta información que disponemos sobre la distribución de probabilidad conjunta P_n (jerarquía de Kolmogorov). Está claro entonces que la representación más sencilla de usar será la segunda si, por ejemplo, conocemos que $P_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1)$ factoriza para todo n según

$$P_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = \prod_{i=1}^n P_1(x_i, t_i). \quad (3.12)$$

Es decir, la **va** asociada al instante t es estadísticamente independiente de la **va** asociada a cualquier otro tiempo t' . Además, para todo t fijo el **pe** establece una transformación de coordenada específica $l \rightarrow X_l(t)$, la cual está caracterizada por la distribución $P_1(x, t)$. Aquí $P_1(x, t)dx$ da la frecuencia relativa con que la realización está en el intervalo $[x, x + dx]$ en el instante t . Entonces es evidente que este **pe** queda completamente caracterizado por la ecuación (3.12).

3.1.4 Generalidades sobre la representación multidimensional

En la representación (II) suele ser conveniente eliminar toda notación superflua (subíndice l , etc.), por lo que de aquí en adelante al **pe** lo denotaremos $\mathbf{X}(t) \equiv X_l(t)$.

La función densidad de probabilidad $P_1(x_1, t_1)$ es positiva, y para todo $t \in [t_i, t_f]$ está relacionada con la probabilidad de que la **va** $X(t_1)$ tome un valor determinado según

$$\int_a^b P_1(x_1, t_1) dx_1 = \text{Prob. } [a < X(t_1) < b].$$

Note la diferente notación para caracterizar el **pe** $\mathbf{X}(t)$, la **va** $X(t_1)$ y la realización $X(t)$ [es decir, la función aleatoria del tiempo $X_\omega(t)$]. En los casos en que esto no traiga confusión alguna simplificaremos la notación.

Es de destacar que $P_1(x, t)$ es necesaria pero no es suficiente para caracterizar al **pe** $\mathbf{X}(t)$. Para describir completamente un **pe** [o sea: el conocimiento estadístico de toda realización posible] es necesario conocer la densidad de probabilidad conjunta n -dimensional. Es decir, la probabilidad conjunta

$$P_n(x_n, t_n; \dots; x_2, t_2; x_1, t_1) \prod_{i=1}^n dx_i,$$

para todo n y $\{t_l\}$ tiempos arbitrarios.

En el caso particular de 2-tiempos la cantidad $P_2(x_2, t_2; x_1, t_1) dx_1 dx_2$ da la probabilidad de que las realizaciones $X(t)$ pasen por las *ventanas*:¹² $[x_1, x_1 + dx_1]$ en el instante t_1 y $[x_2, x_2 + dx_2]$ en el instante t_2 .

Un caso especial es el segundo ejemplo de la sección anterior. Allí el **pe** $\mathbf{X}(t)$ estaba completamente caracterizado por $P_1(x, t)$. Esto es así solamente si las **va** $\{X(t_1) \dots X(t_n)\}$ son **ei** para todos los tiempos $\{t_1, \dots, t_n\} \in [t_i, t_f]$. Es decir, en ese caso la probabilidad conjunta de n -tiempos se reduce a la productoria de densidades de probabilidad de 1-tiempo. Estos son los **pe** no correlacionados, llamados comúnmente *procesos completamente aleatorios*, y se ponen en correspondencia directa con las **vaei** de la teoría usual de la probabilidad.

¹²Aquí (;) está significado en un sentido booleano; o sea, $P(A \cap B) \Rightarrow P(A; B)$. Recuerde que $P(A \cap B) = 0$ sólo si los eventos son mutuamente excluyente, ver sección (1.1).

En lo que sigue supongamos, por el momento, que el **pe** $\mathbf{X}(t)$ en estudio tiene **vm** nulo $\langle X(t) \rangle = 0$. Esto no restringe para nada nuestro análisis, pues siempre es posible considerar un nuevo **pe** $\mathbf{X}(t) = \mathbf{Y}(t) - \langle \mathbf{Y}(t) \rangle$. En la representación (II) los momentos o **vm** del **pe** $\mathbf{X}(t)$ son simplemente los momentos de una **va** multidimensional. En particular, una función de correlación de n -tiempos viene dada en términos del momento n -ésimo:¹³

$$\langle X(t_n) \cdots X(t_1) \rangle = \int_{\mathcal{D}_x} \cdots \int_{\mathcal{D}_x} x_1 \cdots x_n P_n(x_n, t_n; \dots; x_2, t_2; x_1, t_1) \prod_{i=1}^n dx_i. \quad (3.13)$$

Como ya hemos mencionado, el conjunto de distribuciones de probabilidad conjunta de n -tiempos debe satisfacer ciertas condiciones particulares. Éstas son las condiciones de compatibilidad, que no son más que la generalización del concepto de distribuciones marginales a **pe** $X_1(t)$. Un teorema fundamental de Kolmogorov¹⁴ prueba que esta jerarquía (numerable) de distribuciones es necesaria y suficiente para caracterizar completamente el ensemble de las funciones aleatorias $X_\omega(t)$. Éste es un resultado no trivial, pues asegura que sólo necesitamos conocer la probabilidad de que la función aleatoria $X_\omega(t)$ tome un número de valores x_i en tiempos *discretos y arbitrarios*, en lugar de las incontables posibilidades permitidas por la variable continua t .

3.1.5 Generalidades sobre la representación en ensemble

La jerarquía de Kolmogorov se puede obtener por cuadratura a partir de la funcional característica del **pe**. En efecto, en general podemos invertir la funcional $G_X([k])$ introduciendo una transformada de Fourier n -dimensional, y de esa manera podemos obtener una expresión formal para la probabilidad conjunta de n -tiempos:

$$P_n(x_n, t_n; \dots; x_2, t_2; x_1, t_1) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int dk_1 \cdots \int dk_n e^{-i \sum_{j=1}^n k_j x_j} \times G_X([k(t)])_{k(t)=k_1 \delta(t-t_1) + \cdots + k_n \delta(t-t_n)}.$$

Note que este resultado permite obtener toda la jerarquía de Kolmogorov; es decir, la caracterización completa del **pe** cualquiera que sea la clase de proceso.

Ejercicio optativo. Suponga que la expresión para el $\ln G_X([k])$ se corta en el segundo cumulante. A partir de la fórmula (3.6) obtenga la probabilidad $P_1(x_1, t_1)$ y la probabilidad conjunta de dos tiempos $P_2(x_1, t_1; x_2, t_2)$.

3.2 Probabilidad condicionada

La probabilidad de que la función aleatoria $X_\omega(t)$ pase por la “ventana” alrededor de x_n en el instante t_n *dado que pasó* por x_{n-1} en el instante t_{n-1} y en x_{n-2} en el instante t_{n-2} , etc., estará dada en términos de la distribución de probabilidad *condicionada*:

$$P(x_n, t_n \mid x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_i, t_i; \dots; x_1, t_1).$$

¹³La generalización al concepto de correlación de n -tiempos viene dada por la definición misma de cumulante de n -tiempos, ver sección (1.10) y el último ejercicio de la sección (3.1.2).

¹⁴Este teorema fue demostrado por Kolmogorov en 1933 (publicado en alemán). M. Kac y J. Logan presentan su enunciado en forma muy amena en la página 14 del libro *Fluctuation Phenomena*, Eds. E.W. Montroll and J.L. Lebowitz, Amsterdam, Elsevier Science Publisher B.V. (1979).

Al igual que en el capítulo 1, la relación entre la probabilidad conjunta de n -tiempos y la probabilidad condicionada viene dada por la regla de Bayes:

$$P(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_i, t_i \mid x_{i-1}, t_{i-1}; \dots; x_1, t_1) = \frac{P_n(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_i, t_i; x_{i-1}, t_{i-1}; \dots; x_1, t_1)}{P_{i-1}(x_{i-1}, t_{i-1}; \dots; x_1, t_1)}. \quad (3.14)$$

Aquí se ha supuesto un orden en el conjunto de tiempos: $t_1 < t_2 < \dots < t_n$. En nuestra notación $(\dots \mid \dots)$ significa *dado que*.¹⁵

Ejercicio. Muestre, en particular, que la probabilidad condicionada $P(x_2, t_2 \mid x_1, t_1)$ cumple con la condición: $\lim_{t_2 \rightarrow t_1} P(x_2, t_2 \mid x_1, t_1) \rightarrow \delta(x_2 - x_1)$.

Ejercicio optativo. Sean $q(t)$ y $p(t)$ las trayectorias, en el espacio de las fases, de una partícula libre. Considere $q(0)$, $p(0)$ como las condiciones iniciales aleatorias caracterizadas por la distribución de probabilidad $\mathcal{P}(q(0); p(0))$. Calcule:

$$\begin{aligned} &P_1(x_1, p_1, t_1) \\ &P_2(x_2, p_2, t_2; x_1, p_1, t_1) \\ &P(x_2, p_2, t_2 \mid x_1, p_1, t_1). \end{aligned}$$

Note que aquí estamos introduciendo un par ordenado x_i, p_i en cada instante t_i .

3.3 Procesos de Markov

Un caso particular de (3.14) se presenta cuando la condición del “pasado” está dada en un solo tiempo anterior. Por ejemplo, $P(x_2, t_2 \mid x_1, t_1)$ es una probabilidad condicionada típica, y suele llamarse propagador del sistema. Una clase muy particular de **pe** está constituida por los procesos de Markov [1]. La probabilidad condicionada de estos **pe** sólo depende del tiempo menos “remoto”. Esto es, un **pe** de Markov no depende de la historia completa de las condiciones dadas. En un proceso de Markov el futuro no depende del pasado, sino del presente dado, o sea:

$$P(x_n, t_n; \dots; x_i, t_i \mid x_{i-1}, t_{i-1}; \dots; x_1, t_1) = P(x_n, t_n; \dots; x_i, t_i \mid x_{i-1}, t_{i-1}). \quad (3.15)$$

Esta ecuación puede tomarse como la definición misma de un proceso de Markov. Los **pe** de Markov son la complicación inmediata y siguiente de los **pe** no correlacionados (ruidos completamente aleatorios). Esto es, para caracterizar un **pe** de Markov es necesario conocer solamente 2 objetos matemáticos: $P(x_i, t_i \mid x_{i-1}, t_{i-1})$ y $P_1(x, t)$. Esta estructura marca una diferencia fundamental en cuanto a la variedad de aplicaciones en las que los **pe** de Markov intervienen. Sin embargo, no por ello los ruidos completamente aleatorios y los ruidos blancos son menos importantes. Cuando se modelan distintos sistemas, se debe determinar (teóricamente) a que nivel de la descripción física intervienen los **pe** no correlacionados como representantes de variables que fluctúan en escalas de tiempo cortas comparadas con todas las escalas temporales del experimento en cuestión. Los procesos de Markov, con su estructura más compleja, surgen naturalmente en muchas aplicaciones de la física, como solución de ecuaciones diferenciales con coeficientes que son funciones aleatorias δ -correlacionadas (o sea, coeficientes dependientes del tiempo que son ruidos blancos¹⁶).

¹⁵Ver secciones (1.2.1) y (1.13).

¹⁶Los ruidos blancos son **pe** no correlacionados y además singulares; ver, por ejemplo, sección (3.9).

Ejercicio. Muestre que para un **pe** de Markov la densidad de probabilidad conjunta de n -tiempos está completamente caracterizada por el propagador y la densidad de probabilidad de 1-tiempo:

$$P_n(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_i, t_i; x_{i-1}, t_{i-1}; \dots; x_1, t_1) = \quad (3.16)$$

$$P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}) \dots P(x_i, t_i | x_{i-1}, t_{i-1}) \dots P(x_2, t_2 | x_1, t_1) P(x_1, t_1).$$

Ejercicio. Pruebe que el **pe** $X_1(t) = \psi(t)\mathbf{l}$, donde \mathbf{l} es una **va** arbitraria, es un **pe** de Markov.

Ejercicio guiado. (Memoria markoviana.) Considere la ecuación determinista: $\dot{x} = N(x)$. Si escribimos su solución en la forma $x(t) = \phi(x_0, t_0; t)$, donde (x_0, t_0) es la condición inicial del problema, es fácil demostrar que $x(t)$ puede ser considerado como un **pe** de Markov (singular), aun cuando la memoria del sistema determinista sea infinita. Para demostrar esta aseveración usamos simplemente el hecho de que si un **pe** es de Markov, entonces se debe cumplir ($\forall t_n \geq t_{n-1} \geq \dots \geq t_0$) que

$$P(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; \dots | x_0, t_0) = P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}) \dots P(x_1, t_1 | x_0, t_0).$$

Ahora bien, de la definición de probabilidad conjunta de 2-tiempos

$$P(x_2, t_2; x_1, t_1 | x_0, t_0) = \langle \delta[x_2 - \phi(x_0, t_0; t_2)] \delta[x_1 - \phi(x_0, t_0; t_1)] \rangle,$$

y del propagador

$$P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}) = \langle \delta[x_n - \phi(x_{n-1}, t_{n-1}; t_n)] \rangle,$$

se deduce que

$$\delta[x_2 - \phi(x_0, t_0; t_2)] \delta[x_1 - \phi(x_0, t_0; t_1)] = \delta[x_2 - \phi(x_1, t_1; t_2)] \delta[x_1 - \phi(x_0, t_0; t_1)]. \quad (3.17)$$

Aquí hemos considerado que no existen elementos aleatorios porque el sistema es determinista, por lo que podemos eliminar los **vm**; así, por ejemplo: $\langle \delta[x_1 - \phi(x_0, t_0; t_1)] \rangle = \delta[x_1 - \phi(x_0, t_0; t_1)]$, etc. Luego, de (3.17) se deduce que $\phi(x_0, t_0; t_2) = \phi(x_1, t_1; t_2)$, lo cual es cierto por tratarse de un sistema determinista donde $x_1 = \phi(x_0, t_0; t_1)$. Se llega a la misma conclusión al estudiar la probabilidad conjunta de n -tiempos. Es decir: un proceso determinista tiene memoria infinita pero con sólo dar la condición inmediatamente anterior es suficiente. Esta última característica coincide con la definición de **pe** markoviano, la cual usa el hecho de que sólo la historia (condicionada) inmediatamente anterior es necesaria para caracterizar el futuro. Por otro lado, también podemos definir un **pe** introduciendo variables aleatorias en el sistema determinista. Así, por ejemplo, el valor inicial x_0 podría ser una **va**, en cuyo caso el proceso así definido no será, en general, markoviano.

3.3.1 Ecuación de Chapman-Kolmogorov

La ecuación integral (ecuación de Chapman-Kolmogorov) que satisface la probabilidad condicionada de un **pe** de Markov es

$$P(x_n, t_n | x_1, t_1) = \int_{\mathcal{D}_x} P(x_n, t_n | x_i, t_i) P(x_i, t_i | x_1, t_1) dx_i. \quad (3.18)$$

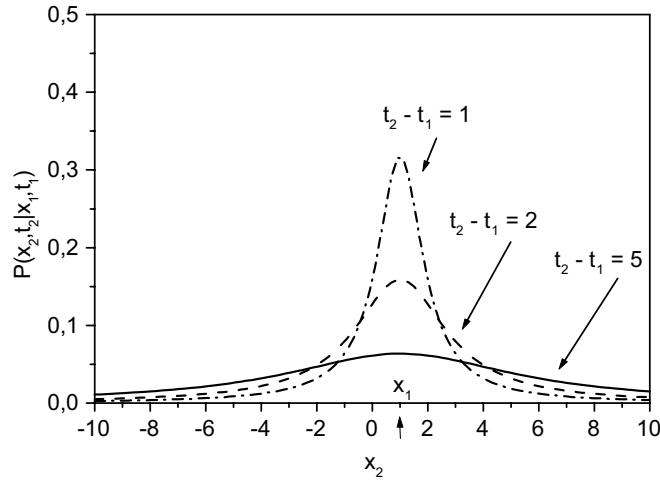


Figura 3.1: Distribución de probabilidad de Lorentz para tres valores de tiempo $t_2 - t_1$.

Esta ecuación también se puede tomar como definición de un proceso de Markov. Recuerde que un proceso de Markov está completamente caracterizado por la distribución $P_1(x, t)$ y el propagador $P(x, t | x', t')$. Por consiguiente estas dos funciones no pueden ser elegidas arbitrariamente, sino que deben satisfacer la ecuación de Chapman-Kolmogorov (3.18) y las relaciones de compatibilidad de la jerarquía. Es decir, dos funciones no negativas:

$$P_1(x, t) \quad \text{y} \quad P(x, t | x', t'),$$

que satisfacen las relaciones de compatibilidad, (3.7), y además el propagador cumple (3.18), definen un único **pe** de Markov. Este teorema no debe confundirse con la caracterización (a veces mal entendida) de la ecuación diferencial que satisface $P_1(x, t)$ (erróneamente llamada Ecuación Maestra markoviana,¹⁷ cuando ésta no tiene un núcleo de memoria).

Ejercicio. (Prueba de 3.18.) Obtenga la ecuación de Chapman-Kolmogorov a partir del hecho de que el futuro de un proceso de Markov no depende del pasado sino del presente dado (3.15).

Ejercicio. (Distribución de Lorentz.) Considere las siguientes funciones no negativas:

$$P_1(x, t) = \frac{t/\pi}{(x^2 + t^2)}$$

$$P(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \frac{(t_2 - t_1)/\pi}{(x_2 - x_1)^2 + (t_2 - t_1)^2}$$

y muestre que el proceso así definido es de Markov [Caminata Aleatoria (*Random Walk*) de Cauchy, ver también capítulo 6]. En la figura (3.1) se muestra la probabilidad condicionada

¹⁷Un análisis detallado de la Ecuación Maestra se presentará en el capítulo 6.

$P(x_2, t_2 \mid x_1, t_1)$ para $x_1 = 1$ y distintos valores de tiempo $t_2 - t_1$. Una discusión sobre la divergencia de los momentos de esta distribución se presenta en la sección (1.4.2).

Ejercicio optativo. (Proceso dicotómico.) Considere el caso particular en que el **pe** sólo puede tomar dos valores ($\{\Delta, -\Delta\}$, por ejemplo), es decir, el dominio \mathcal{D}_x es discreto. Como ya hemos comentado, podemos usar las mismas definiciones para caracterizar procesos definidos sobre un espacio de muestra continuo o discreto. Entonces, estudiemos aquí la ecuación de Chapman-Kolmogorov en el caso en que \mathcal{D}_x sea discreto.¹⁸ Considere la probabilidad de 1-tiempo

$$P_1(x, t) = \frac{\alpha}{\alpha + \gamma} \delta_{x, \Delta} + \frac{\gamma}{\alpha + \gamma} \delta_{x, -\Delta},$$

y el propagador

$$\begin{aligned} P(x_2, t_2 \mid x_1, t_1) &= \frac{1}{\alpha + \gamma} \left(\alpha + \gamma e^{-(\alpha + \gamma)(t_2 - t_1)} \right) \delta_{x_2, \Delta} \delta_{x_1, \Delta} + \\ &+ \frac{\alpha}{\alpha + \gamma} \left(1 - e^{-(\alpha + \gamma)(t_2 - t_1)} \right) \delta_{x_2, \Delta} \delta_{x_1, -\Delta} + \\ &+ \frac{\gamma}{\alpha + \gamma} \left(1 - e^{-(\alpha + \gamma)(t_2 - t_1)} \right) \delta_{x_2, -\Delta} \delta_{x_1, \Delta} + \\ &+ \frac{1}{\alpha + \gamma} \left(\gamma + \alpha e^{-(\alpha + \gamma)(t_2 - t_1)} \right) \delta_{x_2, -\Delta} \delta_{x_1, -\Delta}. \end{aligned}$$

Muestre que el proceso así definido es de Markov. Éste es el proceso dicotómico o proceso del telegrafista; una representación matricial de la probabilidad condicionada se presenta en el capítulo 6. En particular, en la sección (6.3.1) se relacionan las magnitudes α, γ con las cantidades físicas del modelo.¹⁹ Calcule el **vm** $\langle X(t) \rangle$ y el **vm** condicionado $\langle X(t) \rangle|_{X(0)=\Delta}$.

Excursus. (Procesos semimarkovianos.) Es interesante aquí llamar la atención sobre la existencia de casos especiales en los que la probabilidad condicionada puede depender de “dos” condiciones pasadas y, sin embargo, el **pe** puede considerarse de Markov si se redefinen los estados [ver, por ejemplo, G.H. Weiss, *Aspects and Applications of the Random Walk*, Amsterdam, North-Holland (1994), página 6]. Por otro lado, existen **pe** que verifican la ecuación de Chapman-Kolmogorov sin ser procesos de Markov [ver, por ejemplo, P. Lévy, *Comptes Rendus Académie Sciences (París)*, **228**, 2004, (1949); W. Feller, *Ann. Math. Stat.* **30**, 1252, (1959)]; a partir de este resultado se concluye inmediatamente que la ecuación de Chapman-Kolmogorov es una condición necesaria pero no suficiente.

3.4 Procesos estacionarios

En general, un **pe** es estacionario si todas las distribuciones de probabilidad conjuntas de n -tiempos satisfacen, para todo τ , la invariancia continua de traslación temporal:

$$P_n(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = P_n(x_n, t_n + \tau; x_{n-1}, t_{n-1} + \tau; \dots; x_1, t_1 + \tau).$$

¹⁸La integral en (3.18) se reemplaza por una sumatoria.

¹⁹En este caso es sencillo visualizar una posible realización del **pe**.

Por lo tanto, la distribución de probabilidad de 1-tiempo ha de ser independiente de t si el **pe** es estacionario.²⁰ Por consiguiente, si el proceso es estacionario se deduce que $P_1(x, t) = P_{\text{est}}(x)$.

Ejercicio. Demuestre que la función de correlación $\langle\langle X(t_1)X(t_2) \rangle\rangle$ de un **pe** estacionario sólo depende de la diferencia de tiempos $|t_1 - t_2|$.

Ejercicio guiado. (Cálculo de la probabilidad estacionaria.) Mostremos que la distribución de probabilidad estacionaria $P_{\text{est}}(x)$ se puede obtener (si existe) a partir de la probabilidad condicionada $P(x_1, t_1 | x_0, t_0)$. Primero notemos de la definición de probabilidad conjunta de 2-tiempos y del concepto de distribución marginal que

$$P_1(x_1, t_1) = \int P(x_1, t_1 | x_0, t_0) P(x_0, t_0) dx_0.$$

Pero si el proceso es estacionario se deduce que

$$P_{\text{est}}(x_1) = \int P(x_1, t_1 - t_0 | x_0, 0) P_{\text{est}}(x_0) dx_0, \quad (3.19)$$

de aquí se observa que si se cumple que

$$P_{\text{est}}(x_1) = \lim_{t_1 \rightarrow \infty} P(x_1, t_1 - t_0 | x_0, 0) = \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} P(x_1, t_1 - t_0 | x_0, 0), \quad \forall x_0,$$

entonces $P_{\text{est}}(x_1)$ es solución de la ecuación integral (3.19). De este resultado se deduce que es posible obtener, a partir de un límite adecuado en la probabilidad condicionada, la probabilidad estacionaria $P_{\text{est}}(x)$ del proceso. Note que si el **pe** es de Markov y estacionario, entonces el solo conocimiento de la probabilidad condicionada es suficiente para caracterizar por completo al proceso en cuestión.

Ejemplo. Sea el **pe** $\mathbf{T}(t) = X_n$, donde $\{X_j\}$ es un conjunto infinito de **vaei** caracterizadas por una única distribución de probabilidad $P(X_j)$ y además

$$n + \mathfrak{l} < t < n + 1 + \mathfrak{l} \quad \text{con} \quad n \in \mathbb{Z},$$

donde \mathfrak{l} es una variable aleatoria con distribución $P_{\mathfrak{l}}(\omega)$ sobre $\mathcal{D}_{\mathfrak{l}} = [0, 1]$. Una condición necesaria para que el **pe** $\mathbf{T}(t)$ sea estacionario es que su primer momento sea independiente del tiempo. Veamos esa condición:

$$\langle T(t) \rangle_{P_{\mathfrak{l}}(\omega) \prod_j P(X_j)} = \sum_j \langle X_j \rangle \int_0^1 d\omega P_{\mathfrak{l}}(\omega) \Theta(t - j - \omega) \Theta(\omega + j + 1 - t), \quad (3.20)$$

donde $\Theta(z)$ indica la función escalón (ver capítulo 1). Para un tiempo fijo t , en la sumatoria (3.20) existirán varias X_j que cumplan con las condiciones impuestas, en la integración, por las dos funciones escalón: $\Theta(t - j - \omega)$ y $\Theta(\omega + j + 1 - t)$. Por ejemplo, supongamos que la parte entera de t es m , entonces podemos escribir $t = m + \epsilon$, donde ϵ es una cantidad arbitraria en $[0, 1]$. A partir de (3.20) es fácil comprobar que solamente existen dos valores de j que cumplen con las condiciones de los límites de integración. Entonces, si se cumple la condición

$$j = m,$$

²⁰Un ejemplo típico de **pe** estacionario es el de las fluctuaciones temporales de las variables macroscópicas en torno del equilibrio termodinámico.

se infiere que el dominio de integración es $[0, \epsilon]$, o sea, $\int_0^\epsilon P_1(\omega) d\omega$. Mientras que de la condición

$$j = m - 1$$

se deduce que la integración será $\int_\epsilon^1 P_1(\omega) d\omega$. A partir de estos resultados y de (3.20) se observa que para $t = m + \epsilon$

$$\langle T(t) \rangle_{P_1(\omega) \prod_j P(X_j)} = \langle X_m \rangle \int_0^\epsilon d\omega P_1(\omega) + \langle X_{m-1} \rangle \int_\epsilon^1 d\omega P_1(\omega),$$

de lo cual se deduce, por ser X_j idénticamente distribuidas, que

$$\langle T(t) \rangle_{P_1(\omega) \prod_j P(X_j)} = \langle X \rangle \int_0^1 d\omega P_1(\omega) = \langle X \rangle.$$

Ejercicio optativo. Demuestre que $\mathbf{T}(t)$ es un **pe** estacionario. ¿Cuál es la relevancia de la elección de las distribuciones $P_1(\omega)$ y $P(X_j)$?

Ejercicio. Calcule el **vm** de $\mathbf{T}(t)$ cuando las variables X_j son estadísticamente independientes, pero no igualmente distribuidas. En estas condiciones, ¿es estacionario el **pe** $\mathbf{T}(t)$?

3.5 Procesos no estacionarios 2π -periódicos*

De particular interés son los **pe** que asintóticamente cumplen una invariancia de traslación temporal discreta (en general, **pe** no estacionario T -invariante), donde T es cierto período. Es decir, $\forall m = 1, 2 \dots$ se tiene que

$$P_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = P_n(x_n, t_n + mT; \dots; x_1, t_1 + mT), \quad \forall n. \quad (3.21)$$

Casos de este tipo ocurren en sistemas dinámicos, en presencia de ruidos, que son modulados por fuerzas periódicas en el tiempo. En estos procesos suele ser importante estudiar los comportamientos asintóticos (tiempos largos) de las distribuciones de probabilidad conjunta de n -tiempos y funciones de correlación²¹ [5, 6, 7].

Ejercicio. Muestre que un **pe** 2π -periódico no puede ser estacionario.

Como consecuencia de la simetría de traslación discreta (3.21), en el estado asintótico, los momentos, correlaciones, etc., del **pe** $\mathbf{X}(t)$ dependerán de los tiempos absolutos $\{t_l\}$ así como de sus diferencias. Sin embargo, la dependencia en los tiempos absolutos satisface la periodicidad $\{t_l \rightarrow t_l + mT\}$. Entonces, si $0 < \tau < T$, se tiene que la estadística del **pe** $\mathbf{X}(t + \tau)$ es diferente de la estadística del **pe** $\mathbf{X}(t)$, es decir:

$$\begin{aligned} \langle X(t + \tau) \rangle &\neq \langle X(t) \rangle \\ \langle X(t_1 + \tau) X(t_2 + \tau) \rangle &\neq \langle X(t_1) X(t_2) \rangle \\ &\dots \quad \dots \end{aligned}$$

Podemos decir que la diferencia entre los **pe** $\mathbf{X}(t + \tau)$ y $\mathbf{X}(t)$ es una fase. Entonces, en situaciones reales, cuando la fase es importante, decimos que el sistema es coherente, y la utilidad de un **pe** 2π -periódico es obvia. Por otro lado, si la fase no es relevante, decimos

²¹Ver sección (4.8).

que el sistema es incoherente, y entonces, podemos introducir un promedio en τ en el **pe** 2π -periódico, es decir, invocar una difusión aleatoria de la fase.

Excursus. La noción de resonancia estocástica, es decir, la amplificación de una respuesta dinámica mediante la introducción de ruido en el sistema, tiene su génesis en los **pe** no estacionarios 2π -periódicos [ver referencia [5] Vol. 1, pág. 139. Una revisión de distintas aplicaciones del fenómeno de la resonancia estocástica se puede ver en Proc. of the NATO Adv. Res. Workshop: Stochastic Resonance in Physics and Biology, J. Stat. Phys. **70**, N: 1/2, (1993)].

Ejercicio optativo. Muestre que la función de correlación de un **pe** no estacionario 2π -periódico

$$\langle\langle X(t_1)X(t_2) \rangle\rangle,$$

dependerá, en el régimen asintótico, de ambos argumentos. En particular, demuestre que en el estado asintótico la función de correlación depende de $|t_1 - t_2|$ y también, en forma periódica, de los tiempos t_1, t_2 . Ayuda: use series de Fourier para representar el **pe** $\mathbf{X}(t)$.

Otro ejemplo típico de **pe** no estacionario 2π -periódico, es el de las fluctuaciones en circuitos eléctricos sometidos a flujos de corrientes alternas. Ver la sección (3.12.1) para el caso en que el proceso sea también gaussiano.

3.6 Movimiento browniano (proceso de Wiener)

El ejemplo canónico de procesos de Markov es el movimiento browniano, también referido como proceso de Wiener. Denotaremos por $\mathbf{W}(t)$ al proceso de Wiener. Este **pe** de Markov (no estacionario) está caracterizado por la densidad de probabilidad de 1-tiempo

$$P_1(w, t = 0) = \delta(w) \quad (3.22)$$

y tiene por propagador una densidad gaussiana:

$$P(w_2, t_2 | w_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_2 - t_1)}} \exp\left(\frac{-(w_2 - w_1)^2}{2(t_2 - t_1)}\right). \quad (3.23)$$

En la figura (3.2) se muestra el propagador $P(w_2, t_2 | w_1, t_1)$ para $w_1 = 1$ y distintos valores de $t_2 - t_1$. De aquí se puede observar que el “ancho” del propagador gaussiano va como $2\sqrt{t_2 - t_1}$; no así para el propagador de Lorentz de la figura (3.1).

Ejercicio. Demuestre (use densidades marginales) que la densidad de probabilidad de 1-tiempo en $t \neq 0$ viene dada por

$$P_1(w, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left(\frac{-w^2}{2t}\right). \quad (3.24)$$

A partir de (3.24) se observa que para un t fijo, $W(t)$ es una **va** gaussiana de media nula y variancia t . El **pe** $\mathbf{W}(t)$ estará completamente caracterizado si se conoce la distribución de probabilidad conjunta de n -tiempos. Por otro lado, usando (3.16) se observa que

$$\begin{aligned} P_n(w_n, t_n; w_{n-1}, t_{n-1}; \dots; w_1, t_1) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_n - t_{n-1})}} \exp\left(\frac{-(w_n - w_{n-1})^2}{2(t_n - t_{n-1})}\right) \\ &\times \dots \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_2 - t_1)}} \exp\left(\frac{-(w_2 - w_1)^2}{2(t_2 - t_1)}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi t_1}} \exp\left(\frac{-w_1^2}{2t_1}\right), \end{aligned} \quad (3.25)$$

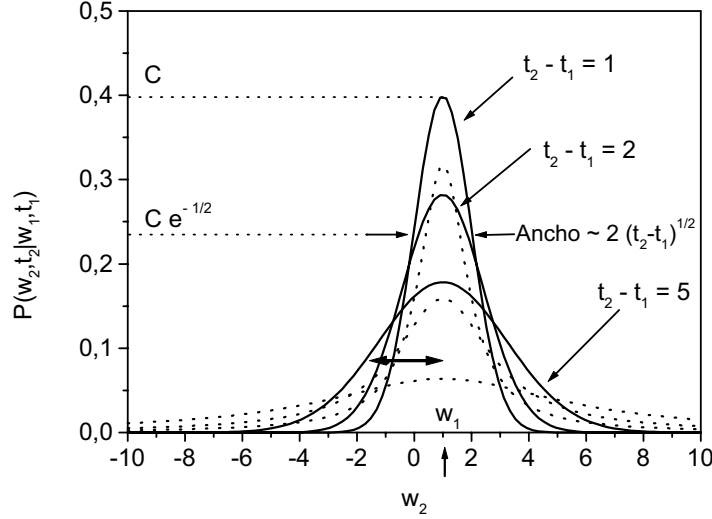


Figura 3.2: Propagador de Wiener para tres valores de tiempo $t_2 - t_1$. Las líneas de puntos corresponden a la caminata aleatoria de Cauchy (distribución de Lorentz) para los mismos tiempos. El semiancho para la distribución gaussiana [en el caso $\sqrt{t_2 - t_1} = \sqrt{5} \simeq 2,23$] se muestra con una flecha doble en la figura 3.2

de donde se deduce que el movimiento browniano es un procesos gaussiano pues

$$\{W(t_1), \dots, W(t_n)\}$$

son **va** conjuntamente distribuidas en forma gaussiana. Un muestreo arbitrario del **pe** $\mathbf{W}(t)$ (para $\{t_n\}$ discretos $\in [t_i, t_f]$) tendrá un peso estadístico dado por la distribución de probabilidad conjunta (3.25).

Excursus. En el límite $\Delta t = |t_j - t_{j-1}| \rightarrow 0$ la distribución conjunta de n -tiempos (3.25) tiende a una distribución de probabilidad funcional. Ésta fue la idea original de la integral funcional introducida por Wiener en 1921, la cual luego dio lugar a la integral de caminos de Feynman. En general, se puede demostrar que todo **pe** de Markov puede ser caracterizado, completamente, mediante una integral de caminos adecuados [8].

Ejercicio. Muestre que los momentos y correlación de dos tiempos del proceso de Wiener están dados por

$$\begin{aligned} \langle W(t)^{2n+1} \rangle &= 0 \\ \langle W(t)^{2n} \rangle &= \frac{(2n)!}{2^n n!} t^n \\ \langle W(t)W(s) \rangle &= \min(t, s). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Ayuda: cuando integre en dW dW' use el cambio de variables $z = W - W'$, $y = W$.

Ejercicio optativo. Use el teorema de Novikov (ver capítulo 1) para calcular el momento de orden cuatro:

$$\langle W(t_1)W(t_2)W(t_3)W(t_4) \rangle.$$

3.6.1 Incrementos del proceso de Wiener*

Otro **pe**, muy importante, que aparece cuando se estudian ecuaciones diferenciales con perturbaciones estocásticas gaussianas (y que está relacionado con el movimiento browniano) es el **pe** de los incrementos del proceso de Wiener:

$$\Delta \mathbf{W}(t) = \mathbf{W}(t + \Delta) - \mathbf{W}(t), \quad \text{para todo valor del parámetro } \Delta. \quad (3.27)$$

El **pe** de los incrementos de Wiener, para un t arbitrario dado, es una **va** gaussiana de media nula y variancia Δ ; veamos

$$\begin{aligned} \mathbb{I} \Delta W(t)^2 \rangle &= \left\langle (W(t + \Delta) - W(t))^2 \right\rangle \\ &= \mathbb{I} W(t + \Delta)^2 \rangle - 2 \langle W(t + \Delta) \cdot W(t) \rangle + \mathbb{I} W(t)^2 \rangle \\ &= (t + \Delta) - 2t + t = \Delta. \end{aligned} \quad (3.28)$$

El hecho de que las realizaciones del movimiento browniano sean altamente irregulares (rugosas), en diferentes escalas de tiempo (factores de magnificación de la “gráfica” $W(t)$), muestra que existen ciertas propiedades estadísticamente autosimilares en el registro de W frente a t .

Ejercicio. Demuestre que la correlación de dos incrementos de Wiener para tiempos disjuntos $\{t, s\}$, tal que $|t - s| \geq \Delta$, se anula idénticamente. Entonces, puesto que $\Delta \mathbf{W}(t)$ es un **pe** gaussiano de media nula con $\langle \Delta W(t) \Delta W(s) \rangle = 0$, se deduce que los incrementos de Wiener son **ei** para tiempos disjuntos. Recuerde que **ei** es una condición más fuerte que **va** no correlacionadas, pero en el caso gaussiano es equivalente.

Excursus. En 1968 Mandelbrot introdujo una generalización del proceso de Wiener con el nombre:²² *The fractional Brownian motion (fBm)* [9]. Esta modificación del **pe** de Wiener da la posibilidad de modelar objetos estadísticamente autosimilares con diferentes “rugosidades”. En el apéndice H se presenta el concepto de autosemejanza.

La tremenda irregularidad en las realizaciones del **pe** de Wiener conduce a concluir que las realizaciones no son diferenciables en ningún lugar. El hecho de que los incrementos de Wiener en intervalos de tiempo disjuntos sean **vaei** es otra de las características típicas de las trayectorias del movimiento browniano (o procesos de Wiener). Por ello mismo, la derivada con respecto al tiempo del proceso de Wiener no está definida en el contexto ordinario de un **pe**; pues $dW(t)/dt$ no está bien definida como función aleatoria, para todo t , de la misma manera que tampoco lo está la δ de Dirac en el espacio de funciones usuales.

3.7 Incrementos de un proceso estocástico arbitrario*

Es posible probar que un **pe** con incrementos estadísticamente independientes es un proceso de Markov, no así la inversa [como lo demuestra el contraejemplo del proceso de Ornstein-Uhlenbeck de la sección (3.12.2)]. Para demostrar esta aseveración notemos que si $\mathbf{Y}(t)$ es

²²Se le llama *movimiento browniano fraccionario* pues la variancia del **pe** *fBm* no es lineal en el tiempo sino que tiene un exponente fraccionario.

el proceso en estudio, sus incrementos (para tiempos arbitrarios t_j) pueden ser denotados de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}\Delta_k &= Y(t_k) - Y(t_{k-1}) \\ \Delta_{k-1} &= Y(t_{k-1}) - Y(t_{k-2}) \\ &\dots \\ \Delta_2 &= Y(t_2) - Y(t_1),\end{aligned}\tag{3.29}$$

donde Δ_k son **va** y los tiempos t_j se han ordenado en forma creciente $t_1 < t_2 \dots < t_{k-1} < t_k$. Usando la representación (II) para los **pe** podemos escribir las variables aleatorias $Y(t_j)$ en la siguiente forma:

$$\begin{aligned}Y(t_k) &= Y(t_{k-1}) + \Delta_k \\ Y(t_{k-2}) &= Y(t_{k-1}) - \Delta_{k-1} \\ Y(t_{k-3}) &= Y(t_{k-1}) - \Delta_{k-1} - \Delta_{k-2} \\ &\dots \\ Y(t_1) &= Y(t_{k-1}) - \Delta_{k-1} - \dots - \Delta_2.\end{aligned}\tag{3.30}$$

Note que estas ecuaciones no son más que transformaciones lineales de variables aleatorias. Consecuentemente, si fijamos la condición $Y(t_{k-1})$, la probabilidad condicionada²³

$$P(Y(t_k) \mid Y(t_{k-1}))$$

estará determinada por la distribución de probabilidad $\mathcal{W}(\Delta_k)$. Pero si fijamos dos condiciones: $Y(t_{k-1})$ y $Y(t_{k-2})$, de la segunda ecuación de (3.30) se deduce que Δ_{k-1} estará fija también. Ahora bien, puesto que Δ_k, Δ_{k-1} son **vai**, se deduce que $\mathcal{W}(\Delta_k \mid \Delta_{k-1}) = \mathcal{W}(\Delta_k)$. Consecuentemente, el hecho de que $Y(t_{k-2})$ esté fija no modifica la distribución de $Y(t_k)$ condicionada a dos tiempos, pues Δ_{k-1} no altera o modifica la distribución condicionada de Δ_k ; o sea:

$$P(Y(t_k) \mid Y(t_{k-1}), Y(t_{k-2})) = P(Y(t_k) \mid Y(t_{k-1})).$$

Esta es la primera de las condiciones que se deben satisfacer para que un proceso sea de Markov. En general, de (3.30) y del hecho de que $\{\Delta_j\}$ son **vai**,²⁴ se deduce que

$$P(y(t_k) \mid y(t_{k-1}), y(t_{k-2}), \dots, y(t_1)) = P(y(t_k) \mid y(t_{k-1})),$$

que es la condición necesaria y suficiente para ser de Markov.

3.8 Criterios de convergencia*

En la teoría de la probabilidad no hay una forma única de definir el concepto de límite²⁵ en una sucesión de **va** [10, 2]. Es necesario entonces considerar las distintas definiciones de

²³Note que aquí estamos usando la notación simplificada: $P(y_k, t_k \mid y_{k-1}, t_{k-1}) \equiv P(Y(t_k) \mid Y(t_{k-1}))$.

²⁴Y por tanto $\mathcal{W}(\Delta_k \mid \Delta_{k-1}, \Delta_{k-2}, \dots, \Delta_2) = \mathcal{W}(\Delta_k)$.

²⁵Recordemos que una sucesión de números N_n tiende al límite N si, dado $\varepsilon > 0$, podemos encontrar un número n_0 tal que $|N_n - N| < \varepsilon$ para todo $n > n_0$.

convergencia al límite, en particular el límite en media cuadrática es una de las convergencias más frecuentemente usadas en física estadística. Definiremos aquí cuatro criterios de convergencia.

Sea la sucesión de $\mathbf{va} \{l_n\}$ con $n \in \mathcal{N}$, donde cada $\mathbf{va} l_n$ está definida en el dominio S . Entonces entendemos que el límite de esa sucesión cuando $n \rightarrow \infty$ es

$$l = \lim_{n \rightarrow \infty} l_n. \quad (3.31)$$

Aquí l es, en general, la \mathbf{va} a la cual la sucesión de $\mathbf{va} \{l_n\}$ converge. Note que para un valor específico de $\omega \in S$, $l_n(\omega)$ es una sucesión de números y ésta podría o no converger.

Definiciones

1. Convergencia con certeza (Probabilidad 1): l_n converge con Prob. 1 a l para todo $\omega \in S$ (excepto un conjunto con probabilidad cero) si

$$l(\omega) = \lim_{n \rightarrow \infty} l_n(\omega), \quad (3.32)$$

entonces l_n converge a l y escribimos²⁶

$$\text{ac} - \lim_{n \rightarrow \infty} l_n \rightarrow l.$$

2. Convergencia en media: l_n converge a l en media cuadrática si se cumple

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_S (l_n(\omega) - l(\omega))^2 P_l(\omega) d\omega \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \langle (l_n - l)^2 \rangle = 0, \quad (3.33)$$

entonces l_n converge a l y escribimos²⁷

$$\text{ms} - \lim_{n \rightarrow \infty} l_n \rightarrow l.$$

3. Convergencia en probabilidad: l_n converge en probabilidad a l si la probabilidad de desviación tiende a cero, o sea, si para todo $\epsilon > 0$ se cumple

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{Prob.} (|l_n - l| > \epsilon) = 0,$$

es decir:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_S \Theta[|l_n(\omega) - l(\omega)| - \epsilon] P_l(\omega) d\omega = 0, \quad (3.34)$$

donde $\Theta[z]$ es la función escalón, entonces l_n converge a l en probabilidad y escribimos

$$\text{Prob.} \lim_{n \rightarrow \infty} l_n \rightarrow l.$$

²⁶La notación ac viene del inglés: *Almost certain* (casi cierto). Note que en este caso el límite es un número.

²⁷La notación ms viene del inglés: *Mean square* (media cuadrada).

4. Convergencia en distribución. Éste es un criterio aún más débil, decimos que \mathfrak{l}_n converge en distribución a \mathfrak{l} si para toda función continua y acotada $f(X)$ se cumple

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle f[\mathfrak{l}_n] \rangle = \langle f[\mathfrak{l}] \rangle, \quad (3.35)$$

es decir:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_S [f(\mathfrak{l}_n(\omega)) - f(\mathfrak{l}(\omega))] P_{\mathfrak{l}}(\omega) d\omega = 0,$$

entonces \mathfrak{l}_n converge en distribución a \mathfrak{l} . En particular, si tomamos

$$f(X) = \exp(ikX),$$

se observa que las funciones características convergen entre sí. O sea, la distribución de probabilidad de \mathfrak{l}_n converge a la distribución de probabilidad de \mathfrak{l} . Note que en este caso la sucesión $\mathfrak{l}_n(\omega)$ no necesita converger $\forall \omega$.

Nota. Es posible observar que existen las siguientes relaciones entre los diferentes criterios de convergencia

$$\begin{aligned} \text{ac} - \lim_{n \rightarrow \infty} \mathfrak{l}_n \rightarrow \mathfrak{l} &\implies \text{Prob.} \lim_{n \rightarrow \infty} \mathfrak{l}_n \rightarrow \mathfrak{l} \\ \text{ms} - \lim_{n \rightarrow \infty} \mathfrak{l}_n \rightarrow \mathfrak{l} &\implies \text{Prob.} \lim_{n \rightarrow \infty} \mathfrak{l}_n \rightarrow \mathfrak{l} \\ \text{Prob.} \lim_{n \rightarrow \infty} \mathfrak{l}_n \rightarrow \mathfrak{l} &\implies \mathfrak{l}_n \text{ converge a } \mathfrak{l} \text{ en distribución.} \end{aligned}$$

3.8.1 Teorema de Markov (ergodicidad)

El concepto de ergodicidad aparece cuando se pretende establecer la equivalencia entre el promedio en distribución (estadístico) frente al promedio temporal (muestreo). Consideremos aquí la situación cuando el promedio temporal del **pe** $\mathbf{X}(t)$ se realiza mediante un conjunto de datos discretos, es decir, cuando $\bar{X}_T = \frac{1}{T} \int_0^T X(t) dt$ se reemplaza por la suma

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n X(t_j).$$

Claramente, \bar{X}_n es una **va** que depende de la realización estocástica $X(t)$. La pregunta interesante es si la sucesión \bar{X}_n converge o no a una cierta cantidad η cuando $n \rightarrow \infty$. La respuesta la da el siguiente teorema debido a Markov [10].

Si las **va** $X(t_j)$ son tales que la media $\bar{\eta}_n$ de \bar{X}_n tiende al límite η y su variancia tiende a 0 cuando $n \rightarrow \infty$, es decir, si en el límite $n \rightarrow \infty$ se tiene

$$\langle \bar{X}_n \rangle = \bar{\eta}_n \rightarrow \eta \quad (3.36)$$

$$\langle (\bar{X}_n - \bar{\eta}_n)^2 \rangle = \bar{\sigma}_n^2 \rightarrow 0, \quad (3.37)$$

entonces la **va** \bar{X}_n converge a η en media cuadrática, es decir: $\lim_{n \rightarrow \infty} \langle (\bar{X}_n - \eta)^2 \rangle \rightarrow 0$.

La prueba de este teorema se basa en el empleo de la desigualdad de Cauchy-Schwarz

$$|\bar{X}_n - \eta|^2 \leq 2 |\bar{X}_n - \bar{\eta}_n|^2 + 2 |\bar{\eta}_n - \eta|^2.$$

Efectivamente, tomando **vm** en esta desigualdad se deduce que

$$\left\langle (\bar{X}_n - \eta)^2 \right\rangle \leq 2 \left\langle (\bar{X}_n - \bar{\eta}_n)^2 \right\rangle + 2 |\bar{\eta}_n - \eta|^2.$$

Aplicando (3.36) y (3.37) en esta expresión se prueba lo que se quería demostrar, es decir:

$$\text{ms} - \lim_{n \rightarrow \infty} \bar{X}_n \rightarrow \eta.$$

3.8.2 Continuidad de las realizaciones

Para tener una idea de la irregularidad de cada realización del proceso de Wiener consideremos primeramente el concepto de derivada temporal en media cuadrática:

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta W}{\Delta t} &\rightarrow \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sqrt{\left\langle (W(t + \Delta t) - W(t))^2 \right\rangle} \frac{1}{\Delta t} \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sqrt{\left\langle (W(t + \Delta t))^2 \right\rangle + \left\langle (W(t))^2 \right\rangle - 2 \langle W(t + \Delta t) W(t) \rangle} \frac{1}{\Delta t} \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\sqrt{\Delta t}}{\Delta t} \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Esta divergencia muestra que la derivada del **pe** de Wiener no está definida en ningún punto de la realización. Sin embargo, las realizaciones del proceso de Wiener son continuas como se puede ver a partir del siguiente resultado.

Podemos estudiar la continuidad de cualquier **pe** utilizando el criterio de Lindeberg. Diremos, con Prob. 1, que las realizaciones son funciones continuas de t si para todo $\epsilon > 0$ se cumple que

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x-z| > \epsilon} dx P(x, t + \Delta t | z, t) \rightarrow 0, \quad (3.38)$$

uniformemente en z , t y Δt . O sea, la probabilidad de estar infinitamente cerca de z (en el instante $t + \Delta t$) tiende a cero más rápido que Δt .

Ejemplo. Consideremos el proceso de Wiener y mostremos que efectivamente el **pe** $\mathbf{W}(t)$ tiene realizaciones continuas (pero no diferenciables, según vimos anteriormente). En este caso el propagador es

$$P(w_2, t_2 | w_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_2 - t_1)}} \exp \left(\frac{-(w_2 - w_1)^2}{2(t_2 - t_1)} \right);$$

entonces

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta t}} \int_{|w_2 - w_1| > \epsilon} dw_2 \exp \left(\frac{-(w_2 - w_1)^2}{2\Delta t} \right) &= \frac{2}{\sqrt{2\pi\Delta t}} \int_{\epsilon}^{\infty} dZ \exp \left(\frac{-Z^2}{2\Delta t} \right) \\ &= \text{erfc} (\epsilon/\sqrt{2\Delta t}). \end{aligned}$$

Aplicando el criterio de Lindeberg y el desarrollo $\text{erfc} (\chi) \simeq e^{-\chi^2}/\chi\sqrt{\pi}$ cuando $\chi \rightarrow \infty$, obtenemos

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \text{erfc} (\epsilon/\sqrt{2\Delta t}) \simeq \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \exp \left[-(\epsilon/\sqrt{2\Delta t})^2 \right] \frac{1}{(\epsilon\sqrt{\pi}/\sqrt{2\Delta t})} \rightarrow 0,$$

de lo cual se deduce, a partir de (3.38), que las realizaciones son continuas con Prob. 1.

Ejercicio optativo. Muestre que una caminata aleatoria de Cauchy tiene realizaciones discontinuas. En general se puede definir un **pe** de Lévy a partir del cual la caminata aleatoria de Cauchy es un caso particular²⁸ [11, 12, 13].

3.9 Ruido gaussiano blanco

La relación entre el ruido gaussiano blanco²⁹ y el movimiento browniano (proceso de Wiener) es fácil de establecer. Puesto que el ruido es gaussiano, podemos caracterizarlo completamente conociendo solamente su **vm** y su correlación, o sea:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad (3.39)$$

$$\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = \delta(t - s). \quad (3.40)$$

La δ de Dirac en la correlación (3.40) indica el carácter singular del ruido blanco; es decir, $\xi(t)$ no es realmente una función aleatoria “usual” de argumento t , o sea, un buen **pe** en el contexto ordinario. No obstante, las ecuaciones (3.39) y (3.40) definen completamente el ruido gaussiano blanco.³⁰ El proceso de Wiener se relaciona con el ruido gaussiano blanco mediante la ecuación integral

$$\int dW(t) = \int \xi(t) dt. \quad (3.41)$$

A menudo suele escribirse esta ecuación en forma de ecuación diferencial,

$$\frac{dW(t)}{dt} = \xi(t), \quad (3.42)$$

pero lo que debe entenderse es (3.41). Esta ecuación diferencial es la más sencilla y a la vez fundamental de las ecuaciones diferenciales estocásticas (**ede**). En ella podemos advertir la presencia de un coeficiente que es un **pe**, por lo que conociendo las propiedades estadísticas de $\xi(t)$ es posible conocer las propiedades estadísticas del **pe** $W(t)$. Sin embargo, debido al carácter singular del **pe** $\xi(t)$, existen algunas **ede** que presentan ambigüedades en el cálculo diferencial, estas dificultades serán analizadas en las próximas secciones.

Ejercicio. Utilizando el momento y la correlación del **pe** $\xi(t)$, muestre que mediante (3.41) se obtienen los momentos y correlaciones que definen el proceso de Wiener.

Esquema funcional

Si extendemos la definición de **pe** a espacios funcionales³¹ podemos volver a interpretar la relación que existe entre el **pe** $W(t)$ y el ruido gaussiano blanco. Consideremos el ruido

²⁸Ver segundo ejercicio de la sección (3.3.1).

²⁹Una realización del ruido gaussiano blanco se puede imaginar como una secuencia de pulsos “angostos” (densa en el tiempo) y de pequeñas amplitudes aleatorias (positivas y negativas). En el límite en que los pulsos (de amplitud infinitesimal) son deltas de Dirac y la densidad de ellos es infinita se obtiene el ruido gaussiano blanco.

³⁰En general hablaremos de ruidos o **pe** indistintamente, y usaremos letras griegas para caracterizarlos cuando nos refiramos a ecuaciones diferenciales.

³¹En esta oportunidad no ahondaremos en este aspecto técnico y sólo daremos “recetas” básicas para poder manejar correctamente este tipo de análisis.

gaussiano blanco como un operador funcional $\xi[\bullet]$, cuyo argumento es una función arbitraria $f(t)$. Ahora bien, para obtener una **va** bien definida “necesitamos” dar una función de prueba $f(t)$, en todo su dominio, más que fijar el tiempo t como se hace en un **pe** ordinario; o sea:

$$\xi[f] = \int_0^\infty \xi(t)f(t) dt. \quad (3.43)$$

Aquí hemos adoptado el dominio $t \in [0, \infty]$. Esta expresión es correcta para toda $f(t)$ suave, es decir, acotada y rápidamente decreciente en los límites de integración. De esta manera, ahora sí, la **va** $\xi[f]$ está bien definida, aún cuando algunas de las realizaciones $\xi(t)$ sean objetos tan singulares como la δ de Dirac.

A partir de la expresión (3.43) se puede mostrar, por ejemplo, la igualdad

$$\mathbb{I} \xi[f]^2 \rangle = \int_0^\infty f(t)^2 dt. \quad (3.44)$$

Entonces, usando $\xi(t) = dW(t)/dt$ junto con los momentos del **pe** $W(t)$, se deduce de (3.43) que

$$\begin{aligned} \mathbb{I} \xi[f]^2 \rangle &= \left\langle \left(\int_0^\infty \xi(t)f(t) dt \right)^2 \right\rangle \\ &= \left\langle \left(\int_0^\infty \frac{dW}{dt} f(t) dt \right)^2 \right\rangle \\ &= \left\langle \left(- \int_0^\infty W(t) \frac{df(t)}{dt} dt \right)^2 \right\rangle, \end{aligned} \quad (3.45)$$

donde hemos integrado por partes y usado $f(\infty) = 0$ por ser suave, y además $W(0) = 0$, pues estamos asumiendo un **pe** de Wiener con media nula. Aplicando $\langle W(t_1)W(t_2) \rangle = \min(t_1, t_2)$ en (3.45) obtenemos finalmente

$$\begin{aligned} \mathbb{I} \xi[f]^2 \rangle &= \left\langle \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_2 f'(t_1)f'(t_2)W(t_1)W(t_2) \right\rangle \\ &= \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_2 f'(t_1)f'(t_2) \min(t_1, t_2) \\ &= \int_0^\infty dt_1 f'(t_1) \left(\int_0^{t_1} dt_2 f'(t_2)t_2 + t_1 \int_{t_1}^\infty dt_2 f'(t_2) \right) \\ &= \int_0^\infty dt_1 f'(t_1) \left(- \int_0^{t_1} dt_2 f(t_2) \right) \\ &= - \left[f(t) \int_0^t f(t_2) dt_2 \right]_0^\infty + \int_0^\infty f(t_1)^2 dt_1 = \int_0^\infty f(t_1)^2 dt_1, \end{aligned}$$

donde hemos integrado por partes dos veces.

Por otro lado, empleando las relaciones (3.39) y (3.40), que definen el ruido gaussiano blanco, la (3.44) se prueba de forma inmediata, a saber:

$$\mathbb{I} \xi[f]^2 \rangle = \left\langle \int_0^\infty \xi(t_1)f(t_1) dt_1 \int_0^\infty \xi(t_2)f(t_2) dt_2 \right\rangle =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^\infty f(t_1) dt_1 \int_0^\infty f(t_2) \langle \xi(t_2) \xi(t_1) \rangle dt_2 \\
&= \int_0^\infty f(t_1) dt_1 \int_0^\infty f(t_2) \delta(t_1 - t_2) dt_2 \\
&= \int_0^\infty f(t)^2 dt.
\end{aligned}$$

Ejercicio optativo. (Momentos superiores.) Utilizando (3.43) y los momentos del proceso de Wiener calcule $\langle \xi[f]^4 \rangle$; compare este resultado con el que se obtiene a partir del cálculo directo usando (3.39) y (3.40) que definen el ruido gaussiano blanco.

3.10 Procesos gaussianos

3.10.1 Caso no singular

Un **pe** $\mathbf{X}(t)$ es gaussiano si toda la Jerarquía de Kolmogorov está caracterizada por probabilidades conjuntas gaussianas. Analicemos $P_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1)$: puesto que tenemos n **va** la densidad de probabilidad debe ser de la forma

$$P_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = \frac{(\det A)^{1/2}}{(2\pi)^{n/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{j,l}^n (x_j - \langle X(t_j) \rangle) A_{jl} (x_l - \langle X(t_l) \rangle) \right], \quad (3.46)$$

donde

$$\begin{aligned}
A_{jl}^{-1} &\equiv A_{jl}^{-1}(\{t_n\}) \\
&= \langle (X(t_j) - \langle X(t_j) \rangle) (X(t_l) - \langle X(t_l) \rangle) \rangle \\
&\equiv \langle \langle X(t_j) X(t_l) \rangle \rangle,
\end{aligned} \quad (3.47)$$

en completa analogía con el caso de n -variables gaussianas.

En el contexto de los procesos estocásticos, $\langle \langle X(t_j) X(t_l) \rangle \rangle$ es una función de correlación en el tiempo. Entonces, de la fórmula (3.46) deducimos que un **pe** $\mathbf{X}(t)$, gaussiano, queda completamente caracterizado conociendo sus dos primeros cumulantes, es decir, $\langle \langle X(t) \rangle \rangle$ y $\langle \langle X(t) X(t') \rangle \rangle$.

3.10.2 Caso singular (correlación blanca)*

Otra forma de definir un **pe** $\mathbf{X}(t)$ es mediante el empleo de la funcional característica:³²

$$G_X([k]) = \left\langle \exp \left[i \int k(t) X(t) dt \right] \right\rangle_{P([X(\bullet)])}.$$

Entonces todas las fórmulas válidas para **va** multidimensionales serán generalizadas usando la prescripción:

$$\frac{\partial}{\partial k_j} \rightarrow \frac{\delta}{\delta k(t_j)} \quad (3.48)$$

³²Comparando con la notación de la ecuación (3.4), se observa que $P([X(\bullet)])$ representa la probabilidad funcional del ensemble de todas las realizaciones del **pe** $\mathbf{X}(t)$.

$$\sum_j x_j \rightarrow \int x(t) dt. \quad (3.49)$$

Por ejemplo, los momentos y correlaciones vendrán dados por

$$\langle X(t)^m X(s)^n \rangle = \frac{1}{i^{m+n}} \frac{\delta^m}{\delta k(t)^m} \frac{\delta^n}{\delta k(s)^n} G_X([k]) \Big|_{k(t)=0}.$$

Es decir, para el segundo cumulante tenemos

$$\langle \langle X(t) X(s) \rangle \rangle = \frac{1}{i^2} \frac{\delta}{\delta k(t)} \frac{\delta}{\delta k(s)} \ln G_X([k]) \Big|_{k(t)=0}.$$

Ejemplo. Calculemos la funcional característica del ruido gaussiano blanco $\xi(t)$ [ver también sección (3.9)]. Dado que el **pe** es gaussiano y de media nula, sabemos que el único cumulante que aparece es el segundo. Usando la definición de funcional característica, en términos de un desarrollo en cumulantes, se observa de (3.6) que

$$\ln G_\xi([k]) = \frac{-1}{2!} \int \int k(t_1) k(t_2) \langle \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle \rangle dt_1 dt_2.$$

En el caso singular la correlación es blanca: $\langle \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle \rangle = \Gamma_2 \delta(t_1 - t_2)$, entonces se obtiene finalmente

$$G_\xi([k]) = \exp \left[-\frac{\Gamma_2}{2} \int k(t)^2 dt \right], \quad (3.50)$$

que es la funcional buscada.

Ejercicio optativo. Usando $G_\xi[k(t)]$, con $\Gamma_2 = 1$, muestre que el momento y la correlación del ruido gaussiano blanco $\xi(t)$ son aquellos dados en (3.39) y (3.40).

Excursus. La funcional generadora de los cumulantes de un **pe** $\xi(t)$ (es decir, la funcional $\ln G_\xi([k])$) no puede ser un polinomio de grado mayor que dos, sino que debe de ser una serie para asegurar la positividad de la probabilidad. [Referencia: *Teorema* de Marcinkiewicz; Math Z. 44, 612, (1939); ver también: Rajagopal and Sudarshan; Phys. Rev. **A** 10, 1852, (1974).]

Ejercicio optativo. (Ruido blanco.) En la sección (3.1.5) mostramos, en forma general, la relación que existe entre la probabilidad conjunta y la funcional característica $G_\xi([k])$. A partir de la funcional característica gaussiana, muestre que si la correlación es blanca no es factible obtener una expresión para la probabilidad. Este hecho no es nada más que una consecuencia del carácter singular de un ruido blanco.

3.11 Espectro de fluctuaciones de procesos escalantes*

Utilizando la función característica $G_X(k, t)$ es posible, de una manera directa, calcular el espectro de potencia de las fluctuaciones del **pe** $\mathbf{X}(t)$. Supongamos que el **pe** $\mathbf{X}(t)$ cumple con la relación de escala (ver apéndice H.2)

$$\frac{\mathbf{X}(\Lambda t)}{\Lambda^H} = \mathbf{X}(t), \quad (3.51)$$

donde H es algún parámetro que se infiere de estudiar la invariancia de la función característica asociada

$$G_X\left(\frac{k}{\Lambda^H}, \Lambda t\right) = G_X(k, t); \quad (3.52)$$

por ejemplo, en el caso del movimiento browniano se tiene $H = \frac{1}{2}$.

A partir de la relación de escala (3.51) es posible estimar el espectro de potencia en la siguiente forma [14]. Consideremos que el parámetro Λ es una cantidad fija; entonces se puede definir un nuevo **pe** $\mathbf{Y}(t)$ de la siguiente manera:

$$\mathbf{Y}(t, T) = \begin{cases} \mathbf{Y}(t) = \Lambda^{-H} \mathbf{X}(\Lambda t) & \text{si } 0 < t < T \\ 0 & \text{en otro lugar.} \end{cases} \quad (3.53)$$

Adoptando la siguiente notación para las transformadas de Fourier³³

$$\begin{array}{ll} F_X(f, T), F_Y(f, T) & \text{Transformadas de Fourier de } \mathbf{X}(t, T) \text{ y } \mathbf{Y}(t, T) \\ S_X(f, T), S_Y(f, T) & \text{Densidades espectrales de } \mathbf{X}(t, T) \text{ y } \mathbf{Y}(t, T) \\ S_X(f), S_Y(f) & \text{Densidades espectrales de } \mathbf{X}(t) \text{ y } \mathbf{Y}(t), \end{array} \quad (3.54)$$

tenemos, por ejemplo:

$$F_Y(f, T) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{Y}(t, T) \exp(-2\pi i f t) dt = \int_0^T \mathbf{Y}(t) \exp(-2\pi i f t) dt$$

y $S_Y(f, T) = \frac{1}{T} |F_Y(f, T)|^2$, etc.

Podemos ahora considerar el cálculo de $F_Y(f, T)$ usando la relación de escala (3.51), de donde se deduce que

$$\begin{aligned} F_Y(f, T) &= \int_0^T \mathbf{Y}(t) \exp(-2\pi i f t) dt \\ &= \frac{1}{\Lambda} \int_0^T \Lambda^{-H} \mathbf{X}(\Lambda t) \exp\left(\frac{-2\pi i f \Lambda t}{\Lambda}\right) \Lambda dt \\ &= \int_0^{T\Lambda} \Lambda^{-H-1} \mathbf{X}(t') \exp\left(\frac{-2\pi i f t'}{\Lambda}\right) dt'. \end{aligned} \quad (3.55)$$

A partir de (3.55) se obtiene

$$F_Y(f, T) = \frac{1}{\Lambda^{H+1}} F_X\left(\frac{f}{\Lambda}, T\Lambda\right). \quad (3.56)$$

Luego $S_Y(f, T)$ está dada por

$$\begin{aligned} S_Y(f, T) &= \frac{1}{T} |F_Y(f, T)|^2 \\ &= \frac{1}{T} \left(\frac{1}{\Lambda^{H+1}}\right)^2 |F_X\left(\frac{f}{\Lambda}, T\Lambda\right)|^2 \\ &= \frac{1}{\Lambda^{2H+1}} S_X\left(\frac{f}{\Lambda}, T\Lambda\right). \end{aligned} \quad (3.57)$$

³³Sobre la definición de densidad espectral (espectro de potencia) ver sección (5.1).

En el límite $T \rightarrow \infty$ la densidad espectral $S_Y(f)$ satisface la relación

$$S_Y(f) = \lim_{T \rightarrow \infty} S_Y(f, T),$$

entonces de (3.57) se deduce que

$$S_Y(f) = \frac{1}{\Lambda^{2H+1}} S_X\left(\frac{f}{\Lambda}\right). \quad (3.58)$$

Puesto que $\mathbf{Y}(t)$ no es nada más ni nada menos que el **pe** $\mathbf{X}(t)$, sus densidades espectrales deben coincidir. Para ver esto tomemos por ejemplo $\Lambda \equiv 1$, de donde se deduce $S_Y(f) = S_X(f)$. Entonces, de la relación (3.58) se obtiene finalmente

$$S_X(f) = \frac{1}{\Lambda^{2H+1}} S_X\left(\frac{f}{\Lambda}\right). \quad (3.59)$$

Ahora, poniendo formalmente $f = 1$ y reemplazando $1/\Lambda$ por f en (3.59), se obtiene el resultado deseado:

$$S_X(f) \propto \frac{1}{f^{2H+1}}. \quad (3.60)$$

Esta expresión da el espectro de las fluctuaciones de un **pe** que cumple la relación de escala: $\mathbf{X}(\Lambda t) = \Lambda^H \mathbf{X}(t)$.

Ejemplo. (Espectro del proceso de Wiener.) La función característica del proceso de difusión³⁴ verifica la relación:

$$G_W\left(\frac{k}{\Lambda^{1/2}}, \Lambda t\right) = \exp\left(-\frac{\Lambda t}{2} \left(\frac{k}{\Lambda^{1/2}}\right)^2\right) = G_W(k, t),$$

luego la relación de escala es

$$\frac{\mathbf{W}(\Lambda t)}{\Lambda^{1/2}} = \mathbf{W}(t).$$

Entonces, utilizando (3.60) con $H = 1/2$, se deduce que

$$S_W(f) \propto \frac{1}{f^2},$$

que es el espectro de potencia del movimiento browniano.

Ejemplo. (Espectro del ruido gaussiano blanco.) La función característica del ruido gaussiano blanco es singular (no está definida), ¡debido a la ocurrencia de una δ de Dirac al cuadrado! Este hecho se puede ver a partir de la funcional característica del ruido gaussiano blanco (3.50). La función característica se obtiene evaluando (3.50) con la función de prueba $k(t) = k\delta(s - t)$, o sea:

$$G_\xi([k(t) = k\delta(s - t)]) = G_\xi(k, t) = \exp\left[-\frac{\Gamma_2}{2} k^2 \int_0^\infty \delta(s - t)^2 ds\right]. \quad (3.61)$$

No obstante la ocurrencia de $\delta(s - t)^2$ en el integrando, podemos estudiar “formalmente” la propiedad de invariancia de $G_\xi(k, t)$ a partir de (3.61); veamos:

³⁴Tome la transformada de Fourier de (3.24).

$$\begin{aligned}
G_\xi\left(\frac{k}{\Lambda^{-1/2}}, \Lambda t\right) &= \exp\left[-\frac{\Gamma_2}{2}\left(\frac{k}{\Lambda^{-1/2}}\right)^2 \int_0^\infty \delta(s - \Lambda t)^2 ds\right] \\
&= \exp\left[-\frac{\Gamma_2}{2}\Lambda k^2 \int_0^\infty (\delta(\Lambda s' - \Lambda t))^2 \Lambda ds'\right].
\end{aligned} \tag{3.62}$$

Utilizando la propiedad de la δ de Dirac: $\delta(\Lambda s' - \Lambda t) = \delta(s' - t)/\Lambda$, en (3.62), se obtiene:

$$G_\xi\left(\frac{k}{\Lambda^{-1/2}}, \Lambda t\right) = \exp\left[-\frac{\Gamma_2}{2}\Lambda k^2 \int_0^\infty \left(\frac{\delta(s' - t)}{\Lambda}\right)^2 \Lambda ds'\right] = G_\xi(k, t), \tag{3.63}$$

lo cual “formalmente” significa que las realizaciones de este ruido verifican la relación de escala:

$$\frac{\xi(\Lambda t)}{\Lambda^{-1/2}} = \xi(t). \tag{3.64}$$

Note que esta relación implica un exponente H negativo. Entonces, utilizando (3.60) con $H = -1/2$, se deduce que

$$S_\xi(f) \propto \frac{1}{f^0} = \text{Cte.};$$

es decir, un espectro de potencia blanco.

Excursus. Utilizando la relación de escala $\mathbf{X}(\Lambda t) = \Lambda^H \mathbf{X}(t)$ también es posible estudiar la dimensión fractal de las realizaciones del **pe** $\mathbf{X}(t)$; o sea, la autosemejanza a diferentes escalas de la gráfica de X frente a t . Ver, por ejemplo, apéndice H y referencias [12, 14, 15].

Nota. Un resultado interesante obtenido por Wiener y Kinchine establece la relación que existe entre el espectro de potencia $S_X(f)$ de un **pe** $\mathbf{X}(t)$ estacionario y ergódico con su función de correlación $\langle\langle X(t)X(t') \rangle\rangle$. Ver capítulo 5.

3.12 Procesos markovianos y gaussianos

La clase de procesos que son simultáneamente markovianos y gaussianos poseen una universalidad que puede ser caracterizada por su función de correlación, como lo demuestra el siguiente teorema debido a Doob [1].

Veamos primero la condición necesaria. Puesto que es gaussiano, el **pe** $\mathbf{X}(t)$ estará caracterizado sólo por los cumulantes $\langle\langle X(t) \rangle\rangle$ y $\langle\langle X(t)X(t') \rangle\rangle$. Por simplicidad y sin pérdida de generalidad, tomemos $\langle\langle X(t) \rangle\rangle = 0$, entonces la probabilidad condicionada

$$P(x_2, t_2 \mid x_1, t_1) = P_2(x_2, t_2; x_1, t_1)/P_1(x_1, t_1),$$

para $t_1 \leq t_2$, vendrá dada por la fórmula

$$P(x_2, t_2 \mid x_1, t_1) = \frac{\frac{(\det A_{jl})^{1/2}}{2\pi} \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_{(j,l)=1}^2 x_j A_{jl} x_l\right]}{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(t_1)}} \exp\left[-\frac{1}{2} x_1^2 / \sigma^2(t_1)\right]}. \tag{3.65}$$

Aquí hemos usado (3.46) para escribir P_2 , P_1 y $A_{jl}^{-1} = \langle X(t_j)X(t_l) \rangle$, entonces se deduce que $\det A_{jl}^{-1} = \sigma^2(t_1)\sigma^2(t_2) - \langle X(t_1)X(t_2) \rangle^2$; y en el caso de considerar 1-tiempo se tiene $A^{-1} = \langle X(t)X(t) \rangle = \sigma^2(t)$.

Usando

$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} \langle X(t_1)X(t_1) \rangle & \langle X(t_1)X(t_2) \rangle \\ \langle X(t_2)X(t_1) \rangle & \langle X(t_2)X(t_2) \rangle \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\det A_{jl}^{-1}} \begin{pmatrix} \sigma^2(t_2) & -\langle X(t_1)X(t_2) \rangle \\ -\langle X(t_2)X(t_1) \rangle & \sigma^2(t_1) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

la probabilidad condicionada (3.65) se escribe

$$\begin{aligned} P(x_2, t_2 | x_1, t_1) &= \frac{\sigma(t_1)}{\sqrt{2\pi} \sqrt{\sigma^2(t_1)\sigma^2(t_2) - \langle X(t_1)X(t_2) \rangle^2}} \\ &\times \exp \left[\frac{-(x_2^2\sigma^2(t_1) - 2x_1x_2\langle X(t_1)X(t_2) \rangle + x_1^2\sigma^2(t_2))}{2(\sigma^2(t_1)\sigma^2(t_2) - \langle X(t_1)X(t_2) \rangle^2)} + \frac{x_1^2}{2\sigma^2(t_1)} \right]. \end{aligned}$$

Por otro lado, el término entre paréntesis en la exponencial se puede escribir en la forma:

$$\exp \left[\frac{-\left(x_2 - \langle X(t_1)X(t_2) \rangle \frac{x_1}{\sigma^2(t_1)}\right)^2}{2\sigma^2(t_2) \left(1 - \frac{\langle X(t_1)X(t_2) \rangle^2}{\sigma^2(t_1)\sigma^2(t_2)}\right)} \right],$$

a partir de lo cual podemos volver a escribir la probabilidad condicionada (o el propagador), definiendo una correlación normalizada o correlador:

$$\rho(t_2, t_1) = \frac{\langle X(t_1)X(t_2) \rangle}{\sigma(t_1)\sigma(t_2)}.$$

Es decir,

$$P(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2(t_2)(1-\rho(t_2, t_1)^2)}} \exp \left[\frac{-\left(x_2 - \frac{\rho(t_2, t_1)\sigma(t_2)}{\sigma(t_1)}x_1\right)^2}{2\sigma^2(t_2)(1-\rho(t_2, t_1)^2)} \right]. \quad (3.66)$$

Note que si el proceso es estacionario se debe cumplir, para todo τ , que

$$\rho(t_2, t_1) = \rho(t_2 - \tau, t_1 - \tau).$$

Además queda claro que si el proceso es markoviano la única dependencia temporal en el propagador (3.66) ha de ser a través de t_1 y t_2 , lo cual indica que el correlador $\rho(t_1, t_2)$ no puede depender paramétricamente de ningún otro tiempo pasado ni futuro. Usando la probabilidad condicionada (3.66) podemos calcular cualquier **vm** condicionado.³⁵ Así, por ejemplo, para $t_1 \leq t_3$ tenemos

$$\begin{aligned} \langle X(t_3) \rangle_{X(t_1)=x_1} &= \int x_3 P(x_3, t_3 | x_1, t_1) dx_3 \\ &= \frac{\rho(t_3, t_1)\sigma(t_3)}{\sigma(t_1)} x_1. \end{aligned} \quad (3.67)$$

³⁵Ver sección (1.14).

Por otro lado, si el proceso es markoviano la probabilidad condicionada tiene que satisfacer la ecuación de Chapman-Kolmogorov. Entonces podemos calcular el momento condicionado, ecuación (3.67), de una manera diferente: para $t_1 \leq t_2 \leq t_3$ tenemos

$$\langle X(t_3) \rangle_{X(t_1)=x_1} = \int x_3 \left[\int P(x_3, t_3 | x_2, t_2) P(x_2, t_2 | x_1, t_1) dx_2 \right] dx_3. \quad (3.68)$$

Intercambiando el orden de integración tendremos

$$\begin{aligned} \langle X(t_3) \rangle_{X(t_1)=x_1} &= \frac{\rho(t_3, t_2)\sigma(t_3)}{\sigma(t_2)} \int x_2 P(x_2, t_2 | x_1, t_1) dx_2 \\ &= \frac{\rho(t_3, t_2)\sigma(t_3)}{\sigma(t_2)} \frac{\rho(t_2, t_1)\sigma(t_2)}{\sigma(t_1)} x_1. \end{aligned}$$

Entonces, al comparar ambos resultados se observa

$$\frac{\rho(t_3, t_1)\sigma(t_3)}{\sigma(t_1)} x_1 = \frac{\rho(t_3, t_2)\sigma(t_3)}{\sigma(t_2)} \frac{\rho(t_2, t_1)\sigma(t_2)}{\sigma(t_1)} x_1,$$

lo que equivale a la siguiente condición necesaria (teorema de Doob)

$$\rho(t_3, t_1) = \rho(t_3, t_2)\rho(t_2, t_1). \quad (3.69)$$

Ejercicio. Escriba esta condición en el caso en que el proceso sea estacionario.

Ejercicio guiado. (**Condición suficiente.**) A la inversa, veamos ahora que (3.69) es una condición suficiente. En este ejemplo se muestra cómo es posible comprender que si el **pe** es gaussiano y cumple con (3.69) el **pe** será markoviano. Consideremos la probabilidad condicionada $P(x_4, t_4 | x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1)$. Si logramos mostrar que esta distribución no depende de las condiciones $\{x_2, t_2; x_1, t_1\}$ y, en general, si $P(x_j, t_j | x_{j-1}, t_{j-1}; \dots; x_1, t_1) = P(x_j, t_j | x_{j-1}, t_{j-1})$ habremos probado que el **pe** es markoviano. A los efectos de simplificar la demostración usamos ahora la siguiente notación abreviada, con $t_4 > t_3 > t_2 > t_1$

$$P(x_4, t_4 | x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1) \equiv P(X_4 | X_3; X_2; X_1)$$

$$\langle X(t_1)X(t_1) \rangle \equiv \sigma_1^2$$

$$\langle X(t_1)X(t_2) \rangle / \sigma_1\sigma_2 \equiv \rho_{12}.$$

Puesto que el **pe** es gaussiano, X_4 es una **va** gaussiana y también lo será la combinación lineal $T_4 = X_4 - X_3\rho_{34}\sigma_4/\sigma_3$. Además, se deduce que $\langle T_4X_3 \rangle = 0$ y que, por ser gaussiana, T_4 es una **vaei** de X_3 . Por otro lado, si se cumple (3.69), en particular $\rho_{23}\rho_{34} = \rho_{24}$, es fácil ver que $\langle T_4X_2 \rangle = 0$, y también $\langle T_4X_1 \rangle = 0$. Entonces T_4 es una **vaei** de X_3, X_2, X_1 . Dada la transformación de variables gaussianas $\{X_4, X_3, X_2, X_1\} \rightarrow \{T_4, X_3, X_2, X_1\}$ se deduce que podemos relacionar $P_4(X_4; X_3; X_2; X_1) \rightarrow P_4(T_4; X_3; X_2; X_1)$. Ahora bien, como T_4 es una **vaei** de X_3, X_2, X_1 , la probabilidad conjunta verifica $P_4(T_4; X_3; X_2; X_1) = P_1(T_4)P_3(X_3; X_2; X_1)$, de lo cual se deduce que la probabilidad condicionada de tres tiempos

satisface $P(T_4 | X_3; X_2; X_1) = P(T_4)$, o sea, la probabilidad condicionada de tres tiempos $P(X_4 | X_3; X_2; X_1)$ es sólo una función de $\{X_4, X_3\}$, que es lo que se quería demostrar. Esta misma metodología se puede utilizar para cualquier probabilidad condicionada de n -tiempos, lo que demuestra la condición de suficiente.

Ejercicio optativo. Muestre que las fluctuaciones de una cuerda tensa (sin masa) pueden ser modeladas por un proceso gaussiano (estocástico en el espacio). Muestre que no es posible decir que las fluctuaciones son markovianas. Note además que el proceso no puede ser estacionario, pues el correlador depende paramétricamente del “pasado” (extremo izquierdo de la cuerda) y del “futuro remoto” (extremo derecho). Ayuda: ver sección (2.3.1).

Ejemplo. (Proceso de Wiener.) Caractericemos un **pe** $\mathbf{W}(t)$ gaussiano y markoviano mediante los cumulantes:

$$\langle W(t) \rangle = 0$$

$$\langle W(t)W(s) \rangle = \min\{t, s\}.$$

Note que este proceso no es estacionario. En este caso el correlador $\rho(t_2, t_1)$ viene dado (para $t_1 \leq t_2$) por

$$\begin{aligned} \rho(t_2, t_1) &= \frac{\langle W(t_1)W(t_2) \rangle}{\sigma(t_1)\sigma(t_2)} \\ &= \frac{t_1}{\sqrt{t_1}\sqrt{t_2}} = \frac{\sqrt{t_1}}{\sqrt{t_2}}. \end{aligned}$$

Vemos, inmediatamente, que el teorema de Doob se satisface: $\rho(t_3, t_1) = \rho(t_3, t_2)\rho(t_2, t_1)$, a partir de lo cual podemos asegurar que tal proceso existe. Calculamos entonces la distribución de probabilidad de 1-tiempo como

$$P_1(w, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left(\frac{-w^2}{2t}\right),$$

pues $\sigma^2(t) = t$. Por otro lado, la distribución de probabilidad condicionada, ecuación (3.66), viene dada por

$$\begin{aligned} P(w_2, t_2 | w_1, t_1) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi t_2 (1 - t_1/t_2)}} \exp\left(\frac{-\left(w_2 - \frac{\sqrt{t_1/t_2} \sqrt{t_2}}{\sqrt{t_1}} w_1\right)^2}{2t_2 (1 - t_1/t_2)}\right)^2 \text{E} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_2 - t_1)}} \exp\left(- (w_2 - w_1)^2 / 2(t_2 - t_1)\right), \end{aligned} \quad (3.70)$$

que, precisamente, corresponde al propagador del proceso de Wiener.

Ejercicio. Muestre que el propagador del proceso de Wiener (con $t_0 = 0$)

$$P(w, t | w_0, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t\epsilon}} \exp\left(- (w - w_0)^2 / 2\epsilon t\right),$$

satisface la ecuación en derivadas parciales

$$\frac{\partial}{\partial t} P(w, t | w_0, 0) = \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial^2}{\partial w^2} P(w, t | w_0, 0) \quad (3.71)$$

y cumple con la condición inicial $P(w, t \rightarrow 0 | w_0, 0) \rightarrow \delta(w - w_0)$. Esta es la ecuación de difusión analizada por Einstein (1920) en sus estudios sobre el movimiento browniano. Einstein logró también relacionar el coeficiente de difusión $\epsilon/2 \equiv D$ [o sea, a partir de la dispersión del desplazamiento $\langle W(t)^2 \rangle = 2Dt = \epsilon t$] con el parámetro que caracteriza la disipación en el sistema. Este análisis fue el primer intento de establecer una relación entre la fluctuación y la disipación.

Ejercicio. Muestre que un **pe** gaussiano de media nula (no singular) será markoviano y estacionario sólo si el correlador es $\rho(t_1, t_2) = \exp[-\gamma | t_1 - t_2 |]$. A la inversa, si un proceso es gaussiano, estacionario y tiene segundo cumulante exponencial con la estructura $\langle X(t_1)X(t_2) \rangle = \sigma^2(0) \exp[-\gamma | t_1 - t_2 |]$, entonces el **pe** $\mathbf{X}(t)$ es único y se denomina proceso de Ornstein-Uhlenbeck.

3.12.1 Caso no estacionario 2π -periódico

Puesto que el proceso es gaussiano de media nula y markoviano se tiene que satisfacer el teorema de Doob $\rho(t_1, t_3) = \rho(t_1, t_2)\rho(t_2, t_3)$. Además, por definición de no estacionario 2π -periódico, en el régimen asintótico la distribución de probabilidad conjunta de 2-tiempos tiene invariancia de traslación discreta en el tiempo³⁶

$$\begin{aligned} P_2(x_1, t_1; x_2, t_2)_{\text{as}} &= P(x_1, t_1 | x_2, t_2) P_1(x_2, t_2)_{\text{as}} \\ &= P_2(x_1, t_1 + 2\pi; x_2, t_2 + 2\pi)_{\text{as}}, \end{aligned}$$

entonces $\langle X(t_2)X(t_1) \rangle_{\text{as}} = \langle X(t_2 + 2\pi)X(t_1 + 2\pi) \rangle_{\text{as}}$. Luego el correlador tendrá que ser una función acotada $\|\rho_{\text{as}}(t_1, t_2)\| < 1$ cualesquiera que sean los valores de las variables reales $\{t_1, t_2\}$, deberá satisfacer la condición de contorno $\rho_{\text{as}}(t_1, t_1) = 1$ y poseer invariancia discreta de traslación temporal [6].

Ejemplo. Si elegimos $\langle X(t) \rangle_{\text{as}} = 0$, $\langle X(t_2)X(t_1) \rangle_{\text{as}} = X(0)^2 \exp[\cos(t_1) - \cos(t_2)]$ tendremos que (para $t_1 \leq t_2$)

$$\begin{aligned} \rho_{\text{as}}(t_1, t_2) &= \frac{\langle X(t_2)X(t_1) \rangle_{\text{as}}}{(\sqrt{\langle X(t_2)^2 \rangle_{\text{as}}}\sqrt{\langle X(t_1)^2 \rangle_{\text{as}}})} \\ &= \exp[\cos(t_1) - \cos(t_2)], \end{aligned}$$

satisface todas las condiciones impuestas sobre el correlador. Entonces $\rho_{\text{as}}(t_1, t_2)$ define un proceso gaussiano de media nula markoviano y no estacionario 2π -periódico.

Ejercicio. Caracterice completamente el proceso gaussiano markoviano no estacionario 2π -periódico del ejemplo anterior.

3.12.2 Proceso de Ornstein-Uhlenbeck

Este proceso es uno de los modelos más importantes en el estudio de la relajación de sistemas dinámicos. Por ejemplo, cuando se trata de estudiar una partícula con velocidad V inmersa

³⁶Note la diferencia con el caso estacionario: $P_2(X_1, t_1; X_2, t_2)_{\text{est}} = P(X_1, t_1 | X_2, t_2) P_1(X_2, t_2)_{\text{est}}$. En ese caso: $P(X_1, t_1 | X_2, t_2) = P(X_1, t_1 + \tau | X_2, t_2 + \tau)$ para todo τ continuo, y $P_1(X_2, t_2)_{\text{est}} = P_{\text{est}}(X_2)$.

en un fluido a temperatura T , la influencia de las fluctuaciones térmicas estará presente en el carácter estocástico de $V(t)$, por otro lado el fluido ejerce un frenado (termalización) sobre la velocidad de la partícula. Se supone entonces que en el estado estacionario el **ve** $\mathbf{V}(t)$ de la velocidad de la partícula es nulo, y que la función de correlación temporal de la velocidad decae con una ley exponencial que sólo depende de la diferencia de tiempos. Sabemos que estos dos ingredientes definen completamente un **pe** $\mathbf{V}(t)$ gaussiano y estacionario. En particular, si el correlador $\rho(t_1, t_2)$ satisface el teorema de Doob entonces estaremos en condiciones de asegurar que el proceso además es markoviano.

Si los dos primeros momentos son

$$\langle V(t) \rangle = 0, \quad \langle V(t)V(s) \rangle = \frac{D}{2\gamma} \exp(-\gamma |t - s|), \quad (3.72)$$

se deduce que $\sigma^2(t) = \frac{D}{2\gamma} = \text{Cte.}$ y se observa que $\rho(t_2, t_1) = \exp(-\gamma(t_2 - t_1))$ para todo $t_1 \leq t_2$. Luego, trivialmente, se satisface el teorema de Doob y por consiguiente el proceso será simultáneamente gaussiano y markoviano. Entonces la distribución de probabilidad estacionaria que lo caracteriza viene dada por

$$P_{\text{est}}(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \left(\frac{D}{2\gamma}\right)}} \exp \left(-\frac{v^2}{2 \left(\frac{D}{2\gamma}\right)} \right). \quad (3.73)$$

Para el correspondiente propagador, (3.66), tendremos la expresión

$$P(v_2, t_2 | v_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \left(\frac{D}{2\gamma}\right) (1 - \rho(t_2, t_1)^2)}} \exp \left(-\frac{\left(v_2 - \frac{\rho(t_2, t_1)\sigma(t_2)}{\sigma(t_1)}v_1\right)^2}{2 \left(\frac{D}{2\gamma}\right) (1 - \rho(t_1, t_2)^2)} \right). \quad (3.74)$$

Ejercicio. Muestre que el conjunto de funciones (positivas) (3.73) y (3.74) satisfacen la compatibilidad de Kolmogorov; por otro lado, (3.74) satisface la ecuación de Chapman-Kolmogorov, entonces (3.73) y (3.74) definen un proceso de Markov.

Ejercicio. Usando (3.74), muestre que la probabilidad condicionada $P(v, t | 0, 0)$ es solución de la ecuación en derivadas parciales

$$\partial_t P(v, t | 0, 0) = \left[\frac{\partial}{\partial v} \gamma v + \frac{D}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \right] P(v, t | 0, 0), \quad (3.75)$$

y satisface la condición inicial

$$\lim_{t \rightarrow 0} P(v, t | 0, 0) \rightarrow \delta(v).$$

En las próximas secciones veremos que la ecuación (3.75) está asociada con la distribución de probabilidad condicionada que se obtiene de la **ede** (lineal) para la velocidad:

$$\frac{d}{dt} V = -\gamma V + \xi(t), \quad (3.76)$$

donde γ es un coeficiente de fricción y $\xi(t)$ es un ruido gaussiano blanco de media nula e intensidad

$$\langle \xi(t) \xi(s) \rangle = D \delta(t - s). \quad (3.77)$$

Note, a partir de un simple análisis dimensional, que si $[V] = \text{cm/seg}$ entonces $[\gamma] = 1/\text{seg}$ y $[D] = \text{cm}^2/\text{seg}$.

Ejercicio. Compare $P_{\text{est}}(v)$, dada en (3.73), con la distribución canónica clásica de la mecánica estadística del equilibrio y muestre que necesariamente se debe cumplir

$$D = 2\gamma \frac{k_B T}{M}, \quad (3.78)$$

donde M es la masa de la partícula. Esto significa que la intensidad de las fluctuaciones del ruido está relacionada con el coeficiente de fricción del fluido. Ésta es una relación típica entre la fluctuación y la disipación que aparece en sistemas que se encuentran en contacto con un baño térmico y que cumplen el principio del balance detallado (ver capítulo 4).

Ejercicio. Integre formalmente (3.76) y use (3.77) para mostrar que la correlación de la velocidad

$$\langle V(t)V(s) \rangle = \frac{D}{2\gamma} \exp(-\gamma |t - s|)$$

corresponde al régimen estacionario del proceso estocástico definido por la **ede** (3.76). Ayuda: dada una realización considere a $\xi(t)$ como una función ordinaria del tiempo.

Ejercicio. Suponga que la velocidad de una partícula está bien descrita, estadísticamente, por el proceso de Ornstein-Uhlenbeck, entonces el desplazamiento de su posición será gaussiano y vendrá dado por

$$X(t) = \int_0^t V(t') dt' + X(0). \quad (3.79)$$

Muestre, usando la condición inicial $X(0) = 0$, que

$$\langle X(t_1)X(t_2) \rangle = \frac{D}{2\gamma} \left[\frac{2}{\gamma} \min(t_1, t_2) - \frac{1}{\gamma^2} + \frac{1}{\gamma^2} \left(e^{-\gamma t_1} + e^{-\gamma t_2} - e^{-\gamma |t_1 - t_2|} \right) \right].$$

¿Por qué el **pe** $\mathbf{X}(t)$, así definido, no es markoviano ni es estacionario?

Ejercicio. ¿En qué condiciones de fricción el **pe** $\mathbf{X}(t)$ tiende asintóticamente a ser el proceso de Wiener? Muestre que, asintóticamente, el coeficiente de difusión que caracteriza al segundo momento del desplazamiento (proceso de Wiener) $\langle X(t)^2 \rangle = D_X t$ viene dado por

$$D_X = \frac{2k_B T}{M\gamma}.$$

Ejercicio. Teniendo en cuenta las unidades de dimensión del proceso de Ornstein-Uhlenbeck muestre que $[D_X] = \text{cm}^2/\text{seg}$.

3.13 Relación de Einstein

El coeficiente de difusión D_X se define como el factor de proporcionalidad entre el segundo momento del desplazamiento de la partícula (que se difunde) y el tiempo transcurrido desde la condición inicial.³⁷ Podemos entonces generalizar esta idea mediante la siguiente definición

$$\frac{d}{dt} \langle (X(t) - X(0))^2 \rangle = 2D_X(t). \quad (3.80)$$

³⁷Algunos autores introducen explícitamente un factor 2. Es decir, asintóticamente, si la difusión no es anómala se tiene: $\langle X(t)^2 \rangle \sim 2D_X t$.

Usando la relación (3.79) se tiene que

$$\left\langle (X(t) - X(0))^2 \right\rangle = \left\langle \int_0^t ds_2 \int_0^{s_2} ds_1 V(s_1) V(s_2) \right\rangle_0 = \int_0^t ds_2 \int_0^{s_2} ds_1 \langle V(s_1) V(s_2) \rangle_0, \quad (3.81)$$

donde el subíndice (0) indica que es un **vm** calculado en el estado estacionario. Entonces usando que $\langle V(s_1) V(s_2) \rangle_0 = f(|s_1 - s_2|)$, donde f es una función de correlación arbitraria, se obtiene, luego de introducir el cambio de variable $\tau = s_1 - s_2$, la siguiente expresión alternativa

$$\left\langle (X(t) - X(0))^2 \right\rangle = 2 \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 f(|s_1 - s_2|) = 2 \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} f(\tau) d\tau.$$

Luego, tomando la derivada con respecto al tiempo, es decir, usando (3.80), se obtiene

$$2D_X(t) = 2 \int_0^t f(\tau) d\tau.$$

Entonces el coeficiente de difusión se puede escribir en función de la correlación de la velocidad³⁸ en la forma:

$$D_X \equiv D_X(\infty) = \int_0^\infty \langle V(\tau) V(0) \rangle_0 d\tau.$$

En particular, Einstein [16] encontró la relación entre la movilidad y el coeficiente de difusión D_X . Esta relación permite escribir la conductividad eléctrica en función de D_X . La movilidad μ se puede definir como la velocidad final de una partícula cargada por unidad de fuerza aplicada $\langle V \rangle = \mu e E$, mientras que el coeficiente de difusión como el factor de proporcionalidad entre la corriente de partículas J_p y el gradiente de concentración $J_p = \frac{-D_X}{2} \frac{\partial n}{\partial X}$. La idea original de Einstein fue establecer que en el equilibrio la corriente de concentración anula la corriente inducida por el campo eléctrico E , a partir de lo cual se deduce la primera relación de fluctuación-disipación:

$$\mu = \frac{D_X}{2k_B T}.$$

3.14 Proceso de Ornstein-Uhlenbeck generalizado*

Cuando se presentó la ecuación (3.76) se comentó también que el **pe** $\mathbf{V}(t)$ así definido se correspondía con el proceso de Ornstein-Uhlenbeck. Para demostrar este hecho, simplemente tenemos que calcular la funcional característica:

$$G_V([k]) = \left\langle \exp \left[i \int_0^\infty k(t) V(t) dt \right] \right\rangle, \quad (3.82)$$

³⁸Una derivación alternativa de esta expresión se puede obtener usando la teoría de la respuesta lineal (ver capítulo 5), frecuentemente llamada fórmula de Green-Kubo. Por otro lado, en el capítulo 8 se presenta la fórmula de Scher-Lax, que es la generalización de la relación de Einstein para situaciones con transporte anómalo.

donde $V(t)$ es la solución formal ($t \in [0, \infty]$) de (3.76) para una realización del proceso (ruido) $\xi(t)$. Es decir,

$$V(t) = \exp(-\gamma t) V_0 + \int_0^t \exp(-\gamma(t-s)) \xi(s) ds. \quad (3.83)$$

Introduciendo (3.83) en (3.82) e invocando el desarrollo en cumulantes se obtiene:³⁹

$$\begin{aligned} G_V([k]) &= \exp \left(i V_0 \int_0^\infty dt k(t) e^{-\gamma t} \right) \\ &\times \exp \sum_{m=1}^\infty \frac{i^m}{m!} \prod_{j=1}^m \int_0^\infty dt_j \int_0^{t_j} ds_j \exp(-\gamma(t_j - s_j)) k(t_1) \cdots \\ &\times \cdots k(t_m) \langle \xi(s_1) \cdots \xi(s_m) \rangle. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Si el proceso $\xi(s)$ es gaussiano, por ejemplo de media nula y blanco⁴⁰ caracterizado por (3.77), el desarrollo en cumulantes se corta en el segundo término. Entonces el **pe** $\mathbf{V}(t)$ estará caracterizado por la funcional característica:

$$\begin{aligned} G_V([k]) &= \exp \left(i V_0 \int_0^\infty dt k(t) e^{-\gamma t} \right) \\ &\times \exp \frac{-D}{2} \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_2 k(t_1) k(t_2) \int_0^{t_1} ds_1 \int_0^{t_2} ds_2 e^{-\gamma(t_1-s_1)} e^{-\gamma(t_2-s_2)} \delta(s_1 - s_2). \end{aligned} \quad (3.85)$$

Efectuando las integrales en las variables s_1 y s_2 , se puede ver a partir de la funcional (3.85) que, en el régimen asintótico, todos los momentos del **pe** $\mathbf{V}(t)$ coinciden con los caracterizados por el proceso de Ornstein-Uhlenbeck, presentado en la sección (3.12.2).

Ejercicio. A partir de la funcional (3.85) calcule la correlación del proceso $V(t)$, y muestre que los cumulantes de orden superior al segundo son nulos.

Si el proceso gaussiano $\xi(s)$ no fuera blanco, la funcional (3.85) seguiría siendo válida siempre que se reemplace $D\delta(s_1 - s_2)$ por la correspondiente correlación del ruido

$$\langle \xi(s_1) \xi(s_2) \rangle.$$

Un problema aún más interesante es aquel en el cual $\xi(s)$ no es un procesos gaussiano. En este caso la expresión formal para la funcional característica del **pe** $\mathbf{V}(t)$ es la (3.84). Sin embargo, esta expresión es complicada de manejar, pues necesitamos primero conocer todos los cumulantes de $\xi(s)$ y luego efectuar las infinitas integraciones correspondientes. Así planteado, este problema es de enorme complejidad.

Alternativamente, supongamos que se conoce la funcional característica del ruido $\eta(s)$. En este caso, si

$$G_\eta([k]) = \left\langle \exp \left[i \int_0^\infty k(t) \eta(t) dt \right] \right\rangle$$

es una funcional dada, se trata de caracterizar el **pe** $\mathbf{V}(t)$ cuando su ecuación diferencial estocástica es

$$\frac{d}{dt} V(t) = -\gamma V + \eta(t). \quad (3.86)$$

³⁹Un comentario sobre el cálculo de cumulantes de procesos integrales puede verse en la ecuación (3.119).

⁴⁰Es común decir que un proceso es blanco si éste tiene una función de correlación deltiforme. Ver último ejercicio de la sección (3.1.2).

La ecuación (3.86) define el proceso de Ornstein-Uhlenbeck generalizado. Para resolver este problema notemos que si escribimos $\eta(t) = \dot{V} + \gamma V$, podemos volver a escribir $G_\eta([k])$, luego de efectuar integrales por parte, en la forma:

$$G_\eta([k]) = e^{-ik_0 V_0} G_V \left(\left[-e^{+\gamma t} \frac{d}{dt} e^{-\gamma t} k(t) \right] \right). \quad (3.87)$$

Entonces, definiendo la función de prueba $Z(t) = -e^{+\gamma t} \frac{d}{dt} e^{-\gamma t} k(t)$ podemos escribir

$$G_V([Z]) = e^{+ik_0 V_0} G_\eta \left(\left[e^{\gamma t} k(0) - \int_0^t e^{\gamma(t-s)} Z(s) ds \right] \right). \quad (3.88)$$

Note, de la definición misma de función de prueba $Z(t)$, que la constante k_0 es funcional de $Z(t)$ según

$$k_0 \equiv k(0) = \int_0^\infty Z(s) \exp(-\gamma s) ds. \quad (3.89)$$

La funcional (3.88) es la solución al problema planteado, pues permite obtener todos los cumulantes del proceso generalizado $\mathbf{V}(t)$ si se conoce la funcional del ruido $G_\eta([k])$ [17].

Ejercicio. A partir de la funcional (3.88) muestre que en el caso de que $\eta(t)$ sea gaussiano y blanco se obtiene también el resultado conocido (3.85) del proceso de Ornstein-Uhlenbeck.

Ejercicio optativo. Demuestre explícitamente que (3.88) es la expresión general cualquiera que sea la funcional característica del ruido $\eta(t)$.

Excursus. (Procesos no markovianos fuertes.) Aquí se trata de caracterizar un **pe** $\mathbf{X}(t)$ cuando su evolución temporal está gobernada por la ecuación diferencial estocástica:

$$\frac{d}{dt} X(t) = \eta(t), \quad (3.90)$$

cualquiera que sea la funcional característica del ruido $\eta(t)$. La ecuación (3.90) es un caso particular de (3.86) y define el proceso de Wiener generalizado. En los casos en que el ruido $\eta(t)$ sea “blanco”, el proceso así definido será markoviano pero, por supuesto, no necesariamente gaussiano. En particular, dependiendo del “alcance” de la memoria de la correlación del ruido $\eta(t)$, es posible clasificar al **pe** $\mathbf{X}(t)$ como no markoviano en un sentido *fuerte* o *débil*, en función de su comportamiento en tiempos suficientemente largos [15, 18].

Excursus. Definiendo el ruido de Lévy mediante la funcional:

$$G_\eta([k]) = \left\langle \exp \left[i \int_0^\infty k(t) \eta(t) dt \right] \right\rangle = \exp \left(-b \int_0^\infty |k(s)|^\alpha ds \right), \quad \alpha \in (0, 2], b > 0,$$

obtenga los vuelos de Lévy a partir de (3.90). En este mismo contexto también se pueden estudiar generalizaciones al caso no autónomo [12]. En el apéndice H.2 se presenta una discusión sobre los vuelos de Lévy.

3.15 Difusión de la fase*

Una aplicación interesante del proceso de Ornstein-Uhlenbeck generalizado es el estudio de la rotación de una molécula “esférica”. Si imaginamos que la molécula es un cuerpo rígido, la ecuación de movimiento será

$$\frac{d}{dt} \vec{L} = \vec{\Upsilon}, \quad (3.91)$$

donde \vec{L} es el vector momento angular y $\vec{\Upsilon}$ es la suma de los torques aplicados al cuerpo rígido. En presencia de fluctuaciones la suma de los torques tendrá una contribución estocástica $\eta(t)$, además de los posibles torques externos $\vec{\Upsilon}_{\text{ext}}(t)$, entonces también habrá que considerar un término disipativo proporcional a la velocidad angular $\gamma \dot{\vec{l}}$, con lo cual la ecuación de movimiento toma la forma

$$\frac{d}{dt} \vec{L} + \gamma \dot{\vec{l}} = \vec{\Upsilon}_{\text{ext}}(t) + \vec{\eta}(t). \quad (3.92)$$

Si el cuerpo rígido es un rotor plano (un plato), el momento angular es simplemente $I\dot{\vec{l}}$, donde I es el momento de inercia del plato. En este caso los torques serán vectores en la dirección de la velocidad angular $\dot{\vec{l}}$. Entonces la ecuación de movimiento estocástica para el rotor plano es

$$I \frac{d}{dt} \dot{\vec{l}} + \gamma \dot{\vec{l}} = \Upsilon_{\text{ext}}(t) + \eta(t). \quad (3.93)$$

Si interesa estudiar la respuesta del sistema cuando el torque externo $\Upsilon_{\text{ext}}(t)$ es apagado (por ejemplo, en $t = 0$), se puede demostrar en el contexto de la teoría de la respuesta lineal (ver capítulo 5) que sólo es necesario estudiar la dinámica del sistema sin excitación externa. O sea, habrá que estudiar (para $t > 0$) funciones de correlación y la relajación de la velocidad angular del sistema libre, es decir:

$$I \frac{d}{dt} \dot{\vec{l}} + \gamma \dot{\vec{l}} = \eta(t). \quad (3.94)$$

3.15.1 Relajación dieléctrica

En 1913 Debye introdujo el modelo del rotor plano para estudiar el fenómeno de la relajación de un fluido dieléctrico. El consideró un *ensemble* de moléculas independientes entre sí, cada una con un momento dipolar dieléctrico permanente $\vec{\mu}$, libre de rotar en un eje fijo. En este caso el torque externo se da entre el vector campo eléctrico \vec{E} y el momento dipolar permanente $\vec{\mu}$, o sea $\Upsilon_{\text{ext}}(t) = \mu E(t) \sin \phi$ donde ϕ , es el ángulo inicial (en el plano) entre los vectores \vec{E} y $\vec{\mu}$. Si en $t = 0$ apagamos el campo eléctrico, a partir de (3.94) se deduce que la ecuación de evolución para la fase ϕ es simplemente

$$I \frac{d^2}{dt^2} \phi + \gamma \frac{d}{dt} \phi = \eta(t), \quad t > 0. \quad (3.95)$$

Esta ecuación se puede estudiar en términos de dos **pe**, $\dot{\vec{l}}(t)$ y $\phi(t)$, es decir utilizamos (3.94) en conjunción con

$$\frac{d}{dt} \phi = \dot{\vec{l}}(t). \quad (3.96)$$

Entonces el estudio de este sistema físico se reduce al estudio del proceso de Ornstein-Uhlenbeck [19]. En particular, si los torques estocásticos $\eta(t)$ no son gaussianos el **pe** $\dot{\vec{l}}(t)$ será un proceso de Ornstein-Uhlenbeck generalizado [15].

La funcional de la velocidad angular $\dot{\vec{l}}$ se puede obtener de (3.88) comparando (3.94) con (3.86) (para $I = 1$); o sea,

$$G_{\dot{\vec{l}}}([Z]) = e^{+ik_0 \dot{\vec{l}}_0} G_{\eta} \left(\left[\int_t^\infty e^{\gamma(t-s)} Z(s) ds \right] \right), \quad (3.97)$$

donde $k_0 = \int_0^\infty Z(s) \exp(-\gamma s) ds$. La funcional de la fase ϕ se obtiene inmediatamente de (3.96) utilizando la funcional $G_1([Z])$ como funcional del “ruido”. Entonces, nuevamente, utilizando (3.88) con $V \rightarrow \phi$ y $\gamma = 0$, $\eta \rightarrow 1$, y comparando (3.86) con (3.96) se deduce que

$$G_\phi([M]) = e^{+iq_0\phi_0} G_1 \left(\left[\int_t^\infty M(s) ds \right] \right), \quad (3.98)$$

donde $q_0 = \int_0^\infty M(s) ds$. Introduciendo (3.97) en (3.98) se deduce que la funcional de la fase se escribe, para todo torque estocástico $\eta(t)$, en la forma:

$$G_\phi([M]) = e^{+iq_0\phi_0} e^{+ik_0\dot{\phi}_0} G_\eta \left(\left[\int_t^\infty e^{\gamma(t-s)} \int_s^\infty M(s') ds' ds \right] \right). \quad (3.99)$$

Aquí ϕ_0 es el ángulo inicial y $\dot{\phi}_0 = \dot{\phi}_0$ la velocidad angular inicial en $t = 0$. La expresión (3.99) es exacta y válida para cualquier tipo de **pe** $\eta(t)$. En particular si los torques estocásticos son gaussianos blancos, utilizando (3.50) se obtiene para la funcional de la fase

$$\begin{aligned} G_\phi([M]) &= e^{+iq_0\phi_0} e^{+ik_0\dot{\phi}_0} \exp \left[\frac{-\Gamma_2}{2} \int_0^\infty \left(\int_t^\infty e^{\gamma(t-s)} \int_s^\infty M(s') ds' ds \right) \right. \\ &\quad \times \left. \left(\int_t^\infty e^{\gamma(t-s)} \int_s^\infty M(s') ds' ds \right) dt \right]. \end{aligned}$$

Puesto que interesa estudiar la relajación del momento dipolar $\mu \langle \cos \phi(t) \rangle$, todas las correlaciones se pueden obtener a partir de relaciones trigonométricas y de considerar la funcional coseno y la funcional seno, por ejemplo:

$$\left\langle \cos \left[\int_0^\infty \phi(t) M(t) dt \right] \right\rangle = \mathcal{R}_e [G_\phi([M])]. \quad (3.100)$$

Ejemplo. Se puede obtener $\langle \cos \phi(t_1) \rangle$ considerando la funcional (3.100) con la función de prueba $M(t) = \delta(t - t_1)$. En este caso, y para torques gaussianos, se obtiene

$$\langle \cos \phi(t_1) \rangle = \cos \left[\phi_0 + \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t_1}) \dot{\phi}_0 \right] \exp \left(\frac{-\Xi(t_1)}{2} \right),$$

donde

$$\Xi(t) = \frac{\Gamma_2}{2\gamma^3} [2\gamma t - 3 - e^{-2\gamma t} + 4e^{-\gamma t}].$$

Es decir, para tiempos largos, $\gamma t \gg 1$, la relajación dipolar es exponencial.

Ejercicio optativo. Considere el rotor plano en presencia de torques gaussianos no blancos y caracterizados por una función de correlación de largo alcance. Muestre que la relajación del momento dipolar ya no es una función exponencial. Calcule la correlación dipolo-dipolo $\langle \cos \phi(t_1) \cos \phi(t_2) \rangle$. Muestre que la función de correlación coseno-coseno se puede estudiar calculando $\langle \cos [\phi(t_1) - \phi(t_2)] \rangle$ mediante (3.100) evaluada con la función de prueba $M(t) = \delta(t - t_1) - \delta(t - t_2)$. Ver, por ejemplo, [15].

Excursus. Considere el mismo rotor plano pero cuando los torques estocásticos no son gaussianos, ver por ejemplo [12].

3.16 Realizaciones estocásticas (desarrollo en autofunciones)

Suele ser conveniente contar con aproximaciones semianalíticas para cada una de las realizaciones de un proceso estocástico, más aún cuando se trata de estudiar campos estocásticos. Como veremos en esta sección, una representación en autofunciones puede fácilmente ser generalizada al caso de campos estocásticos $d + 1$ dimensional.

Sea $\mathbf{Z}(t) \in \mathcal{R}_e$ un **pe** arbitrario para $t \in [0, T]$, del cual sólo se conocen sus dos primeros cumulantes (en principio no hay razón para suponer que los cumulantes superiores sean nulos). Consideremos el desarrollo en autofunciones del segundo cumulante,

$$\int_0^T \langle \langle Z(t)Z(s) \rangle \rangle \phi_j(s) ds = \lambda_j \phi_j(t). \quad (3.101)$$

Supondremos que el conjunto de autofunciones $\{\phi_j(s)\}$ es normalizable y completo, es decir:⁴¹

$$\begin{aligned} \int_0^T \phi_l(s) \phi_j(s) ds &= \delta_{lj} \\ \sum_j \phi_j(t) \phi_j(t') &= \delta(t - t') \\ \int_0^T \phi_j(s) ds &= \text{Cte.} \end{aligned}$$

Entonces, cada realización $Z(t)$ puede ser representada en términos de autofunciones del operador integral (3.101) [operador de Fredholm con núcleo simétrico⁴² $\langle \langle Z(t)Z(s) \rangle \rangle$] según

$$Z(t) = \sum_j z_j \phi_j(t),$$

donde obviamente z_j son números aleatorios:

$$z_j = \int_0^T Z(s) \phi_j(s) ds.$$

De aquí se observa que sus valores medios vienen dados por

$$\langle z_j \rangle = \int_0^T \langle Z(s) \rangle \phi_j(s) ds,$$

⁴¹ Como siempre, aquí $\delta_{ij} \equiv \delta_{i,j}$ representa la delta de Kroneker.

⁴² Puesto que el núcleo del operador de Fredholm es simétrico, y suponiendo válida la condición de Hilbert-Schmidt, $\int_0^T \int_0^T |\langle \langle Z(s)Z(t) \rangle \rangle|^2 dt ds < \infty$, es posible probar las siguientes proposiciones:

a) La ecuación integral tiene al menos un autovalor no nulo.
b) Cada autovalor tiene a lo sumo una degeneración finita.
c) Existe un conjunto (finito o infinito) de autofunciones completo, con la propiedad de que toda función $F(t)$ de cuadrado integrable en $[0, T]$ puede ser representada, en el sentido de convergencia en media, en la forma: $F(t) = h(t) + \sum \phi_n(t) z_n$, donde $h(t)$ es una función que verifica $\int \langle \langle Z(t)Z(s) \rangle \rangle h(t) dt = 0$ y $z_n = \int_0^T \phi_n(t) Z(t) dt$.
e) El núcleo $\langle \langle Z(t)Z(s) \rangle \rangle$ de la ecuación integral puede ser desarrollado en serie en la forma $\langle \langle Z(t)Z(s) \rangle \rangle = \sum \lambda_n \phi_n(t) \phi_n(s)$, convergiendo en media.

mientras que el segundo cumulante está caracterizado por el autovalor λ_j :

$$\langle z_j^2 \rangle - \langle z_j \rangle^2 = \lambda_j \int_0^T \phi_j(s)^2 ds = \lambda_j.$$

Aquí hemos usado la normalización $\int_0^T \phi_j(s)^2 ds = 1$. Vemos entonces que el problema se ha reducido a caracterizar las **va** z_j ; luego, si sólo conocemos los dos primeros momentos del **pe** $\mathbf{Z}(t)$, ello equivale a “construir” una aproximación gaussiana para las realizaciones $Z(t)$.

Ejercicio. Pruebe que z_j, z_l no están correlacionadas. ¿Son z_j, z_l **vai**?

Ejercicio. La distribución de probabilidad $P(z_j)$ viene dada por la función característica $G_{z_j}(k)$, que a su vez viene dada en términos de las autofunciones $\phi_j(s)$ y todos los cumulantes del **pe** $\mathbf{Z}(t)$ según

$$\begin{aligned} G_{z_j}(k) &\equiv \langle \exp[ikz_j] \rangle \\ &= \left\langle \exp \left[ik \int_0^T Z(s) \phi_j(s) ds \right] \right\rangle \\ &= \exp \left[\sum_{m=1}^{\infty} \frac{(ik)^m}{m!} \int_0^T \cdots \int_0^T \phi_j(s_1) \cdots \phi_j(s_m) \langle \langle Z(s_1) \cdots Z(s_m) \rangle \rangle \prod_{l=1}^m ds_l \right]. \end{aligned}$$

Muestre que $G_{z_j}(k)$ no es una funcional característica, aquí las autofunciones $\phi_j(s)$ son factores de peso que provienen del desarrollo en cumulantes de la **va** $z_j \equiv \int_0^T Z(s) \phi_j(s) ds$.

Ejercicio. En la aproximación gaussiana, muestre que cuando $\langle Z(t) \rangle = 0$ la distribución conjunta de todas las **va** z_j , o sea, $P(\{z_j\})$, queda completamente caracterizada por la forma bilineal $\vec{z} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{z}$:

$$P(\{z_j\}) \propto \exp \left[\frac{-\vec{z} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{z}}{2} \right],$$

donde la matriz diagonal \mathbf{A} viene dada por

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} \cdot & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \lambda_{i-1} & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & \cdot & \lambda_i & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \lambda_{i+1} & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot \end{pmatrix}^{\mathbf{E}}.$$

En principio los autovalores λ_i pueden ser degenerados, pero se ha supuesto que el conjunto de autofunciones $\phi_j(s)$ es completo. Note que el beneficio de usar esta representación (de Karhunen-Loève) radica en poder construir aproximaciones (gaussianas) analíticas a las realizaciones $Z(t)$ en términos de **va** no correlacionadas z_j [20].

Ejemplo. Aquí mostramos cómo trabajar la ecuación integral (3.101) en un caso particularmente simple. Supongamos que la función de correlación $\langle \langle Z(t_1)Z(t_2) \rangle \rangle$ tiene la siguiente dependencia en los argumentos (t_1, t_2) :

$$\langle \langle Z(t_1)Z(t_2) \rangle \rangle = g(\min(t_1, t_2)). \quad (3.102)$$

El caso lineal $g(t) = t$ corresponde al movimiento browniano (proceso de Wiener). Aplicando (3.102) en (3.101) se obtiene

$$\int_0^{t_1} g(t_2) \phi(t_2) dt_2 + g(t_1) \int_{t_1}^T \phi(t_2) dt_2 = \lambda \phi(t_1). \quad (3.103)$$

Entonces $\phi(t=0)$ verifica la relación

$$\lambda\phi(0) = g(0) \int_0^T \phi(t_2) dt_2.$$

Si se elige una función de correlación que satisface $g(0) = 0$, obtenemos para las autofunciones la siguiente la condición de contorno:

$$\phi(0) = 0. \quad (3.104)$$

Diferenciando la ecuación (3.103) una vez con respecto a t_1 , se obtiene⁴³

$$g(t_1)\phi(t_1) + g'(t_1) \int_{t_1}^T \phi(t_2) dt_2 - g(t_1)\phi(t_1) = g'(t_1) \int_{t_1}^T \phi(t_2) dt_2 = \lambda\phi'(t_1). \quad (3.105)$$

Luego, si se satisface $g'(T) \neq \infty$, se deduce la segunda condición de contorno para las autofunciones:

$$\phi'(T) = 0. \quad (3.106)$$

Diferenciando otra vez la ecuación (3.105), se obtiene

$$g''(t_1) \int_{t_1}^T \phi(t_2) dt_2 - g'(t_1)\phi(t_1) = \lambda\phi''(t_1). \quad (3.107)$$

Esta es la ecuación que deberíamos resolver, junto con las condiciones de contorno (3.104) y (3.106), para encontrar las autofunciones $\phi(t)$.

Ejercicio. Muestre que en el caso de que $g(t)$ sea lineal, las autofunciones estarán caracterizadas por

$$\phi_j(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sin(\omega_j t) \quad \text{donde} \quad \omega_j = \sqrt{\frac{1}{\lambda_j}} = \frac{(2j+1)\pi}{2T}, \quad j = 1, 2, 3 \dots$$

Entonces las realizaciones del proceso de Wiener se pueden escribir en la forma

$$Z(t) = \sqrt{\frac{2}{T}} \sum_{j=1}^{\infty} z_j \sin(\omega_j t), \quad z_j = \sqrt{\frac{2}{T}} \int_0^T Z(t) \sin(\omega_j t) dt.$$

Si $\langle Z(t) \rangle = 0 \Rightarrow \langle z_j \rangle = 0$, y, como ya se comentó, $\{z_j\}$ son **v.a.e.i** con segundo momento $\langle z_j^2 \rangle = \lambda_j = (2T / (2j+1)\pi)^2$.

Ejercicio optativo. Estudie el desarrollo en autofunciones $\phi_j(t)$ para situaciones en las que $g(t)$ no es lineal.

Ejercicio optativo. Generalice el desarrollo en autofunciones para campos estocásticos $d+1$ dimensional. Considere un núcleo en el operador integral (3.101) de la forma

$$\langle\langle Z(\mathbf{r}_1, t_1) Z(\mathbf{r}_2, t_2) \rangle\rangle,$$

donde \mathbf{r} es un vector de dimensión d .

⁴³En general usaremos la notación: $g'(t) = \frac{d}{dt}g(t)$, $g''(t) = \frac{d^2}{dt^2}g(t)$, etc.

3.17 Ecuaciones diferenciales estocásticas

3.17.1 Ecuación de Langevin

Una ecuación diferencial en la cual aparecen coeficientes que son funciones aleatorias del tiempo, de carácter gaussiano y con correlación deltiforme, es una ecuación de Langevin. Por otro lado, y como es evidente, la ecuación de Langevin es sólo un caso particular de **ede**.

Las fuerzas generalizadas de Langevin, habitualmente denominadas, *fuerzas de ruido blanco*, representan a las variables dinámicas que fluctúan en una escala de tiempo corta, en comparación con la relajación de las variables de estado macroscópicas que describen un sistema [1]. Más aún, estamos suponiendo que conocemos, en un sentido estadístico, el comportamiento de estas variables que llamamos “ocultas”, y a las que representamos mediante uno o varios **pe**. En lo que sigue analizaremos en detalle el caso 1-dimensional.⁴⁴ Sea

$$\frac{dX}{dt} = h(X, t) + g(X, t)\xi(t), \quad (3.108)$$

la **ede** para la variable X . Aquí $\xi(t)$ es un **pe** gaussiano δ -correlacionado de media nula, por lo que está completamente caracterizado por (3.39), (3.40) y se cumple que $W(t) - W(0) = \int_0^t \xi(\tau) d\tau$, donde $W(t)$ es una realización del **pe** de Wiener. En (3.108), $h(X, t)$ y $g(X, t)$ son funciones conocidas de la variable incógnita⁴⁵ X y del tiempo t .

En realidad la **ede** (3.108) no está bien definida, pues la integral

$$\int g(X, t') dW(t') \quad (3.109)$$

no está, aún, correctamente especificada. Cada elección particular de la regla de integración que se use, se corresponderá con un cálculo diferencial estocástico específico. Esta distinción es la que conduce, por ejemplo, al cálculo diferencial estocástico de Ito o al de Stratonovich [2]. En particular el cálculo de Stratonovich coincide con el cálculo diferencial ordinario (tiene las mismas reglas de diferenciación).

Si $g(X, t)$ fuese, a lo sumo, una función dependiente del tiempo, esta dificultad no aparecería, pues el **vm** de la integral en cuestión sería el **vm** de una integral ordinaria de Riemann-Stieljes:

$$\left\langle \sum g(\tau_j)[W(t_j) - W(t_{j-1})] \right\rangle,$$

la cual converge a $\int g(t') dW(t')$ independientemente de la elección de τ_j , donde $t_{j-1} < \tau_j < t_j$. Este tipo de análisis no será discutido en el presente texto,⁴⁶ aquí sólo nos limitaremos a usar el cálculo diferencial estocástico de Stratonovich.

Existen justificaciones físicas para elegir un cálculo diferencial u otro. En particular, en el caso de usar una función de correlación, $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle$, que aproxima a la δ de Dirac se obtiene un cálculo diferencial que coincide con el cálculo de Stratonovich. Ésta es una justificación plausible para el uso de este particular cálculo diferencial estocástico. Por otro lado, el cálculo de Stratonovich es físicamente razonable en los casos en que las fuerzas

⁴⁴Una presentación escueta de la generalización a n ecuaciones acopladas se presenta en la última sección.

⁴⁵Aquí ya conviene simplificar la notación y denotar **pe** $X(t)$ al proceso caracterizado por la **ede** (3.108).

⁴⁶Una discusión de este tema se puede consultar en el texto de Langouch, Roekaerts y Tirapegui [8].

de Langevin sean externas, pues allí las correlaciones aproximan a la δ de Dirac. Cabe destacar que la ecuación (3.108), en sí misma, no tiene sentido, sin antes especificar un cálculo diferencial estocástico; es decir, si no se define en qué instante⁴⁷ hay que evaluar la función $g(X(t'), t')$ en el integrando (3.109).

3.17.2 Integrales de Wiener en el cálculo de Stratonovich

A los efectos de ilustrar este particular cálculo diferencial presentaremos aquí algunos ejemplos de aplicaciones concretas.

Ejemplo. Sea $W(t)$ una realización del **pe** de Wiener (con $W(0) = 0$). Si definimos el proceso gaussiano $\mathfrak{I}(t) = \int_0^t W(s) ds$, podría ser necesario considerar valores medios y correlaciones entre ambos procesos. Por ejemplo, calculemos

$$\langle W(t)\mathfrak{I}(t) \rangle = \left\langle W(t) \int_0^t W(s) ds \right\rangle = \int_0^t \langle W(s)W(t) \rangle ds.$$

Usando la correlación del proceso de Wiener $\langle W(s)W(t) \rangle = \min\{t, s\}$ se ve inmediatamente que

$$\langle W(t)\mathfrak{I}(t) \rangle = \int_0^t s ds = \frac{t^2}{2}.$$

Ejercicio. Considere el proceso de Wiener. Muestre integrando por partes que

$$\left\langle \int_t^{t+\tau} W(s) dW(s) \right\rangle = \frac{\tau}{2}.$$

Ejemplo. Usando el cálculo diferencial ordinario mostremos ahora que

$$\left\langle \int_0^t \mathfrak{I}(t') dW(t') \right\rangle = 0.$$

Para ello, primero integramos por partes (con las reglas usuales de diferenciación); entonces

$$\int_0^t \mathfrak{I}(t') dW(t') = [\mathfrak{I}(t')W(t')]_0^t - \int_0^t \dot{\mathfrak{I}}(t')W(t') dt'.$$

De la definición del proceso $\mathfrak{I}(t)$ y notando que $W(0) = \mathfrak{I}(0) = 0$ se observa que

$$\int_0^t \mathfrak{I}(t') dW(t') = \mathfrak{I}(t)W(t) - \int_0^t W(t')W(t') dt',$$

entonces, tomando valores medios en las realizaciones del proceso de Wiener se obtiene finalmente

$$\begin{aligned} \left\langle \int_0^t \mathfrak{I}(t') dW(t') \right\rangle &= \left\langle \mathfrak{I}(t)W(t) - \int_0^t W(t')W(t') dt' \right\rangle \\ &= \langle \mathfrak{I}(t)W(t) \rangle - \int_0^t \langle W(t')W(t') \rangle dt' \\ &= \frac{t^2}{2} - \int_0^t t' dt' = 0. \end{aligned}$$

⁴⁷En el cálculo de Stratonovich el instante τ_j que se usa es justo el punto medio.

Ejercicio. Muestre que la correlación del proceso $\mathfrak{l}(t) = \int_0^t W(s) ds$ viene dada por

$$\langle \mathfrak{l}(t_1) \mathfrak{l}(t_2) \rangle = \frac{-1}{6} t_1^3 + \frac{t_2 t_1^2}{2} \quad \text{para } t_1 < t_2.$$

O sea, el proceso $\mathfrak{l}(t)$ es gaussiano pero no es estacionario ni markoviano [21]. ¿Por qué?

Ejercicio optativo. Calcule la funcional generatriz del proceso $\mathfrak{l}(t)$ y verifique el resultado del ejercicio anterior. Ayuda: use los resultados de la sección (3.14).

Ejercicio. Sea el proceso no gaussiano $\eta(t) = \int_0^t \mathfrak{l}(s) dW(s)$. Muestre que la correlación del proceso $\eta(t)$ viene dada por

$$\langle \eta(t_1) \eta(t_2) \rangle = \frac{1}{12} [\min(t_1, t_2)]^4.$$

O sea, el proceso $\eta(t)$ no es estacionario. ¿Por qué a partir de este resultado no es posible concluir nada sobre la condición de no Markoviano del proceso $\eta(t)$?

Ejercicio. Sea el proceso no gaussiano $\Lambda(t) = \int_0^t W^2(s) ds$. Muestre que el segundo momento de $\Lambda(t)$ viene dado por [22]

$$\mathfrak{l} \Lambda^2(t) \rangle = \frac{7}{12} t^4.$$

Ejercicio optativo. Sea el proceso $\theta(t) = \int_0^t \eta(s) ds$ con $\eta(t) = \int_0^t \mathfrak{l}(s) dW(s)$. Muestre que el segundo momento de $\theta(t)$ viene dado por

$$\mathfrak{l} \theta^2(t) \rangle = \frac{1}{180} t^6.$$

3.17.3 Ecuaciones diferenciales estocásticas de Stratonovich

Tiempos cortos

Si escribimos (3.108) en forma integral

$$X(t + \tau) = X + \int_t^{t+\tau} h(X(t'), t') dt' + \int_t^{t+\tau} g(X(t'), t') \xi(t') dt', \quad (3.110)$$

el tercer término del segundo miembro muestra la integral en conflicto. Aquí hay que especificar el cálculo diferencial estocástico a usar [23]. En lo que sigue adoptaremos siempre el cálculo de Stratonovich [5, 13, 24]. Suponiendo que tanto $h(X(t'), t')$ como $g(X(t'), t')$ se pueden desarrollar en series de Taylor⁴⁸ alrededor de X

$$h(X(t'), t') \simeq h(X, t') + h'(X, t')(X(t') - X) + \dots \quad (3.111)$$

$$g(X(t'), t') \simeq g(X, t') + g'(X, t')(X(t') - X) + \dots,$$

se obtiene, a partir de (3.110), que la solución integral sólo depende de la condición inicial X y de las realizaciones de los incrementos de Wiener $dW(t) = \xi(t) dt$. Mediante este procedimiento es posible calcular todos los momentos en $\mathcal{O}(\tau^n)$.

⁴⁸En esta sección $h'(X, t)$ o $h''(X, t)$, etc. representará la primera o segunda derivada de la función $h(X, t)$ con respecto a X .

Si la **ede** fuese lineal, sería factible obtener la solución exacta $X([\xi(t)], t)$ como funcional del **pe** $\xi(t)$. En este caso se pueden calcular todos los momentos del **pe** $X(t)$ a partir del conocimiento estadístico de **pe** $\xi(t)$. Alternativamente, también es factible calcular la funcional característica del proceso en estudio [ver sección (3.14)]. En la mayoría de los casos no lineales no es posible obtener una solución cerrada de la **ede** (3.108); sin embargo, es factible obtener una ecuación en derivadas parciales para el propagador del **pe** $X(t)$ (o sea, $P(x, t \mid x', t')$). Esta ecuación de evolución se llama ecuación de Fokker-Planck (**F-P**) y será analizada en detalle en la próxima sección.

Ejercicio optativo. Aplicando (3.111) en (3.110), obtenga luego de repetidas iteraciones

$$\begin{aligned} X(t+\tau) - X &= \int_t^{t+\tau} h(X, t') dt' + \int_t^{t+\tau} h'(X, t') \int_t^{t'} h(X, t'') dt'' dt' + \\ &+ \int_t^{t+\tau} h'(X, t') \int_t^{t'} g(X, t'') \xi(t'') dt'' dt' + \int_t^{t+\tau} g(X, t') \xi(t') dt' + \\ &+ \int_t^{t+\tau} g'(X, t') \int_t^{t'} h(X, t'') \xi(t'') dt'' dt' + \\ &+ \int_t^{t+\tau} g'(X, t') \int_t^{t'} g(X, t'') \xi(t'') \xi(t') dt'' dt' + \dots \end{aligned} \quad (3.112)$$

Ejercicio. Basándose en el teorema fundamental del análisis (teorema del valor medio para funciones continuas) muestre que en el límite $\tau \rightarrow 0$ se obtiene

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \int_t^{t+\tau} h'(X, t') \int_t^{t'} h(X, t'') dt'' dt' \rightarrow b\tau^2 h'(X, t) h(X, t) + b\tau^3 h''(X, t) h(X, t) + \mathcal{O}(\tau^4),$$

donde $b \in [0, 1]$. O sea, las integrales que no contienen fuerzas de Langevin $\xi(t)$ se comportan en el límite $\tau \rightarrow 0$ del $\mathcal{O}(\tau^2)$.

Ejercicio guiado. Mostremos usando diferenciales de Wiener que en el límite $\tau \rightarrow 0$ se obtiene:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \left\langle \int_t^{t+\tau} g'(X, t') \int_t^{t'} g(X, t'') \xi(t'') dt'' dt' \right\rangle \rightarrow \frac{\tau}{2} g'(X, t) g(X, t) + \mathcal{O}(\tau^n), \quad (3.113)$$

con $n > 1$. Para demostrar este resultado primero identificamos $dW(t') = \xi(t') dt'$. Entonces usando el teorema fundamental del análisis podemos escribir:

$$\int_t^{t+\tau} g'(X, t') dW(t') \int_t^{t'} g(X, t'') dW(t'') = g(X, b) \int_t^{t+\tau} g'(X, t') dW(t') [W(t') - W(t)],$$

donde $b \in (t, t')$. En el límite $\tau \sim 0$ podemos aproximar este resultado en la forma

$$\begin{aligned} &g(X, b) \int_t^{t+\tau} g'(X, t') dW(t') [W(t') - W(t)] \approx \\ &\approx g(X, b) g'(X, t) \int_t^{t+\tau} dW(t') [W(t') - W(t)] = \\ &= g(X, b) g'(X, t) \left(\int_t^{t+\tau} W(t') dW(t') - W(t) \int_t^{t+\tau} dW(t') \right). \end{aligned}$$

Si ahora tomamos el valor medio y usamos

$$\left\langle W(t) \int_t^{t+\tau} dW(t') \right\rangle = \frac{1}{2} \langle W(t)W(t+\tau) - W(t)^2 \rangle = 0,$$

se deduce que

$$\begin{aligned} \left\langle \int_t^{t+\tau} g'(X, t') dW(t') \int_t^{t'} g(X, t'') dW(t'') \right\rangle &\cong g(X, b)g'(X, t) \left\langle \int_t^{t+\tau} W(t') dW(t') \right\rangle \\ &\cong g(X, b)g'(X, t) \frac{\tau}{2}, \end{aligned}$$

y en el límite $\tau \rightarrow 0$ corresponde al resultado (3.113), pues $b \rightarrow t$.

Ejercicio optativo. Muestre que el resultado del ejercicio anterior también se puede obtener usando las propiedades de los cumulantes de $\xi(t)$, si además se interpreta que

$$\int_b^a f(x)\delta(x-a) dx = \frac{1}{2}f(a).$$

Esta definición está en acuerdo con la interpretación del cálculo diferencial de Stratonovich.

Ejercicio guiado. Usando (3.112) y las propiedades estadísticas del **pe** $\xi(t)$, obtenga en el límite $\tau \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \langle X(t+\tau) - X \rangle &= \left[h(X, t) + \frac{1}{2}g'(X, t)g(X, t) \right] \tau \\ \langle (X(t+\tau) - X)^2 \rangle &= [g(X, t)g(X, t)] \tau. \end{aligned} \tag{3.114}$$

Note que τ es el orden principal. Muestre también que los momentos superiores son de $\mathcal{O}(\tau^2)$. Éste es el motivo por el cual una **ede** del tipo (3.108) caracteriza, en general, a $X(t)$ como un **pe** markoviano inducido por el ruido gaussiano blanco $\xi(t)$.

Excursus. En general, a partir de una **ede** arbitraria como la (3.108) se puede ver que si el ruido $\xi(t)$, cualquiera que sea, es δ -correlacionado, entonces el proceso inducido $X(t)$ será markoviano (ver ejercicio 16-20, pág. 651 de la referencia [10]).

Ejercicio optativo. A partir de la **ede** (3.76) y para el caso en que el ruido $\xi(t)$ tenga una correlación exponencial, $\langle \xi^2 \rangle e^{-|t|/\tau_c}$, muestre que la difusividad, $\lim_{\tau \rightarrow 0} \langle \Delta V(\tau)^2 \rangle / \tau$, se anula si $\tau_c \neq 0$; de aquí es posible inferir que el **pe** $V(t)$ no es markoviano.

Perturbaciones temporales singulares

En general, una **ede** no puede ser analizada para tiempos largos mediante un desarrollo perturbativo del tipo (3.112), pues este tipo de análisis implica una perturbación singular. El presente ejemplo *determinista* muestra tal problema.

Considere la ecuación diferencial:

$$\frac{d}{dt}X = -\epsilon X, \quad X(0) = 1, \epsilon > 0, t \in [0, \infty] \tag{3.115}$$

La solución es obvia: $X(t) = \exp(-\epsilon t)$, y su límite asintótico $X(t \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ también es inmediato. Note que este sencillo resultado no se puede obtener mediante una teoría de perturbación en el tiempo.

Ejercicio. Muestre que la solución perturbativa (temporal) de (3.115) es:⁴⁹

$$X(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\epsilon t)^n}{n!}. \quad (3.116)$$

Pero si no conociéramos esta suma y cortáramos (3.116) en el orden p , obtendríamos

$$X_p(t) \sim \sum_{n=0}^p \frac{(-\epsilon t)^n}{n!}. \quad (3.117)$$

Esta expresión aproxima el resultado correcto sólo para tiempos $t \ll p/\epsilon$. Más aún, esta aproximación daría un resultado asintótico incorrecto [$X(t \rightarrow \infty) \rightarrow \text{diverge}$], este simple hecho muestra que en general los desarrollos perturbativos en el tiempo son singulares.

Ejercicio optativo. Muestre que si se introduce un desarrollo perturbativo en la variable conjugada de Laplace,⁵⁰ este fenómeno singular desaparece.

Desafortunadamente, la transformada de Laplace no es útil en una **ede** del tipo (3.108). Necesitamos, entonces, alguna hipótesis extra que nos permita obtener información sobre el **pe** $X(t)$, a todo tiempo, conociendo solamente sus desarrollos perturbativos a tiempos cortos. Esta hipótesis la proporciona la estructura de los procesos de Markov, razón por la cual estos **pe** son de importancia en la teoría estadística de no equilibrio; ver sección (3.18).

Comentario sobre los cumulantes de procesos integrados

En el capítulo 1 presentamos la función generadora de los cumulantes de una **va** como el logaritmo de la función característica. Además, en ese mismo capítulo se introdujo también un esquema de diagramas que permite el cálculo de cualquier cumulante de orden n si se conocen los cumulantes de orden inferior.

Consideremos ahora un **pe** definido mediante la integral de un proceso arbitrario $\eta(t)$; o sea:

$$X(t) = \int \eta(s) ds. \quad (3.118)$$

Se trata aquí de mostrar que, en efecto, la siguiente ecuación es válida para todo **pe** $\eta(t)$ y n arbitrario:

$$\langle\langle X(t_1) \cdots X(t_n) \rangle\rangle = \int \cdots \int ds_1 \cdots ds_n \langle\langle \eta(s_1) \cdots \eta(s_n) \rangle\rangle. \quad (3.119)$$

Ejemplo. Para el caso del segundo cumulante, la relación es obvia. Probemos (3.119) para el tercer cumulante. En general, usando el esquema diagramático⁵¹ se deduce que

$$\begin{aligned} \langle\langle X(t_1)X(t_2)X(t_3) \rangle\rangle &= \langle X(t_1)X(t_2)X(t_3) \rangle - \langle\langle X(t_1)X(t_2) \rangle\rangle \langle X(t_3) \rangle - \\ &- \langle\langle X(t_1)X(t_3) \rangle\rangle \langle X(t_2) \rangle - \langle\langle X(t_2)X(t_3) \rangle\rangle \langle X(t_1) \rangle - \langle X(t_1) \rangle \langle X(t_2) \rangle \langle X(t_3) \rangle, \end{aligned}$$

⁴⁹Obviamente esta expresión es el desarrollo en serie de una exponencial.

⁵⁰La transformada de Laplace de una función arbitraria $f(t)$ se define de la siguiente manera: $f(u) \equiv \mathcal{L}_u[f(t)] = \int_0^\infty f(t)e^{-ut} dt$, donde u es un número arbitrario siempre y cuando la integral converja. El estudio de $f(u)$ en el límite $u \rightarrow 0$ da información sobre el comportamiento de $f(t)$ para el régimen de tiempos largos $t \rightarrow \infty$. En el capítulo 7 se darán algunas propiedades al respecto.

⁵¹Ver sección (1.10).

y aplicando (3.118) en esta expresión se obtiene

$$\begin{aligned}
\langle\langle X(t_1)X(t_2)X(t_3)\rangle\rangle &= \int \int \int \{ \langle\eta(s_1)\eta(s_2)\eta(s_3)\rangle - \langle\eta(s_1)\eta(s_2)\rangle\langle\eta(s_3)\rangle - \\
&\quad - \langle\eta(s_1)\eta(s_3)\rangle\langle\eta(s_2)\rangle - \langle\eta(s_2)\eta(s_3)\rangle\langle\eta(s_1)\rangle - \\
&\quad - \langle\eta(s_1)\rangle\langle\eta(s_2)\rangle\langle\eta(s_3)\rangle\} ds_1 ds_2 ds_3 \\
&= \int \int \int \langle\eta(s_1)\eta(s_2)\eta(s_3)\rangle ds_1 ds_2 ds_3,
\end{aligned}$$

que es el resultado que se quería probar.

Ejercicio. Muestre que la relación (3.119) es válida para todo n .

Ejemplo. Podemos invocar un desarrollo en cumulantes para promediar soluciones que involucren integrales estocásticas. Un ejemplo de aplicación es la **ede** $dX/dt = -\varepsilon(t)X$, donde $\varepsilon(t)$ es un **pe** arbitrario. El **pe** $X(t)$ así definido se llama el oscilador de Kubo [1, 17]. Su solución integral para una realización del **pe** $\varepsilon(t)$ es

$$X(t) = X(0) \exp \left(- \int_0^t \varepsilon(s) ds \right).$$

Un caso más sencillo que éste ya fue presentado en la sección (3.14).

Aproximación autoconsistente para pequeñas fluctuaciones*

Si el término de ruido en una ecuación de Langevin es pequeño, y la parte determinista de la ecuación diferencial admite una solución estacionaria y estable, es posible estudiar la correspondiente **ede**, en valor medio, en el contexto de una teoría de perturbación, donde el parámetro de pequenés sea la amplitud de las fluctuaciones.

En el capítulo 1 vimos que si $h(X)$ es una función no lineal arbitraria de la **va** X , es factible introducir un desarrollo en fluctuaciones para calcular su **vm**:

$$\langle h(X) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\frac{d^n h}{dX^n} \right]_{X=\langle X \rangle} \langle (X - \langle X \rangle)^n \rangle. \quad (3.120)$$

Entonces, en ciertas condiciones particulares para cada caso, es posible reemplazar en una **ede** el término no lineal $h(X)$ por una expresión más sencilla. Es decir, es factible estudiar de manera *autoconsistente* la evolución de $\langle X(t) \rangle$ en forma perturbativa. Por ejemplo, si la **ede** es

$$\frac{d}{dt} X = h(X) + \sqrt{d} \xi(t), \quad (3.121)$$

donde $\xi(t)$ es un ruido gaussiano blanco de media nula, podemos tomar valores medios en (3.121) y usando (3.120) obtenemos:

$$\frac{d}{dt} \langle X \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\frac{d^n h}{dX^n} \right]_{X=\langle X \rangle} \langle (X - \langle X \rangle)^n \rangle. \quad (3.122)$$

En general, este sistema no es cerrado pero se puede resolver de forma aproximada truncando la serie convenientemente. Por otro lado, si $h(X)$ es un polinomio, es posible introducir aproximaciones *gaussianas*, entonces (3.122) puede resolverse autoconsistentemente en ese mismo orden de aproximación [22].

Excursus. La aproximación autoconsistente también se puede emplear en problemas de ecuaciones estocásticas en derivadas parciales, es decir, en el análisis de las fluctuaciones de campos estocásticos (sistemas no homogéneos) [25].

3.18 La ecuación de Fokker-Planck

El problema del cálculo de los momentos y correlaciones del **pe** $X(t)$, caracterizado por la **ede** (3.108), se reduce a calcular promedios conociendo la jerarquía de distribuciones de Kolmogorov. Como ya se comentó, para un proceso de Markov el conocimiento de la probabilidad condicionada (el propagador) y la distribución de 1-tiempo, permiten la caracterización completa del **pe**. La relación entre estos dos objetos, $P(x_1, t_1 | x_0, t_0)$ y $P_1(x, t)$, viene dada por la compatibilidad de la jerarquía de Kolmogorov y la regla de Bayes (definición de probabilidad condicionada). En general, si el **pe** es estacionario, casi siempre se estará interesado en resultados asintóticos (tiempos largos). En cuyo caso la distribución estacionaria de probabilidad (que es independiente de t) se obtiene como el límite asintótico, para $t_0 \rightarrow -\infty$, del propagador.⁵² Por otro lado, la ecuación diferencial que gobierna al propagador del sistema es la misma que la ecuación de evolución para la distribución de probabilidad de 1-tiempo. Intentemos entonces obtener esta ecuación en derivadas parciales.

Existen muchos métodos para la obtención de la ecuación de Fokker-Planck a partir de una **ede** de Langevin. Por ejemplo, el método de integrales de caminos [8], desarrollos en cumulantes ordinarios y cumulantes de Terwiel⁵³ [1, 24], análisis funcional [26], etc. En particular, aquí presentaremos uno de los métodos más sencillos y que está fuertemente inspirado en el cálculo de la función característica presentado en el capítulo 1. Por otro lado, este método permite un análisis directo en aquellos casos en que las fuerzas estocásticas no sean gaussianas ni de correlación deltiforme. Por supuesto, en el caso particular de que el ruido tenga correlación no deltiforme, la probabilidad condicionada (o propagador) no será suficiente para caracterizar completamente el sistema, puesto que éste es no markoviano.

En la representación (II), para un valor del tiempo dado, $t \in [t_i, t_f]$, el **pe** $X(t)$ es equivalente a una **va** caracterizada por la distribución $P(x, t)$. En particular, si el **pe** $X(t)$ toma, con certeza, un valor dado x' en el instante t' , la distribución de la **va** (en el instante t) viene dada por la probabilidad condicionada $P(x, t | x', t')$. Esta distribución se puede estudiar en términos de la función característica (su transformada de Fourier). Tomando $t = t + \Delta t$, $t' = t$ y $x' = X(t)$, la función característica viene dada en términos de los momentos condicionados:

$$\langle [X(t + \Delta t) - X(t)]^n \rangle,$$

los cuales se suponen conocidos a partir de su correspondiente **ede**.⁵⁴ Entonces, en general,

⁵²Ver segundo ejercicio de la sección (3.4)

⁵³La definición de ambos cumulantes se presentó en el capítulo 1. El punto de partida para pasar de una ecuación diferencial no lineal y estocástica a una ecuación lineal para la densidad de probabilidad, se basa en el uso de la ecuación de Liouville [para un fluido no necesariamente incompresible] y el empleo del lema de van Kampen [1].

⁵⁴Por ejemplo, en la ecuación (3.114) se dan los dos primeros momentos para $\tau \rightarrow 0$.

la función característica condicionada⁵⁵ viene dada por

$$\begin{aligned} G(k, x', t, \Delta t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ik(x - x')) P(x, t + \Delta t | x', t) dx \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (ik)^n M_n(x', t, \Delta t)/n!. \end{aligned} \quad (3.123)$$

Aquí $M_n(x', t, \Delta t) \equiv \langle [X(t + \Delta t) - X(t)]^n \rangle_{X(t)=x'}$. La notación de momentos *condicionados* indica que la solución de la **ede** se ha tomado con la condición inicial $X(t) = x'$. Luego, el propagador puede obtenerse invirtiendo en Fourier la función (3.123)

$$\begin{aligned} P(x, t + \Delta t | x', t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ik(x - x')) G(k, x', t, \Delta t) dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ik(x - x')) \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} (ik)^n M_n(x', t, \Delta t)/n! \right] dk. \end{aligned} \quad (3.124)$$

Observando que $n \geq 1$, podemos usar la siguiente relación operacional de Fourier

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ik(x - x')) (ik)^n dk = \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \delta(x - x'), \quad (3.125)$$

y utilizando las propiedades de la δ de Dirac, de (3.124) se obtiene

$$P(x, t + \Delta t | x', t) = \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n M_n(x, t, \Delta t)/n! \right] \delta(x - x'). \quad (3.126)$$

Si $\Delta t \rightarrow 0$, esta ecuación representa la solución infinitesimal para el propagador del sistema en términos de los momentos del **pe** $X(t)$. La ecuación (3.126) también satisface la condición inicial, usual, de la probabilidad condicionada

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} P(x, t + \Delta t | x', t) \rightarrow \delta(x - x').$$

La ecuación de evolución para la probabilidad condicionada se obtiene construyendo la derivada temporal del propagador infinitesimal

$$\begin{aligned} &\lim_{\Delta t \rightarrow 0} [P(x, t + \Delta t | x', t) - P(x, t | x', t)] / \Delta t = \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \frac{M_n(x, t, \Delta t)}{\Delta t n!} \right] \delta(x - x') \equiv \mathcal{L}(x, t) \delta(x - x'). \end{aligned} \quad (3.127)$$

Entonces $\mathcal{L}(x, t)$ es un operador diferencial sobre la condición inicial. Ésta es la ecuación en derivadas parciales buscada. O sea, podemos escribir una ecuación para la derivada temporal de la probabilidad condicionada en el instante inicial:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} P(x, \tau | x', t') \Big|_{\tau=t'} = \mathcal{L}(x, \tau) P(x, \tau | x', t') \Big|_{\tau=t'}. \quad (3.128)$$

⁵⁵Ver sección (1.14).

En particular, si la **ede** (3.108) involucra un ruido gaussiano blanco, $\xi(t)$, solamente los dos primeros momentos $M_n(x', t, \Delta t)$ son del $\mathcal{O}(\Delta t)$, con lo cual de (3.127) se obtiene una ecuación en derivadas parciales de segundo orden, llamada ecuación de Fokker-Planck (**F-P**).

La ecuación de **F-P** representa la generalización de la ecuación de difusión, pues en ella aparece un término de *deriva* proporcional a

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{M_1(x, t, \Delta t)}{\Delta t},$$

Así como el término usual de difusión proporcional a

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{M_2(x, t, \Delta t)}{2!\Delta t}.$$

En general, éstos son coeficientes no homogéneos en la variable de estado x . Definiendo

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{M_1(x, t, \Delta t)}{\Delta t} &\equiv K(x, t) \\ \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{M_2(x, t, \Delta t)}{2!\Delta t} &\equiv D(x, t), \end{aligned} \quad (3.129)$$

podemos escribir los coeficientes de la ecuación de **F-P** en función de los coeficientes que aparecen en la ecuación de Langevin $dX/dt = h(X, t) + g(X, t)\xi(t)$. Usando los resultados de (3.114) se ve que

$$K(x, t) = h(x, t) + \frac{1}{2}g'(x, t)g(x, t) \quad (3.130)$$

$$D(x, t) = \frac{1}{2}[g(x, t)]^2, \quad (3.131)$$

de donde se deduce que la ecuación diferencial de **F-P** (en el cálculo de Stratonovich) se escribe para todo t, t' en la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t | x', t') = \left[-\frac{\partial}{\partial x} K(x, t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D(x, t) \right] P(x, t | x', t'). \quad (3.132)$$

Note que integrando en la condición inicial obtenemos la misma ecuación de evolución para la distribución de probabilidad de 1-tiempo $P_1(x, t)$.

Ejercicio. Sea $X(t)$ es un **pe** de Markov (continuo) caracterizado para $\Delta t \rightarrow 0$ por $M_1(x', t, \Delta t) \sim \mathcal{O}(\Delta t)$, $M_2(x', t, \Delta t) \sim \mathcal{O}(\Delta t)$ y $M_n(x', t, \Delta t) \sim \mathcal{O}(\Delta t^\nu)$ con $\nu > 1$ para $n \geq 3$, donde

$$M_n(x', t, \Delta t) \equiv \langle [X(t + \Delta t) - X(t)]^n \rangle_{X(t)=x'}.$$

Muestre que el propagador infinitesimal satisface

$$P(x, t + \Delta t | x', t) = \left[1 + \sum_{n=1}^2 \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n M_n(x, t, \Delta t) / n! \right] P(x, t | x', t) + \mathcal{O}(\Delta t^\nu).$$

Por otro lado, puesto que el **pe** $X(t)$ es de Markov se cumple la ecuación de Chapman-Kolmogorov, es decir:

$$P(x, t + \Delta t \mid x', t') = \int P(x, t + \Delta t \mid z, t) P(z, t \mid x', t') dz; \quad t \geq t'.$$

Usando (3.124) podemos relacionar $P(x, t + \Delta t \mid z, t)$ con la inversa de la transformada de Fourier de $G(k, z, t, \Delta t)$, entonces la ecuación de Chapman-Kolmogorov se escribirá, en función de $M_n(z, t, \Delta t)$, de la siguiente manera ($\forall t \geq t'$):

$$P(x, t + \Delta t \mid x', t') = \int \int e^{-ik(x-z)} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} (ik)^n \frac{M_n(z, t, \Delta t)}{n!} \right] P(z, t \mid x', t') \frac{dz dk}{2\pi}. \quad (3.133)$$

Ésta es la ecuación de Chapman-Kolmogorov en su forma diferencial.

Ejercicio. (Prueba de 3.132.) Usando el comportamiento (para $\Delta t \rightarrow 0$) de los momentos $M_n(z, t, \Delta t)$ y la relación operacional de Fourier (3.125) obtenga, a partir de la ecuación de Chapman-Kolmogorov diferencial, la ecuación de **F-P** para el proceso de Markov $X(t)$, o sea: (3.132).

Ejercicio. Usando (3.130), (3.131) y (3.132) muestre que la ecuación de **F-P** asociada a la ecuación de Langevin (3.108) se puede escribir, también, en la forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t \mid x', t') = \left[-\frac{\partial}{\partial x} h(x, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} g(x, t) \frac{\partial}{\partial x} g(x, t) \right] P(x, t \mid x', t'); \quad \forall t \geq t'.$$

Excursus. Si en lugar de haber usado el cálculo diferencial de Stratonovich hubiésemos usado el cálculo de Ito, la ecuación de **F-P** asociada al proceso de Markov $X(t)$ sería

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t \mid x', t') = \left[-\frac{\partial}{\partial x} h(x, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} g(x, t)^2 \right] P(x, t \mid x', t'); \quad \forall t \geq t'.$$

De aquí se observa que para una **ede** con $g = g(t)$ no existe ninguna diferencia entre ambos cálculos diferenciales. En el caso de que g sea una función de la variable de estado, $g = g(x)$, la **ede** suele llamarse, habitualmente, *de ruido multiplicativa*.⁵⁶

Excursus. (Dilema Ito-Stratonovich.) Si se compara (3.132) con la ecuación de **F-P** que se obtiene usando el cálculo de Ito, es sencillo observar que la diferencia es una deriva *espuria*. Sin embargo, cabe destacar que no existe justificación alguna para elegir un cálculo diferencial de otro; simplemente la ecuación (3.108) es una *pre-ecuación* en el sentido que carece de significado si no se define algún cálculo diferencial específico. Por consiguiente ambos **pe** $X(t)$ (de Markov) son diferentes y están corretamente definidos [23].

En general, si sabemos que el **pe** $X(t)$ es de Markov, pero no todos sus momentos $M_n(x', t, \Delta t)$ con $n \geq 3$ son de $\mathcal{O}(\Delta t^\nu)$ con $\nu > 1$, la ecuación de evolución para el propagador será

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t \mid x', t') = \left[\sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} M_n(x', t, \Delta t) / n! \right] P(x, t \mid x', t'); \quad \forall t \geq t',$$

⁵⁶En 1D esta clasificación es superflua, pues siempre es factible hacer un cambio de variable (no lineal) “para evitar” esta característica multiplicativa [1]. Note que al hacer un cambio de variable no lineal, no se evita la ambigüedad que existe en la **ede** (3.108) cuando en ella hay una función de estado $g(x)$. Es decir, en este caso es indispensable especificar (definir) un cálculo diferencial estocástico particular. Ver el último ejercicio de esta sección.

éste sería el caso de tener un ruido blanco no gaussiano $\xi(t)$ en la **ede** (3.108).

Ejercicio. Muestre que el propagador (3.70) corresponde a la probabilidad condicionada $P(w, t | w', t')$, $\forall t \geq t'$, del proceso de Wiener definido a través de la **ede** $\dot{W} = \xi(t)$ con $\xi(t)$ un ruido gaussiano blanco, y tiene asociada la siguiente ecuación de **F-P**

$$\frac{\partial}{\partial t} P(w, t | w', t') = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial w^2} P(w, t | w', t'),$$

junto con la condición inicial $\lim_{t \rightarrow t'} P(w, t | w', t') \rightarrow \delta(w - w')$.

Excursus. En 1906 Smoluchowski⁵⁷ introdujo un método para estudiar las fluctuaciones espaciales de una partícula que se difunde en presencia de una fuerza externa $F(x, t)$. Este método se basó en el análisis de la ecuación de difusión

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t | x', t') = \frac{1}{m\gamma} \left[-\frac{\partial}{\partial x} F(x, t) + k_B T \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] P(x, t | x', t'); \quad \forall t \geq t', \quad (3.134)$$

donde m es la masa de la partícula y γ el coeficiente de amortiguación de la velocidad. Esta ecuación es correcta si la fuerza es aproximadamente constante a lo largo de la distancia en la cual se amortigua la velocidad. Si esta condición no se cumple, es conveniente considerar la distribución de probabilidad conjunta de la posición y la velocidad de la partícula; en este caso la descripción necesariamente lleva a una ecuación de **F-P** multidimensional.⁵⁸ En un contexto moderno la ecuación de Smoluchowski (3.134) es la primera corrección sistemática en el parámetro pequeño γ^{-1} (disipación grande). Sucesivas correcciones se pueden estudiar, por ejemplo, para el caso de una fuerza independiente del tiempo, empleando un desarrollo de perturbación *singular*, como el presentado por van Kampen [1].

Ejercicio. (Ecuación de Smoluchowski.) Obtenga la **ede** asociada a la ecuación de **F-P** (3.134).

Ejercicio optativo. (Condición de contorno especial.) Considere en una dimensión una partícula que se difunde en presencia de la fuerza de la gravedad en la dirección $-x$. Muestre a partir del ejercicio anterior que en la aproximación *sobreamortiguada*, la ecuación para la densidad de probabilidad en el espacio es

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t | x', t') = \frac{1}{\gamma} \left[g \frac{\partial}{\partial x} + \frac{k_B T}{m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] P(x, t | x', t'); \quad \forall t \geq t'.$$

Donde, ahora, habrá que resolver $P(x, t | x', t')$ para todo $\{x, x'\} \geq 0$, bajo la condición de reflexión en $x = 0$, es decir:

$$\left[g + \frac{k_B T}{m} \frac{\partial}{\partial x} \right] P(x, t | x', t') = 0 \quad \text{en} \quad x = 0.$$

Muestre que la solución independiente del tiempo es la densidad barométrica:

$$P_{\text{eq}}(x) \propto \exp \left(-\frac{mg}{k_B T} x \right) \quad \text{con} \quad x \in [0, \infty).$$

El problema de encontrar la solución *independiente del tiempo* de la ecuación de **F-P** (el estado estacionario) será presentado en el capítulo 4. Cabe destacar que el estudio de

⁵⁷M. von Smoluchowski, Ann. Physik **21**, 756, (1906).

⁵⁸La ecuación de **F-P** en las variables posición y velocidad es la ecuación de Kramers, ver capítulo 4.

soluciones con condiciones de contorno *especiales* es un problema no trivial y dejaremos parte de su análisis para los capítulos 4 y 6.

Ejercicio. Considere la **ede** 1-dimensional “multiplicativa”:

$$\frac{dX}{dt} = h(X) + g(X)\xi(t). \quad (3.135)$$

Si $g(X) \neq 0, \forall X \in \mathcal{D}_X$, podemos dividir (3.135) por $g(X)$. Entonces, si definimos una nueva variable Y mediante la expresión

$$Y = \int^X \frac{dX'}{g(X')} = f(X),$$

se observa que $X = f^{(-1)}(Y)$, donde $f^{(-1)}$ representa la función inversa de $Y(X)$. Muestre que podemos volver a escribir (3.135) en la forma no multiplicativa:

$$\frac{dY}{dt} = H[f^{(-1)}(Y)] + \xi(t),$$

donde la nueva parte determinista está caracterizada por la función $H[X] = h(X)/g(X)$.

Excursus. (**Lema de van Kampen.**) Considere la **ede** 1-dimensional:

$$\frac{dX}{dt} = h(X) + g(X, [\xi(t)]), \quad \text{donde } \xi(t) \text{ es un } \mathbf{pe} \text{ arbitrario.} \quad (3.136)$$

Aunque la función $g(X, [\xi(t)])$ no se pueda *factorizar* como en el ejercicio anterior, existe un resultado interesante (*lema* de van Kampen) que permite abordar el problema del cálculo de la ecuación de evolución para la densidad de probabilidad (dada una condición inicial arbitraria $X(0)$):

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \langle [h(X) + g(X, [\xi(t)])] \delta(x - X(t)) \rangle_{\xi(t)}, \quad (3.137)$$

donde $P(x, t) = \langle \delta(x - X(t)) \rangle_{\xi(t)}$ y el **vm** se toma sobre todas las realizaciones del **pe** $\xi(t)$. Note que si el **pe** $\xi(t)$ es gaussiano, el teorema de Novikov es de suma utilidad para calcular el **vm** que aparece en el segundo miembro de (3.137). Sin embargo, debido a lo complejo del problema,⁵⁹ a partir de este *lema* es necesario aún emplear un tratamiento de perturbación para poder obtener una ecuación cerrada para la evolución de $P(x, t)$.

3.18.1 Perfiles estocásticos*

Puede ocurrir que se esté interesado en conocer la dinámica de un **pe** $X(t)$ cuando ésta es inducida por la deriva de un perfil espacial que avanza en el tiempo de manera estocástica. Por ejemplo, en ese caso es de interés estudiar una **ede** de la forma:

$$\frac{dX}{dt} = \Theta(\xi(t) + ct - X), \quad (3.138)$$

⁵⁹Si $\xi(t)$ no es un ruido blanco, $X(t)$ será un proceso *no markoviano*; debido a lo extenso del tema este problema no será tratado aquí. Una buena referencia donde se puede consultar el *lema* de van Kampen y sus aplicaciones es: Phys. Rep. **24**, 171, (1976).

donde $\xi(t)$ es un **pe** arbitrario y $\Theta(\alpha)$ es la función escalón [ver su definición en los capítulos 1 y 5]; compare esta ecuación con la **ede** (3.136). Evidentemente este problema no es sencillo de resolver; sin embargo, para ciertos procesos $\xi(t)$ es posible obtener —a partir del lema de van Kampen— resultados aproximados para la evolución temporal de $P(x, t)$. Aquí no abordaremos el estudio de la evolución de la probabilidad $P(x, t)$; sin embargo, a efectos de comprender algo más sobre este tema calculemos ahora el **vm** del proceso (biparamétrico) definido por la relación

$$Z(t) = \Theta(\xi(t) + \epsilon - x), \quad (3.139)$$

con $x \geq 0$, y $\xi(t)$ un **pe** arbitrario positivo. Para calcular el **vm** del **pe** $Z(t)$ usamos la relación

$$\Theta(\alpha - x) = \Theta(\alpha) - \int_0^x \delta(\alpha - x') dx', \quad x \geq 0. \quad (3.140)$$

Entonces, el **vm** del **pe** $Z(t)$ es ($\forall \epsilon$ y $x \geq 0$)

$$\begin{aligned} \langle Z(t) \rangle &= \langle \Theta(\xi(t) + \epsilon - x) \rangle \\ &= \langle \Theta(\xi(t) + \epsilon) \rangle - \int_0^x \langle \delta(\xi(t) + \epsilon - x') \rangle dx'. \end{aligned} \quad (3.141)$$

Supongamos ahora que el **pe** $\xi(t)$ es gaussiano *positivo*, entonces

$$P_1(\xi, t) = \frac{2}{\sqrt{2\pi\sigma^2(t)}} \exp\left(\frac{-\xi^2}{2\sigma^2(t)}\right), \quad \mathcal{D}_\xi = (0, \infty). \quad (3.142)$$

Aplicando (3.142) en (3.141) se obtiene, para $\epsilon \geq 0$

$$\begin{aligned} \langle \Theta(\xi(t) + \epsilon - x) \rangle &= 1 - \int_{-\epsilon}^{x-\epsilon} \Theta(x - \epsilon) \Theta(z) P_\xi(z) dz \\ &= 1 - \Theta(x - \epsilon) \int_0^{x-\epsilon} P_\xi(z) dz \\ &= 1 - \Theta(x - \epsilon) \operatorname{erf}\left(\frac{x - \epsilon}{\sqrt{2\sigma^2(t)}}\right). \end{aligned}$$

Aquí $\operatorname{erf}(\alpha)$ es la función integral de probabilidad y $P_\xi(z) = P_1(\xi = z, t)$. De este resultado se observa que $\langle \Theta(\xi(t) + \epsilon - x) \rangle = 1$ para $0 \leq x \leq \epsilon$, y que $\langle \Theta(\xi(t) + \epsilon - x) \rangle \rightarrow 0$ para $x \rightarrow \infty$. Por otro lado, si la dispersión $\sigma^2(t)$ del **pe** $\xi(t)$ satura a un valor finito para $t \rightarrow \infty$, es evidente que $\langle Z(t \rightarrow \infty) \rangle$ será un perfil estacionario en la coordenada x . Compare esta conclusión con la que se obtendría si se usara que el **pe** $\xi(t)$ tiene una dispersión que aumenta en el tiempo (análoga al proceso de Wiener).

Ejercicio. Muestre que si el **pe** $\xi(t)$ es gaussiano *positivo* se puede escribir

$$\langle \Theta(\xi(t) \mp \epsilon - x) \rangle = 1 - \Theta(x \pm \epsilon) \operatorname{erf}\left(\frac{x \pm \epsilon}{\sqrt{2\sigma^2(t)}}\right), \quad \text{para } \epsilon \geq 0 \text{ y } x \geq 0. \quad (3.143)$$

Considere que $\epsilon = ct$ e interprete ambos resultados (para $\pm\epsilon$) en el caso en que $\epsilon \rightarrow \infty$. ¿Qué diferencia se obtiene si se considera que el **pe** $\xi(t)$ es gaussiano definido en todo su dominio y $x \in (-\infty, +\infty)$?

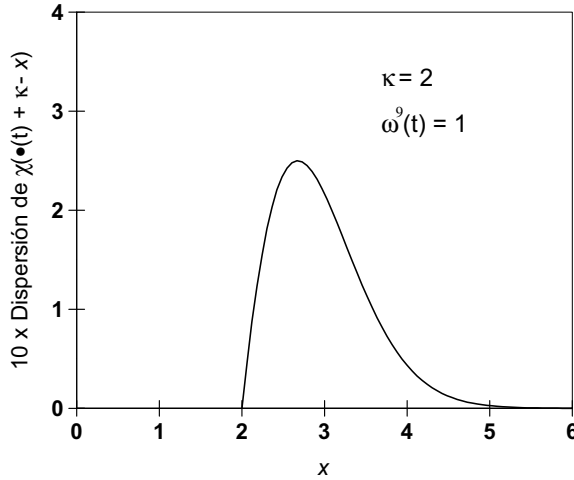


Figura 3.3: Dispersión $\langle Z(t)^2 \rangle - \langle Z(t) \rangle^2$ como función del parámetro x .

Ejercicio guiado. (Dispersión espacial.) Consideremos el caso $\mathcal{D}_\xi = (0, \infty)$ y calculemos la dispersión del **pe** $Z(t) = \Theta(\xi(t) + \epsilon - x)$ en función del parámetro $x \geq 0$ (coordenada espacial). A partir de la definición de la función escalón se deduce que

$$\langle (\Theta(\xi(t) + \epsilon - x))^2 \rangle = \langle \Theta(\xi(t) + \epsilon - x) \rangle,$$

entonces, empleando (3.143) se infiere que

$$\langle Z(t)^2 \rangle - \langle Z(t) \rangle^2 = \Theta(x - \epsilon) \operatorname{erf} \left(\frac{x - \epsilon}{\sqrt{2\sigma^2(t)}} \right) \left(1 - \Theta(x - \epsilon) \operatorname{erf} \left(\frac{x - \epsilon}{\sqrt{2\sigma^2(t)}} \right) \right), \quad (3.144)$$

de donde evidentemente se observa que la dispersión no es nula para $x > \epsilon$. Interprete el significado de que la dispersión es nula para $0 \leq x \leq \epsilon$. Muestre que el ancho del pico de la dispersión del **pe** $Z(t)$ como función de x está controlado por la magnitud $\sigma^2(t)$. En la figura (3.3) se muestra la gráfica de la dispersión del **pe** $Z(t)$, (3.144), como función de la coordenada espacial x para el caso en que $\sigma^2(t) = \text{Cte}$.

Ejercicio. En el caso en que el **pe** $\xi(t)$ sea dicotómico *positivo* [ver sección (3.3.1)], calcule la dispersión del **pe** $Z(t) = \Theta(\xi(t) + \epsilon - x)$ en función del parámetro x (coordenada espacial).

Excursus. Estudie el **pe** $X(t)$ caracterizado por la **ede**

$$\frac{d^2 X}{dt^2} + \gamma \frac{dX}{dt} = -g + \tilde{g} \Theta(\xi(t) - X), \quad \text{con } \{\gamma, g, \tilde{g}\} > 0,$$

donde $\xi(t)$ es un **pe** arbitrario; interprete el término de ruido no factorizable $\Theta(\xi(t) - X)$. Es interesante destacar que para resolver esta **ede** es conveniente introducir un espacio de

configuración bidimensional $\{X, V\}$, donde $V = dX/dt$. Entonces, en este caso es necesario introducir una representación multidimensional para la **ede**. En particular el caso multidimensional markoviano⁶⁰ con ruido factorizable será discutido en la próxima sección. Por otro lado, el caso no factorizable se puede estudiar empleando una generalización multidimensional de (3.137); sin embargo, debido a lo complejo del problema aquí no entraremos en el análisis de ese tema.

3.19 La ecuación de Fokker-Planck multidimensional*

La ecuación de **F-P** es el punto de partida para el estudio de las fluctuaciones temporales en torno del equilibrio, y también para el análisis de las fluctuaciones temporales de variables macroscópicas lejos del equilibrio termodinámico.

Ejercicio. Considere n **ede** acopladas en presencia de n ruidos $\xi_j(t)$, ($j = 1, \dots, n$) gaussianos de media nula y correlaciones blancas: $\langle \xi_j(t)\xi_l(s) \rangle = \delta_{j,l} \delta(t-s)$

$$\frac{d}{dt}X_j(t) = h_j(\{X_m\}, t) + g_{jl}(\{X_m\}, t)\xi_l(t), \quad (3.145)$$

donde se ha usado la convención de suma sobre índices repetidos. Generalizando (3.130) y (3.131), demuestre que

$$K_i(\{x_m\}, t) = h_i(\{x_m\}, t) + \frac{1}{2}g_{kj}(\{x_m\}, t)\frac{\partial}{\partial x_k}g_{ij}(\{x_m\}, t) \quad (3.146)$$

$$D_{ij}(\{x_m\}, t) = \frac{1}{2}g_{ik}(\{x_m\}, t)g_{jk}(\{x_m\}, t). \quad (3.147)$$

Ejercicio. Usando el cálculo de Stratonovich, muestre que la ecuación de **F-P** asociada a la **ede** (3.145) viene dada por

$$\frac{\partial}{\partial t}P(\{x_m\}, t | \{x'_m\}) = \left[-\frac{\partial}{\partial x_i}K_i(\{x_m\}, t) + \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_j}D_{ij}(\{x_m\}, t) \right] P(\{x_m\}, t | \{x'_m\}), \quad (3.148)$$

donde los coeficientes de **F-P** vienen dados por (3.146) y (3.147), y la distribución cumple con la condición inicial $\lim_{t \rightarrow 0} P(\{x_m\}, t | \{x'_m\}) \rightarrow \delta(\{x_m\} - \{x'_m\})$. El análisis y solución de esta ecuación será discutido en el próximo capítulo.

Si el **pe** de Markov es discreto,⁶¹ la ecuación de evolución para la probabilidad condicionada es la Ecuación Maestra. En el capítulo 6 se discutirá en detalle la Ecuación Maestra en relación con el problema de la difusión en medios desordenados.

Ejercicio optativo. Sea el siguiente sistema (lineal) de ecuaciones estocásticas acopladas:

$$\begin{aligned} \frac{dX_1}{dt} &= X_2 \\ \frac{dX_2}{dt} &= \frac{4}{3}\Lambda X_1 - 2k + \sqrt{\epsilon}\xi_2(t), \end{aligned}$$

donde $X_j \in [-\infty, \infty]$. Considere un par de ruidos gaussianos blancos $\xi_l(t)$, tales que $\langle \xi_l(t) \rangle = 0$ y $\langle \xi_l(t)\xi_j(t') \rangle = 2\delta_{l,j} \delta(t-t')$. Obtenga la ecuación en derivadas parciales que gobierna la

⁶⁰Es decir, cuando la correlación del ruido estacionario es $\langle \xi(t)\xi(0) \rangle = \delta(t)$.

⁶¹La descripción física (dinámica mesoscópica) del sistema está dada a través de variaciones discretas.

evolución de la distribución de probabilidad condicionada $P(\{x_m\}, t | \{x'_m\}, t')$. Estudie, en el régimen de tiempos largos, el **vm** $\langle X_j(t) \rangle$ y la dispersión cuadrática relativa $\sqrt{\sigma_{jj}} / \langle X_j(t) \rangle$, para $j = 1, 2$. Muestre que estas dispersiones relativas sólo se mantienen constantes si $\Lambda \neq 0$ [27].

Excursus. Considere ahora el siguiente sistema no lineal de ecuaciones estocásticas acopladas:

$$\begin{aligned}\frac{dX_1}{dt} &= X_2 \\ \frac{dX_2}{dt} &= a \frac{X_2^2}{X_1} + bX_1 + \sqrt{\epsilon} \xi_2(t).\end{aligned}$$

Encuentre la ecuación de **F-P** asociada a este conjunto de **ede**. Por lo general, en el caso no lineal no es posible obtener la solución exacta de la ecuación de **F-P**. Sin embargo, en el límite de pequeñas fluctuaciones $\epsilon \sim 0$ es posible arbitrar técnicas perturbativas para estudiar el problema estocástico; en particular el método de la expansión ϵ de van Kampen [1] es de suma utilidad. Muestre, para este modelo, que si ϵ es pequeño la dispersión cuadrática relativa se mantiene constante (para tiempos largos [28]) sólo si $b \neq 0$.

Excursus. (Sistemas extendidos.) Considere la situación en que el sistema de interés tiene un número muy grande de variables dinámicas X_i , $i = 1, 2, \dots, m$ [2]. En particular, en el caso en que $m \rightarrow \infty$ podemos considerar el límite en el continuo $X_i \rightarrow r$ [esto da lugar a una ecuación funcional de **F-P**; ver la referencia en la nota (31) del capítulo 7]. Éste es el caso en que la variable dinámica de interés (el parámetro de orden) es un campo escalar en un espacio de dimensión arbitraria, es decir: $\phi(r, t)$. El sistema dinámico podría, por ejemplo, tener términos lineales, no lineales y hasta términos de difusión de la forma $\nabla^2 \phi(r, t)$ (o aun más complejos); si además el sistema tiene coeficientes aleatorios (procesos estocásticos), decimos que estamos en presencia de una ecuación en derivadas parciales estocásticas. Este tipo de ecuaciones suelen llamarse ecuaciones de reacción-difusión con términos de ruido y no serán tratadas en este texto [ésta es la génesis del escenario de los sistemas complejos que presentan patrones espacio-temporales, caos espacial, espirales, etc., una buena referencia introductoria sobre este tema se puede encontrar en el libro de G. Nicolis, *Introduction to Nonlinear Science*, Cambridge, University Press (1995)]. Por otro lado, también es factible estudiar inestabilidades, estructuras espaciales, etc., sin necesidad de pasar por la dinámica de una ecuación funcional de **F-P**; ver por ejemplo, J. Phys. A Math. and Gen. **32**, 3209, (1999) donde hemos estudiado la evolución estocástica de las explosiones de llamas.

3.19.1 Movimiento browniano esférico

Cuando se trata de entender un movimiento “esférico” errático, surge de manera natural generalizar el concepto de movimiento browniano en el plano al estudio estocástico del desplazamiento de un punto sobre la superficie de una esfera⁶² de radio constante r (por ejemplo, $r = 1$). Una aplicación concreta del análisis del movimiento browniano sobre la esfera es el estudio de la relajación magnética [19].

El punto de partida para estudiar la relajación magnética lo establece el análisis de la dinámica fenomenológica del vector momento magnético **M**. Según el tratamiento de

⁶²Una presentación rigurosa acerca del problema del movimiento browniano *sobre* una variedad diferencial puede leerse en el trabajo de van Kampen: J. Stat. Phys. **44**, 1, (1986).

Brown-Gilbert esta evolución dinámica está controlada por la ecuación determinista

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \gamma_0 \mathbf{M} \times \left(\frac{-\partial V}{\partial \mathbf{M}} - \eta \frac{d\mathbf{M}}{dt} \right), \quad (3.149)$$

donde γ_0 es el cociente entre el momento magnético y el momento angular (cociente giro-magnético), η es la constante de amortiguamiento y $V = V(\theta, \phi)$ representa el potencial de fuerzas conservativas. Entonces el vector $\left(\frac{-\partial V}{\partial \mathbf{M}} - \eta \frac{d\mathbf{M}}{dt} \right)$ representa un *campo efectivo* que actúa sobre $\mathbf{M}(t)$. Para tener en cuenta una descripción mesoscópica se reemplaza el factor de amortiguamiento *puro* por un término que también introduzca fluctuaciones, es decir:

$$-\eta \frac{d\mathbf{M}}{dt} \rightarrow -\eta \frac{d\mathbf{M}}{dt} + \xi(t),$$

donde el vector $\xi(t)$ es un **pe** gaussiano de media nula y correlación blanca $\langle \xi_j(t) \xi_l(t + \tau) \rangle = \epsilon \delta_{j,l} \delta(\tau)$. Introduciendo este reemplazo en (3.149) se obtiene una **ede**, a partir de la cual es posible escribir la ecuación de **F-P** asociada a la distribución de probabilidad $P(\theta, \phi, t)$. Esta probabilidad caracteriza la dirección angular del momento magnético \mathbf{M} en el instante t . Es decir, θ y ϕ caracterizan los ángulos instantáneos del momento magnético estocástico \mathbf{M} . Adoptado un sistema de coordenadas cartesiano $M_x = M_s \sin \theta \cos \phi$, $M_y = M_s \sin \theta \sin \phi$, y $M_z = M_s \cos \theta$; podemos definir una densidad de probabilidad *superficial* $\mathcal{W}(\theta, \phi, t)$ mediante la relación:

$$\begin{aligned} d\mathcal{W}(\theta, \phi, t) &= \mathcal{W}(\theta, \phi, t) \sin \theta \, d\theta \, d\phi \\ &= dP(\theta, \phi, t) \\ &= P(\theta, \phi, t) \, d\theta \, d\phi, \end{aligned}$$

a partir de la cual la ecuación de **F-P** asociada a la densidad $\mathcal{W}(\theta, \phi, t)$ viene dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial t} &= \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left\{ \sin \theta \left[\left(h' \frac{\partial V}{\partial \theta} - \frac{g'}{\sin \theta} \frac{\partial V}{\partial \phi} \right) \mathcal{W} + k' \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \theta} \right] \right\} + \\ &+ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \left\{ \left(g' \frac{\partial V}{\partial \theta} + \frac{h'}{\sin \theta} \frac{\partial V}{\partial \phi} \right) \mathcal{W} + \frac{k'}{\sin \theta} \frac{\partial \mathcal{W}}{\partial \phi} \right\}. \end{aligned} \quad (3.150)$$

Aquí se ha usado que $\frac{-\partial V}{\partial \mathbf{M}} \equiv (\partial V / \partial M_x, \partial V / \partial M_y, \partial V / \partial M_z)$, junto con las definiciones de las constantes

$$g' = \frac{\gamma_0}{(1 + \alpha^2) M_s}; \quad h' = g' \alpha; \quad \alpha = \eta \gamma_0 M_s; \quad k' = \frac{\epsilon}{2} M_s^2 [h'^2 + g'^2].$$

Ejercicio optativo. Empleando en (3.149) la relación que existe entre coordenadas esféricas (polares) y cartesianas, es posible mediante la aplicación de la teoría de Fokker-Planck multidimensional obtener el correspondiente operador (3.150). Sin embargo, mediante conceptos intuitivos de corrientes de probabilidad, también se puede obtener este resultado de una manera mucho más sencilla [29].

En el próximo capítulo se verá, bajo la restricción del principio del balance detallado, que es posible relacionar el coeficiente de disipación η con el parámetro de fluctuación ϵ que aparecen en la **ede** de Brown-Gilbert. De esta manera es fácil ver cómo a partir de la **ede** de Brown-Gilbert es posible obtener la distribución de probabilidad correspondiente a la mecánica estadística del equilibrio [ver sección (4.6.2)].

Bibliografía

- [1] N.G. van Kampen, *Stochastic Process in Physics and Chemistry*, Second Edition, Amsterdam, North-Holland (1992).
- [2] C.W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods*, Berlin, Springer-Verlag (1985).
- [3] L.E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, Second Edition, Austin, Edward Arnold Publ. Ltd. (1992).
- [4] P. Hangii, *Stochastic Processes applied to Physics*, Eds. L Pesquera and M.A. Rodríguez, Singapore, World Scientific (1985).
- [5] R.L. Stratonovich, *Topics in the Theory of Random Noise, Vols. 1 and 2*, New York, Gordon and Breach (1963).
- [6] M.O. Cáceres, A. Becker and L. Kramer, Phys. Rev. **A 43**, 6581, (1991).
- [7] A. Becker, M.O. Cáceres and L. Kramer, Phys. Rev. **A 46**, R4463, (1992).
- [8] F. Langouche, D. Roekaerts and E. Tirapegui, *Functional Integration and Semiclassical Expansions*, Dordrecht, D. Reidel Publ. Co. (1982).
- [9] B.B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, New York, W.H. Freeman (1983).
- [10] A. Papoulis, *Probability Random Variables, and Stochastic Processes*, 3rd Edition, New York, McGraw-Hill (1991).
- [11] E. W. Montroll and B. West, *Fluctuation Phenomena*, Eds. E.W. Montroll and J.L. Lebowits, Amsterdam, Elsevier Science Publisher B.V. (1979).
- [12] M.O. Cáceres, J. Phys. A Math. Gen. **32**, 6009, (1999).
- [13] L. Arnold, *Stochastic Differential Equation*, New York, J. Wiley and Sons (1974).
- [14] D. Saupe, *The Science of Fractal Images*, Eds. Heinz-Otto Peitgen and Dietmar Saupe, Berlin, Springer-Verlag (1988).
- [15] M.O. Cáceres, Phys. Rev **E 60**, 5208, (1999).
- [16] A. Einstein, Ann. Physik **17**, 549, (1905); **19**, 371, (1906).
- [17] M.O. Cáceres and A.A Budini, J. Phys. A Math. Gen. **30**, 8427, (1997).

- [18] M.O. Cáceres, Braz. J. of Phys. **29**, 125, (1999).
- [19] W.T. Coffey, Yu P. Kalmykov and J.T. Waldron, *The Langevin Equation*, Singapore, World Scientific (1996).
- [20] L. Mandel and E. Wolf, *Optical Coherence on Quantum Optics*, Cambridge, Cambridge Univ. Press. (1995).
- [21] M.O. Cáceres, C.E. Budde and G. J. Sibona, J. Phys. A Math. Gen. **28**, 3877, (1995); M.O. Cáceres, M.A. Fuentes and C.E. Budde, idem **30**, 2287, (1997).
- [22] P. Colet, F. de Pasquale, M.O. Cáceres and M. San Miguel, Phys. Rev. **A 41**, 1901, (1990).
- [23] N.G. van Kampen, J. Stat. Phys. **24**, 175, (1981).
- [24] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, Berlin, Springer-Verlag (1984).
- [25] O. Osenda, C. B. Briozzo and M. O. Cáceres, Phys. Rev. **E 54**, 6944, (1996); idem **57**, 412, (1998).
- [26] F. Moss and P.V.E. MacClintock Editors, *Noise in Nonlinear Dynamics Systems, Vol. 1*, Cambridge, Cambridge Univ. Press. (1989).
- [27] M.O. Cáceres, M.C. Diaz and J.A. Pullin, Phys. Lett. **A 123**, 329, (1987).
- [28] C.B Briozzo, C.E. Budde, M.O. Cáceres and P.W. Lamberti, Phys. Lett. **A 129**, 363, (1988).
- [29] W.F. Brown, Phys. Rev. **130**, 1677, (1963).

Capítulo 4

Irreversibilidad, ecuación de Fokker-Planck

Ya en 1897 Planck se planteaba cómo la *irreversibilidad* (obvia en los fenómenos macroscópicos) podía surgir de las leyes microscópicas, las cuales en sí mismas son *reversibles*. En efecto, éste fue, y aún lo es en la actualidad, uno de los problemas teóricos más fundamentales de la física.¹ Si bien los esfuerzos de Planck no fueron de vital importancia en el entendimiento de la irreversibilidad, ¡sus trabajos sobre este tema dieron origen a la teoría de la mecánica cuántica!

El concepto intuitivo de irreversibilidad es simple, pues es lo que se observa en los sistemas naturales (abiertos o cerrados). Algunos sistemas “idealmente” cerrados donde la irreversibilidad es por sí obvia son, por ejemplo, la expansión de un gas en un determinado volumen, la difusión del calor, la generación de calor por fricción, etc. Por otro lado, el ejemplo más natural de sistemas abiertos irreversibles lo constituyen los seres vivos.

Desde un punto de vista termodinámico, la irreversibilidad puede ser formulada a partir del concepto de entropía (función de estado que está definida para estados de equilibrio, ver apéndice A). Es decir, si un sistema (en contacto o no con un medio externo) pasa del estado de equilibrio 1 al estado de equilibrio 2, la variación de la entropía (final menos inicial) es $\Delta S_{21} = \Delta S_e + \Delta S_i \geq 0$. Si el sistema está cerrado al medio externo, $\Delta S_e = 0$, la variación (interna ΔS_i) de entropía del sistema siempre será positiva si el proceso es irreversible, y nula $\Delta S_{21} = \Delta S_i = 0$ si el proceso es reversible (es decir, la segunda ley de la termodinámica). Si el sistema es abierto, ΔS_e puede ser positivo o negativo, dependiendo del tipo de interacción con el medio externo.²

Desde el punto de vista de la termodinámica de no equilibrio también es posible formular un concepto claro que permita caracterizar la irreversibilidad.³ Decimos que un sistema es

¹Una revisión de los trabajos de Planck se puede leer en: M. Planck, *Treatise on Thermodynamics*, 3rd ed., New York, Dover (1945).

²Por ejemplo, si la interacción con el medio ambiente implica *solamente* la transferencia de calor ΔQ (desde el medio ambiente al sistema) a la temperatura T , entonces $\Delta S_e = \Delta Q/T > 0$.

³Si existe equilibrio local es posible escribir una ecuación de balance que involucre una densidad de entropía ρ_s , un flujo de entropía J_s (positivo o negativo) y una (densidad) fuente de producción interna de entropía $\sigma_s \geq 0$ (la cual es nula *sólo si* el proceso es reversible). Es decir, la ecuación de balance es $\frac{d}{dt}\rho_s = -\nabla \cdot J_s + \sigma_s$. Es evidente entonces que si el proceso es irreversible la ecuación no es la misma si transformamos $t \rightarrow -t$.

irreversible si éste no es *invariante* frente a la inversión del tiempo $t \rightarrow -t$.

Muchos de los esfuerzos realizados para resolver la paradoja de la reversibilidad microscópica frente a la irreversibilidad macroscópica fueron, quizás, plasmados en el célebre trabajo de Boltzmann [1]: el teorema H. La teoría cinética de Boltzmann muestra que para resolver esta paradoja es necesario introducir ingredientes probabilísticos en la descripción dinámica de las partículas. Éste es el principio fundamental de Boltzmann, *Stosszahl-ansatz* (o Caos molecular).

En lo que sigue de este texto no entraremos en el problema de la irreversibilidad, o la flecha del tiempo,⁴ como la ha llamado Prigogine [2], este tema está fuera del alcance de este libro. Aquí, cuando queramos describir fenómenos irreversibles, simplemente adoptaremos una descripción en términos de procesos estocásticos [3]. Por otro lado, la ecuación de Fokker-Planck (**F-P**) es de particular interés, pues ella también describe adecuadamente la evolución temporal clásica de las fluctuaciones en torno del equilibrio termodinámico.

4.1 Simetrías de Onsager

Supongamos que un sistema físico se puede caracterizar por un conjunto de variaciones macroscópicas $\{X_m\}$ tales como la energía, el momento, la concentración de partículas, etc. Si la evolución temporal de estas variables macroscópicas se puede describir mediante un **pe** de Markov continuo, la ecuación de evolución para la probabilidad condicionada $P(\{X_m(t)\} | \{X_m(0)\})$ es la ecuación de **F-P** [4]. Si el sistema en estudio es cerrado y aislado, la solución estacionaria $P_{\text{est}}(\{X_m\})$ de la ecuación de **F-P** ha de coincidir con la distribución de probabilidad de Einstein en torno del equilibrio termodinámico [5] (ver capítulo 2).

Utilizando el concepto de **pe** asociado a las fluctuaciones temporales de las variables de estado $\{A_m\}$, Onsager dedujo que la fuerza espontánea resultante de una variación instantánea $X_j(t)$ puede producir un flujo y viceversa [6, 1]. Lo importante de este hecho es que los coeficientes de proporcionalidad son los mismos aun cuando los procesos físicos involucrados son diferentes. Es decir, los coeficientes de transporte tienen simetrías intrínsecas. Las hipótesis involucradas para probar el teorema de Onsager son las siguientes:

1. En valor medio las fluctuaciones $X_m(t)$ decaen en el tiempo siguiendo una ley exponencial, de la misma manera que lo hacen las leyes fenomenológicas macroscópicas. Es decir, la ecuación de evolución es lineal:⁵

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{X}(t) \rangle_{\mathbf{X}(0)} = -\mathbf{M} \cdot \langle \mathbf{X}(t) \rangle_{\mathbf{X}(0)}. \quad (4.1)$$

2. Las fluctuaciones en torno del equilibrio termodinámico se describen por la distribución de probabilidad de Einstein: $P_{\text{eq}}(\mathbf{X}) \propto \exp(+\Delta S_T/k_B)$, donde la variación total de la entropía del sistema aislado viene dada por la forma bilineal $\Delta S_T/k_B \equiv \frac{-1}{2} (\mathbf{X} \cdot \mathbf{g} \cdot \mathbf{X})$.

⁴Recientemente Prigogine y sus colaboradores propusieron que la condición esencial para entender la flecha del tiempo es que la descripción microscópica del universo se haga mediante sistemas dinámicos inestables (es decir, caóticos).

⁵Aquí hemos usado la notación vectorial $\mathbf{X}(t)$ para indicar las componentes $\{X_m(t)\}$, es decir, todas las posibles fluctuaciones (variaciones) instantáneas asociadas a las variables de estado $\{A_m\}$ respecto del equilibrio. Note que en principio no hay ninguna razón para presuponer alguna simetría en la matriz \mathbf{M} .

Para probar este teorema procedemos de la siguiente manera:

En primer lugar se define el concepto de fuerzas generalizadas (producidas por las fluctuaciones espontáneas de las variables de estado $\{A_m\}$)

$$\mathcal{F}_i = -\frac{\partial \Delta S_T}{\partial X_i} = -\frac{\partial S}{\partial A_i} = +k_B \sum_l \mathbf{g}_{il} X_l. \quad (4.2)$$

Note que en el equilibrio termodinámico S es máxima, de modo que $\langle \partial S / \partial A_i \rangle_{\text{eq}} = 0$ y, entonces, $\langle \mathcal{F}_i \rangle_{\text{eq}} = 0$.

Luego se introduce el concepto de corrientes generalizadas [producida por la variación temporal, o fluctuación $X_i(t)$]

$$J_i = \frac{dX_i}{dt}, \quad (4.3)$$

a partir de lo cual se observa que la producción de entropía viene dada por

$$\frac{d\Delta S_T}{dt} = \sum_j \frac{\partial \Delta S_T}{\partial X_j} \frac{dX_j}{dt} = - \sum_j \mathcal{F}_j J_j. \quad (4.4)$$

Entonces el problema se reduce a expresar las corrientes J_i en términos de las fuerzas \mathcal{F}_m a través de una matriz (coeficientes de transporte) que tendrá cierta simetría intrínseca.

La solución de (4.1) para tiempos cortos viene dada por el desarrollo

$$\langle \mathbf{X}(t) \rangle_{\mathbf{X}(0)} = \exp(-\mathbf{M}t) \cdot \mathbf{X}(0) \simeq \mathbf{X}(0) - t\mathbf{M} \cdot \mathbf{X}(0) + \mathcal{O}(t^2). \quad (4.5)$$

Entonces, para $t \simeq 0$, las componentes de los valores medios condicionados vienen dadas por

$$\langle X_i(t) \rangle_{\mathbf{X}(0)} = X_i(0) - t \sum_j \mathbf{M}_{ij} X_j(0) + \mathcal{O}(t^2). \quad (4.6)$$

Multiplicando esta ecuación por $X_l(0)$ y tomando, nuevamente, valores medios sobre las fluctuaciones se obtiene

$$\left\langle X_l(0) \langle X_i(t) \rangle_{\mathbf{X}(0)} \right\rangle = \langle X_l(0) X_i(0) \rangle - t \left\langle X_l(0) \sum_j \mathbf{M}_{ij} X_j(0) \right\rangle + \mathcal{O}(t^2). \quad (4.7)$$

Análogamente se deduce que

$$\left\langle X_i(0) \langle X_l(t) \rangle_{\mathbf{X}(0)} \right\rangle = \langle X_l(0) X_i(0) \rangle - t \left\langle X_i(0) \sum_j \mathbf{M}_{lj} X_j(0) \right\rangle + \mathcal{O}(t^2). \quad (4.8)$$

Usando la reversibilidad microscópica⁶ se puede igualar (4.7) con (4.8), y dado que

$$\langle X_l(0) X_i(0) \rangle = (\mathbf{g}^{-1})_{li}$$

se obtiene finalmente

$$\mathbf{g}^{-1} \cdot \mathbf{M}^T = \mathbf{M} \cdot \mathbf{g}^{-1}. \quad (4.9)$$

⁶La reversibilidad microscópica establece que en el equilibrio termodinámico la matriz de correlación temporal satisface $\langle X_j(0) X_i(\tau) \rangle_{\text{eq}} = \langle X_j(\tau) X_i(0) \rangle_{\text{eq}}$, relación que se prueba [5] a partir de la invariancia de la dinámica hamiltoniana frente a la transformación $t \rightarrow -t$. Note que aquí estamos usando el hecho de que el valor medio $\langle X_j(\tau) \rangle_{\text{eq}}$ es nulo en el equilibrio termodinámico.

Aquí \mathbf{M}^T indica la transpuesta de \mathbf{M} , de donde se observa que la matriz $\mathbf{L} \equiv \mathbf{M} \cdot \mathbf{g}^{-1} / k_B$ es simétrica. Ésta es la relación buscada, puesto que permite escribir el $\mathbf{v}\mathbf{m}$ de las corrientes $J_i = dX_i / dt$ en la forma

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{X}(t) \rangle_{\mathbf{X}(0)} = -\mathbf{M} \cdot \langle \mathbf{X}(t) \rangle_{\mathbf{X}(0)} = -k_B \mathbf{L} \cdot \mathbf{g} \cdot \langle \mathbf{X}(t) \rangle_{\mathbf{X}(0)}. \quad (4.10)$$

Finalmente, usando la definición de fuerzas generalizadas (4.2) obtenemos que, en valor medio, la proporcionalidad entre las corrientes y las fuerzas generalizadas están caracterizadas por una matriz \mathbf{L} simétrica, es decir:

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{X}(t) \rangle_{\mathbf{X}(0)} = -\mathbf{L} \cdot \langle \mathcal{F}(t) \rangle_{\mathbf{X}(0)}, \quad (4.11)$$

donde \mathbf{L} es la matriz de los coeficientes cinéticos.

Ejercicio. En aquellos casos en que no exista campo magnético externo, es fácil observar que las ecuaciones de la mecánica, que describen el movimiento de las partículas de un sistema, son simétricas ante un cambio de signo del tiempo. Por lo tanto es indiferente calcular un promedio estacionario cuando la cantidad X_k se evalúa en el instante posterior a la cantidad X_j y viceversa. Muestre que el $\mathbf{v}\mathbf{m}$ del producto $X_k(t + \tau)X_j(t)$ es igual al del producto $X_j(t + \tau)X_k(t)$.

Excursus. En el caso de que existan variables de estado A_i que sean impares frente a la transformación temporal $t \rightarrow -t$, se pueden definir factores de paridad ϵ_l tales que $\epsilon_l = -1$ para las variables impares y $\epsilon_l = 1$ para las variables pares. Entonces el teorema de Onsager se escribe de la siguiente forma generalizada:

$$\mathbf{L}_{ij} = \epsilon_i \epsilon_j \mathbf{L}_{ji}. \quad (4.12)$$

Aquí los índices repetidos no se suman [1].

Excursus. Consideremos dos fuerzas generalizadas con diferentes orígenes físicos: un gradiente de concentración $\nabla n(r)$, y un gradiente de temperatura $\nabla T(r)$. Por el teorema de Onsager el $\nabla n(r)$ implicará una corriente de calor, y viceversa un $\nabla T(r)$ implicará una corriente de partículas. Muestre que estos procesos físicos, aunque sean diferentes, tienen los mismos coeficientes de proporcionalidad \mathbf{L}_{ij} . Es decir, usando las simetrías de \mathbf{L}_{ij} es posible obtener coeficientes cinéticos para situaciones en las que es muy difícil calcularlos a partir de primeros principios [1].

4.2 Producción de entropía en la aproximación lineal

Usando la forma cuadrática que caracteriza el cambio de entropía total frente a fluctuaciones, podemos calcular las fuerzas generalizadas \mathcal{F}_i . Si el conjunto $\{X_m(t)\}$ representa en el instante t el grado en que el sistema se aparta del equilibrio, las fuerzas generalizadas en ese instante están dadas por

$$\mathcal{F}_i(t) = k_B \sum_l \mathbf{g}_{il} X_l(t).$$

Por otro lado, en el equilibrio la entropía es máxima, luego $\langle \mathcal{F}_i(t) \rangle_{\text{eq}} = 0$ para todo i .

Utilizando la definición de corrientes generalizadas $J_i = dX_i / dt$, la variación *temporal* del cambio total de entropía ΔS_T , debido a las fluctuaciones, vendrá dada, usando (4.4), por

$$\frac{dS}{dt} = - \sum_j \mathcal{F}_j J_j. \quad (4.13)$$

Si se supone válida una respuesta lineal (es decir, que las corrientes $J_m = dX_m/dt$ son proporcionales a las fuerzas generalizadas $J_m = - \sum_j \mathbf{L}_{mj} \mathcal{F}_j$), de (4.13) se deduce que la derivada de la entropía con respecto al tiempo (corriente de entropía) es

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{ji} \mathbf{L}_{ij} \mathcal{F}_i \mathcal{F}_j.$$

Esta cantidad caracteriza la producción de entropía. Luego $\sum_{ji} \mathbf{L}_{ij} \mathcal{F}_i \mathcal{F}_j$ tiene que ser una forma cuadrática *definida positiva*;⁷ entonces, a medida que el sistema se acerca al estado de equilibrio, la entropía debe crecer tendiendo al máximo.

A partir de la termodinámica [1] es posible obtener expresiones para las fuerzas generalizadas \mathcal{F}_i , entonces es posible estudiar los flujos termodinámicos (y corrientes) en función de los coeficientes de proporcionalidad \mathbf{L}_{ij} (coeficientes cinéticos de Onsager).

Ejemplo. Para un resistor mantenido a temperatura constante, donde J_e es la corriente eléctrica y \mathcal{F} es proporcional al campo aplicado, la cantidad (4.13) es proporcional a la disipación de energía por efecto Joule. Una situación similar se presenta en el siguiente ejemplo mecánico.

4.2.1 Efecto mecánico-calórico*

Considere un gas clásico (con un solo tipo de partículas) encerrado en una caja aislada dividida en dos compartimientos conectados por un pequeño agujero. La masa y la energía totales del sistema, M_T y U_T , son constantes, y puede haber fluctuaciones a causa de la transferencia de energía y masa a través del agujero. Si el sistema está próximo al equilibrio, podemos calcular la variación de la entropía total como función de las variaciones ΔM_i y ΔU_i en cada compartimiento ($\Delta M_1 = -\Delta M_2 = \Delta M$, $\Delta U_1 = -\Delta U_2 = \Delta U$). Es decir, ΔM y ΔU son las variables aleatorias o fluctuaciones macroscópicas; entonces la variación de la entropía total se escribe, hasta el segundo orden, en la forma

$$\Delta S_T = 2 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial U^2} \right)_M (\Delta U)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial U} \left(\frac{\partial S}{\partial M} \right)_U \right)_M^0 (\Delta U \Delta M) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial M^2} \right)_U (\Delta M)^2 \right].$$

El cambio temporal de la variación de entropía total viene dado por

$$\begin{aligned} \frac{d\Delta S_T}{dt} &= 2 \left[\left(\frac{\partial^2 S}{\partial U^2} \right)_M^0 \Delta U \frac{d\Delta U}{dt} + \left(\frac{\partial}{\partial U} \left(\frac{\partial S}{\partial M} \right)_U \right)_M^0 \frac{d}{dt} (\Delta U \Delta M) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial^2 S}{\partial M^2} \right)_U^0 \Delta M \frac{d\Delta M}{dt} \right] = \end{aligned}$$

⁷Si $\mathbf{L}_{ij} \in \mathcal{R}_e$ y es una matriz *definida positiva*, entonces $\sum_{ji} \mathbf{L}_{ij} \mathcal{F}_i \mathcal{F}_j > 0$, $\forall \mathcal{F}_i, \mathcal{F}_j$ sobre los reales. Acerca del concepto de matriz *definida positiva*, ver sección (1.12) y también la nota (5) del capítulo 6.

$$\begin{aligned}
&= 2 \left[\frac{d\Delta U}{dt} \left\{ \left(\frac{\partial^2 S}{\partial U^2} \right)_M^0 \Delta U + \left(\frac{\partial}{\partial M} \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_M^0 \right)_U^0 \Delta M \right\} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{d\Delta M}{dt} \left\{ \left(\frac{\partial^2 S}{\partial M^2} \right)_U^0 \Delta M + \left(\frac{\partial}{\partial U} \left(\frac{\partial S}{\partial M} \right)_U^0 \right)_M^0 \Delta U \right\} \right] \\
&\equiv 2 \left[\frac{d\Delta U}{dt} \left\{ \Delta \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_M \right\} + \frac{d\Delta M}{dt} \left\{ \Delta \left(\frac{\partial S}{\partial M} \right)_U \right\} \right].
\end{aligned}$$

Entonces, comparando con (4.4) se deduce que los flujos de energía J_u y de masa J_m vienen dados por

$$J_u = \frac{d}{dt} \Delta U \quad \text{y} \quad J_m = \frac{d}{dt} \Delta M,$$

mientras que las fuerzas generalizadas están dadas por las expresiones

$$\mathcal{F}_u = -\Delta \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_M \quad \text{y} \quad \mathcal{F}_m = -\Delta \left(\frac{\partial S}{\partial M} \right)_U. \quad (4.14)$$

Por otro lado, de la termodinámica se sabe que para un sistema a volumen constante V , se tiene (ver apéndice A)

$$dS = \frac{1}{T} dU - \frac{\mu}{T} dM \equiv \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_M dU + \left(\frac{\partial S}{\partial M} \right)_U dM.$$

Entonces, comparando con (4.14) se deduce que las fuerzas generalizadas están caracterizadas por la diferencia de temperatura y la diferencia de potencial químico entre ambos compartimientos, es decir:

$$\mathcal{F}_u = -\Delta \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_M = -\Delta \left(\frac{1}{T} \right) \quad \text{y} \quad \mathcal{F}_m = -\Delta \left(\frac{\partial S}{\partial M} \right)_U = \Delta \left(\frac{\mu}{T} \right).$$

Las relaciones de Onsager $\mathbf{L} = \mathbf{L}^T$ permiten comprobar que los flujos de energía y masa están íntimamente relacionados aun cuando los fenómenos involucrados son físicamente diferentes.

Excursus. En el régimen lineal, si escribimos que las corrientes son proporcionales a las fuerzas generalizadas $J_j = -\sum_l \mathbf{L}_{jl} \mathcal{F}_l$, es posible, por ejemplo, obtener expresiones para las corrientes en función de las variaciones de presión y temperatura. Usando la ecuación de Gibbs-Duhem $d\mu = -s dT + dP/\rho$, donde s y ρ son la entropía y el volumen por unidad de masa, respectivamente, podemos escribir las fuerzas generalizadas en términos de las variables de estado T y P , es decir:

$$\mathcal{F}_u = \frac{1}{T^2} \Delta T \quad \text{y} \quad \mathcal{F}_m = -\frac{h}{T^2} \Delta T + \frac{1}{\rho T} \Delta P,$$

donde $h = sT + \mu$ es la entalpía por unidad de masa. Entonces en la aproximación lineal el flujo de energía es

$$J_u = -L_{uu} \mathcal{F}_u - L_{um} \mathcal{F}_m = -L_{uu} \frac{\Delta T}{T^2} + L_{um} \left(\frac{h}{T^2} \Delta T - \frac{1}{\rho T} \Delta P \right),$$

y el flujo de masa viene dado por

$$J_m = -L_{mm}\mathcal{F}_m - L_{mu}\mathcal{F}_u = L_{mm}\left(\frac{h}{T^2}\Delta T - \frac{1}{\rho T}\Delta P\right) - L_{mu}\frac{\Delta T}{T^2}.$$

Por otro lado, las relaciones de Onsager establecen que $L_{mu} = L_{um}$. Si $\Delta T = 0$ (es decir, los dos compartimientos tienen la misma temperatura), pero distinta presión $\Delta P \neq 0$, obtenemos:

$$J_u = -\frac{L_{um}}{\rho T}\Delta P \quad \text{y} \quad J_m = -\frac{L_{mm}}{\rho T}\Delta P,$$

a partir de lo cual vemos que las corrientes de masa y energía están relacionada por la condición $J_u = (\mathbf{L}_{um}/\mathbf{L}_{mm}) J_m$. La constante $\mathbf{L}_{um}/\mathbf{L}_{mm}$ determina la cantidad de energía por unidad de masa que pasa por el agujero del compartimiento. Esta constante de proporcionalidad se puede calcular con diferentes modelos microscópicos [1]. No obstante, puede ocurrir que existan circunstancias que no permitan obtener de forma explícita alguno de los coeficientes cinéticos. En esos casos las relaciones de Onsager son de invaluable utilidad.⁸

Ejercicio guiado. (Gas de Knudsen.) Consideremos un gas constituido por partículas libres de masa m a la temperatura T , supongamos que al llegar al agujero (que comunica los compartimientos de la caja antes mencionada) cada una de las partículas puede transportar *libremente*, desde un recinto al otro, una cantidad de energía por unidad de masa $\mathbf{L}_{um}/\mathbf{L}_{mm} \equiv u^*$. En este caso es fácil calcular u^* utilizando la estadística de Maxwell-Boltzmann. Es decir, si usamos la distribución de equilibrio de las velocidades (en 3 dimensión) $P(\mathbf{v}) = (2\pi D_V)^{-3/2} \exp(-\mathbf{v}^2/2D_V)$, donde $D_V \equiv k_B T/m$, la cantidad u^* viene dada por

$$u^* = \frac{N_A \int_0^\infty dv_x \int_{-\infty}^{+\infty} dv_y \int_{-\infty}^{+\infty} dv_z \frac{m}{2} \mathbf{v}^2 n v_x P(\mathbf{v})}{m^* \int_0^\infty dv_x \int_{-\infty}^{+\infty} dv_y \int_{-\infty}^{+\infty} dv_z n v_x P(\mathbf{v})},$$

donde $n = N/V$ es la densidad de partículas. Dado que $\int_0^\infty dv_x v_x P(\mathbf{v}) = \sqrt{D_V/2\pi}$, $\int_0^\infty dv_x v_x^3 P(\mathbf{v}) = \sqrt{2D_V^3/\pi}$, $\int_{-\infty}^\infty dv_j v_j^2 P(\mathbf{v}) = D_V$, se deduce inmediatamente que $u^* = 2k_B T N_A/m^*$ es la energía transferida por unidad de masa. Es decir, podemos escribir $\mathbf{L}_{um}/\mathbf{L}_{mm} = 2RT/m^*$, donde $R = N_A k_B$ es la constante de los gases (N_A es el número de Avogadro) y m^* es la masa molecular de las partículas. También se puede obtener una expresión análoga considerando un tamaño de *agujero* mayor que el camino libre medio de las partículas “libres” (gas de Boyle). En este caso las partículas tienen que *empujarse* una a otras (hacer trabajo) para pasar por el agujero, por lo que u^* tiene una expresión diferente del caso anterior [1].

4.3 Relaciones de Onsager en un circuito eléctrico

Las relaciones de Onsager son propiedades macroscópicas que permiten verificar el principio de reversibilidad microscópico. En efecto, ésta fue la primera oportunidad en que el principio

⁸Las simetrías de Onsager son el punto de partida para el análisis de la producción de entropía en sistemas fuera del equilibrio termodinámico. En el contexto de una teoría de respuesta lineal es posible probar que el estado de mínima producción de entropía es estable, no así fuera del régimen lineal. Ésta fue la idea básica que dio lugar al concepto de transiciones de fase de no equilibrio [7].

de invariancia temporal $t \rightarrow -t$ de la dinámica hamiltoniana ocupó un rol fundamental en la formulación de la mecánica estadística.

A los efectos de construir la matriz de coeficientes cinéticos \mathbf{L}_{ij} es necesario conocer la matriz \mathbf{g}^{-1} que caracteriza las fluctuaciones en torno del equilibrio termodinámico. Un ejemplo sencillo que permite visualizar la simetría de \mathbf{L}_{ij} es el de un circuito eléctrico RCL sumergido en un baño térmico \mathcal{B} de solución iónica (reservorio de cargas a la temperatura T).

Podemos comenzar el análisis de este sistema escribiendo la ecuación fenomenológica para la conservación de la carga:

$$\frac{dq}{dt} = I - \gamma q + \Delta q(t). \quad (4.15)$$

En esta ecuación $q(t)$ representa la carga instantánea en el capacitor, I la corriente eléctrica en el circuito RCL, γq la pérdida de carga del capacitor inmerso en el reservorio térmico y $\Delta q(t)$ el término de fluctuación proveniente de la solución iónica \mathcal{B} . Aplicando las leyes de Kirchoff al circuito RCL podemos escribir una ecuación para la diferencia de potencial a lo largo del circuito:

$$L \frac{dI}{dt} + \frac{q}{C} + IR = \Delta V(t). \quad (4.16)$$

En esta ecuación $L dI/dt$ representa la diferencia de potencial en el inductor y q/C e IR la caída de potencial en el capacitor y en el resistor, respectivamente. Entonces $\Delta V(t)$ representa las fluctuaciones en el voltaje a causa del reservorio iónico \mathcal{B} . Los términos de fluctuación serán modelados por ruidos $\xi_i(t)$ gaussianos blancos de media nula, por lo que, en general, tendremos

$$\begin{aligned} \Delta q(t) &= d_{11} \xi_1(t) + d_{12} \xi_2(t) \\ \Delta V(t) &= d_{21} \xi_1(t) + d_{22} \xi_2(t), \end{aligned} \quad (4.17)$$

donde la correlación de los ruidos se denota en la forma $\langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = \delta_{i,j} \delta(t - t')$.

En el caso de que no existan fluctuaciones ($\Delta q(t) = \Delta V(t) = 0$), la dinámica de este sistema RCL (con $\gamma = 0$) se reduce al estudio de la ecuación determinista para un circuito resonante. Es decir, dado que $I = dq/dt$ y que $V_c = Lq$, se obtiene [8]

$$\frac{d^2 V_c}{dt^2} + \frac{1}{LC} V_c + \frac{R}{L} \frac{dV_c}{dt} = 0.$$

Pero a nosotros nos interesa el estudio de las **ede** (4.15) y (4.16) asociadas a las variables de estado $q(t)$ e $I(t)$ respectivamente, y sus fluctuaciones. Puesto que el circuito es lineal podemos escribir estas ecuaciones en forma matricial

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ I \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \gamma & -1 \\ 1/LC & R/L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ I \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Note que esta ecuación define la matriz de relajación \mathbf{M} .

En torno del equilibrio termodinámico la distribución de probabilidad es

$$P_{\text{eq}}(q, I) \propto \exp(-W_{\text{min}}/k_B T),$$

donde W_{\min} es el trabajo mínimo (ver capítulo 2), el cual, para el sistema físico que estamos estudiando, viene dado por

$$W_{\min} = \frac{1}{2C}q^2 + \frac{L}{2}I^2 \equiv \frac{k_B T}{2}(\mathbf{X} \cdot \mathbf{g} \cdot \mathbf{X}) \quad \text{con} \quad \mathbf{X} \equiv (q, I). \quad (4.19)$$

Luego las fuerzas espontáneas (4.2), que restauran el equilibrio, son

$$\mathcal{F}_q = -\frac{\partial S}{\partial q} = \frac{1}{T} \frac{q}{C} \quad \text{y} \quad \mathcal{F}_I = -\frac{\partial S}{\partial I} = \frac{1}{T} LI. \quad (4.20)$$

La matriz \mathbf{g}^{-1} que caracteriza las fluctuaciones cuadráticas medias está dada por

$$\mathbf{g}^{-1} = \begin{pmatrix} \langle qq \rangle & \langle qI \rangle \\ \langle Iq \rangle & \langle II \rangle \end{pmatrix}^E = \begin{pmatrix} k_B TC & 0 \\ 0 & k_B T/L \end{pmatrix}^E. \quad (4.21)$$

Las relaciones de Onsager (para variables de estado par) establecen que la combinación $\mathbf{L} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{g}^{-1}/k_B$ es simétrica. En nuestro caso, tomando el \mathbf{vm} de (4.18) para calcular \mathbf{M} y usando (4.21) se obtiene

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} \gamma & -1 \\ 1/LC & R/L \end{pmatrix}^E \begin{pmatrix} TC & 0 \\ 0 & T/L \end{pmatrix}^E = \begin{pmatrix} \gamma TC & -T/L \\ T/L & TR/L^2 \end{pmatrix}^E, \quad (4.22)$$

matriz que satisface las simetrías generalizadas $\mathbf{L}_{ij} = \epsilon_i \epsilon_j \mathbf{L}_{ji}$. Note que bajo la inversión temporal $t \rightarrow -t$ las variables de estado se comportan de la forma $q \rightarrow q$ y $I \rightarrow -I$. Entonces se observa que $\epsilon \cdot \mathbf{M} \cdot \mathbf{g}^{-1} = (\mathbf{M} \cdot \mathbf{g}^{-1})^T \cdot \epsilon$. Aquí la matriz ϵ está definida por

$$\epsilon = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

A partir de este ejemplo se ve que si expresamos los \mathbf{vm} de los flujos en función de las fuerzas generalizadas $\langle J_m \rangle = \langle dX_m/dt \rangle = -\sum_j \mathbf{L}_{mj} \langle \mathcal{F}_j \rangle$, los coeficientes de proporcionalidad están, justamente, caracterizados por $\mathbf{M} \cdot \mathbf{g}^{-1}/k_B$. Usando la definición de fuerzas generalizadas $\mathcal{F}_i(t) = k_B \sum_l \mathbf{g}_{il} X_l(t)$, se observa de (4.18) y (4.20) que

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \langle q \rangle \\ \langle I \rangle \end{pmatrix}^E = - \begin{pmatrix} \gamma TC & -T/L \\ T/L & TR/L^2 \end{pmatrix}^E \begin{pmatrix} \langle \mathcal{F}_q \rangle \\ \langle \mathcal{F}_I \rangle \end{pmatrix}^E. \quad (4.23)$$

Además, también es posible comprobar que tanto γ como R son coeficientes de disipación, y por lo tanto positivos. La variación determinista de la energía del sistema \mathcal{S} está dada por

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= LI \frac{dI}{dt} + \frac{q}{C} \frac{dq}{dt} \\ &= LI \left(\frac{q/C + IR}{-L} \right) + \frac{q}{C} (I - \gamma q) \\ &= -(RI^2 + \gamma q^2/C), \end{aligned} \quad (4.24)$$

expresión que representa la pérdida de energía en el elemento resistivo y en el capacitor. Por otro lado, si calculamos la corriente de entropía en la aproximación lineal, obtendremos

$$\begin{aligned}
 \frac{dS}{dt} &= \sum_{ji} \mathbf{L}_{ij} \mathcal{F}_i \mathcal{F}_j \\
 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{T} q/C & \frac{1}{T} LI \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma TC & -T/L \\ T/L & TR/L^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{T} q/C \\ \frac{1}{T} LI \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{T} (RI^2 + \gamma q^2/C) > 0.
 \end{aligned}$$

Es decir que la producción de entropía se hace *exactamente* a expensas de la disipación de energía.

En la próxima sección probaremos el (primer) teorema de fluctuación-disipación. Este resultado establece la caracterización de los coeficientes d_{ij} que aparecen en los términos de ruidos en las **ede** constitutivas (4.15), (4.16) y (4.17). En particular, se mostrará que $d_{12} = d_{21} = 0$, lo que equivale a decir que los términos de ruidos en la carga y en el voltaje no están correlacionados.

A menudo se presenta el problema inverso: es decir, dada la matriz de coeficientes cinéticos \mathbf{L}_{ij} y la matriz de las fluctuaciones en el equilibrio \mathbf{g}^{-1} , puede ser necesario calcular los elementos de la matriz de relajación (macroscópica) lineal \mathbf{M} . En este caso las relaciones de Onsager son también de gran utilidad.

4.4 Proceso de Ornstein-Uhlenbeck multidimensional

Estudiemos ahora un sistema lineal de n **ede**, en particular las fluctuaciones y su relajación al equilibrio termodinámico. Si esperamos un comportamiento macroscópico exponencial en la relajación de las n variables $\{x_j\}$, entonces la dinámica determinista estará gobernada por una ecuación diferencial ordinaria de la forma⁹

$$\frac{d}{dt} x_i = -\mathbf{M}_{ij} x_j, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (4.25)$$

Puesto que en el equilibrio termodinámico la distribución de probabilidad es gaussiana y está caracterizada por la distribución de Einstein (ver capítulo 2), es natural pensar que el conjunto¹⁰ de **pe** $\{x_j(t)\}$ será gaussiano para todo t . Entonces la **ede** (4.25) será la generalización n -dimensional del proceso de Ornstein-Uhlenbeck, ya presentado en el capítulo anterior en ocasión de analizar la relajación de la velocidad de una partícula browniana. En esta oportunidad presentaremos el problema inverso.

Sea $\{x_m(t)\}$ un proceso estocástico (vectorial con n componentes) estacionario markoviano y gaussiano, entonces el propagador de las variables $\{x_m(t)\}$ satisface

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\{x_m\}, t) = \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \mathbf{M}_{ij} x_j + \frac{1}{2} \mathbf{B}_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \right] P(\{x_m\}, t), \quad (4.26)$$

⁹De aquí en adelante usamos la notación de índices repetidos para indicar una sumatoria.

¹⁰En lo que sigue simplificaremos la notación, cuando no haya ambigüedad, y usaremos las mismas letras para caracterizar **pe** que **va** (compare con el capítulo 3).

con la condición inicial¹¹ $P(\{x_m\}, t \rightarrow 0) \rightarrow \prod_{j=1}^n \delta(x_j - x_j(0))$. La solución en el equilibrio termodinámico es $P_{\text{eq}}(\{x_m\}) \propto \exp(-\frac{1}{2}\mathbf{x} \cdot \mathbf{g} \cdot \mathbf{x})$, donde la forma bilineal $\mathbf{x} \cdot \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}$ está dada en términos de la variación de la entropía total. El problema consiste en obtener relaciones para la matriz \mathbf{B} que aseguren la relajación al equilibrio termodinámico (primer teorema de fluctuación-disipación). O sea, se pretende que la solución estacionaria de la ecuación de $\mathbf{F-P}$ (4.26) coincida con $P_{\text{eq}}(\{x_m\})$.

Excursus. (**Autofunciones para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck.**) Resuelva una ecuación de $\mathbf{F-P}$ multidimensional mediante un análisis de autovalores para el caso general en que la deriva sea lineal y la matriz de difusión sea constante, simétrica y *definida positiva*; es decir, la ecuación (4.26). Este **pe** es sumamente importante y es el análogo, en *dificultad matemática*, al oscilador armónico n -dimensional en la mecánica cuántica [4].

4.4.1 Primer teorema de fluctuación-disipación

Dada la ecuación (4.26), ¿cuál es la matriz \mathbf{B} que asegure que la probabilidad estacionaria sea la distribución de Einstein? Para resolver este problema introducimos la distribución $P_{\text{est}}(\{x_m\}) \propto \exp(-\frac{1}{2}\mathbf{x} \cdot \mathbf{g} \cdot \mathbf{x})$ en la ecuación estacionaria de $\mathbf{F-P}$ (4.26), es decir:

$$0 = \left[2 \frac{\partial}{\partial x_i} \mathbf{M}_{ij} x_j + \mathbf{B}_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \right] P_{\text{est}}(\{x_m\}), \quad (4.27)$$

de donde se obtiene que

$$0 = 2\mathbf{M}_{ii} - \mathbf{B}_{ij} \mathbf{g}_{ji} + (\mathbf{B}_{ij} \mathbf{g}_{im} \mathbf{g}_{jn} - 2\mathbf{M}_{im} \mathbf{g}_{in}) x_m x_n. \quad (4.28)$$

Entonces, para (x_m, x_n) arbitrarios, el primer término de (4.28) y la forma cuadrática se anulan separadamente. O sea, explícitamente se tiene

$$2 \sum_i \mathbf{M}_{ii} = \sum_{ij} \mathbf{B}_{ij} \mathbf{g}_{ji}. \quad (4.29)$$

Además, usando la simetría de \mathbf{g} y de los índices mudos podemos escribir

$$\begin{aligned} 0 &= (\mathbf{B}_{ij} \mathbf{g}_{im} \mathbf{g}_{jn} - 2\mathbf{M}_{im} \mathbf{g}_{in}) x_m x_n \\ &= (\mathbf{B}_{ij} \mathbf{g}_{im} \mathbf{g}_{jn} - \mathbf{M}_{im} \mathbf{g}_{in} - \mathbf{M}_{im} \mathbf{g}_{in}) x_m x_n, \end{aligned}$$

de donde se observa que

$$\mathbf{B}_{ij} \mathbf{g}_{im} \mathbf{g}_{jn} = \mathbf{g}_{ni} \mathbf{M}_{im} + \mathbf{g}_{mi} \mathbf{M}_{in}. \quad (4.30)$$

Multiplicando (4.30) por \mathbf{g}_{im}^{-1} y sumando, se obtiene

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{ij} \mathbf{g}_{jn} &= \mathbf{g}_{im}^{-1} \mathbf{g}_{nl} \mathbf{M}_{lm} + \mathbf{g}_{im}^{-1} \mathbf{g}_{ml} \mathbf{M}_{ln} \\ &= \mathbf{g}_{im}^{-1} \mathbf{g}_{nl} \mathbf{M}_{lm} + \mathbf{M}_{in}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Note que poniendo $n = i$ y sumando respecto de i en (4.31), explícitamente se obtiene

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \mathbf{B}_{ij} \mathbf{g}_{ji} &= \sum_{ilm} \mathbf{g}_{im}^{-1} \mathbf{g}_{il} \mathbf{M}_{lm} + \sum_i \mathbf{M}_{ii} \\ &= 2 \sum_m \mathbf{M}_{mm}, \end{aligned} \quad (4.32)$$

¹¹Observe la simplificación usada en la notación de probabilidad condicionada.

que justamente es la (4.29); entonces sólo es suficiente que se cumpla (4.31). Para despejar la matriz \mathbf{B} , podemos volver a escribir esta condición en la forma:

$$\begin{aligned}\mathbf{B}_{ij} &= \mathbf{g}_{jn}^{-1} \mathbf{g}_{im}^{-1} \mathbf{g}_{nl} \mathbf{M}_{lm} + \mathbf{g}_{jn}^{-1} \mathbf{M}_{in} \\ &= \delta_{j,l} \mathbf{g}_{im}^{-1} \mathbf{M}_{lm} + \mathbf{M}_{in} \mathbf{g}_{nj}^{-1} \\ &= \mathbf{M}_{jm} \mathbf{g}_{mi}^{-1} + \mathbf{M}_{in} \mathbf{g}_{nj}^{-1},\end{aligned}\tag{4.33}$$

es decir,

$$\mathbf{B} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{g}^{-1} + (\mathbf{M} \cdot \mathbf{g}^{-1})^T.$$

Aquí el supraíndice T indica matriz transpuesta.

La ecuación (4.33) es la expresión buscada pues representa la relación que existe entre la matriz de fluctuación \mathbf{B} y la matriz de disipación \mathbf{M} y asegura que en el estado estacionario la distribución de probabilidad sea igual a la distribución en torno del equilibrio termodinámico.

Ejemplo. Consideremos una partícula browniana de masa m en un potencial armónico, caracterizada por su velocidad $V(t) = \dot{X}(t)$ y posición $X(t)$ en 1-dimensión. La ecuación de evolución determinista¹² es

$$m\ddot{X} + \gamma\dot{X} + \kappa X = 0.$$

Entonces, en las variables X y $p = m\dot{X}(t)$, se puede escribir el par de ecuaciones

$$\dot{X} = p/m \quad \text{y} \quad \dot{p} = -\gamma p/m - \kappa X.$$

Como la dinámica es lineal, podemos escribir

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} X \\ p \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & 1/m \\ -\kappa & -\gamma/m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ p \end{pmatrix} \\ &\equiv -\mathbf{M} \begin{pmatrix} X \\ p \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

A partir de la distribución de probabilidad en torno del equilibrio termodinámico se observa que

$$-\frac{1}{2} \mathbf{x} \cdot \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} = \frac{-1}{k_B T} \left(\frac{\kappa X^2}{2} + \frac{p^2}{2m} \right),$$

entonces $\mathbf{g} = \frac{1}{k_B T} \begin{pmatrix} \kappa & 0 \\ 0 & 1/m \end{pmatrix}$. Luego usando la definición de la matriz de Onsager $\mathbf{L} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{g}^{-1} / k_B$ se obtiene:

$$\begin{aligned}\mathbf{L} &= \frac{1}{k_B} \mathbf{M} \cdot \mathbf{g}^{-1} \\ &= \frac{1}{k_B} \begin{pmatrix} 0 & -1/m \\ \kappa & \gamma/m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_B T / \kappa & 0 \\ 0 & k_B T m \end{pmatrix} \\ &= T \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ +1 & \gamma \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

¹²Note que el sistema dinámico disipa energía cinética.

A partir del primer teorema de fluctuación-disipación (4.33) se sabe que $\mathbf{B} = k_B(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T)$, o sea:

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= \begin{pmatrix} 0 & -k_B T \\ +k_B T & \gamma k_B T \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & k_B T \\ -k_B T & \gamma k_B T \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2\gamma k_B T \end{pmatrix},\end{aligned}$$

entonces de (4.26) se deduce que la ecuación de $\mathbf{F}\text{-}\mathbf{P}$ para este sistema será

$$\frac{\partial}{\partial t} P(X, p, t) = \left[-\frac{\partial}{\partial X} (p/m) + \frac{\partial}{\partial p} (\kappa X + \gamma p/m) + \gamma k_B T \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right] P(X, p, t),$$

donde $P(X, p, t \rightarrow t_0) \rightarrow \delta(X - X_0)\delta(p - p_0)$. Gracias al carácter markoviano del proceso, conocer el propagador $P(X, p, t)$ de esta ecuación, permite, en principio, el cálculo de cualquier función de correlación; por ejemplo:

$$\langle X(t_1)X(t_2) \rangle, \quad \langle X(t_1)p(t_2) \rangle, \quad \langle p(t_1)p(t_2)p(t_3)p(t_4) \rangle, \quad \text{etc.}$$

Ejercicio. Muestre a partir del ejemplo anterior que la variación temporal de entropía es positiva y está dada por

$$\frac{1}{k_B} \frac{dS}{dt} = \frac{1}{k_B} \sum_{ij} \mathbf{L}_{ij} \mathcal{F}_i \mathcal{F}_j = \frac{\gamma}{m} \frac{p^2/2m}{k_B T/2}.$$

Es decir, la producción de entropía se realiza a expensa de la disipación de energía cinética.

Ejercicio guiado. Consideremos la **ede** asociada al proceso de Ornstein-Uhlenbeck, pero supongamos que se desconoce la intensidad de las fluctuaciones estocásticas ϵ , es decir:

$$m \frac{dV}{dt} = -m\Gamma V(t) + \sqrt{\epsilon} \xi(t), \quad (4.34)$$

donde $\xi(t)$ es gaussiano de media cero y blanco.¹³ Usemos el teorema de Novikov (ver capítulo 1) para mostrar que la imposición del vínculo de *igual fluctuación de equilibrio* implica que $\epsilon = 2m\Gamma k_B T$. A partir de (4.34) es posible calcular el **vm** de la energía cinética de la partícula: simplemente multiplicamos (4.34) por $V(t)$ y luego tomamos el **vm**, es decir,

$$\begin{aligned}m \left\langle V(t) \frac{dV}{dt} \right\rangle &= \frac{m}{2} \frac{d}{dt} \langle V(t)^2 \rangle \\ &= -m\Gamma \langle V(t)^2 \rangle + \sqrt{\epsilon} \langle V(t) \xi(t) \rangle.\end{aligned} \quad (4.35)$$

Como el sistema es lineal conocemos la solución formal de (4.34):

$$V(t) = \frac{\sqrt{\epsilon}}{m} \int_0^t e^{-(t-s)\Gamma} \xi(s) ds + V(0)e^{-\Gamma t}.$$

Entonces es posible calcular la variación funcional [ver ejercicio optativo de la sección (3.1.2)]:

$$\frac{\delta V(t)}{\delta \xi(t')} = \frac{\sqrt{\epsilon}}{m} \int_0^t e^{-(t-s)\Gamma} \delta(s - t') ds = \frac{\sqrt{\epsilon}}{m} e^{-(t-t')\Gamma}, \quad t' < t.$$

¹³En particular de intensidad uno; es decir, $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t')$.

Por otro lado, el teorema de Novikov (en el continuo) establece que

$$\begin{aligned}\langle V(t)\xi(t) \rangle &= \int_0^t \langle \xi(t)\xi(t') \rangle \left\langle \frac{\delta V(t)}{\delta \xi(t')} \right\rangle dt' \\ &= \int_0^t \delta(t-t') \frac{\sqrt{\epsilon}}{m} e^{-(t-t')\Gamma} dt' = \frac{\sqrt{\epsilon}}{2m}.\end{aligned}$$

Entonces, a partir de (4.35) se tiene que

$$\frac{m}{2} \frac{d}{dt} \langle V(t)^2 \rangle = -m\Gamma \langle V(t)^2 \rangle + \frac{\epsilon}{2m}.$$

Integrando esta ecuación se obtiene para el valor medio del cuadrado de la velocidad

$$\langle V(t)^2 \rangle = \frac{\epsilon}{m^2} \left(\frac{1 - e^{-2\Gamma t}}{2\Gamma} \right) + \langle V(0)^2 \rangle e^{-2\Gamma t}.$$

Para que en el estado estacionario esta expresión coincida con el resultado termodinámico (en 1-dimensión) se debe cumplir que

$$\langle V^2 \rangle = k_B T / m,$$

de donde se concluye que $\epsilon = 2m\Gamma k_B T$. Tome $m\Gamma = \gamma$ y compare con el ejemplo anterior.

4.5 Distribución canónica en estadística clásica

Consideremos el movimiento de una partícula browniana (en 1-dimensión) de masa m en un potencial arbitrario $U(X)$ (su generalización a 3-dimensión es inmediata), y en presencia de un baño térmico \mathcal{B} , o reservorio a la temperatura T . Las variables de estado serán la posición X y la velocidad V de la partícula. Las **ede** que caracterizan al sistema son

$$m \frac{dV}{dt} = -U'(X) - \gamma V + \sqrt{2\gamma k_B T} \xi(t) \quad \text{y} \quad \frac{dX}{dt} = V. \quad (4.36)$$

Aquí $\xi(t)$ es un **pe** gaussiano de media nula δ -correlacionado. Este proceso, $\xi(t)$, representa a las variables *ocultas del reservorio* que dan cuenta de las fuerzas aleatorias introducidas por el baño térmico \mathcal{B} . La (4.36) es esencialmente una **ede** de Langevin para el vector $(X(t), V(t))$. Aquí $U(X)$ es el potencial clásico, cuyo gradiente da lugar a una fuerza determinista, y el término $-\gamma V$ representa una fuerza de fricción sobre la partícula.

Si bien la (4.36) no es una ecuación de Langevin lineal, su estructura tampoco es del tipo *multiplicativa*, pues el **pe** $\xi(t)$ no está multiplicado por ninguna variable de estado. Por consiguiente no hay ninguna diferencia entre los cálculos diferenciales de Stratonovich o Ito [9, 10]. El factor $\sqrt{2\gamma k_B T}$ asegura que la distribución de probabilidad en el estado estacionario coincida con la distribución del equilibrio termodinámico.¹⁴ Note que la intensidad de la fluctuación es proporcional al coeficiente de disipación γ , este hecho no es más que una versión elemental del teorema de fluctuación-disipación.

Ejercicio. Muestre que el sistema de **ede** (4.36) está asociado a la ecuación de **F-P**

¹⁴Es decir, el principio de balance detallado; tema que se verá en detalle en el próximo apartado.

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}P(X, V, t) &= \mathcal{L}(X, V, \partial_X, \partial_V) P(X, V, t) \\ &\equiv \left[-\frac{\partial}{\partial X}V + \frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial V} \left\{ U'(X) + \gamma V \right\} + \gamma k_B T / m^2 \frac{\partial^2}{\partial V^2} \right] P(X, V, t),\end{aligned}\quad (4.37)$$

donde $P(X, V, t \rightarrow t_0) \rightarrow \delta(X - X_0)\delta(V - V_0)$. Esta ecuación fue introducida por Kramers [5] para estudiar las fluctuaciones temporales en torno del equilibrio.¹⁵

Ejercicio. Para los casos en que el potencial $U(X)$ implica condiciones de contorno naturales,¹⁶ pruebe por sustitución directa que

$$P_{\text{est}}(X, V) = \mathcal{N} \exp \left(-\frac{U(X)}{k_B T} - \frac{mV^2}{2k_B T} \right) \quad (4.38)$$

es la solución estacionaria de (4.37). Note que $P_{\text{est}}(X, V)$ es justamente la distribución canónica de Boltzmann. El conocimiento del propagador [solución de (4.37)] y el empleo de la solución estacionaria (4.38) permite la caracterización completa del proceso; en particular, el estudio de las correlaciones temporales en torno del equilibrio del sistema mecánico (4.36).

4.6 Solución estacionaria de Fokker-Planck

El cálculo de la solución estacionaria $P_{\text{est}}(\{x_m\})$ de la ecuación multidimensional de **F-P** es un problema no trivial. En principio el análisis se reduce a encontrar la solución de la ecuación estacionaria:

$$0 = \left[-\frac{\partial}{\partial x_i} K_i(\{x_m\}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} D_{ij}(\{x_m\}) \right] P_{\text{est}}(\{x_m\}) \equiv \mathcal{L}P_{\text{est}}(\{x_m\}), \quad (4.39)$$

donde hemos definido el operador \mathcal{L} y usado la notación de suma para índices repetidos.

La unicidad de la solución estacionaria está asegurada por la existencia de la función de Lyapunov:¹⁷

$$\mathcal{H}(t) = \int \cdots \int P_1(\{x_m\}, t) \ln \left(\frac{P_1(\{x_m\}, t)}{P_2(\{x_m\}, t)} \right) \prod_m dx_m. \quad (4.40)$$

Aquí P_1 y P_2 son soluciones arbitrarias de la ecuación de **F-P** que satisfacen condiciones de contorno naturales: $P_1(\{x_m\} \rightarrow \pm\infty, t) \rightarrow 0$ para todo t .

Si la deriva $K_i(\{x_m\})$ es no singular¹⁸ y la matriz de difusión $D_{ij}(\{x_m\})$ es *definida positiva*¹⁹ en todo el dominio de $\{x_m\}$, entonces es posible probar que $\mathcal{H}(t)$ es una función

¹⁵En particular, el potencial podría ser periódico $U(X) = U(X + L)$. En general, los autovalores del correspondiente operador de **F-P** caracterizan completamente las correlaciones temporales: $\langle X(0)X(\tau) \rangle$, $\langle V(0)V(\tau) \rangle$, etc. [4].

¹⁶Es decir, $P(X = \pm\infty, V, t) = 0$ para todo V, t .

¹⁷El concepto de función de Lyapunov $\mathcal{H}(t)$ fue claramente introducido por Boltzmann para probar su famoso teorema H. En ese caso la función $\mathcal{H}(t) = \int P \ln P d\{x_m\}$ decrece en el tiempo si la solución de la ecuación de Boltzmann P no coincide con la solución estacionaria. En general podemos decir que $\mathcal{H}(t)$ es una función de Lyapunov si es positiva para todo t y además cumple que $\frac{d}{dt}\mathcal{H}(t) < 0$; es decir, $\mathcal{H}(t)$ es decreciente y está acotada inferiormente.

¹⁸Es decir, no hay “paredes infinitas” de potencial que inhiban la difusión en todo el dominio de $\{x_m\}$.

¹⁹Es decir, $\sum_{ij} D_{ij}(\{x_m\}) R_i R_j > 0$ en todo el dominio de las variables $\{x_m\}$ y para todo par de números reales $R_i, R_j \neq 0$.

de Lyapunov [4]. De este hecho se deduce que el estado estacionario es único [11]. Es decir, el estado estacionario es independiente de la condición inicial.²⁰

Ejercicio optativo. (Función de Lyapunov.) Definiendo

$$R \equiv R(\{x_m\}, t) = P_1(\{x_m\}, t) / P_2(\{x_m\}, t),$$

es posible probar usando la definición (4.40) [ver apéndice B para una demostración similar] que

$$\mathcal{H}(t) = \int \cdots \int P_2(\{x_m\}, t) (R \ln R - R + 1) \prod_m dx_m \geq 0. \quad (4.41)$$

Por otro lado, si $D_{ij}(\{x_m\})$ es *definida positiva* y $K_i(\{x_m\})$ no tiene singularidades, usando la estructura diferencial del operador \mathcal{L} de **F-P** es posible probar [4] que

$$\frac{d}{dt} \mathcal{H}(t) = - \int \cdots \int P_1(\{x_m\}, t) \sum_{ij} D_{ij}(\{x_m\}) \frac{\partial \ln R}{\partial x_i} \frac{\partial \ln R}{\partial x_j} \prod_m dx_m \leq 0,$$

donde explícitamente hemos usado la notación de sumatoria. Entonces $\mathcal{H}(t)$ decrece si $\partial \ln R / \partial x_i \neq 0$, además $\mathcal{H}(t) / dt = 0$ sólo cuando $\ln R = \ln C$, donde C es una constante. Así se concluye que, asintóticamente en el tiempo, R ha de ser independiente de $\{x_m\}$. Por otro lado, como $\mathcal{H}(t)$ está acotada inferiormente, la función $\mathcal{H}(t)$ no decrece indefinidamente. Entonces, cuando $\mathcal{H}(t)$ se aproxima a su valor mínimo, $R \rightarrow C$, se tiene que

$$P_1(\{x_m\}, t \rightarrow \infty) \rightarrow C P_2(\{x_m\}, t \rightarrow \infty).$$

Finalmente, por normalización se concluye que la constante vale 1, es decir, $\mathcal{H}(t \rightarrow \infty) \rightarrow 0$. Lo que concluye la prueba de que la solución estacionaria es única.

Ejercicio. Muestre que para el proceso de Ornstein-Uhlenbeck 1-dimensional [ver sección (3.12.2)] también se puede obtener la solución estacionaria $P_{\text{est}}(v)$ a partir de la probabilidad condicionada $P(v, t | v_0, t_0)$ tomando la condición inicial en un tiempo infinitamente remoto (o sea, en el límite $t_0 \rightarrow -\infty$).

Ejercicio. Muestre que una condición necesaria para la existencia de una solución estacionaria de **F-P** es que los coeficientes $K_i(\{x_m\})$ y $D_{ij}(\{x_m\})$ sean independientes del tiempo.

En esta sección hemos diferenciado explícitamente la notación para la solución en el equilibrio termodinámico $P_{\text{eq}}(\{x_m\})$ de la solución estacionaria de **F-P** $P_{\text{est}}(\{x_m\})$. Solamente si el sistema es cerrado y aislado ambas soluciones coincidirán.

Ejercicio guiado. Considere un sistema \mathcal{S} caracterizado por la **ede** (en el plano complejo)

$$\dot{E} = (a - c)E - b |E|^2 E + L(t), \quad (4.42)$$

donde el ruido $L(t)$ es un **pe** complejo gaussiano blanco que satisface las relaciones

$$\langle L(t) \rangle = 0, \quad \langle L(t)L(t') \rangle = 0 \quad \text{y} \quad \langle L(t)L^*(t') \rangle = \Gamma \delta(t - t'). \quad (4.43)$$

En general, si el sistema \mathcal{S} está fuera del equilibrio termodinámico, el coeficiente Γ en principio no tiene ninguna relación con la disipación en la ecuación determinista. Encuentre

²⁰En el caso particular de sistemas de Markov no estacionarios 2π -periódicos, también es posible probar, en condiciones similares, la unicidad de la solución asintótica, la cual será periódica en el tiempo [12] (ver última sección de este capítulo).

los coeficientes de deriva $K_i(E, E^*)$ y de difusión $D_{ij}(E, E^*)$ que aparecen en la ecuación de **F-P**. Muestre que la distribución de probabilidad estacionaria es solución de la ecuación

$$0 = \left[-\frac{\partial}{\partial E}(a - c - b |E|^2)E - \frac{\partial}{\partial E^*}(a - c - b |E|^2)E^* + \Gamma \frac{\partial}{\partial E} \frac{\partial}{\partial E^*} \right] P_{\text{est}}(E, E^*). \quad (4.44)$$

Por otro lado, introduciendo coordenadas polares, o sea, el cambio de variable $E = \sqrt{s}e^{i\phi}$, muestre que también puede hallarse la solución estacionaria a partir de la ecuación

$$0 = \left\{ -2 \frac{\partial}{\partial s}(a - c - bs)s + \Gamma \left(\frac{\partial}{\partial s} s \frac{\partial}{\partial s} + \frac{1}{4s} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right\} P_{\text{est}}(s, \phi). \quad (4.45)$$

Ejercicio optativo. A partir del ejercicio anterior, muestre que la ecuación determinista que se obtiene “eliminando” ingenuamente el término de ruido (es decir, poniendo $\Gamma = 0$) no es invariante frente a transformaciones no lineales de coordenadas. Este hecho tiene importantes connotaciones con relación a la comparación entre el potencial determinista y el potencial de no equilibrio para sistemas difusivos. Ver capítulo XI, sección 5, del libro de van Kampen [5], y nota (28) como también la nota (55) del capítulo 3.

4.6.1 Problema inverso

Sabemos que dada una ecuación de Langevin (y una vez especificado el cálculo diferencial estocástico) los coeficientes de deriva $K_i(\{x_m\})$ y de difusión $D_{ij}(\{x_m\})$ están unívocamente determinados (ver capítulo 3). Sin embargo, el problema inverso no lo está, pues hay una libertad de elección.

En general, en el problema inverso, si n es el número de variables estocásticas, existe un grado de libertad en la elección de los parámetros de Langevin caracterizados por la **ede** $\dot{x}_j = h_j + g_{jl}\xi_l$, donde en general h_j y g_{jl} son funciones de $\{x_m\}$. Del capítulo 3 sabemos que existe una relación entre la deriva, la difusión y los parámetros de Langevin. Es decir, la deriva y la difusión están dados, en el cálculo de Stratonovich, por

$$K_i(\{x_m\}) = h_i + \frac{1}{2} g_{kj} \frac{\partial}{\partial x_k} g_{ij} \quad (4.46)$$

$$D_{ij}(\{x_m\}) = \frac{1}{2} g_{ik} g_{jk}, \quad (4.47)$$

donde los índices repetidos se suman. Además, puesto que $D_{ij}(\{x_m\})$ es simétrica, se observa de (4.47) que sólo tenemos $\frac{1}{2}n(n+1)$ ecuaciones. Es decir, el grado de libertad para determinar h_i y g_{kj} está caracterizado por

$$\{\text{número de incógnitas} = n + n^2\} - \{\text{número de ecuaciones} = n + \frac{n(n+1)}{2}\} = \frac{n(n-1)}{2}.$$

De donde concluimos que solamente en 1-dimensión el problema inverso está unívocamente determinado [4].

4.6.2 Balance detallado

Hemos enfatizado que la solución estacionaria de **F-P** es un problema no trivial para dimensiones mayores que uno. Pero, en particular y teniendo en cuenta ciertas restricciones, esta

solución estacionaria puede ser analizada por cuadraturas. El punto crucial lo establece una condición de simetría llamada balance detallado. Esta condición es simplemente un reflejo a nivel macroscópico de la invariancia frente a la inversión temporal $t \rightarrow -t$ en los sistemas hamiltonianos.

En el capítulo 2 ya vimos la descripción *estacionaria* de las fluctuaciones alrededor del equilibrio termodinámico. Pero, ¿qué ocurre con la dependencia temporal de las fluctuaciones de las variables de estado? Para describir las correlaciones temporales de estas fluctuaciones es necesario utilizar el concepto de **pe**. Justamente, es el marco de los procesos de Markov el que nos permite caracterizar completamente la dependencia temporal de estas fluctuaciones.

En un sistema aislado y cerrado las fluctuaciones en torno al equilibrio termodinámico se describen mediante una ecuación **F-P** que satisface el principio de balance detallado. En general, lejos del equilibrio esta situación no se cumple. Este principio establece que en el estado estacionario, y para toda celda elemental del espacio de las fases de las variables de estado $\{x_m\}$, el flujo de probabilidad entrante es igual al saliente. Matemáticamente el balance detallado (para variables pares) establece que

$$P(\{x_m\}, \tau | \{x'_m\}, 0) P_{\text{eq}}(\{x'_m\}) = P(\{x'_m\}, \tau | \{x_m\}, 0) P_{\text{eq}}(\{x_m\}). \quad (4.48)$$

Si las variables de estado son impares frente a la inversión temporal $t \rightarrow -t$, también es posible formular²¹ una generalización de (4.48). Aquí $P_{\text{eq}}(\{x_m\})$ representa la distribución estacionaria de probabilidad (en torno del equilibrio termodinámico).

Si un **pe** 1-dimensional toma el valor x en el instante t y además el valor x' en instante $t + \tau$, la probabilidad de ocurrencia de este evento vendrá dada por la distribución conjunta de 2-tiempos $P_2(x', t + \tau; x, t)$. En particular, en el equilibrio termodinámico esta distribución de probabilidad conjunta está dada por

$$P_2(x', t + \tau; x, t)_{\text{eq}} = P(x', t + \tau | x, t) P_{\text{eq}}(x, t),$$

donde obviamente $P_{\text{eq}}(x, t)$ ha de ser independiente del tiempo. Entonces el principio de balance detallado puede formularse de la siguiente manera²²

$$P_2(x', 0; x, \tau)_{\text{eq}} = P_2(x', \tau; x, 0)_{\text{eq}}. \quad (4.49)$$

Excursus. Sea $Y(p, q)$ un observable macroscópico (que a su vez es función de las coordenadas del espacio de las fases (p, q) de un sistema de N cuerpos). De la definición de probabilidad conjunta de 2-tiempos, en el equilibrio termodinámico, se tiene que

$$P_2(x', t; x, 0)_{\text{eq}} = \int \cdots \int \delta(x' - Y(p, q, t)) \delta(x - Y(p, q, 0)) P_{\text{eq}}(p, q) \mathcal{D}p \mathcal{D}q.$$

Note que aquí $P_{\text{eq}}(p, q) \propto \exp(-H(p, q)/k_B T)$. En virtud de la invariancia frente a la inversión temporal de las ecuaciones de Hamilton del sistema, y usando la paridad del observable $Y(p, q)$ ante la transformación $t \rightarrow -t$, se puede demostrar que

$$P_2(x', 0; x, t)_{\text{eq}} = P_2(x', t; x, 0)_{\text{eq}}.$$

²¹Ver el primer excursus de la sección (4.7.2).

²²En particular, si el **pe** es discreto, la (4.48) se reduce, inmediatamente, a una simple relación entre la matriz de transición W_{jm} (ver capítulo 6) y la distribución de probabilidad estacionaria $P_{\text{est}}(m)$, es decir, $W_{jm} P_{\text{est}}(m) = W_{mj} P_{\text{est}}(j)$. Es de destacar que aquí la convención de índices repetidos *no se aplica*.

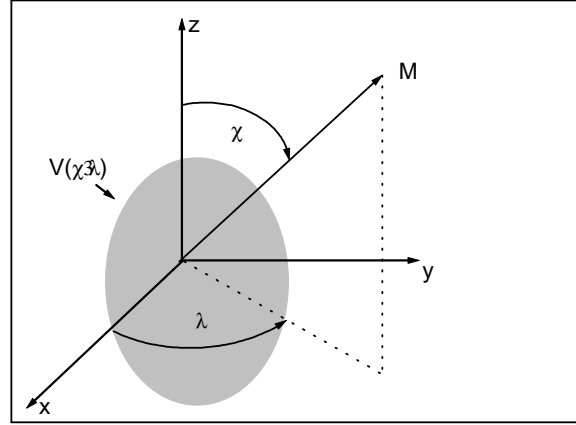


Figura 4.1: Esquema representativo de la presencia del potencial $V(\theta, \phi)$ actuando sobre el momento magnético \mathbf{M} .

Es decir, la condición de balance detallado se prueba mediante el principio de reversibilidad microscópico [13, 5].

Excursus. A partir del principio de balance detallado (4.48) es posible formular condiciones necesarias y suficientes sobre los coeficientes de deriva y de difusión de manera tal que un **pe** continuo, y caracterizado por una ecuación de **F-P** cumpla con el principio de balance detallado [5]; ver también el primer *excursus* de la sección (4.7.2).

Ejercicio. Utilizando el principio de balance detallado (reversibilidad microscópica) muestre que la matriz de correlación (macroscópica) satisface

$$\langle x_j(0)x_i(\tau) \rangle_{\text{eq}} = \langle x_j(\tau)x_i(0) \rangle_{\text{eq}}. \quad (4.50)$$

Note que aquí estamos suponiendo que el **vm** $\langle x_j(\tau) \rangle_{\text{eq}}$ es nulo, como es lógico en torno del equilibrio termodinámico.

Excursus. (Relajación magnética.) Sea una partícula de volumen ν con momento magnético uniforme \mathbf{M} de magnitud constante M_s . Si la orientación instantánea de \mathbf{M} está descrita por los ángulos estocásticos $\theta \equiv \theta(t)$ y $\phi \equiv \phi(t)$, considere a partir de la **ede** de Brown-Gilbert el operador \mathcal{L} de **F-P** asociado [ver sección (3.19.1)]. Puesto que el modelo describe un sistema cerrado y aislado, la solución estacionaria de **F-P** ha de coincidir con la solución de Boltzmann:

$$\mathcal{W}_{\text{eq}}(\theta, \phi) = \mathcal{N}e^{-\beta V(\theta, \phi)},$$

donde $\beta = \nu/k_B T$ y $V(\theta, \phi)$ es el potencial de las fuerzas aplicadas al momento \mathbf{M} [la figura (4.1) muestra un esquema representativo]. Es fácil mostrar (por sustitución directa) que esta distribución es solución de la ecuación estacionaria de **F-P** si y sólo si $h' = \beta k'$. Este hecho no es nada más que la condición de balance detallado. Entonces, con esta condición es posible relacionar la intensidad de las fluctuaciones térmicas, ϵ , con el parámetro de

disipación, η , del modelo de Brown-Gilbert [23] según

$$\epsilon = \frac{2\eta k_B T}{\nu}. \quad (4.51)$$

4.7 Corriente de probabilidad

4.7.1 Caso 1-dimensional

En el caso 1-dimensional la solución estacionaria de la ecuación de **F-P** es siempre resoluble por cuadraturas. Este hecho se sigue inmediatamente, pues en el caso 1-dimensional siempre es posible introducir una transformación de coordenadas en la ecuación de Langevin [ver último ejercicio de la sección (3.18)] a fin de que el coeficiente de difusión en la ecuación asociada de **F-P** sea una constante.

Sea la ecuación 1-dimensional de **F-P**

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} K(x) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} D(x) \right] P(x, t) = -\partial_x J(x, t). \quad (4.52)$$

En el estado estacionario la corriente de probabilidad $J_{\text{est}}(x)$ ha de ser una constante. En particular, si las condiciones de contorno lo permiten, y para algún valor de x la corriente se anula, se deduce que $J_{\text{est}}(x) = 0$ en todo el dominio de x . De donde se deduce que si $D(x)$ no es singular se tiene

$$K(x)P_{\text{est}}(x) = K(x) \frac{D(x)}{D(x)} P_{\text{est}}(x) = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} D(x) P_{\text{est}}(x).$$

Esta ecuación puede ser integrada en $D(x)P_{\text{est}}(x)$ de la siguiente forma:

$$\int \frac{d[D(x)P_{\text{est}}(x)]}{D(x)P_{\text{est}}(x)} = 2 \int \frac{K(x)}{D(x)} dx,$$

obteniéndose para la solución estacionaria la expresión

$$P_{\text{est}}(x) = \frac{\mathcal{N}}{D(x)} \exp \left(2 \int^x \frac{K(x')}{D(x')} dx' \right). \quad (4.53)$$

Excursus. Sea la ecuación 1-dimensional de **F-P**

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} K(x) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} D(x) \right] P(x, t) \equiv \mathcal{L}P(x, t).$$

Puesto que \mathcal{L} es un operador diferencial, el principio de balance detallado no se puede analizar en una forma sencilla.²³ Se puede probar que el principio de balance detallado se cumple si y sólo si [14]

$$K(x) = \frac{1}{2P_{\text{est}}(x)} \frac{d}{dx} P_{\text{est}}(x) D(x). \quad (4.54)$$

²³Como lo es en el caso de una ecuación maestra (esta ecuación será presentada en el capítulo 6); ver nota (22) de este capítulo. Sin embargo, una condición equivalente: la simetrización del operador diferencial \mathcal{L} es fácil de observar, ver ejercicio optativo de la sección (4.8.4).

Entonces $P_{\text{est}}(x)$ se obtiene por cuadraturas en la forma (4.53). Note que esta condición establece que la corriente de probabilidad

$$J(x, t) = \left[K(x) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} D(x) \right] P(x, t)$$

es idénticamente nula en el estado estacionario [5]. Este hecho es consecuencia de estar usando una condición de contorno *natural* para la probabilidad. El siguiente *excursus* muestra una condición de contorno no natural.

En general, se puede mostrar que la distribución canónica de la mecánica estadística clásica es la solución estacionaria de **F-P** (4.39) si y sólo si $D_{ij}(\{x_m\})$ y $K_i(\{x_m\})$ están relacionados adecuadamente. En este caso la ecuación de **F-P** es multidimensional y será analizada en la próxima sección.

Excursus. (Juntura Josephson.) Una juntura Josephson consiste en dos superconductores separados por una fina capa de material aislante. Esta juntura puede ser analizada como un circuito eléctrico *en paralelo* con una cierta resistencia R y capacitancia C (modelo RSJ²⁴). En el modelo RSJ la corriente en la juntura $I_S = I_0 \sin \phi$, representa la supercorriente debida al *par de Cooper*, que por efecto túnel cuántico *salta* de un lado al otro del material aislante. Aquí ϕ es la diferencia de fase de la función de onda cuántica a ambos lados del aislador de la juntura propiamente dicha. La aplicación de las reglas de Kirchoff al circuito eléctrico equivalente RSJ permiten descomponer la corriente, I , aplicada a la juntura en la forma:

$$I = C \frac{dV}{dt} + \frac{V}{R} + I_S. \quad (4.55)$$

Consideremos ahora que el voltaje a través de la juntura está relacionado con la variación temporal de la diferencia de fase, es decir: $d\phi/dt = 2eV/\hbar$. Entonces, en el límite sobre amortiguado, $C \rightarrow 0$, introduciendo los cambios de escala $t \rightarrow (2eRI_0/\hbar)t$, $I(t) \rightarrow I/I_0$ es posible volver a escribir la expresión (4.55) como una ecuación diferencial para la fase ϕ :

$$\frac{d\phi}{dt} = -\sin \phi + I. \quad (4.56)$$

Ahora bien, si tenemos en cuenta el ruido térmico generado en la resistencia R , cuando el circuito equivalente RSJ está operando a una temperatura distinta de cero, podemos *simplemente* incluir un ruido aditivo gaussiano blanco de media nula²⁵ $\eta(t)$ a la ecuación (4.55). De esto resulta que en lugar de la ecuación determinista (4.56) se obtiene la siguiente **ede** (con $\xi(t)$ gaussiano blanco):

$$\frac{d\phi}{dt} = -\sin \phi + I + \sqrt{\epsilon} \xi(t), \quad \text{donde} \quad \langle \xi(t) \rangle = 0, \langle \xi(t) \xi(t + \tau) \rangle = \delta(\tau). \quad (4.57)$$

Ejercicio optativo. A partir de la ecuación de Langevin (4.57) obtenga la correspondiente ecuación de **F-P**. Por el principio de balance detallado es posible ver que la intensidad del ruido viene dada por $\epsilon = 4ek_B T/(\hbar I_0)$. Note que el significado físico de la fase ϕ sólo tiene

²⁴La sigla RSJ proviene del inglés: *Resistively Shunted Junction*. Una presentación sencilla y didáctica del fenómeno de la superconductividad puede leerse en el artículo de C. Balseiro y F. de la Cruz; Ciencia Hoy, Vol. 1, N 1, 27, Buenos Aires (1989).

²⁵Es decir, suponiendo que $\langle \eta(t) \rangle = 0$ y $\langle \eta(t) \eta(t + \tau) \rangle = \frac{2k_B T}{R} \delta(\tau)$.

sentido en el intervalo $[0, 2\pi]$; por consiguiente su probabilidad condicionada $P(\phi, t | \phi_0, t_0)$ ha de estar normalizada en ese intervalo y, por supuesto, cumplir la condición de periodicidad

$$P(\phi, t | \phi_0, t_0) = P(\phi + 2\pi, t | \phi_0, t_0). \quad (4.58)$$

En el contexto de **F-P** una normalización del tipo (4.58) es típicamente una condición “no natural” y necesita un minucioso estudio aparte. Es de hacer notar que este análisis fue introducido por Stratonovich en el año 1958 (ver pág. 234, Vol. II, de su libro [9]); sin embargo, es habitual encontrar solamente referencias al trabajo de V. Ambegaokar y B.I. Halperin [Phys. Rev. Lett. **22**, 1364, (1969)]. Un análisis detallado del circuito equivalente RSJ también se puede estudiar en el libro de Risken [4].

4.7.2 Caso multidimensional

En general, fuera del equilibrio termodinámico, y a los efectos de calcular la solución estacionaria de la ecuación de **F-P** multidimensional, es conveniente escribir la ecuación (4.39) en términos de una corriente de probabilidad J_μ . Obviamente, en el caso multidimensional la corriente total, estacionaria, no tiene por qué anularse. Por ejemplo, podría haber un estado estacionario con un flujo de corriente que tenga rotor no nulo.

En general, en dimensión n , la ecuación de **F-P** se puede escribir en la siguiente forma compacta:²⁶

$$\partial_t P + \partial_\mu J_\mu = 0, \quad (4.59)$$

donde la corriente de probabilidad está dada por

$$J_\mu = (K_\mu - \partial_\nu D_{\mu\nu}) P. \quad (4.60)$$

En general, $K_\mu \equiv K_\mu(\{q_\mu\})$ proviene del término de deriva y $D_{\mu\nu} \equiv D_{\mu\nu}(\{q_\mu\})$ del término de difusión propiamente dicho; ambas pueden depender de n -variables de estado $\{q_\mu\}$, pero no explícitamente del tiempo ya que estamos interesados en **pe** estacionarios.

A los efectos de obtener una solución estacionaria con estructura potencial, es decir,

$$P_{\text{est}} \propto \exp(-F(\{q_\mu\})), \quad (4.61)$$

es necesario, primero, separar el término de deriva de la ecuación (4.60) en dos contribuciones: una disipativa, f_μ^d , y otra no disipativa, f_μ^o . Esto es,

$$K_\mu = f_\mu^d + f_\mu^o, \quad (4.62)$$

a partir de lo cual se define la corriente disipativa (en principio no se conoce esta separación):

$$J_\mu^d = (f_\mu^d - \partial_\nu D_{\mu\nu}) P. \quad (4.63)$$

Entonces la ecuación de **F-P** quedará expresada en términos de dos corrientes: una disipativa y otra no disipativa, a saber:

$$\partial_t P + \partial_\mu (f_\mu^o P) + \partial_\mu J_\mu^d = 0. \quad (4.64)$$

²⁶Usando la notación de suma al considerar índices repetidos.

Proposición. En el estado estacionario $\partial_t P_{\text{est}} = [-\partial_\mu J_\mu]_{\text{est}} = 0$, y si se cumple la condición potencial

$$[J_\mu^{\text{d}}]_{\text{est}} = 0, \quad (4.65)$$

la divergencia de la corriente no disipativa $J_\mu^{\text{o}} = f_\mu^{\text{o}} P_{\text{est}}$ se anula idénticamente:

$$\partial_\mu (f_\mu^{\text{o}} P_{\text{est}}) = 0. \quad (4.66)$$

Introduciendo la estructura potencial (4.61) para el estado estacionario P_{est} en (4.66) se deduce que

$$\partial_\mu f_\mu^{\text{o}} = f_\mu^{\text{o}} \partial_\mu F, \quad (4.67)$$

la cual, en principio, puede ser resuelta por cuadraturas.

Nota. Exigir la condición no trivial $[J_\mu^{\text{d}}]_{\text{est}} = 0$ implica que las funciones f_μ^{d} , $D_{\mu\nu}$ y F deben satisfacer la condición de consistencia

$$f_\mu^{\text{d}} - \partial_\nu D_{\mu\nu} = -D_{\mu\nu} \partial_\nu F. \quad (4.68)$$

Esta relación, llamada *condición potencial*, es difícil de resolver, pues no se conoce el potencial $F \equiv F(\{q_\mu\})$. Sólo en ocasiones especiales se puede “conjeturar” la separación (4.62). Por otro lado, es posible probar que si el sistema de **F-P** satisface el principio (más restrictivo) de balance detallado [4, 15, 16], entonces la condición potencial, antes mencionada, se cumple. Note que para calcular la componente disipativa f_μ^{d} es necesario conocer primero el potencial $F(\{q_\mu\})$. Frecuentemente el problema se plantea a la inversa. Es decir, dada la ecuación de **F-P**, se trata de sugerir la parte disipativa f_μ^{d} a partir de la cual, si se asume que se cumple la condición potencial (4.68) y (4.67), el cálculo de F se infiere por cuadraturas.

Ejercicio. Muestre que si se cumple la condición potencial (4.68), $D_{\mu\nu}$ es invertible y se conoce f_μ^{d} . Entonces el potencial F viene dado por integración en la forma:

$$\partial_\alpha F(\{q_\gamma\}) = -D_{\alpha\mu}^{-1} (f_\mu^{\text{d}} - \partial_\nu D_{\mu\nu}).$$

Luego, si definimos el vector $\mathcal{A}_\alpha \equiv -D_{\alpha\mu}^{-1} (f_\mu^{\text{d}} - \partial_\nu D_{\mu\nu})$, éste debe satisfacer la condición de rotor nulo:

$$\partial_\mu \mathcal{A}_\alpha = \partial_\alpha \mathcal{A}_\mu.$$

Excursus. (Balance detallado.) Considere un sistema cerrado, aislado y caracterizado por una ecuación de **F-P** en la cual existen variables pares e impares (frente a la transformación temporal $t \rightarrow -t$). Por ejemplo, la posición de una partícula es una variable par, mientras que su velocidad es impar. Si se definen las cantidades ϵ_μ según la prescripción

$$\epsilon_\mu = \begin{cases} 1, & \text{para variables pares} \\ -1, & \text{para variables impares,} \end{cases}$$

se puede probar que la ecuación de **F-P** cumple el principio de balance detallado si y sólo si [5]

$$\begin{aligned} D_{\mu\nu}(q) &= \epsilon_\mu \epsilon_\nu D_{\nu\mu}(\epsilon q) \\ \epsilon_\mu K_\mu^{\text{rev}}(\epsilon q) &= -K_\mu^{\text{rev}}(q) \\ \sum_\mu \partial_\mu (K_\mu^{\text{rev}} P_{\text{eq}}) &= 0. \end{aligned}$$

Note que cuando aparece un producto de la forma $\epsilon_\mu K_\mu^{\text{rev}}(\epsilon q)$ o $\epsilon_\mu \epsilon_\nu D_{\nu\mu}(\epsilon q)$ no se usa la convención de suma de índices repetidos. Además, la ecuación de **F-P** se ha redefinido en la forma

$$\begin{aligned}\partial_t P &= -\partial_\mu K_\mu P + \partial_\mu \partial_\nu D_{\mu\nu} P \\ &= -\partial_\mu K_\mu^{\text{rev}} P + \partial_\mu P_{\text{eq}} D_{\mu\nu} \partial_\nu \frac{P}{P_{\text{eq}}}.\end{aligned}\quad (4.69)$$

donde

$$K_\mu^{\text{rev}} = K_\mu - \frac{1}{P_{\text{eq}}} \partial_\mu (D_{\mu\nu} P_{\text{eq}}).$$

Puesto que el sistema es cerrado y aislado, la solución estacionaria coincide con la solución del equilibrio P_{eq} . Entonces es posible interpretar físicamente cada uno de los términos de la ecuación de **F-P** (4.69). El primero (determinista), $-\partial_\mu K_\mu^{\text{rev}} P$, es justamente el operador de Liouville, que es reversible. El segundo (puramente disipativo), $\partial_\mu P_{\text{eq}} D_{\mu\nu} \partial_\nu [P/P_{\text{eq}}]$, explica el acercamiento irreversible hacia el estado estacionario. Note que si se cumple el principio de balance detallado existe una prescripción clara para obtener la separación entre corriente disipativa y no disipativa. Entonces, en equilibrio, la corriente disipativa $P_{\text{eq}} D_{\mu\nu} \partial_\nu [P/P_{\text{eq}}]$ es nula.

Ejercicio optativo. Si se cumple el principio de balance detallado, muestre que en el estado estacionario puede existir una corriente no disipativa J_μ^o no nula proveniente del rotor de un vector potencial: $J^o = \nabla \times A$.

Ejercicio guiado. (Potencial de no equilibrio.) Considere que la ecuación fenomenológica (4.42) describe a un láser en una cavidad electromagnética fuera del equilibrio [5]. Usando coordenadas polares es posible ver, de (4.45), que la ecuación determinista ($\Gamma = 0$) para el módulo del campo eléctrico $|E|^2 \equiv s$ viene dada por

$$\dot{s} = 2s(a - c - bs). \quad (4.70)$$

Entonces, podemos definir un potencial determinista $V(s) = -(a - c)s^2 + 2bs^3/3$ de manera que (4.70) se pueda escribir en la forma potencial: $\dot{s} = -V'(s)$. Por otro lado, podemos resolver el estado estacionario de **F-P**, solución de (4.45), suponiendo que se cumple la condición potencial²⁷ (4.68), y proponiendo la siguiente separación para el término de deriva K_μ :

$$\begin{aligned}f^d &\equiv (f_s^d, f_\phi^d) = (2s(a - c - bs) + \Gamma, 0) \\ f^o &\equiv (f_s^o, f_\phi^o) = (0, 0).\end{aligned}$$

De aquí se deduce que las componentes de la corriente disipativa,

$$J_\mu^d = (f_\mu^d - \partial_\nu D_{\mu\nu}) P,$$

son

$$\begin{aligned}J_s^d(s, \phi, t) &= [2s(a - c - bs) + \Gamma - \partial_s D_{ss}] P(s, \phi, t) \\ J_\phi^d(s, \phi, t) &\equiv -\partial_\phi D_{\phi\phi} P(s, \phi, t).\end{aligned}$$

²⁷Mediante la identificación de las corrientes disipativa, $J^d \equiv (J_s^d, J_\phi^d)$, y no disipativa $J^o \equiv (J_s^o, J_\phi^o)$.

Note, de (4.45), que $D_{s\phi} = D_{\phi s} = 0$; es decir, la matriz $D_{\mu\nu}$ (dependiente de las variables de estado s, ϕ) está dada por

$$D_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} \Gamma s & 0 \\ 0 & \frac{\Gamma}{4s} \end{pmatrix}. \quad (4.71)$$

Además, la corriente no disipativa es idénticamente nula (pues $J^o \equiv (f_s^o, f_\phi^o)P = (0, 0)$).

Ejercicio optativo. Muestre que la solución estacionaria de **F-P** del ejercicio anterior es

$$P_{\text{est}}(s) = \mathcal{N} \exp \left(\frac{2}{\Gamma} \left\{ (a - c)s - \frac{1}{2}bs^2 \right\} \right) \equiv \mathcal{N} e^{-F}.$$

Aquí \mathcal{N} es la constante de normalización. De esta solución se observa que el potencial de no equilibrio

$$F(s) \equiv -\frac{2}{\Gamma} \left\{ (a - c)s - \frac{1}{2}bs^2 \right\}$$

es diferente del potencial determinista $V(s)$. Esta diferencia se debe al carácter no lineal de la parte determinista de la ecuación (4.42).²⁸

Ejercicio optativo. Para el estado estacionario del láser del ejercicio anterior, calcule el valor más probable del módulo s . Interprete el significado del potencial de no equilibrio $F(s)$ y el hecho de que éste sea independiente de la variable de estado ϕ (ángulo).

Excursus. (Correlaciones lejos del equilibrio.) Si se considera la ecuación de **F-P** para un láser en una cavidad electromagnética [ver (4.42)], se puede emplear la aproximación de “linealización” y comprobar que si $c - a \gg \sqrt{b\Gamma}$ la función de correlación de la intensidad de campo eléctrico $|E(t)|^2$ viene dada por [5]

$$\langle |E(t_1)|^2 |E(t_2)|^2 \rangle_{\text{est}} = \frac{\Gamma^2}{4(c - a)^2} \exp(-2(c - a) |t_1 - t_2|).$$

Mientras que en el caso opuesto, es decir, $a - c \gg \sqrt{b\Gamma}$, se obtiene:

$$\langle |E(t_1)|^2 |E(t_2)|^2 \rangle_{\text{est}} = \frac{\Gamma}{2b} \exp(-2(a - c) |t_1 - t_2|).$$

4.7.3 Ecuación de Kramers

A efectos de ejemplificar el uso de las corrientes de probabilidad disipativa y no disipativa, como método de cálculo de la solución estacionaria multidimensional de la ecuación de **F-P**, vamos a resolver aquí la ecuación estacionaria de Kramers introducida en la sección (4.5).

Considere una partícula browniana de masa m en un potencial arbitrario $U(X)$, la ecuación de **F-P** será la (4.37). Entonces, inmediatamente identificamos el operador gradiente $\partial_\mu \equiv (\partial_X, \partial_V)$ y la corriente de probabilidad total²⁹

$$J = \left(V, -\frac{U'(X) + \gamma V}{m} - \varepsilon \partial_V \right) P, \quad (4.72)$$

²⁸Ver segundo ejercicio optativo de la sección (4.6). Si las fluctuaciones de un sistema no lineal se tienen en cuenta introduciendo de manera *ad hoc* un término de ruido en la ecuación determinista, la **ede** resultante puede conducir a resultados paradójicos. Una discusión al respecto se puede encontrar en el libro de van Kampen [5], pág. 235.

²⁹Es decir, μ puede ser X o V .

donde $\varepsilon \equiv \gamma k_B T / m^2$. Note que a partir de la ecuación de Kramers (4.37) es posible “conjeturar” cómo separar K_μ en una parte disipativa y otra no disipativa (puramente mecánica):

$$f^o \equiv (f_X^o, f_V^o) = \left(V, \frac{-U'(X)}{m} \right) \quad y \quad f^d \equiv (f_X^d, f_V^d) = \left(0, \frac{-\gamma V}{m} \right). \quad (4.73)$$

Obviamente, esta elección depende del sistema de **F-P** que se esté estudiando (compare con el ejercicio guiado de la sección anterior). Usando (4.72), (4.73) y (4.63) se obtiene la siguiente separación para las corrientes de probabilidad:

$$J^o = \left(V, \frac{-U'(X)}{m} \right) P \quad y \quad J^d = \left(0, -\frac{\gamma V}{m} - \partial_V \varepsilon \right) P. \quad (4.74)$$

En este caso la matriz de difusión

$$D_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \quad (4.75)$$

es singular.³⁰

La condición potencial³¹ $f_\mu^d - \partial_\nu D_{\mu\nu} = -D_{\mu\nu} \partial_\nu F$ conduce a la siguiente ecuación para el potencial $F(X, V)$ de la solución estacionaria:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{\gamma V}{m} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_X F \\ \partial_V F \end{pmatrix}. \quad (4.76)$$

Entonces, en el estado estacionario, a partir de la condición $[J_\mu^d]_{\text{est}} = 0$ se deduce que $\gamma V / m = \varepsilon \partial_V F$. Esta ecuación puede ser integrada inmediatamente, resultando:

$$F(X, V) = \frac{\gamma}{2m\varepsilon} V^2 + \text{Cte}(X). \quad (4.77)$$

Por otro lado, en el estado estacionario, la anulación de la divergencia de la corriente no disipativa $\partial_\mu f_\mu^o = f_\mu^o \partial_\mu F$ conduce a

$$\partial_X f_X^o + \partial_V f_V^o = (f_X^o, f_V^o) \cdot (\partial_X F(X, V), \partial_V F(X, V)). \quad (4.78)$$

Observando que $f^o \equiv \left(V, \frac{-U'(X)}{m} \right)$ implica que $\partial_\mu f_\mu^o = 0$, y de (4.78), se deduce que

$$0 = \left(V, \frac{-U'(X)}{m} \right) \cdot (\partial_X F(X, V), \partial_V F(X, V)).$$

Utilizando (4.77) se ve que la constante de integración es

$$\text{Cte}(X) = \frac{\gamma}{m^2 \varepsilon} U(X) + \mathcal{N},$$

³⁰Es decir, no tiene inversa.

³¹En general es válida para problemas de **F-P** de no equilibrio.

con lo cual, y notando que $\varepsilon \equiv \gamma k_B T / m^2$, finalmente obtenemos para el potencial F (a menos de la constante \mathcal{N} que se absorbe por normalización) la forma

$$F(X, V) = \frac{m}{2k_B T} V^2 + \frac{1}{k_B T} U(X).$$

De aquí se deduce que la solución estacionaria de la ecuación de Kramers es

$$P_{\text{est}} = \mathcal{N} \exp(-F(X, V)) \propto \exp\left(-\frac{m}{2k_B T} V^2 - \frac{1}{k_B T} U(X)\right),$$

la cual, como era de esperar, coincide con la solución canónica de la mecánica estadística de equilibrio.

4.7.4 Teorema de Onsager generalizado*

En una sección anterior hemos comentado que el principio de balance detallado implica que se cumpla la condición potencial $f_\mu^d - \partial_\nu D_{\mu\nu} = -D_{\mu\nu} \partial_\nu F$ y la divergencia nula de la corriente de probabilidad no disipativa $\partial_\mu (f_\mu^o P_{\text{est}}) = 0$. Note que la inversa no es cierta.

En aquellos casos en que la matriz de difusión sea constante la condición potencial se simplifica notablemente:

$$f_\mu^d = -D_{\mu\nu} \partial_\nu F. \quad (4.79)$$

Definiendo las fuerzas generalizadas

$$\mathcal{F}_\nu = k_B \partial_\nu F$$

podemos escribir (4.79) en la forma

$$f_\mu^d = -\frac{D_{\mu\nu}}{k_B} \mathcal{F}_\nu, \quad (4.80)$$

que es la relación de Onsager (4.11). Más aún, en el caso particular (no lineal) en que $\partial_\nu D_{\mu\nu} = 0$, la relación (4.80) es la generalización no lineal del teorema de Onsager [16].

Excursus. Cerca del equilibrio termodinámico $F(\{q_\mu\})$ es la segunda variación de la energía interna. Expresado en términos de ΔT y ΔV tenemos: $k_B T F = C_V / 2T (\Delta T)^2 + \frac{C_V}{C_P} (\Delta V)^2 / 2V \gamma$, donde $\gamma = -(\partial \log V / \partial P)_S$ es la compresibilidad adiabática, C_V y C_P son los calores específicos a volumen y presión constante, respectivamente. Es decir: $F = \frac{1}{2} g_{\mu\nu} q_\mu q_\nu$ es una forma cuadrática *definida positiva*, entonces $\mathcal{F}_\nu = \frac{k_B}{2} (g_{\mu\nu} q_\mu + g_{\nu\mu} q_\mu) = k_B g_{\nu\mu} q_\mu$. Luego, en esta aproximación: $f_\mu^d = -\frac{D_{\mu\nu}}{k_B} \mathcal{F}_\nu = -D_{\mu\nu} g_{\nu\alpha} q_\alpha = -M_{\mu\alpha} q_\alpha$, donde $M_{\mu\alpha}$ es la matriz de amortiguamiento [16]. Note que algunos autores definen las fuerzas generalizadas \mathcal{F}_ν con el signo opuesto. Ver, por ejemplo, el trabajo de M. Lax [Rev. of Mod. Phys. **32**, 25, (1960)].

4.7.5 Comentarios sobre el cálculo del potencial de no equilibrio*

En 1-dimensión siempre es posible introducir un cambio de coordenada de manera tal que el coeficiente de difusión sea constante. Esto simplifica notablemente el cálculo del estado estacionario de **F-P**. En dimensión n el problema de encontrar una transformación de coordenadas de manera que $D_{\mu\nu}$ sea constante es un problema no trivial, de allí la utilidad de

introducir una representación covariante para la ecuación de **F-P**, a efectos de calcular el estado estacionario [17].

En general, en situaciones lejos del equilibrio si no se cumple la condición potencial, no se puede mantener ninguna de las condiciones (4.67) o (4.68). Entonces es necesario arbitrar métodos perturbativos para el cálculo del potencial de no equilibrio $F(\{q_\mu\})$, a los efectos de conocer la solución estacionaria de la ecuación de **F-P**. En particular, el empleo de las variables de acción y ángulo [18] son de importancia a fin de calcular dicho potencial. Otra posibilidad es detectar la parte no hermítica, \mathcal{L}_N , del operador de **F-P**, entonces es factible estudiar el problema de **F-P** en autofunciones de la parte hermítica \mathcal{L}_H en una base $|q\rangle$ de manera tal que los elementos de transición $\langle q_1 | \mathcal{L}_N | q_2 \rangle$ sean lo más simple posible. Cuando estos elementos cumplen relaciones de recurrencia finitas, y en particular si es tridiagonal, el método de las fracciones continuas permite resolver numéricamente el problema de **F-P** en una forma eficiente [4]. Por último cabe mencionar que si la intensidad de los ruidos (proporcional a las fuerzas de Langevin) es pequeña, el método de la integral de caminos permite obtener buenas aproximaciones al potencial de no equilibrio [19].

Simetrización, desarrollo en autofunciones

Como ya se comentó, si existe el estado estacionario, la distribución $P_{\text{est}}(\{q_\mu\})$ es el límite asintótico, para tiempos largos, del propagador del sistema. Podemos obtener $P_{\text{est}}(\{q_\mu\})$ como la solución de la ecuación estacionaria de **F-P**. Por otro lado, si se efectúa un análisis de autofunciones del operador de Fokker-Planck \mathcal{L} , $P_{\text{est}}(\{q_\mu\})$ es la autofunción con autovalor nulo del problema de contorno³² (donde se considera que $\int_{\mathcal{D}} \Phi_n(q_\mu) dq_\mu < \infty$)

$$\mathcal{L}\Phi_n = \lambda_n \Phi_n. \quad (4.81)$$

Pero puede ocurrir que el conjunto de autofunciones Φ_n no sea completo; ésta es una dificultad extra que suele aparecer en sistemas fuera del equilibrio, puesto que el operador \mathcal{L} puede no ser normal; ver por ejemplo [20]. En lo que sigue adoptaremos el criterio de que el conjunto de autofunciones Φ_n es completo (esto siempre podrá ser justificado evitando la degeneración de los autovalores mediante pequeñas perturbaciones³³ [4]). Por otro lado, si el principio de balance detallado se cumple, siempre es posible simetrizar el operador \mathcal{L} , lo cual asegura la reducción a su forma diagonal [ver (4.104)].

4.8 Procesos de Fokker-Planck no estacionarios*

4.8.1 Teoría de autovalores

Hemos mostrado en el capítulo 3, a partir del cálculo estocástico de Stratonovich, que toda **ede** en presencia de un ruido gaussiano blanco da lugar a un proceso de Markov bien definido.³⁴ Un proceso de Markov continuo está completamente caracterizado por su operador \mathcal{L} de **F-P**, el cual puede escribirse inmediatamente a partir de su correspondiente **ede**. Si algún parámetro de la **ede** depende del tiempo, el **pe** no será estacionario. En

³²Si el dominio de la distribución es \mathcal{D} [con sus correspondientes condiciones de contorno] las funciones sobre las cuales opera \mathcal{L} deberían ser integrables en \mathcal{D} . Es decir, un espacio de funciones integrables.

³³En un contexto similar, ver el ejemplo del apéndice B.1

³⁴Resultado válido para toda prescripción diferencial estocásticas como, por ejemplo, la de Stratonovich, Ito, etc.

particular, si esta dependencia es 2π periódica, el **pe** se denomina proceso de Markov no estacionario 2π -periódico. En esta sección presentamos un método para resolver la dinámica de Fokker-Planck cuando los coeficientes de deriva y/o de difusión son funciones periódicas en el tiempo. Considere la siguiente ecuación de **F-P** (en dimensión n)

$$\begin{aligned}\partial_t P(q, t) &= \left[-\frac{\partial}{\partial q_\nu} K_\nu(q, t) + \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial^2}{\partial q_\nu \partial q_\mu} D_{\nu\mu}(q, t) \right] P(q, t) \\ &\equiv \mathcal{L}(q, \partial_q, t) P(q, t).\end{aligned}\tag{4.82}$$

Aquí q representa el conjunto de variables (q_1, \dots, q_n) , y la suma sobre los índices repetidos se sobrentiende. Se supone que el término de deriva y la matriz de difusión son funciones periódicas en el tiempo con invariancia discreta de traslación temporal $t \rightarrow t + T$, es decir:

$$\begin{aligned}K_\nu(q, t + T) &= K_\nu(q, t) \\ D_{\nu\mu}(q, t + T) &= D_{\nu\mu}(q, t).\end{aligned}\tag{4.83}$$

Se puede usar el parámetro ϵ para medir la intensidad del ruido. El propagador (densidad de probabilidad condicionada) de la dinámica de Fokker-Planck $P(q, t|q_0, t_0)$ es solución de (4.82) y cumple con la condición inicial

$$P(q, t_0|q_0, t_0) = \delta(q - q_0).\tag{4.84}$$

Si K_ν y $D_{\nu\mu}$ son independientes del tiempo, la dinámica de **F-P** es equivalente a un problema de autovalores; entonces el propagador puede desarrollarse en términos de un conjunto biortonormal de autofunciones del operador \mathcal{L} . La necesidad de las autofunciones adjuntas se debe al hecho de que en general el operador \mathcal{L} no es hermítico ni normal. En el caso particular de que se cumpla el principio de balance detallado el problema puede ser puesto en equivalencia con un problema de autovalores *autoadjunto* definido seminegativo [4]; lo cual muestra la existencia de un conjunto completo de autofunciones con autovalores negativos (o cero), pero en general no es posible probar la existencia de un conjunto completo de autofunciones del operador \mathcal{L} . En esta sección vamos a mostrar que la dinámica de un proceso de Markov no estacionario T -periódico también se puede estudiar como un problema de autovalores, pero donde el tipo de operador que hay que resolver es un operador integral.³⁵ En las siguientes secciones daremos algunas aplicaciones de esta teoría de autovalores; es decir, primero deduciremos algunas relaciones entre los autovalores y autofunciones, y luego mostraremos la relación entre estos autovalores y ciertas cantidades que caracterizan al sistema dinámico, como por ejemplo: funciones de correlación, función de Lyapunov, tiempos de salto entre atractores, etc.

4.8.2 El operador de Kolmogorov

Toda solución $f(q, t)$ del operador de **F-P** (4.82) satisface la condición de compatibilidad³⁶

$$f(q, t) = \int P(q, t|q', t') f(q', t') dq',$$

³⁵Este método presenta más ventajas cuando el sistema, inevitablemente, tiene que resolverse numéricamente [12]. Mostraremos que la dificultad matemática se reduce al análisis de autovalores de una ecuación integral de Fredholm.

³⁶Ver capítulo 3.

para todo $t' \leq t$.

Definición. El operador de Kolmogorov está dado, para $t_2 \geq t_1$, por

$$\mathcal{U}(t_2, t_1) : f(q) \rightarrow \int P(q, t_2 | q', t_1) f(q') dq'; \quad (4.85)$$

es decir, la evolución de toda solución de la ecuación de **F-P** (4.82) se obtiene mediante la aplicación del operador de Kolmogorov:

$$f(q, t_2) = \mathcal{U}(t_2, t_1) f(q, t_1). \quad (4.86)$$

Esta última ecuación no es más que la condición de compatibilidad de Kolmogorov.

Proposición. El operador de Kolmogorov satisface la ley de semigrupo

$$\mathcal{U}(t_1, t_1) = \text{identidad} \quad (4.87)$$

$$\mathcal{U}(t_3, t_1) = \mathcal{U}(t_3, t_2) \mathcal{U}(t_2, t_1). \quad (4.88)$$

Si el operador de **F-P** (4.82) es periódico en el tiempo, el operador de Kolmogorov (4.85) tiene la periodicidad

$$\mathcal{U}(t_2 + T, t_1 + T) = \mathcal{U}(t_2, t_1). \quad (4.89)$$

La propiedad (4.87) se infiere de la condición inicial del propagador (4.84), la propiedad (4.88) se prueba a partir de la ecuación de Chapman-Kolmogorov (ver capítulo 3), la cual es válida para todo proceso de Markov. Por otro lado, de (4.82) y (4.83) es fácil comprobar que el propagador tiene la periodicidad

$$P(q, t + T | q_0, t_0 + T) = P(q, t | q_0, t_0), \quad (4.90)$$

a partir de lo cual la propiedad (4.89) se deduce inmediatamente. Note que a causa de que en general el propagador no es simétrico bajo la transformación $q \leftrightarrow q_0$, el operador de Kolmogorov en general no es autoadjunto. Su adjunto está dado por

$$\mathcal{U}(t_2, t_1)^+ : \phi(q) \rightarrow \int \phi(q') P(q', t_2 | q, t_1) dq'. \quad (4.91)$$

Proposición. El operador adjunto de Kolmogorov satisface:

$$\mathcal{U}(t_1, t_1)^+ = \text{identidad} \quad (4.92)$$

$$\mathcal{U}(t_3, t_1)^+ = \mathcal{U}(t_2, t_1)^+ \mathcal{U}(t_3, t_2)^+, \quad (4.93)$$

y si el operador de **F-P** (4.82) es periódico en el tiempo se deduce que el adjunto cumple

$$\mathcal{U}(t_2 + T, t_1 + T)^+ = \mathcal{U}(t_2, t_1)^+. \quad (4.94)$$

Estas tres propiedades se infieren de las correspondientes propiedades del operador de Kolmogorov.

Si $\phi(q, t)$ es una solución de la ecuación “hacia atrás” (*Backward*) de **F-P**, es decir,³⁷

$$\begin{aligned} \partial_t \phi(q, t) &= \left[K_\nu(q, t) \frac{\partial}{\partial q_\nu} + \frac{\epsilon}{2} D_{\nu\mu}(q, t) \frac{\partial^2}{\partial q_\nu \partial q_\mu} \right] \phi(q, t) \\ &\equiv \mathcal{L}(q, \partial_q, t)^+ \phi(q, t), \end{aligned} \quad (4.95)$$

³⁷Esta ecuación *hacia atrás* es de utilidad en el estudio de los tiempos “aleatorios” de pasaje *por primera vez* por una determinada frontera [5]; ver sección (6.6).

entonces su evolución *hacia atrás* en el tiempo se puede obtener mediante la aplicación del operador adjunto de Kolmogorov:

$$\phi(q, t_1) = \mathcal{U}(t_2, t_1)^+ \phi(q, t_2). \quad (4.96)$$

Podemos, entonces, llamar a esta ecuación la condición de compatibilidad adjunta de Kolmogorov.

4.8.3 Evolución en un período de tiempo

Estamos ahora interesados en el problema de autovalores del operador $\mathcal{U}(t+T, t)$. Puesto que el operador de Kolmogorov en general no es autoadjunto, necesitamos hallar un conjunto biortonormal de autofunciones de $\mathcal{U}(t+T, t)$ y su adjunto $\mathcal{U}(t+T, t)^+$; es decir:

$$\mathcal{U}(t+T, t)f_i(q, t) = k_i f_i(q, t) \quad (4.97)$$

$$\mathcal{U}(t+T, t)^+ \phi_i(q, t+T) = k_i \phi_i(q, t+T) \quad (4.98)$$

$$\{\phi_i, f_j\} = \int \phi_i(q, t+T) f_j(q, t) dq = \delta_{i,j}. \quad (4.99)$$

Usando las definiciones (4.85) y (4.91), y las propiedades (4.87)-(4.89) y (4.92)-(4.94), el siguiente lema se prueba inmediatamente:

Lema

Considerando que $f(q, t)$ satisface la compatibilidad de Kolmogorov (4.86) y que $\phi(q, t)$ satisface la compatibilidad adjunta de Kolmogorov (4.96), se infiere que

- (a) Si $f(q, t_0)$ es una autofunción de $\mathcal{U}(t_0+T, t_0)$ con autovalor k , entonces $f(q, t)$ es una autofunción de $\mathcal{U}(t+T, t)$ con el mismo autovalor k para todo t .
Si $\phi(q, t_0+T)$ es una autofunción de $\mathcal{U}(t_0+T, t_0)^+$ con autovalor k , entonces $\phi(q, t+T)$ es una autofunción de $\mathcal{U}(t+T, t)^+$ con el mismo autovalor k para todo t .
- (b) Las autofunciones $f_i(q, t)$ y $\phi_i(q, t)$ tienen la misma estructura de Floquet

$$\begin{aligned} f_i(q, t) &= e^{-\lambda_i t} g_i(q, t) \\ \phi_i(q, t) &= e^{\lambda_i t} \gamma_i(q, t), \end{aligned} \quad (4.100)$$

donde las funciones $g_i(q, t)$ y $\gamma_i(q, t)$ son periódicas en t , es decir,

$$\begin{aligned} g_i(q, t+T) &= g_i(q, t) \\ \gamma_i(q, t+T) &= \gamma_i(q, t), \end{aligned} \quad (4.101)$$

y λ_i deben elegirse de forma tal que los autovalores k_i tengan la forma

$$k_i = e^{-\lambda_i T}.$$

- (c) La integral $\int \phi(q, t+T) f(q, t) dq$ no depende del tiempo t , es decir, el producto escalar $\{\phi, f\}$ en (4.99) está bien definido.

Prueba. (a) Puesto que $\mathcal{U}(t+T, t)$ es periódica en t es suficiente mostrar que para $t_0 + T > t > t_0$:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{U}(t+T, t)f(q, t) &= \mathcal{U}(t+T, t)\mathcal{U}(t, t_0)f(q, t_0) \\
 &= \mathcal{U}(t+T, t_0)f(q, t_0) \\
 &= \mathcal{U}(t+T, t_0+T)\mathcal{U}(t_0+T, t_0)f(q, t_0) \\
 &= \mathcal{U}(t+T, t_0+T)kf(q, t_0) \\
 &= k\mathcal{U}(t, t_0)f(q, t_0) \\
 &= kf(q, t).
 \end{aligned}$$

La prueba para $\phi(q, t)$ se realiza de forma análoga. (b) Sea $k_i = e^{-\lambda_i T}$; entonces $g_i(q, t)$ es periódica en t :

$$\begin{aligned}
 g_i(q, t+T) &= e^{\lambda_i(t+T)}f_i(q, t+T) \\
 &= e^{\lambda_i(t+T)}\mathcal{U}(t+T, t)f_i(q, t) \\
 &= e^{\lambda_i(t+T)}k_i f_i(q, t) \\
 &= e^{\lambda_i t}f_i(q, t) \\
 &= g_i(q, t).
 \end{aligned}$$

La prueba para $\phi_i(q, t)$, nuevamente, es completamente análoga. (c) Sea $t_2 > t_1$; entonces

$$\begin{aligned}
 \int \phi(q, t_1+T)f(q, t_1) dq &= \int (\mathcal{U}(t_2+T, t_1+T)^+ \phi(q, t_2+T)) f(q, t_1) dq \\
 &= \int (\mathcal{U}(t_2, t_1)^+ \phi(q, t_2+T)) f(q, t_1) dq \\
 &= \int \phi(q, t_2+T) (\mathcal{U}(t_2, t_1)f(q, t_1)) dq \\
 &= \int \phi(q, t_2+T)f(q, t_2) dq.
 \end{aligned}$$

Hasta este momento el lema (partes a, b y c) fue, solamente, una conclusión a partir de la periodicidad de nuestro sistema (estructura equivalente al teorema de Floquet [21]). Si ahora tenemos en cuenta que nuestras ecuaciones describen distribuciones de probabilidad de procesos de Markov, podemos aportar las siguientes conclusiones [22]:

(d) Siempre existe el autovalor $k_0 = 1$ ($\lambda_0 = 0$) con autofunción adjunta constante: $\phi_0(q, t) = \gamma_0(q, t) = 1$.

(e) Las autofunciones para otros autovalores tienen integral nula

$$\int f_i(q, t) dq = \int g_i(q, t) dq = 0, \quad \text{para } k_i \neq 1.$$

(f) Si la deriva y la matriz de difusión no son singulares, el autovalor $k_0 = 1$ no es degenerado y su autofunción es la distribución de probabilidad asintótica periódica $P_{\text{as}}(q, t) = f_0(q, t) = g_0(q, t)$.

(g) Todos los otros autovalores tienen módulos menores que 1:

$$|k_i| < 1, \quad \text{es decir, } \mathcal{R}_e[\lambda_i] > 0, \quad \text{para } i = 1, 2, \dots$$

Prueba. (d) Puesto que el propagador es una densidad de probabilidad normalizable se tiene que $\mathcal{U}(t+T, t)^+ 1 = \int P(q', t+T|q, t) dq' = 1$. (e) Puesto que la dinámica de **F-P** conserva la integral tenemos que $\int f_i(q, t+T) dq = \int f_i(q, t) dq = e^{-\lambda_i t} \int g_i(q, t) dq$, pero la periodicidad de $g_i(q, t)$ implica que $\int f_i(q, t+T) dq = e^{-\lambda_i(t+T)} \int g_i(q, t+T) dq = e^{-\lambda_i(t+T)} \int g_i(q, t) dq$. Ambos resultados son posibles sólo si se tiene que $e^{-\lambda_i T} (= k_i) = 1$ ó $\int g_i(q, t) dq = 0$, entonces se deduce que $\int f_i(q, t) dq = 0$. (f) En estas condiciones el sistema aproxima, para $t \rightarrow \infty$, una única distribución³⁸ $P_{as}(q, t)$. Las autofunciones con autovalor 1 son precisamente las funciones periódicas que cumplen (b); pero $P_{as}(q, t)$ es la única de tales funciones (salvo multiplicación por un escalar). (g) Puesto que en estas condiciones toda solución de la dinámica de **F-P** se aproxima asintóticamente a $P_{as}(q, t)$ para $t \rightarrow \infty$, toda otra autofunción debe anularse para $t \rightarrow \infty$; así pues, $|k_i|$ debe de ser menor que 1.

A partir de este momento ordenamos los autovalores en módulo decreciente según: $1 = k_0 > |k_1| > |k_2| > \dots$, es decir, λ_i con parte real creciente. Hasta este momento nada se ha comentado sobre la completitud del conjunto de autofunciones. En verdad, esta afirmación no se puede probar en forma general. Pero las partes (a) y (b) del lema muestran que de la existencia de un conjunto completo de autofunciones para algún valor fijo t_0 , se infiere su existencia para todo t . De aquí en adelante supondremos que tal conjunto completo de autofunciones existe, por lo que las funciones $f_i(q, t)$ y $\phi_i(q, t)$ satisfarán:

$$\begin{aligned} \int \phi_i(q, t+T) f_j(q, t) dq &= \delta_{i,j} \\ \sum_{i=0}^{\infty} \phi_i(q', t+T) f_i(q, t) &= \delta(q' - q). \end{aligned} \quad (4.102)$$

Ahora podemos desarrollar toda función $h(q, t)$ que satisfaga la condición de compatibilidad de Kolmogorov (4.86) en series de autofunciones según

$$h(q, t) = \sum_{i=0}^{\infty} A_i f_i(q, t) = \sum_{i=0}^{\infty} A_i e^{-\lambda_i t} g_i(q, t),$$

donde los coeficientes A_i se pueden obtener en la forma:

$$A_i = \{\phi_i, h\} = \int \phi_i(q, t+T) h(q, t) dq.$$

En particular, el propagador se puede escribir como

$$P(q, t|q_0, t_0) = \sum_{i=0}^{\infty} A_i(q_0, t_0) e^{-\lambda_i(t-t_0)} g_i(q, t), \quad (4.103)$$

donde los coeficientes $A_i(q_0, t_0)$ son periódicos en t_0 .

Ejercicio. Demuestre (4.103) a partir de la periodicidad de $P(q, t|q_0, t_0)$ (4.90) y de la estructura de $g_i(q, t)$ [parte (b) del lema].

³⁸Esta afirmación, se puede probar mediante la definición de una función de Lyapunov [12]. Ver el primer ejercicio optativo de la sección (4.6) o el apéndice B.2 para entender una situación análoga, en el caso de un **pe** estacionario.

4.8.4 Balance detallado periódico

Probar la existencia de un conjunto completo de autofunciones del operador de Kolmogorov es una cuestión abierta. El problema surge porque por un lado la representación diferencial del operador de Kolmogorov involucra el operador de ordenación temporal, el cual es difícil de manejar (todos los operadores involucrados tienen que estar cronológicamente ordenados; por ejemplo, ver referencia [5])

$$\mathcal{U}(t_2, t_1) = \vec{T} \exp \left(\int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(q, \partial_q, s) ds \right),$$

y por otro lado, en la representación integral de este operador (4.85), el núcleo (o sea, el propagador) es en general no simétrico. Para procesos de Markov estacionarios es posible simetrizar el operador de $\mathbf{F-P}$ suponiendo que la condición de balance detallado se cumple. Esta condición establece que para variables pares,³⁹ bajo la inversión temporal $t \rightarrow -t$, se tiene

$$P(x, t|y, 0)P_{\text{est}}(y) = P(y, t|x, 0)P_{\text{est}}(x)$$

($P_{\text{est}}(x)$ es la solución estacionaria del proceso de Markov). Este hecho permite obtener operadores autoadjuntos de $\mathbf{F-P}$ y de Kolmogorov. Además, en estas condiciones el operador simetrizado de $\mathbf{F-P}$ es *definido seminegativo*, así pues, sus autovalores son números reales negativos, de donde se deduce que los autovalores del operador de Kolmogorov son reales entre 0 y 1.

En el caso no estacionario T -periódico no tenemos una invariancia continua de traslación temporal, pero sí una invariancia discreta $t \rightarrow t+T$. Con una condición *similar* a la condición de balance detallado es posible simetrizar el operador de Kolmogorov. Esta nueva condición es compatible con la invariancia discreta de traslación temporal y la llamaremos condición de balance detallado periódico.

Definición. La condición de balance detallado periódico se cumple si

$$P(x, t+T|y, t)P_{\text{as}}(y, t) = P(y, t+T|x, t)P_{\text{as}}(x, t), \quad \forall x, y, t.$$

Proposición. Si la condición de balance detallado periódico se cumple, el operador de Kolmogorov $\mathcal{U}(t+T, t)$ es autoadjunto bajo el producto escalar

$$\{\eta, \xi\} = \int \eta(x)\xi(x)/P_{\text{as}}(x, t) dx.$$

Prueba.

$$\begin{aligned} \{\eta, \mathcal{U}(t+T, t)\xi\} &= \int \int \eta(x)P(x, t+T|y, t)\xi(y)/P_{\text{as}}(x, t) dx dy \\ &= \int \int P(y, t+T|x, t)\eta(x)\xi(y)/P_{\text{as}}(y, t) dx dy \\ &= \{\mathcal{U}(t+T, t)\eta, \xi\}. \end{aligned}$$

Corolario. Si el balance detallado periódico se cumple, existe un conjunto completo de autofunciones del operador de Kolmogorov $\mathcal{U}(t+T, t)$.

³⁹Aquí los símbolos x o y son equivalentes a q y representa un conjunto $\{q_1, q_2, \dots\}$ de variables pares.

Ejercicio optativo. Considere el operador de Kolmogorov para el caso especial en que el sistema sea estacionario (es decir, la deriva y la matriz de difusión son independientes del tiempo). En general, usando la representación de Dyson para el operador de Kolmogorov [22],

$$\mathcal{U}(t + \tau, t) = \vec{T} \exp \left(\int_t^{t+\tau} \mathcal{L}(q, \partial_q, s) ds \right) = \vec{T} \left\{ \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_t^{t+\tau} dt_1 \int_t^{t_1+\tau} dt_2 \cdots \right. \\ \left. \cdots \int_t^{t_{n-1}+\tau} dt_n \mathcal{L}(q_\mu, \partial_\mu, t_1) \mathcal{L}(q_\mu, \partial_\mu, t_2) \cdots \mathcal{L}(q_\mu, \partial_\mu, t_n) \right\},$$

y el hecho de que para procesos estacionarios \mathcal{L} es independiente del tiempo, pruebe que si $\mathcal{U}(t + \tau, t)$ es simetrizable, entonces también lo será $\mathcal{L}(q_\mu, \partial_\mu)$. Esto es equivalente a establecer que con la condición de balance detallado el operador de $\mathbf{F-P}$ admite un conjunto completo de autofunciones. Entonces el balance detallado también se puede formular en términos de la simetrización del operador de $\mathbf{F-P}$, es decir:

$$\{\phi, \mathcal{L}\psi\} = \{\mathcal{L}\phi, \psi\}, \quad (4.104)$$

bajo el producto escalar $\{\eta, \xi\} = \int \eta(x) \xi(x) / P_{\text{est}}(x) dx$. Entonces, si el sistema es estacionario y la ecuación de $\mathbf{F-P}$ satisface el principio de balance detallado, muestre que $P_{\text{est}}(x) \equiv g_0(x)$ (autofunción con autovalor $k_0 = 1$).

4.8.5 Mezcla fuerte

El concepto de mezcla fuerte⁴⁰ se introdujo originalmente como una de las varias condiciones que un **pe** debía satisfacer para que sea aplicable el teorema central del límite. Este problema no aparece aquí puesto que, en general, nuestro proceso de Markov no es gaussiano. En esta sección estamos más interesados en el concepto de “mezcla fuerte” como una condición de independencia asintótica.

Sea $q(t)$ una realización del **pe** no estacionario T -periódico. Una función de correlación se define, de manera usual, por

$$\langle \langle q(t)q(t') \rangle \rangle = \langle q(t)q(t') \rangle - \langle q(t) \rangle \langle q(t') \rangle, \quad (4.105)$$

donde el símbolo $\langle \cdots \rangle$ representa el promedio en ensemble (ver capítulo 3). Por lo general lo que suele interesar es el cálculo de la función de correlación en el límite de tiempos largos, es decir, mediante el uso de la distribución asintótica, $P_{\text{as}}(q, t)$, para construir la densidad de probabilidad conjunta (asintótica) de 2-tiempos [necesaria para el cálculo de (4.105)]. Entonces el segundo momento (asintótico) de 2-tiempos está dado por⁴¹

$$\langle q(t)q(t') \rangle_{\text{as}} = \int \int q q' P(q', t' | q, t) P_{\text{as}}(q, t) dq dq',$$

donde, sin pérdida de generalidad, hemos elegido $t' \geq t$. Podemos considerar la función de correlación como una función de las variables t y $\tau = t' - t$. Ahora bien, usando la representación del propagador en autofunciones del operador de Kolmogorov obtenemos:

$$\langle \langle q(t + \tau)q(t) \rangle \rangle_{\text{as}} = \sum_{i=1}^{\infty} e^{-\lambda_i \tau} B_i(t, \tau), \quad (4.106)$$

⁴⁰En inglés, *Strong mixing*.

⁴¹Como en las secciones previas, dq representa un conjunto n -dimensional de diferenciales.

donde las funciones

$$B_i(t, \tau) = \int \int q q' A_i(q, t) g_i(q', t + \tau) g_0(q, t) dq dq' \quad (4.107)$$

son periódicas en t y τ .

Ejercicio optativo. Demuestre (4.107) a partir del lema probado.

La función de correlación (4.106) es una función oscilatoria decreciente de τ para todo valor fijo t , la cual tiende a cero cuando $\tau \rightarrow \infty$. Este hecho prueba el siguiente corolario.

Corolario. Todo proceso de Markov no estacionario T -periódico caracterizado por una deriva y una matriz de difusión no singular es de mezcla fuerte (*Strong Mixing*).

Función de correlación para τ grande

Si ordenamos los autovalores del operador de Kolmogorov en forma decreciente, $1 = k_0 > |k_1| > |k_2| > \dots$, y retenemos solamente los sumandos dominantes, en la serie (4.106) obtenemos, para la correlación asintótica

$$\langle \langle q(t + \tau) q(t) \rangle \rangle_{\text{as}} \approx e^{-\lambda_1 \tau} B_1(t, \tau). \quad (4.108)$$

Entonces, luego de un período de tiempo, la función de correlación (como función de τ) es amortiguada por el factor $k_1 = e^{-\lambda_1 T}$. Es decir, el primer autovalor del operador de Kolmogorov, menor que 1, caracteriza la pendiente del decaimiento de $\langle \langle q(t + \tau) q(t) \rangle \rangle_{\text{as}}$ como función de τ .

Excursus. Se puede ver que el autovalor k_1 generaliza el concepto de tiempo de escape, $\tau_K \approx \lambda_1^{-1}$, desde un atractor para sistemas markovianos no estacionarios periódicos [22]. En el caso de tratarse de un proceso estacionario, el tiempo τ_K es el tiempo de activación de Kramers [5].

Función de Lyapunov

Otro objeto interesante que da información sobre la evolución dinámica de un proceso markoviano no estacionario T -periódico, es la función de Lyapunov. Tradicionalmente esta función se introdujo para analizar el decaimiento de la preparación inicial de un sistema estacionario.⁴²

Considere el sistema preparado en el punto q_0 en cierto instante t_0 . En este caso la función de Lyapunov está definida por⁴³

$$\mathcal{H}(t) = \int P(q, t | q_0, t_0) \ln \left(\frac{P(q, t | q_0, t_0)}{P_{\text{as}}(q, t)} \right) dq.$$

Es posible probar [12] que para todo q_0 la función $\mathcal{H}(t)$ es no negativa decreciente. Es decir, el acercamiento desde la preparación inicial del sistema (en el punto q_0) al estado asintótico $P_{\text{as}}(q, t)$ está caracterizado por $\mathcal{H}(t)$.

Nuevamente, si usamos un desarrollo en autofunciones del operador de Kolmogorov y tomamos solamente el comportamiento dominante del decaimiento, se observa lo siguiente:

⁴²Este hecho ya fue comentado cuando se planteó el problema de la irreversibilidad al principio del capítulo.

⁴³Note que esta definición es independiente de la dimensión, es decir, del número de elementos del conjunto $\{q_\nu\}$. Para probar que $\mathcal{H}(t)$ es una función de Lyapunov se procede de manera análoga a como se presenta en la sección (4.6) y en el apéndice B.2.

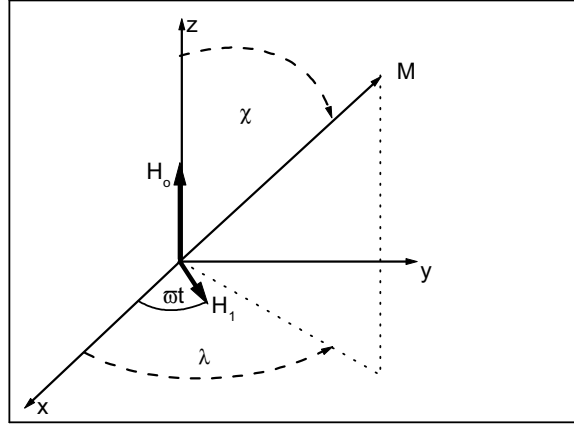


Figura 4.2: Configuración de campo total aplicado, $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1(t)$, sobre el momento magnético \mathbf{M} .

Corolario. En el régimen de tiempos largos la función de Lyapunov $\mathcal{H}(t)$ es oscilatoria decreciente y decae en cada período de tiempo en un factor $(k_1)^2$.

Su prueba se deja como ejercicio para el lector. Note que en el régimen asintótico el decaimiento de la función de correlación es más lento que el decaimiento de la función de Lyapunov.

Excursus. (Resonancia magnética.) Considere una partícula monodominio con momento magnético uniforme \mathbf{M} de magnitud M_s (cuya variación con la temperatura puede ser despreciada), en presencia de un campo externo constante \mathbf{H}_0 . Si la orientación instantánea de \mathbf{M} está descrita por los ángulos $\theta \equiv \theta(t)$ y $\phi \equiv \phi(t)$ de forma tal que las componentes del momento magnético son $M_x = M_s \sin \theta \cos \phi$, $M_y = M_s \sin \theta \sin \phi$ y $M_z = M_s \cos \theta$, considere a partir de la *ede* de Brown-Gilbert [ver sección (3.19.1)] el operador \mathcal{L} de \mathbf{F} - \mathbf{P} asociado [23]. En este caso, y mediante el principio de balance detallado, es posible relacionar la intensidad de las fluctuaciones térmicas con el parámetro de disipación del modelo [ver (4.51)]. Por otro lado, si además del campo magnético \mathbf{H}_0 está presente un campo rotante de radiofrecuencia $\mathbf{H}_1 = \mathbf{H}_1(t)$ (perpendicular a \mathbf{H}_0), es de interés estudiar en estas condiciones de no equilibrio el comportamiento del sistema magnético; es decir: sus funciones de correlación, absorción de energía, tiempos característicos de relajación (paralelo y perpendicular a la dirección de \mathbf{H}_0), etc. Para este modelo se obtiene un operador de \mathbf{F} - \mathbf{P} modulado periódicamente en el tiempo. Considere, por ejemplo, la configuración total de campo magnético aplicado: $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1(t) = \hat{\mathbf{x}}H_1 \cos(\omega t) + \hat{\mathbf{y}}H_1 \sin(\omega t) + \hat{\mathbf{z}}H_0$, que se muestra en la figura (4.2). Usando que $V(\theta, \phi) = -\mathbf{H} \cdot \mathbf{M}$, compruebe que es posible separar el operador de \mathbf{F} - \mathbf{P} en la forma $\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \mathcal{K}_1$, donde \mathcal{L}_0 es el operador de \mathbf{F} - \mathbf{P} para el problema con campo \mathbf{H}_0 ; mientras que $\mathcal{K}_1 = \mathcal{K}_1(t)$ es un término de deriva, periódico en

el tiempo, dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_1 = & \frac{-H_1 M_s}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \{ \sin \theta [(h' \cos \theta \cos (\phi - \omega t) + g' \sin (\phi - \omega t))] \} - \\ & - \frac{H_1 M_s}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \{ (g' \cos \theta \cos (\phi - \omega t) - h' \sin (\phi - \omega t)) \}. \end{aligned}$$

Entonces, a partir de la teoría de autovalores del operador de Kolmogorov es posible caracterizar este sistema markoviano no estacionario 2π -periódico.

Excursus. (Escalones de Shapiro.) Si en un circuito eléctrico RSJ [es decir, la juntura Josephson caracterizada por la ecuación (4.56)] se considera que la corriente aplicada I tiene además del término dc una parte alterna $I = I_{dc} + I_{ac} \cos(\omega t)$, el circuito RSJ se puede estudiar en términos de la frecuencia ω de la corriente alterna aplicada; dando así lugar al fenómeno de “cerrado” o “bloqueo” de la fase ϕ [24]. Este hecho conduce a que el gráfico de la corriente I_{dc} en función de la diferencia de potencial V muestre una estructura escalonada. Es decir, estos escalones se producen si el promedio en un ciclo de la variación de la fase iguala a un número entero de la frecuencia externa $\langle \dot{\phi} \rangle = n\omega$. Si ahora tenemos en cuenta las fluctuaciones térmicas, la evolución de la fase está gobernada por la ede (4.57). Entonces estamos en presencia de un proceso markoviano no estacionario 2π -periódico. En este caso la diferencia de potencial viene dada por

$$\frac{V}{RI_0} = \langle \dot{\phi} \rangle = \frac{1}{\Gamma} \int_0^\Gamma dt \int_0^{2\pi} \dot{\phi} P_{as}(\phi, t) d\phi, \quad \Gamma = 2\pi/\omega.$$

De aquí se puede observar que los escalones de Shapiro son redondeados cuando la temperatura es distinta de cero [25].

Excursus. (Resonancia estocástica.) El concepto de “Resonancia Estocástica” se introdujo para describir la coincidencia de dos tiempos característicos en un sistema estocástico multiestable modulado periódicamente en el tiempo. Una de esas escalas es el tiempo establecido por el período de la modulación externa: $2\pi/\omega$; la otra es el tiempo “entre saltos” inducido por las componentes estocásticas del sistema (por ejemplo, el tiempo de activación de Kramers τ_K). Originalmente este concepto fue introducido para procesos markovianos pero también es posible generalizarlo a sistemas no markovianos. Obviamente en estos casos se introduce la competencia con una tercera escala de tiempo: la memoria no Markoviana. Es interesante acotar que el término “Resonancia Estocástica” fue originalmente introducido en un esfuerzo por descubrir los mecanismos que explicaran el período de ocurrencia de las eras glaciales en el planeta Tierra [26]. Existen muchas técnicas matemáticas para estudiar este tipo de procesos markovianos no estacionarios 2π -periódicos. En particular, es posible analizar eficientemente este fenómeno en el contexto de la integral de caminos [27].

Bibliografía

- [1] L.E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, Second Edition, Austin, Edward Arnold Publ. Ltd. (1992).
- [2] I. Prigogine, *Las Leyes del Caos*, Barcelona, Crítica, Grijalbo Mondadori S.A. (1997).
- [3] N.G. van Kampen, *Views of a Physicist, Selected Papers of N.G. van Kampen*, Ed. P.H.E. Meijer, Singapore, World Scientific (2000).
- [4] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, Berlin, Springer-Verlag (1984).
- [5] N.G. van Kampen, *Stochastic Process in Physics and Chemistry*, 2dn Edition, Amsterdam, North-Holland (1992).
- [6] L. Onsager, Phys. Rev. **37**, 405, (1931).
- [7] G. Nicolis and I. Prigogine, *Self-Organization in Nonequilibrium Systems*, New York, Wiley (1977).
- [8] R.P. Feynman, R.B. Leighton and M. Sands, *The Feynmann Lectures on Physics, Vol. 2*, Bogotá, Fondo Educativo Interamericano, Addison-Wesley Publishing Company (1972).
- [9] R.L. Stratonovich, *Topics in the Theory of Random Noise, Vols. 1 and 2*, New York, Gordon and Breach (1963).
- [10] C.W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods*, Berlin, Springer-Verlag (1983).
- [11] J.L. Lebowitz and P.G. Bergmann, Ann. Physik **1**, 1, (1957).
- [12] M.O. Cáceres, A. Becker and L. Kramer, Phys. Rev. **A 43**, 6581, (1991).
- [13] E.P. Wigner, J. Chem. Phys. **22**, 1912, (1954).
- [14] S.R. de Groot and N.G. van Kampen, Physica **21**, 39, (1954).
- [15] R. Graham, *Springer Tracts in Modern Physics*, Berlin, Springer (1973).
- [16] C.P. Enz, Physica **A 89**, 1, (1977).
- [17] R. Graham, Z. Physik **B 26**, 397, (1977).
- [18] Z. Schuss, *Theory and Applications of Stochastic Differential Equations*, New York, Wiley (1980).

- [19] R. Graham and T. Tél, Phys. Rev. **A 31**, 1109, (1985).
- [20] W. Horsthemke and R. Lefever, *Noise-Induced Transitions*, Berlin, Springer-Verlag (1984).
- [21] J.H. Shirley, Phys. Rev **B 138**, 979, (1965).
- [22] A. Becker, M.O. Cáceres and L. Kramer, Phys. Rev. **A 46**, R4463, (1992); idem, Chaos Solitons and Fractals **6**, 27, (1995).
- [23] W.F. Brown, Phys. Rev. **130**, 1677, (1963).
- [24] B. Ya. Shapiro, I. Dayan, M. Gitterman and G. Weiss, Phys. Rev. **B 46**, 8349, (1992).
- [25] A.K. Chattah, C.B. Briozzo, O. Osenda and M.O. Cáceres, Mod. Phys. Lett. **B 10**, 1095, (1996).
- [26] R. Benzi, A. Sutera and A. Vulpiani, J. Phys. A Math. and Gen. **14**, 453, (1981).
- [27] A.K. Chattah, C.B. Briozzo, O. Osenda and M.O. Cáceres, Mod. Phys. Lett. **B 10**, 1085, (1996).

Apéndice H

Fractales

H.1 Objetos autosimilares

El monumental trabajo de B.B. Mandelbrot,¹ generó una innumerable cantidad de investigaciones a partir del concepto de dimensión fractal. No pretendemos hacer aquí una introducción al estudio de tan vasto y complejo tema de investigación, sino dar los elementos mínimos necesarios para motivar al lector en el estudio de este tema tan apasionante.²

Un objeto es autosimilar si está formado por partes que son *similares* al todo. Los objetos autosimilares se pueden “construir” mediante reglas iterativas o k generaciones determinísticas a partir de un “generador” inicial dado. En general, si amplificamos [agrandamos] parte de la generación k -ésima, encontraremos el mismo objeto de la generación $k - 1$. El ejemplo más simple es el conjunto de Cantor. En la figura (H.1) se muestran 4 generaciones de dicho conjunto. Así, por ejemplo, si en la generación $k = 2$ amplificamos la parte derecha del conjunto de Cantor en un factor de 3, vemos que se obtiene *exactamente* el mismo objeto que el de la generación $k = 1$. Éste es un típico fractal determinista.³

Por otro lado, en la naturaleza existen objetos aleatorios que presentan características autosimilares. A este tipo de objetos se les llama fractales aleatorios y serán descritos, brevemente, en la próxima sección.

Para caracterizar un objeto autosimilar es necesario primero dar algunas definiciones. Llamamos d_E a la mínima dimensión euclidiana —del espacio— en donde podemos “empotrar” este “objeto” o fractal.⁴ En un espacio euclidiano el hipervolumen $V(l)$ de un objeto arbitrario se puede “medir” cubriéndolo con “cajas” lineales de tamaño l . Es decir, necesitamos $N(l)$ “cajas” para cubrir un objeto dado y poder así medir $V(l)$, o sea:

$$V(l) = N(l) l^{d_E}.$$

Puesto que el hipervolumen no puede depender de un cambio de unidad, en general podemos

¹Ver, por ejemplo, el tratado *The Fractal Geometry of Nature*, New York, W.H. Freeman (1982).

²Otros libros que también pueden consultarse para estudiar experimentos y simulaciones numéricas en el contexto de la geometría fractal son: *Fractals*, J. Feder, N.Y., Plenum Press (1988); *The Science of Fractal Images*, Eds. Heinz-Otto Peitgen and Dietmar Saupe, Berlin, Springer-Verlag (1988).

³Muchas veces a estos objetos se les llama “Monstruos”, quizás por su intrínseca hermosura matemática.

⁴En inglés se dice: *Embedding dimension* d_E .

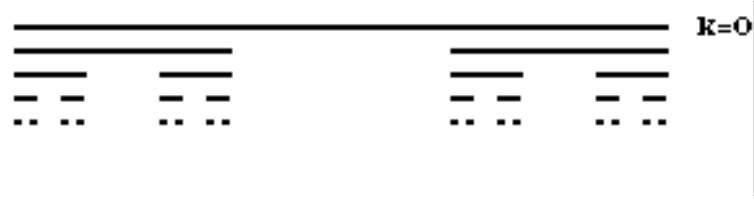


Figura H.1: Conjunto de Cantor; su dimensión fractal es $d_f = 0,639 \dots$. La línea continua corresponde a la generación $k = 0$, la siguiente a $k = 1$ y así sucesivamente.

esperar que $N(l) \sim l^{-d_E}$. Sin embargo, para objetos fractales se propone:

$$N(l) \sim l^{-d_f}. \quad (\text{H.1})$$

Si se cumple que $d_f < d_E$, decimos que tal objeto es un fractal.⁵ Entonces a partir de (H.1) se infiere —luego de tomar el logaritmo— que

$$d_f = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{\ln N(l)}{\ln(1/l)}$$

corresponde a la dimensión crítica de Hausdorff-Besicovitch.⁶

Ejemplo. (Conjunto de Cantor.) Consideremos el fractal caracterizado en la figura (H.1). Se observa que para pasar de la generación k a la generación $k + 1$ el factor de escala de un segmento arbitrario es $l = 1/3$ y allí el número de objetos autosimilares es $N(l) = 2$; entonces $d_f = \ln 2 / \ln 3 = 0,639 \dots$. Ahora bien, puesto que $d_f < 1$, se deduce que d_f es su dimensión fractal.

Ejercicio. (Generador triangular de Koch.) Consideremos el fractal caracterizado en la figura (H.2). Es decir, en cada iteración se reemplaza un segmento por el “generador” que aparece en la iteración $k = 1$. Se observa que en la generación k la escala es $l_{(k)} = 3^{-k}$ y el número total de objetos autosimilares es $N(l_{(k)}) = 4^k$. Luego, el “largo” total de la curva en la generación k se puede calcular usando que $k = -\ln l_{(k)} / \ln 3$, es decir:

$$\begin{aligned} L(l_{(k)}) &= N(l_{(k)}) l_{(k)} = \left(\frac{4}{3}\right)^k = \left(\frac{4}{3}\right)^{-\ln l_{(k)} / \ln 3} = \exp \left(\ln \left[\left(\frac{4}{3}\right)^{-\ln l_{(k)} / \ln 3} \right] \right) \\ &= \exp \left(\left[\frac{-\ln l_{(k)} \ln(4/3)}{\ln 3} \right] \right) = \exp \left(\left[\ln(l_{(k)})^{-\ln(4/3)/\ln 3} \right] \right) = (l_{(k)})^{1-d_f}. \end{aligned}$$

Donde $d_f = \ln 4 / \ln 3 = 1,2628 \dots < 2$ es su dimensión fractal. Claramente, en el límite $l_{(k)} \rightarrow 0$ la longitud total: $L(l_{(k)}) = N(l_{(k)}) l_{(k)}$, no es una cantidad útil. Muestre —de forma análoga— que $N(l_{(k)}) = l_{(k)}^{-d_f}$.

Ejemplo. (Generador cuadrado de Koch.) Consideremos el fractal de la figura (H.3). Es decir, en cada iteración se reemplaza un segmento por el “generador” que aparece en la

⁵En general se tiene $d_T < d_f < d_E$, donde d_T es la dimensión topológica del objeto en estudio. Es decir, $d_T = 0$ para un conjunto de puntos desconectados; $d_T = 1$ para una curva; $d_T = 2$ para una superficie; $d_T = 3$ para un cuerpo sólido.

⁶Ver referencia en la nota (1).

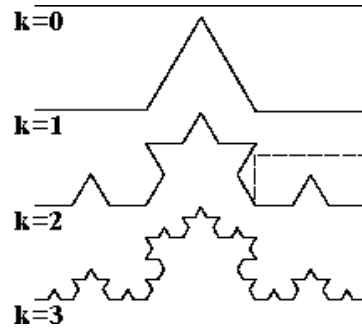


Figura H.2: Curva de Koch con generador triangular; su dimensión fractal es $d_f = 1,2628 \dots$.

iteración $k = 1$. Se observa que el factor de escala es $l = 1/3$ y $N(l) = 9$, entonces $d_f = \ln 9 / \ln 3 = 2$. En este caso no obtenemos una dimensión fraccionaria, pero sí mayor que la topológica $d_T = 1$.

Pasemos ahora a mostrar ejemplos de fractales donde la dimensión topológica del objeto en estudio es una superficie, o un cuerpo sólido. Las “carpetas” de Sierpinski, cuyos generadores son superficies agujereadas, son ejemplos típicos de superficies fractales.

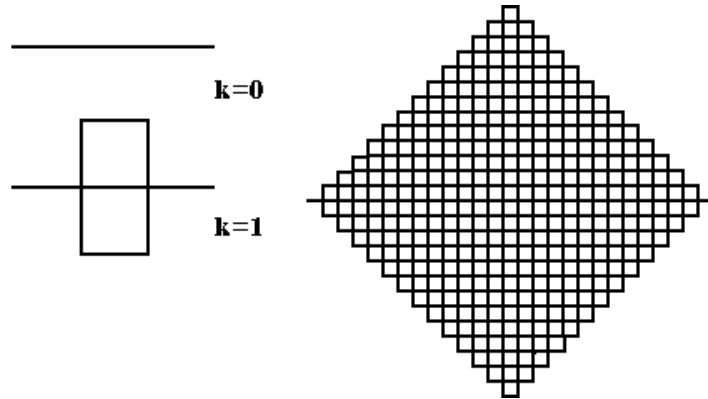


Figura H.3: Curva de Koch con generador cuadrado; en este caso $d_f = 2$.

Ejemplo. (Carpeta triangular de Sierpinski.) Consideremos el fractal caracterizado en la figura (H.4). Es decir, en cada iteración se reemplaza una “superficie” triangular por el “generador” que aparece en la iteración $k = 1$. Se observa que para pasar de la generación k a la generación $k + 1$ el factor de escala es $l = 1/2$ y $N(l) = 3$, entonces $d_f = \ln 3 / \ln 2 = 1,585 \dots < 2$ es su dimensión fractal.

Ejemplo. (Carpeta de Vicsek.) Consideremos la superficie fractal caracterizada en la

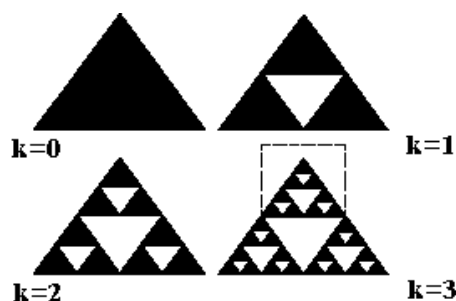


Figura H.4: Carpeta triangular de Sierpinski, su dimensión fractal es $d_f = 1,585 \dots$.

figura (H.5). En cada iteración se reemplaza una “superficie” cuadrada por el “generador” que aparece en la iteración $k = 1$. Se observa que para pasar de la generación k a la generación $k + 1$ el factor de escala es $l = 1/3$ y $N(l) = 5$. Entonces $d_f = \ln 5 / \ln 3 = 1,4649 \dots < 2$ es su dimensión fractal.

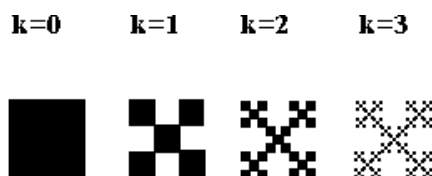


Figura H.5: Carpeta de Vicsek; su dimensión fractal es $d_f = 1,4649 \dots$.

Ejercicio. (Cuerpo sólido de Sierpinski.) Considere la carpeta cuadrada de Sierpinski que se muestra en la figura (H.6). Se observa que para pasar de la generación k a la generación $k + 1$ el factor de escala es $l = 1/3$ y $N(l) = 8$; entonces $d_f = \ln 8 / \ln 3 = 1,8927 \dots$. A partir de este fractal “superficial” construya su generalización para un cuerpo sólido fractal, muestre en ese caso que la dimensión fractal del objeto generado es mayor que 2 y está dada por $d_f = \ln 10 / \ln 3 < 3$.

H.2 Objetos estadísticamente autosimilares

Hemos mencionado que en la naturaleza aparece de manera natural el concepto de objeto autosimilar aleatorio. Las interfases rugosas, el frente de avance de las llamas, los perfiles de una costa [ver el mapa del sur de Chile, por ejemplo], el contorno de las nubes en un día soleado, las ramificaciones de los ríos, etc., son algunos de los muchos ejemplos de objetos

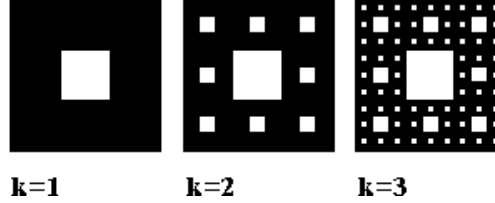


Figura H.6: Carpeta cuadrada de Sierpinski; su dimensión fractal es $d_f = 1,8927 \dots$.

autosimilares con características aleatorias.

En general, si centramos nuestra atención en situaciones estocásticas, es decir, si estudiamos **pe**, podemos introducir fácilmente el concepto de fractal aleatorio clasificando la “rugosidad” de una realización estocástica.

En la sección (3.11), cuando se estudió el espectro de potencia de un **pe** introdujimos la definición de **pe** escalante; precisemos nuevamente este concepto. Por ejemplo, consideremos la probabilidad condicionada del proceso difusivo de Wiener $P[X(t) | X(t_0)]$. En este caso es fácil verificar que se cumple la relación

$$P[\Lambda^{1/2} X(\Lambda t) | \Lambda^{1/2} X(\Lambda t_0)] = \Lambda^{-1/2} P[X(t) | X(t_0)] , \forall \Lambda > 0.$$

Como ya se comentó en el capítulo 3, esta propiedad también se puede analizar en términos de su correspondiente función característica:

$$G_X\left(\frac{k}{\Lambda^{1/2}}, \Lambda t\right) = G_X(k, t).$$

Es decir —en distribución— las realizaciones del **pe** cumplen una invariancia de escala. Este hecho lo hemos denotado diciendo que el **pe** $\mathbf{X}(t)$ satisface la relación de escala:

$$\mathbf{X}(\Lambda t) / \Lambda^{1/2} = \mathbf{X}(t).$$

Éste es el punto de partida para calcular “mecánicamente” la dimensión fractal asociada al “dibujo” de una realización de un **pe**. Sin embargo, por la naturaleza misma de fractal aleatorio, la transformación de escala en el eje X es diferente de la transformación de escala en el eje temporal; como consecuencia de esto, la definición de dimensión fractal —de un objeto estadísticamente autosimilar— no es única.⁷ Para mostrar este hecho procedemos de la siguiente forma. Primero supongamos que para un proceso arbitrario se cumple la relación de escala

$$\mathbf{X}(\Lambda t) / \Lambda^H = \mathbf{X}(t). \quad (\text{H.2})$$

Calculemos la dimensión fractal asociada con la operación de “cubrir” una realización del **pe** $\mathbf{X}(t)$ que satisface la relación de escala (H.2). Una posible manera de calcular esta

⁷Ver referencia en la nota (1), o B.B. Mandelbrot, *Physica Scripta* **32**, 257, (1985).

cantidad es “contando” el número de paralelogramos [de alto mínimo a y ancho mínimo τ , en la dirección de los ejes X, t respectivamente] necesarios para cubrir completamente la realización. Supongamos que \mathcal{T} es el tiempo de duración de la realización, entonces necesitamos $\mathcal{T}/\Lambda\tau$ segmentos para cubrir todo el eje temporal. Por otro lado, usando (H.2) se observa que el rango en el intervalo temporal $\Lambda\tau$ es del orden (tomando $\mathbf{X}(0) = 0$)

$$\Delta\mathbf{X}(\Lambda\tau) \equiv \mathbf{X}(\Lambda\tau) - \mathbf{X}(0) = \Lambda^H \Delta\mathbf{X}(\tau). \quad (\text{H.3})$$

Es decir, en cada segmento $\Lambda\tau$ el rango de variación en el eje X está caracterizado por la cantidad $\Delta\mathbf{X}(\Lambda\tau) = \Lambda^H \Delta\mathbf{X}(\tau)$, de donde se deduce que necesitamos “apilar” $\Lambda^H \Delta\mathbf{X}(\tau)/\Lambda a$ “cajas” de alto Λa para cubrir tal variación. Entonces el número total de “cajas” necesarias para cubrir este objeto viene dado por

$$\mathcal{N}(\Lambda, a, \tau) = \frac{\Lambda^H \Delta\mathbf{X}(\tau)}{\Lambda a} \times \frac{\mathcal{T}}{\Lambda\tau} \sim \Lambda^{H-2}.$$

Luego, de (H.1) se infiere que la dimensión fractal es

$$D_B = 2 - H < 2. \quad (\text{H.4})$$

Note que en este análisis hemos usado el argumento de que las “cajas” mínimas son pequeñas con respecto a la duración temporal \mathcal{T} y el rango de la realización, es decir $\tau \ll \mathcal{T}$ y $a \ll \Delta\mathbf{X}(\tau)$, respectivamente. Si éste no es el caso, o sea, si $a \sim \Delta\mathbf{X}(\tau)^2$ sólo es necesario poner una caja para cubrir el rango en un segmento $\Lambda\tau$, de donde se deduce que $\mathcal{N}(\Lambda, a, \tau) = 1 \times \mathcal{T}/(\Lambda\tau) \sim \Lambda^{-1}$, entonces $D = 1$. Es decir, en este caso no se obtiene una dimensión fractal. Entonces este cálculo sólo tiene sentido en el límite de alta resolución, o sea que la dimensión fractal D_B es una cantidad local.⁸ Otra posibilidad es calcular el largo de la curva en lugar de calcular el cubrimiento de la realización. Para tal efecto procedemos de otra forma.

Para objetos autosimilares aleatorios, como las costas en un mapa, suele usarse una “regla” de *longitud* δ para calcular el largo total de la realización. Es decir, la contribución a la longitud total medida *sobre* la realización del **pe** $\mathbf{X}(t)$ se efectúa con una “regla” de longitud δ para abarcar una porción caracterizada por el segmento temporal $\Lambda\tau$; en este caso se tiene —por el teorema de Pitágoras— que

$$\delta = \sqrt{(\Lambda\tau)^2 + \left(\frac{\Delta\mathbf{X}(\Lambda\tau)}{a}\right)^2} = \sqrt{(\Lambda\tau)^2 + \Lambda^{2H} \left(\frac{\Delta\mathbf{X}(\tau)}{a}\right)^2}. \quad (\text{H.5})$$

Observe que en el segundo término de esta expresión hemos usado (H.3); aquí a mide la unidad en el eje X . Luego, en el límite de a pequeño se infiere que el término dominante está dado por

$$\delta \sim \Lambda^H. \quad (\text{H.6})$$

Note que en este caso, cuando colocamos “la regla”, de longitud δ , *sobre* la realización, ésta queda casi “paralela” al eje X . Entonces el número de reglas, de *longitud* δ , necesarias para medir el objeto viene dado por

$$\mathcal{N}(\delta) = \frac{\mathcal{T}}{\Lambda\tau} \sim \Lambda^{-1} \sim \delta^{-1/H},$$

⁸En inglés a esta dimensión fractal se le llama *Box dimension* [dimensión de caja].

donde hemos usado (H.6). Nuevamente, usando (H.1) se deduce que la dimensión fractal de “compás” tiene el valor⁹

$$D_D = \frac{1}{H}. \quad (\text{H.7})$$

Si la escala en el eje X no es pequeña, o sea, $\Delta \mathbf{X}(\Lambda \tau) \ll a$, el segundo término en (H.5) no es el dominante; entonces $\delta \sim \Lambda^1$, con lo cual $\mathcal{N}(\delta) \sim \Lambda^{-1} \sim \delta^{-1}$, de donde se deduce que la dimensión aparente es $D = 1$. Es decir, para un mismo objeto autosimilar aleatorio aquí hemos presentado al menos tres dimensiones diferentes: $D_B = 2 - H$, $D_D = 1/H$ y $D = 1$. En general, dado un objeto estadísticamente autosimilar y fijado el mecanismo de “medida”, el interés está en representar gráficamente el $\ln N(l)$ en función de $\ln(l)$ para calcular así su pendiente (dimensión fractal).

Ejemplo. (Proceso browniano.) El proceso de Wiener cumple una relación de escala de la forma (H.2) con $H = 1/2$; entonces, usando (H.4) y (H.7) obtenemos las siguientes dimensiones fractales: $D_B = 3/2$, $D_D = 2$. En la sección (3.6.1) se comentó que B.B. Mandelbrot introdujo una generalización del proceso de Wiener, que llamó *movimiento browniano fraccionario*.¹⁰ La ventaja de este proceso es que permite variar la rugosidad de la realizaciones controlando su correlación. En particular, B.B. Mandelbrot acuñó el uso del exponente $H \in (0, 1)$ para caracterizar la relación de escala (H.2); cuando $H \sim 0$ la realización es extremadamente rugosa [el proceso parece un ruido blanco], mientras que para $H \sim 1$ la realización es suave, el caso $H = 0,5$ corresponde al proceso difusivo normal. En la figura (H.7) se muestran distintas realizaciones del proceso fBm para tres valores de H , obteniéndose así distintas dimensiones fractales. También es posible comprobar que la dispersión del proceso fBm está caracterizada por el comportamiento $\langle X(t)^2 \rangle \propto t^{2H}$. Por otro lado, la correlación persistente-antipersistente está caracterizada por $\langle -X(-t)X(t) \rangle / \langle X(t)^2 \rangle = 2^{2H-1} - 1$.

Ejercicio optativo. (Proceso de Lévy.) La distribución de probabilidad condicionada del proceso de Lévy¹¹ está caracterizada por la función característica

$$G_X(k, t) \propto \exp(-Ct |k|^\mu), \quad \forall t > 0,$$

donde $C > 0$ es una constante y $\mu \in (0, 2]$. El caso $\mu = 2$ corresponde a un proceso gaussiano, $\mu = 1$ corresponde a la distribución de Cauchy [ver secciones (1.4.2) y (6.2.2)], etc. En general, este proceso cumple una relación de escala de la forma (H.2) con $H = 1/\mu$. Muestre que se pueden definir las siguientes dimensiones fractales para el proceso de Lévy:

$$\begin{aligned} D_B &= 2 - 1/\mu, \quad \forall \mu \in [1, 2] \\ D_D &= \mu, \quad \forall \mu \in (0, 2]. \end{aligned}$$

Note que, dependiendo del valor de μ , no están definidos los momentos del **pe**; sin embargo, sí se pueden calcular momentos fraccionarios. Desafortunadamente este cálculo es no local, razón por la cual su análisis es más difícil. Por ejemplo, suponiendo un dominio positivo para X use

$$\frac{1}{X^{1-\beta}} = \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_0^\infty \xi^{-\beta} e^{-\xi X} d\xi, \quad 0 < \beta < 1,$$

⁹En inglés a la dimensión D_D se le suele llamar *Divider dimension* o *Compass dimension*.

¹⁰En inglés suele denotarse por la sigla *fBm*.

¹¹Ver los *excursus* de las secciones (3.14) y (6.2.3), y nota (33) en la sección (8.5.1).

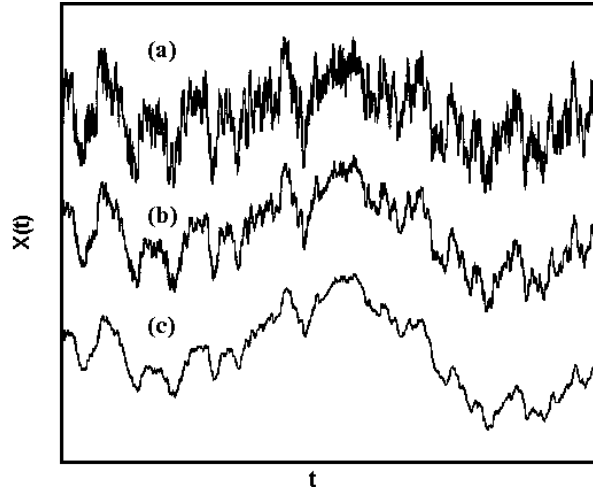


Figura H.7: Realizaciones del proceso fBm para tres valores distintos de H ; en la realización (a) $H = 0,2$; (b) $H = 0,5$ y (c) $H = 0,8$. Entonces, los correspondientes valores para la dimensión fractal de “caja” son (a) $D_B = 1,8$; (b) $D_B = 1,5$ y (c) $D_B = 1,2$.

para demostrar que los momentos fraccionarios se pueden estudiar en términos de la función característica $G_X(k) \equiv \langle e^{ikX} \rangle$, mediante la fórmula

$$\langle X^\beta \rangle \equiv \int_0^\infty X^\beta P(X) dX = \frac{-1}{\Gamma(1-\beta)} \int_0^\infty \xi^{-\beta} \frac{dG_X(k=i\xi)}{d\xi} d\xi.$$

Excursus. (Difusión anómala en redes fractales.) A partir del reconocimiento de que las redes fractales son buenos candidatos para modelar sistemas desordenados, el estudio de la dinámica de un RW *sobre* una estructura fractal ha sido una técnica importante en el análisis de la difusión anómala. Frecuentemente suele caracterizarse el comportamiento asintótico del segundo momento de un RW *sobre* una red no euclidiana (empotrada en dimensión d_E) mediante la introducción de un exponente d_ω , en la forma:

$$\langle r(t)^2 \rangle \sim t^{2/d_\omega}, \quad \text{con } d_E > d_\omega > 2,$$

en el caso euclidiano $d_\omega = 2$. La razón por la cual se obtiene un transporte subdifusivo es que el RW está restringido a un “volumen” reducido en la estructura fractal. Es habitual relacionar la dimensión fractal d_ω con la información topológica y dinámica del RW (representa la dimensión fractal del RW en el sistema desordenado). Existen interesantes conjeturas entre los diferentes exponentes que aparecen en la teoría de difusión anómala sobre redes no euclidianas. Nuevamente la relación de Einstein permite establecer vínculos entre los exponentes críticos estáticos y dinámicos [ver, por ejemplo, el tratado sobre percolación y desorden de A. Bunde and S. Havlin en: *Fractals and Disordered Systems*, Berlin, Springer-Verlag (1991)].

Ejercicio optativo. (Red de Bethe.) La red de Bethe o “árbol” de Cayley es una estructura peculiar que permite estudiar analíticamente problemas no triviales de percolación

en función del número de coordinación z . Esta red no es un fractal,¹² sino que consiste en una estructura —sin lazos— mediante la cual sólo hay un camino para ir desde un nivel¹³ j al p . Para generar esta red procedemos de la siguiente forma. Consideremos un nivel arbitrario, al que llamamos 0, a partir del cual emanan z “ramas” [de longitud unidad], entonces el punto final de cada rama es un nuevo nivel [digamos el 1] y obtenemos así z niveles que constituyen la primera “cáscara” del árbol de Cayley. A partir de cada uno de estos niveles generamos nuevamente $z - 1$ niveles [digamos el 2], de esta manera en la segunda cáscara se tienen $z(z - 1)$ niveles equivalentes, y así sucesivamente. El caso $z = 2$ corresponde a la red euclidiana seminfinita $1D$. Generalice la red de Bethe agregando, ahora, los correspondientes niveles negativos, considere entonces un RW en una red de Bethe infinita con número de coordinación z y obtenga la función de Green de la EM asociada a este modelo homogéneo. Ayuda: use el resultado presentado en el ejercicio optativo [*Transiciones asimétricas*] de la sección (6.3.3).

Ejercicio optativo. (Red “peine”). Una red “peine” es una estructura bidimensional que permite estudiar analíticamente problemas no triviales de difusión anómala. Obviamente esta red no es un fractal, sino que consiste en una estructura peculiar en forma de “peine” en la cual, por ejemplo, sólo hay difusión en el eje x cuando $y = 0$. Para generar una dinámica de Markov sobre esta red peine definimos la siguiente matriz de transición (ver capítulo 6)

$$\begin{aligned}\mathbf{H}_{\text{peine}} &= \mu_x \delta_{y,0} (E_x^+ + E_x^- - 2) + \mu_y (E_y^+ + E_y^- - 2) \\ &\equiv \mu_x \delta_{y,0} \mathbf{H}_x^0 + \mu_y \mathbf{H}_y^0.\end{aligned}$$

Considere ahora la siguiente EM

$$\dot{\mathbf{P}} = \mathbf{H}_{\text{peine}} \cdot \mathbf{P}.$$

Empleando la función de Green del problema en la dirección y :

$$\mathbf{G} = [u\mathbf{1} - \mu_y \mathbf{H}_y^0]^{-1},$$

y usando el término $\mu_x \delta_{y,0} \mathbf{H}_x^0 \cdot \mathbf{P}$ como “fuente” de la solución general, obtenga una expresión para la difusión en el eje x , es decir, la probabilidad:

$$\mathbf{P}(x, 0, t) \equiv \langle x, 0 | \mathbf{P}(t) | 0, 0 \rangle.$$

Observe que asintóticamente $\sum_x \mathbf{P}(x, 0, t) \sim t^{-1/2}$, es decir que $\mathbf{P}(x, 0, t)$ no está normalizada. Calcule el segundo momento del desplazamiento $\langle x(t)^2 \rangle$. Ayuda: empleando las variables de Laplace ($t \rightarrow u$) y Fourier ($x \rightarrow k$) las expresiones suelen ser más fáciles de manejar. Una buena referencia donde se presenta el análisis de un RW de tiempo discreto en este tipo de red se puede ver en: G. Weiss and S. Havlin, *Physica A* 134, 474, (1986). ¿Se podría generalizar una red “peine” para que sí sea una estructura fractal? ¿Qué ocurre si los “dientes del peine” tienen distintas longitudes¹⁴?

¹²Es posible verificar que la dimensión de este objeto es infinita $\forall z > 2$.

¹³Es importante destacar que en esta red no tiene sentido la distancia euclidiana, de ahí que ahora hablamos de nivel j o distancia química $j - p$.

¹⁴La generalización a una red peine con dientes desordenados se presenta en: S. Havlin, J.E. Kleifer and G. Weiss, *Phys. Rev. A* 36, 1403, (1987).

Índice

- Absorción, 209
- Absorción de energía, 157
- Absorción deltiforme, 167
- Acopladas en espacio y tiempo, 250
- Acoplamiento condicionado, 250
- Acoplamiento débil, 261
- Activación (Kramers), 156, 158, 222
- Acumulación (ver Distribución acumulativa), 229
- Acumulativa (función de probabilidad), 8
- Admitancia (ver Susceptibilidad), 180, 320
- Afuera (del dominio), 211, 213
- Aleatoria (variable), 5, 7, 10, 13, 16, 17, 19–26, 28, 32, 59, 64, 68, 76, 99, 195, 203, 207, 208, 213, 227, 232, 247
- Aleatorios (valores), 55, 162, 228
- Alta/s temperatura/s, 268
- Amorfos, 203
- Amortiguamiento (matriz de), 147
- Amplitud de probabilidad, 261
- Amplitudes aleatorias, 62, 162
- Análisis funcional, 108
- Analiticidad, 189, 247
- Angulo/s, 118, 139, 145, 157
- Anisotrópica (red), 234
- Anisotropía, 230, 302
- Anticonmutador/es, 320
- Aproximación de CTRW, 303
- Aproximación de medio efectivo, 228
- Aproximación gaussiana, 99
- Arrastre (ver Deriva), 249
- Asignación térmica (probabilidad), 318
- Asimétrico/a, 202, 222, 234, 282
- Atractores, 149
- Atrapado en un sitio, 241
- Autoadjunto (operador), 150, 154
- Autoconsistente, 107, 233–235, 238, 282
- Autoconsistentes (ecuaciones acopladas), 282
- Autofunciones, 98, 100, 131, 148, 149, 154, 155, 309
- Autosemejanza (ver Autosimilar), 14, 75, 86
- Autosimilar, 75, 191, 321
- Autosimilar (aleatorio), 324
- Autovalor/es, 99, 149, 151, 153, 156, 185, 199, 209, 213, 295
- Autovalor/es (aleatorio/s), 214
- Autovalores (aproximados), 297
- Autovector/es, 185, 199, 209, 295, 318
- Avogadro, 127
- Axiomática (probabilidad), 1
- Baño térmico, 42, 128, 134, 170, 263, 311
- Baja/s temperatura/s, 269
- Balance detallado, 92, 118, 138–141, 143, 144, 147–149, 154, 157, 172, 179, 197, 199
- Balance detallado periódico, 154
- Base (de la posición), 266, 310
- Bayes (regla de), 56, 67, 108
- Bayes (teorema de), 4, 35
- Binomial (probabilidad), 10
- Bloqueo de la fase, 158
- Bochner (teorema de), 10
- Boltzmann, 21, 41, 122, 269
- Boltzmann (principio de), 289, 290, 292
- Boltzmann-Bloch, 267
- Boltzmann-Lorentz, 272
- Braket (notación), 196, 312, 319
- Brillouin (zona de), 16
- Brown R., 183
- Brown-Gilbert (modelo de), 118, 139, 157
- Buen número cuántico, 269

- Cíclicamente (permutar), 266, 316
- Cálculo diferencial estocástico, 101, 137
- Cálculo diferencial fraccionario, 285, 307
- Cadena de Markov, 183, 186, 189, 192, 197, 253, 254
- Cadenas no markovianas, 188, 228, 255, 273
- Calor, 292
- Calor entregado, 292
- Calor específico, 147
- Calor ganado, 49
- Cambio de energía, 291
- Cambio de entropía, 291
- Caminata aleatoria (ver Random walk), 13
- Caminata aleatoria persistente, 272, 283
- Camino libre medio, 127, 268
- Camino alternativo, 257
- Campo de velocidad, 249, 250
- Campo de velocidad turbulento, 249
- Campo eléctrico, 144, 267
- Campo escalar estocástico, 117
- Campo externo, 157, 165
- Campo magnético, 157, 173, 277, 278
- Campo rotante, 157
- Campos estocásticos, 98, 100, 249
- Capacidad calorífica, 44, 46, 51
- Capacitancia, 141
- Capacitancias aleatorias, 205
- Capacitor, 128
- Carga eléctrica, 128, 268
- Carpeta de Sierpinski, 323
- Cauchy (analiticidad), 166
- Cauchy (random walk de), 191, 327
- Causalidad (principio de), 164, 165, 320
- Cavidad electromagnética, 145
- Celdas elementales, 42
- Centros de dispersión, 253
- Centros de localización, 261
- Certeza (distribución de), 36
- Chandrasekhar S., 218
- Chapman-Kolmogorov, 68, 88, 91, 111, 150, 183, 187, 195
- Ciclos químicos, 257
- Cinéticos (coeficientes), 124, 125, 128, 130
- Circuito lineal, 128
- Circuito RCL, 128
- Circuito RSJ, 141, 158
- Clausura (relación de), 319
- Cociente (probabilidad del), 34
- Coeficiente de difusión, 92, 140, 147, 190, 191, 201, 205, 207, 228, 232, 235, 238, 262, 269, 277, 278
- Coeficiente de difusión estático, 237, 275
- Coeficiente de difusión generalizado, 271, 281, 283
- Coeficiente de fricción, 91, 172
- Coeficiente efectivo, 208, 209, 232, 234, 235
- Coeficientes aleatorios, 38
- Coeficientes de transporte, 123, 262, 283
- Coeficientes disipativos, 45, 129
- Coherente, 72
- Cola larga (distribución con), 22, 280
- Colapso, 274
- Colisión, 272
- Compatibilidad de Kolmogorov, 150, 151, 153
- Compleja (variable aleatoria), 36
- Complejo (número), 136, 165
- Complejidad, 149
- Comportamiento difusivo, 193, 242
- Compresibilidad, 46, 47, 51, 147
- Concentración, 238, 282
- Condición inicial, 67, 68, 136, 150, 174, 195, 198, 202, 228, 237, 239, 245, 248, 254, 274, 306
- Condición macroscópica, 309
- Condición potencial, 143, 144, 146–148
- Condición/es absorbente/s, 211, 214, 218, 221
- Condición/es de contorno, 15, 100, 112, 135, 140, 200, 205, 209, 210, 212, 214, 215, 217, 218, 224, 239
- Condición/es periódica/s, 216, 218, 221
- Condición/es reflectante/s, 211, 212, 215, 218, 219
- Condicionada (probabilidad), 3
- Condiciones mixtas, 219
- Conducción por banda, 269
- Conductividad eléctrica, 176, 237, 248, 262, 266–269, 272, 282, 285
- Conductividad estática, 268
- Conductividad iónica, 283

- Configuración/es de desorden, 206, 213, 214, 228, 262
 Conjunto biortonormal, 149, 151, 199, 295
 Conjunto completo, 153, 296, 309
 Conjunto de Cantor, 321
 Conjunto vacío, 3
 Conjuntos (teoría de), 2
 Conmensurable, 192
 Conmutador cuántico, 264, 315
 Conmutador/es, 312, 320
 Conservación de la energía, 291
 Contacto térmico, 290
 Continua (variable aleatoria), 5, 9
 Continuidad, 79
 Contornos de nubes, 324
 Convergencia (media cuadrática), 163
 Convolución de Fourier, 320
 Convolución espacial, 240
 Convolución temporal, 240, 243, 274, 317
 Coordenada espacial, 115
 Coordenadas esféricas (ver Coordenadas polares), 284
 Coordenadas polares, 118, 137, 144
 Correlación, 23, 27, 54, 56, 63, 66, 71, 72, 108, 133, 139, 145, 149, 156, 157, 161, 176, 178
 Correlación asintótica, 73, 156
 Correlación blanca (ver Correlación delta), 83, 116, 118
 Correlación canónica de Kubo, 265, 267, 317
 Correlación de la velocidad, 174, 262, 268, 269, 272, 277, 278
 Correlación delta, 63, 67, 101, 105, 108
 Correlación estacionaria, 179, 268
 Correlación exponencial, 92, 105, 163, 268
 Correlación no blanca, 94
 Correlación simétrica, 320
 Correlación temporal, 56, 135, 138
 Correlaciones en equilibrio, 262
 Correlaciones espaciales, 44
 Corriente alterna, 73, 158
 Corriente de calor, 124
 Corriente de partículas, 124
 Corriente de probabilidad, 118, 140–142, 145
 Corriente disipativa, 142, 144, 145
 Corriente eléctrica, 128, 267, 268
 Corriente no disipativa, 142, 144, 145, 147
 Corriente no nula, 199
 Corriente nula, 140, 215
 Corrientes generalizadas, 123, 124
 Covariante (transformación), 148
 Cuasiestático, 291
 Cubrir (medir), 321, 325
 Cuerda tensa, 52, 54, 89
 Cumulantes, 18, 27, 61, 83, 94, 99, 106, 108, 206
 Curva de equilibrio, 48
 Curva de Koch, 322
 Dímeros en superficies, 257
 Decaimiento oscilatorio, 156
 Definida positiva, 46, 125, 135, 136, 147, 185
 Deformación, 53
 Degeneración (evitando la), 148
 Degenerado (autovalor), 199, 295, 296
 Densidad de estados, 202, 229, 289
 Densidad de probabilidad, 6, 8, 250
 Densidad espectral, 85, 161, 163
 Densidades extremales, 229
 Deriva, 110, 139, 142, 149, 152, 157, 191, 213, 242, 249
 Derivada funcional, 62
 Derivada negativa, 299
 Derivada temporal, 79
 Derivadas parciales, 108, 109, 243
 Desorden, 203, 205–207, 213, 237, 247, 255, 267, 272, 282, 285, 303
 Desorden débil, 238
 Desorden de ligadura, 204, 206–208, 214, 234, 237
 Desorden de sitio, 204, 205, 207, 209, 247
 Desorden dinámico, 249
 Desorden estático, 249
 Desorden fuerte, 208, 235, 283, 307
 Desplazamiento, 266, 269
 Desplazamiento termodinámico, 315
 Desplazamientos transversales, 53
 Determinantes, 185
 Diagonalizar, 30, 184, 209, 295, 296
 Diagramas, 26, 106
 Dicotómico (positivo), 115

- Diferencia (probabilidad de la), 34
- Diferencia de potencial, 128
- Diferencial de entropía, 291
- Diferencial incremental, 195
- Diferenciales de Wiener, 104
- Diferencias finitas, 200
- Difusión, 121, 139, 142, 261
- Difusión anómala, 208, 227, 247, 250, 278, 282, 283, 328
- Difusión clásica, 229
- Difusión limitada, 255
- Difusión-advección, 249
- Difusivo, 190, 192, 242, 243, 327
- Dimensión crítica, 322
- Dimensión de caja, 326
- Dimensión de compas, 327
- Dimensión euclideana, 321
- Dimensión fractal, 15, 86, 281, 321
- Dimensión fractal de RW, 328
- Dimensión topológica, 322
- Dinámica, 73, 128
- Dinámica determinista, 305
- Dinámica helicoidal, 278
- Dinámica lineal, 132
- Dinámica reducida, 311
- Dinámica unitaria, 311, 312
- Dirac (delta de), 6, 8, 9, 21, 75, 80, 81, 85, 101, 109
- Discreta (variable aleatoria), 9, 70
- Disipación, 90, 140, 157, 172, 175, 278, 311
- Disipativo (término), 278
- Dislocaciones, 267
- Dispersión, 8, 114, 115, 191, 251, 253, 272–274
- Dispersión de electrones, 269
- Dispersión de rayos X, 286
- Dispersión del desplazamiento, 262
- Distancia euclidiana, 329
- Distribución (acumulativa), 7, 224
- Distribución canónica, 92, 135, 141, 147, 176, 263, 313
- Distribución de Gibbs, 262
- Distribución estacionaria, 56, 108
- Distribución estadística térmica, 318
- Distribución normal, 32
- Distribución superficial, 118
- Distribuida (idénticamente), 72
- Divergencia, 143, 146, 147
- Dominio discreto, 215
- Dominio finito, 205, 214
- Dominio infinito, 214
- Dominio/s, 5, 7, 59, 72, 135, 140, 195, 211, 212
- Dominios (no negativos), 35
- Dominios fractales, 191
- Doob (teorema de), 86, 89–91
- Dyson (desarrollo de), 155, 302
- Ecuación adjunta, 221
- Ecuación de balance, 196
- Ecuación de Boltzmann, 262
- Ecuación de difusión, 110, 277, 284
- Ecuación de evolución, 243, 307, 311, 316
- Ecuación de Langevin, 101, 108, 110, 140
- Ecuación de onda, 307
- Ecuación del telegrafista, 243, 272, 281, 307, 308
- Ecuación diferencial, 37
- Ecuación diferencial estocástica, 80, 91, 94, 95, 101
- Ecuación integral, 316
- Ecuación Maestra, 69, 116, 195, 227, 243
- Ecuación Maestra de Pauli, 261
- Ecuación Maestra generalizada, 243, 307
- Ecuaciones cinéticas, 262, 272, 311
- Ecuaciones diferenciales, 75
- Efecto túnel, 141, 283
- Einstein (difusión), 90, 93
- Einstein (distribución de), 47, 56, 122, 130, 131
- Einstein (postulado de), 41, 46
- Einstein (relación de), 93, 237, 248, 266, 267, 269, 271–273, 282, 283, 328
- Eléctrico (circuito), 205
- Electrolitos sólidos, 283
- Electrones, 261, 269
- Electrones libres, 267
- Elemento/s de transición, 196, 227, 299, 303
- Elementos del operador, 309
- Elementos diagonales, 196, 232, 261
- Elementos positivos, 184
- Elongación transversal, 52

- Energía, 289
- Energía (disipación), 133, 134, 171, 320
- Energía (distribución), 21
- Energía (elemento diferencial), 289
- Energía (total), 42, 48
- Energía cinética, 52, 133
- Energía de deformación, 55
- Energía interna, 147
- Energía mecánica, 291
- Ensemble, 2, 59, 64, 66, 155, 172, 289, 309, 312
- Ensemble canónico, 313
- Ensemble estacionario, 312
- Ensemble gran canónico, 313
- Ensemble microcanónico, 312
- Ensemble puro, 314
- Entes (complejos), 255
- Entropía, 41, 47, 51, 121, 122, 289, 292
- Entropía (aditividad), 292
- Entropía (incremento), 291
- Entropía (máxima), 124
- Entropía de información, 314
- Entropía estadística, 292
- Equilibrio, 1, 41, 64, 121, 122, 127, 128, 130, 132, 134–136, 138, 144, 147, 161, 164, 169, 176, 290, 315, 316, 318
- Equilibrio termodinámico, 263, 291
- Eras glaciales, 158
- Ergódico, 78, 86, 162, 163, 289
- Escalón (función), 7, 114, 115, 165, 170
- Escala (relación de), 15, 83, 281, 325
- Escalar (cantidad), 59
- Escalas de tiempo, 158
- Escalones de Shapiro, 158
- Escape (tiempos de), 22
- Espacio de Hilbert, 315, 318
- Espacio de las fases, 56, 138, 176, 290, 313
- Espacio de muestra, 1, 183
- Espacio euclidiano, 284
- Espectro de potencia, 83, 86
- Estable (sistema), 42
- Estacionario, 86, 161, 228
- Estadística de equilibrio, 289
- Estado del sistema, 309
- Estado estacionario, 197–199, 212, 216, 261, 295, 298, 305
- Estado estacionario (único), 299
- Estado instantáneo, 315
- Estado limbo, 211
- Estado macroscópico, 289
- Estado/s de no equilibrio, 48, 199, 292
- Estados aislados, 295
- Estados internos, 253, 256, 272, 273, 283
- Estados microscópicos, 289, 290, 292
- Estructura (no separable), 243, 250–252
- Estructura de red, 189, 245
- Estructura de saltos, 241, 243, 281, 303
- Evento (o suceso), 1
- Eventos excluyentes, 2, 3, 5
- Evolución de un CTRW, 242
- Evolución lineal, 122
- Evolución temporal, 59, 319
- Excitaciones, 261
- Expansión de un gas, 121
- Expectación, 1, 6
- Explosiones, 117
- Exponencial (fórmula asintótica), 20
- Exponencial (función de espera), 242, 243
- Exponentes anómalos, 251
- Exponentes críticos, 239, 282
- Física de llamas, 117
- Física de plasma, 278
- Fórmula de Callen-Welton, 178, 180
- Fórmula de Kubo, 318
- Fórmula de Nyquist, 179, 180
- Factor de estructura, 285
- Fallas, 267
- Fase (difusión de la), 73, 97
- Feynman (integral de caminos), 74
- Fick (ley de), 277
- Fisura, 257
- Flecha del tiempo, 122
- Floquet (autofunción), 151, 152
- Fluctuación-disipación, 56, 92, 93, 130, 131, 133, 164, 176, 178, 179, 262, 267, 318, 320
- Fluctuación/es, 24, 90, 123, 128, 129, 135, 138, 161, 162, 168, 170, 172, 175, 176, 311
- Fluctuación/es térmica/s, 139, 157, 158, 320
- Fluctuaciones cuadráticas, 51, 161

- Fluctuaciones del medio, 255
- Fluctuaciones en el equilibrio, 262, 267
- Fluctuaciones en el voltaje, 180
- Fluctuaciones espaciales, 112
- Fluctuaciones espontáneas, 42
- Fluctuaciones intrínsecas, 311
- Fluctuaciones locales, 43
- Fluctuaciones macroscópicas, 56
- Fluctuaciones pequeñas, 107, 117
- Fluctuaciones termodinámicas, 41
- Fluido, 172
- Flujo de corriente, 142
- Flujo de energía, 126
- Flujo de masa, 126, 127
- Flujo de partículas, 277
- Flujos termodinámicos, 125
- Fokker-Planck, 104, 108, 110, 122, 149, 153, 154, 161, 298
- Fokker-Planck (ecuación estacionaria), 131, 135, 137, 144, 145, 148
- Fokker-Planck (operador de), 157
- Fonones, 203, 268, 269
- Forma bilineal (ver Forma cuadrática), 131
- Forma cuadrática, 45, 124, 131, 147
- Forma lorentziana, 269
- Fourier (discreta), 15, 187, 215, 218, 254
- Fourier (series de), 55, 161
- Fourier (transformada de), 8, 66, 73, 84, 162, 164, 171, 172, 216, 240, 317
- Fourier (vector de onda), 261
- Fractal, 321
- Fractal aleatorio, 321, 325
- Fracturas, 255, 256
- Frecuencia, 236, 267, 268
- Frecuencia de Larmor, 173
- Frecuencial (esquema de probabilidad), 1, 7
- Frecuencias (bajas), 248
- Fredholm (operador de), 98
- Frente de llamas, 324
- Fricción, 121, 134, 172, 173
- Frontera (de un dominio), 221
- Fuente de trabajo, 49
- Fuera (del dominio), 212
- Fuera del equilibrio, 142, 148, 161, 178, 199, 262, 267, 320
- Fuerza de Lorentz, 173, 278
- Fuerza electromotriz, 179
- Fuerza monocromática, 263
- Fuerza periódica, 320
- Fuerza/s conservativa/s, 118
- Fuerza/s de Langevin, 102, 104, 134, 148, 278
- Fuerza/s externa/s, 112, 161, 164, 170–172, 176–178, 262, 315
- Fuerzas espontáneas, 129
- Fuerzas estocásticas, 278
- Fuerzas generalizadas, 123, 124, 126, 129, 147
- Fuerzas térmicas, 263
- Fuerzas termodinámicas, 45
- Función aleatoria, 59, 65–67, 80
- Función analítica, 10, 308
- Función característica, 9, 45, 78, 84, 108, 188, 242, 285, 325
- Función de Bessel, 201
- Función de espera, 240, 242, 243, 245, 247, 248, 256, 280, 281, 303
- Función de estructura, 190, 191, 193, 242, 250
- Función de Green, 174, 198, 206, 207, 214, 228, 231, 233, 241, 255, 256, 301, 329
- Función de Green (de un CTRW), 303
- Función de matriz, 199
- Función de onda, 309, 311
- Función de partición, 313
- Función de respuesta, 164, 165, 173, 262, 264, 265, 317
- Función escalón, 71, 77
- Función generatriz, 188, 200, 273
- Función generatriz (de matriz), 254
- Función homogénea, 183
- Función no negativa, 156
- Función oscilatoria, 156
- Función positiva, 298
- Función suave, 81
- Funcional característica, 60, 62, 66, 82, 93, 94
- Funcional coseno, 97
- Funcional gaussiana, 83, 85
- Funcional lineal, 61
- Funciones de distribución, 263
- Funciones de estado, 289

- Futuro, 68
- Gamma (probabilidad), 11
- Ganancia, 196, 199, 243
- Gas de Lorentz, 253, 272
- Gas de Lorentz (desordenado), 254
- Gauss (aproximación), 24
- Gauss (distribución de), 10, 31, 55
- Gauss (multidimensional), 29, 45, 46
- Gaussiano (perfil), 251
- Gaussiano (positivo), 114
- Gaussiano (proceso), 73, 102, 114
- Generador inicial, 321
- Generatriz (ver Función generatriz), 17
- Geométrica (distribución), 17
- Geometría fractal, 284
- Gibbs-Duhem (ecuación de), 126
- Gradiente (operador), 145
- Gradiente de concentración, 93, 277
- Gradientes químicos, 263
- Gradientes térmicos, 263
- Grados de libertad, 137, 172, 249, 253, 256, 311
- Granos metálicos, 283
- Gravedad, 52, 112
- Hélice (movimiento en), 173
- Hamiltoniano, 176, 203, 290
- Hamiltoniano del universo, 311
- Hamiltoniano estocástico, 312
- Hamiltoniano Maestro, 198, 199, 204, 207, 212, 227, 229, 295, 301, 303
- Hamiltoniano Maestro efectivo, 228
- Hamiltoniano total, 263, 315, 318
- Heisenberg (representación de), 319
- Hermítico/a, 148
- Hermitiano/a, 309
- Hermiticidad, 312
- Hipervolumen, 321
- Homogéneo/a, 200, 202, 205, 206, 211, 212, 216, 217, 219, 301
- Idempotente, 314
- Igual probabilidad, 289, 290
- Imagen negativa, 218, 220
- Imagen positiva, 218, 219
- Imagen/es, 15, 211, 214–216, 219
- Impedancia, 180
- Impulso, 52
- Impureza aleatoria, 232
- Impureza de sitio, 238
- Impureza/s, 229, 267, 268, 301
- Impurezas en sistemas cuánticos, 249
- Impurezas estocásticas, 249
- Incoherencia, 311
- Incoherente, 73
- Incremento de energía, 292
- Incrementos, 75
- Incrementos de Wiener, 103
- Independencia asintótica, 155
- Independencia estadística, 4, 19, 46, 47, 55, 72, 203
- Independientes (variables), 16
- Inductancia, 179
- Inductor, 128
- Inestabilidad, 59
- Instante, 65, 67
- Integral de caminos, 74, 108, 148, 158
- Integral ordinaria, 101
- Interacción, 255, 311
- Interacción externa, 263, 315
- Intercambio de calor, 49
- Intercambio de trabajo, 49
- Interfase, 283
- Interfases rugosas, 324
- Intervalo, 65
- Invariancia, 187, 200
- Invariancia discreta, 149
- Invariancia traslacional, 254, 304
- Inversión temporal, 122, 129, 138
- Iones radiactivos, 257
- Irreversibilidad, 292, 298, 305, 311, 312
- Irreversibilidad macroscópica, 122
- Irreversible, 49, 121, 144
- Isoterma, 49
- Isotrópico, 231, 233, 302
- Ito (cálculo de), 101, 111, 134
- Jordan (forma de), 197, 199, 296
- Joule (calor), 125
- Juntura Josephson, 141, 158
- Kirchoff (leyes de), 128, 141
- Knudsen (gas de), 127
- Kolmogorov (jerarquía de), 63, 65, 66, 82, 108

- Kolmogorov (operador de), 150, 154–156, 158
- Kossakowski-Lindblad, 312
- Kramers (ecuación de), 135, 145–147
- Kramers-Kroning, 165, 167, 168, 171, 172, 271
- Kronecker (delta de), 5, 196
- Kubo, 164, 262
- Kubo (identidad de), 264
- Kubo (oscilador de), 107
- Kubo (teorema de), 178, 263, 315, 320

- Límite (convergencia al), 76
- Límite al continuo, 193
- Límite asintótico, 185, 190, 248
- Límite balístico, 274
- Límite clásico, 263, 265, 267, 313
- Límite determinista, 61
- Láser, 144, 145
- Lévy, 80, 192, 193
- Lévy (probabilidad), 13, 191, 327
- Lévy (ruido de), 95
- Langevin, 137
- Laplace (transformada de), 168, 198, 206, 228, 235, 236, 240, 241, 252, 268, 271, 304
- Laplace (variable de), 106, 198, 207, 213, 228, 232, 234, 235, 304
- Laplaciano, 284
- Largo alcance, 227, 261
- Largo alcance (correlación de), 97
- Lax M., 164
- Le Chatelier, 46
- Lejos del equilibrio, 56, 116
- Lema de van Kampen, 108, 113, 114
- Ley de equipartición, 180
- Ley de Ohm, 249
- Ley de potencia, 46
- Ligadura impura, 229, 301
- Ligaduras, 203
- Ligaduras (vínculos), 42
- Lindeberg (criterio), 79
- Linealmente independiente, 199
- Liouville, 312
- Liouville (ecuación de), 315
- Liouville (flujo de), 56
- Liouville (operador), 144

- Liouville-Neumann, 263, 318
- Lisas (funciones), 8
- Local (variable), 42
- Localización, 202, 203, 237, 248, 261, 267
- Localizar la partícula, 250
- Longitud, 326
- Longitud de correlación, 18
- Longitud de escala, 192, 224, 242
- Lorentz (probabilidad), 13
- Lyapunov (función de), 135, 149, 156, 298, 305, 306

- Máximo de entropía, 41
- Macroscópicas, 49
- Magnetización, 165, 177
- Magnitud física, 315
- Mandelbrot B., 15, 75, 321
- Mapa completamente positivo, 312
- Mapas caóticos, 252
- Markov, 56, 67, 68, 71, 73, 75, 76, 91, 105, 106, 108, 111, 116, 122, 138, 148, 150, 152, 154
- Markov (teorema), 78
- Markov no estacionario (proceso), 149, 156
- Markoviano (proceso), 88, 133, 183, 218, 228, 305
- Markoviano y gaussiano (proceso), 86, 130
- Masa, 52
- Masas desordenadas, 228
- Materiales desordenados, 176
- Materiales granulares, 283
- Materiales iónicos, 283
- Materiales superiónicos, 283
- Matriz aleatoria, 206, 208
- Matriz de difusión, 135, 146, 147, 149, 152
- Matriz de estructura, 253, 254, 273
- Matriz de Markov, 185, 197, 254, 257
- Matriz de saltos, 187
- Matriz de transformación, 186
- Matriz de transición, 185
- Matriz densidad, 261, 263, 286, 309, 311, 316, 318, 320
- Matriz densidad diagonal, 312
- Matriz densidad reducida, 261, 311
- Matriz diagonal aleatoria, 205, 207, 208
- Matriz espectral, 162
- Matriz H, 196, 197, 209, 211, 228, 229, 296

- Matriz identidad, 198
 Matriz reducible, 299
 Matriz simétrica, 295
 Maxwell (relaciones de), 43, 46
 Maxwell-Boltzmann, 52, 127, 174
 Mecánica cuántica, 121, 131
 Mecánica estadística, 289, 291
 Mecánico-calórico (efecto), 125
 Medio ambiente, 49, 52, 311
 Medio efectivo, 232, 248, 254, 282
 Medio externo, 161
 Medios desordenados, 37, 227, 257, 262, 285
 Memoria, 68, 69, 158, 243, 255, 273, 305
 Memoria de un CTRW, 243
 Memoria infinita, 218
 Mesoscópico, 118
 Metales, 268, 269
 Mezcla fuerte, 155
 Modelo de saltos, 189
 Modos de Fourier, 202
 Momento angular, 118
 Momento dipolar, 96
 Momento magnético, 117, 118, 139, 157
 Momento/s inverso/s, 203, 208, 209, 239
 Momentos, 8, 9, 45, 60, 64, 72, 108, 111, 189, 190, 241
 Momentos condicionados, 36, 109
 Momentos finitos, 251
 Momentos fraccionarios, 327
 Momentos impares, 30
 Monocromática (exitación), 171, 173
 Movilidad, 93
 Movimiento browniano, 73, 84, 85, 99, 173, 178
 Movimiento errático, 117, 183
 Movimiento térmico, 179
 Multidimensional, 32, 60, 64–66, 116, 141, 142, 313
 Multidimensional (distribución), 25
 Multiplicativo (carácter), 64, 134
 Núcleo de memoria, 306, 307
 Núcleo deltiforme, 243
 Núcleo no separable, 243
 Número cuántico, 261
 Número de autoestados, 313
 Número de coordinación, 229, 232, 238, 329
 Número de electrones, 262
 Número de estados, 289, 290
 Número de partículas, 42, 43, 292
 Número de portadores, 268
 Neutrones multienergéticos, 257
 Niveles de energía, 289
 No analítica, 15
 No diagonalizable, 198, 296
 No equilibrio, 48, 157
 No equilibrio (estadística de), 1, 14
 No estacionario, 72, 90, 198
 No estacionario periódico (proceso), 149, 158
 No gaussiano, 280
 No homogéneo/a, 212
 No markoviano, 55, 280, 285
 No reducible, 296
 Normalización, 6, 63, 142, 145, 147, 184, 190, 197, 212, 215, 241, 250, 251, 253, 257, 295, 298
 Novikov (teorema de), 31, 38, 75, 113, 133
 Observable, 263, 286, 289, 309
 Observable (operador), 315
 Onda, 54
 Onsager, 127, 129, 130, 132, 147, 164
 Onsager (generalización no lineal), 147
 Onsager (teorema de), 56, 122, 124
 Operador, 81
 Operador adjunto, 221
 Operador de equilibrio, 319
 Operador diagonal, 303
 Operador posición, 266
 Operador/es de traslación, 204, 208
 Operadores de CTRW, 303
 Orbital atómico, 261
 Orden estructural, 261
 Ornstein-Uhlenbeck (generalizado), 93, 95, 96
 Ornstein-Uhlenbeck (multidimensional), 130, 173
 Péndulo (fluctuaciones en un), 51, 52
 Pérdida (término de), 196, 243
 Paramagnética/o, 164, 176
 Pares, impares (variables), 143

- Paridad, 241
- Partícula browniana, 130, 132, 134, 145, 172
- Partícula independiente, 268
- Partícula libre, 51, 67, 127
- Partículas cargadas, 277
- Partículas localizadas, 266
- Partición más probable, 290, 291
- Pasado, 67
- Pasado remoto, 318
- Pausa, 250
- Películas delgadas, 283
- Pequeñas deformaciones, 54
- Pequeñas desviaciones, 41
- Percolación, 328
- Percolativo, 238
- Perfil (subdifusivo), 280, 282
- Perfil espacial, 113
- Perfiles de costas, 324
- Periódica en el tiempo, 72, 156, 158
- Periodicidad, 150
- Permutación, 63
- Perron-Frobenius, 186, 296
- Perturbación aleatoria, 37
- Perturbación/es, 37, 105, 262, 263, 315, 318
- Pesos estadísticos, 320
- Planck, 121, 290
- Plasma, 173
- Poisson (corchetes de), 264, 313, 315
- Poisson (probabilidad de), 10, 61, 193
- Poisson (ruido de), 61
- Poisson (suma de), 16, 216, 217
- Polímeros (relajación de), 257
- Portadores de carga, 268
- Positiva (densidad), 8, 63, 65
- Positrones, 255
- Potencia absorbida, 171
- Potencia disipada, 171
- Potencia media, 171
- Potencial (estructura de), 142
- Potencial aleatorio, 261
- Potencial armónico, 132
- Potencial de no equilibrio, 137, 143, 145, 148
- Potencial determinista, 144
- Potencial eléctrico, 266
- Potencial químico, 42, 126, 290
- Potencial termodinámico, 50
- Preparación mesoscópica, 273
- Presión, 42, 43, 47, 51, 126, 290
- Prigogine I., 122
- Primer orden (perturbación), 316, 318
- Primera ley (termodinámica), 43, 49, 291
- Primeros vecinos (transición a), 199, 201, 203, 211, 227, 229, 232, 247
- Principio de reflexión, 218
- Probabilidad (distribución de), 41, 55, 60, 67, 71, 72, 76
- Probabilidad a priori, 312
- Probabilidad condicionada, 35, 66, 88, 108, 183, 185, 195, 214, 227, 240, 250, 251, 296
- Probabilidad conjunta, 2, 33, 36, 63–68, 71, 72, 138, 155
- Probabilidad de ocupación, 318
- Probabilidad de permanencia, 240, 244, 256, 304
- Probabilidad de transición, 184, 187, 196, 209, 227
- Probabilidad estacionaria, 71, 91, 131, 134, 138, 199, 296
- Probabilidad exponencial, 41
- Probabilidad geométrica, 190
- Probabilidad marginal, 33, 35, 56, 63, 71, 186, 255, 257, 273
- Probabilidad superficial, 118
- Problema de contornos, 214
- Problema de la impureza, 301
- Problema inverso, 137
- Proceso de CTRW, 305
- Proceso de Ornstein-Uhlenbeck, 75, 90, 92, 95, 133, 136, 179
- Proceso dicotómico, 70, 198
- Proceso ergódico, 162
- Proceso estacionario, 70, 88, 155, 161, 162
- Proceso estocástico, 54–56, 59, 101, 176, 177, 261
- Proceso gaussiano, 80, 82, 88, 134
- Proceso no estacionario, 89, 148
- Proceso no gaussiano, 103
- Proceso no markoviano, 89, 105, 108, 218, 239, 243, 305
- Proceso singular (ruido blanco), 83

- Procesos estocásticos discretos, 197
 Procesos irreversibles, 292
 Procesos semimarkovianos, 70
 Producción de entropía, 123, 124, 130, 133
 Producto (probabilidad del), 34
 Producto escalar, 197
 Promedio, 78
 Promedio en distribución, 162
 Promedio térmico, 309
 Promedio temporal, 162, 289
 Propagador, 67, 68, 73, 87, 108, 109, 135, 149, 153, 195, 213, 217, 282
 Propagador (con impureza), 232
 Propagador asintótico, 251
 Propagador de CTRW, 240, 242, 251, 280, 281
 Propagador homogéneo, 232, 282
 Propiedades extremas, 245
 Proyección (operadores), 27
 Proyector, 37, 199, 229
 Punto crítico, 47
 Puntos visitados, 15, 191

 Régimen asintótico, 157
 Régimen gaussiano, 242, 251
 Régimen lineal, 126
 Radiofrecuencia, 157
 Ramificaciones de ríos, 324
 Random walk (caminata aleatoria), 11, 69, 186, 228
 Random walk (de CTRW), 239, 303
 Random walk de Lévy, 192
 Rango (variación de la ordenada), 326
 Rayos X, 285
 Reacción difusión, 117
 Reacciones químicas, 222
 Realización de Lévy, 192
 Realización en el plano, 192
 Realización numérica, 192
 Realizaciones, 59, 62, 64, 65, 75, 98, 161, 172, 174, 218, 325
 Realizaciones continuas, 79, 220
 Realizaciones discontinuas, 80
 Rebote, 272
 Red bidimensional, 192, 219, 253
 Red cristalina, 269
 Red cuadrada, 230
 Red de Bethe, 328
 Red finita, 15, 206, 211
 Red hipercúbica, 238, 301
 Red homogénea, 231
 Red infinita, 205, 215, 216, 240
 Red no euclidiana, 278, 281, 285, 328
 Red peine, 278, 329
 Red toroidal, 215
 Red/es regular/es, 227, 239, 241, 256, 262
 Relación de recurrencia, 186–188, 253, 254, 273
 Relajación, 59, 130, 157, 161, 197, 202, 237, 245, 248, 285, 298, 305
 Relajación (modos de), 202
 Relajación dieléctrica, 96
 Relajación dipolar, 97
 Relajación magnética, 117, 139
 Representaciones de procesos, 59
 Resistencia, 141
 Resistor, 125
 Resonancia estocástica, 73, 158
 Resonancia magnética, 157
 Respuesta del sistema, 263, 275, 276
 Respuesta lineal, 96, 161, 163, 164, 168, 170, 172, 176, 178, 262, 263, 277, 317, 319, 320
 Retorno al origen, 244, 279
 Reversibilidad microscópica, 122, 123, 127, 139
 Reversible, 144
 Reversible (trabajo), 47
 Rompimiento de la invariancia, 267
 Rotación, 95
 Rotor, 142–144
 Rotor plano, 96
 Rugosas, 75
 Rugosidad, 325
 Ruido, 73
 Ruido blanco, 101, 327
 Ruido cuántico, 311
 Ruido de Johnson, 179
 Ruido gaussiano blanco, 80, 83, 85, 91, 105, 107, 110, 128, 136, 148, 172, 179
 Ruido multiplicativo, 111
 Ruido no factorizable, 115
 Ruido térmico, 141

- Ruidos blancos, 63
- Ruidos completamente aleatorios, 65, 67
- Ruidos independientes, 62

- Saltos (bidimensional), 191
- Saltos (de un random walk), 13, 14, 187, 190–192, 242, 250, 252
- Saltos (difusión por), 261
- Saltos (transporte por), 267, 269, 283
- Saltos largos, 190, 192
- Scher-Lax, 269, 272
- Schrödinger, 318
- Schrödinger (ecuación de), 311
- Sección eficaz, 268
- Segunda derivada, 42
- Segunda ley (termodinámica), 121, 292
- Segunda variación, 147
- Segundo cumulado, 66
- Segundo momento, 54, 63, 189, 191, 192, 205, 234, 241, 242, 247, 248, 250, 251, 257, 274, 281, 328
- Segundo orden, 41, 42, 47
- Semiconductores, 268
- Semicuántico, 266
- Semigrupo, 150
- Semirrecta, 215
- Separable, 241, 280
- Simétrico, 189
- Simetría/s, 203, 205
- Simetrías de Onsager, 45, 56, 122, 129
- Simetrización de un operador, 140
- Simetrizar, 148, 155, 197
- Sistema abierto, 311
- Sistema adiabático, 292
- Sistema aislado, 41, 42, 52, 122, 136, 138, 139, 143, 144, 289
- Sistema cerrado, 47, 49, 51, 122, 136, 138, 139, 143, 144, 311, 315
- Sistema continuo, 219
- Sistema dinámico, 59, 149
- Sistema estacionario, 156
- Sistema finito, 215, 228, 229
- Sistema lineal, 116, 130
- Sistema macroscópico, 289
- Sistema no lineal, 117
- Sistemas complejos, 256
- Sistemas cuánticos, 286
- Sistemas desordenados, 227, 261, 267, 280, 283
- Sistemas disipativos, 311
- Sistemas en contacto, 290, 291
- Sistemas extendidos, 117
- Sistemas geológicos, 255
- Sistemas hamiltonianos, 138
- Sistemas independientes, 292
- Sistemas normales en contacto, 292
- Sistemas termodinámicos, 290
- Sitio/s absorbente/s, 209, 211
- Sitios, 227
- Sitios de localización, 269
- Sitios de red, 192, 203
- Sitios desordenados, 204
- Sitios diferentes, 246
- Sitios limbo, 211
- Sitios trampa, 238
- Sitios visitados (ver Puntos visitados), 192, 255
- Smoluchowski, 249
- Smoluchowski (ecuación de), 112
- Solución estacionaria, 135–137, 139, 140, 142, 144, 146, 148, 154, 185, 205, 206, 213
- Stosszahl-anzatz, 122, 318
- Stratonovich, 134, 137, 148
- Stratonovich (cálculo de), 101, 103, 105, 110, 116
- Subdifusión, 250, 257, 279
- Subdifusivo, 248, 277, 280, 308, 328
- Submatrices H , 295
- Subsistemas, 47, 50
- Suma (probabilidad de la), 34
- Superconductividad, 283
- Supercorriente, 141
- Superdifusión, 250, 257, 283
- Superdifusivo, 251, 277, 280
- Superoperador (liouvilliano), 315
- Superoperadores, 262, 311
- Superredes, 286
- Supervivencia, 229
- Supervivencia (probabilidad), 221
- Susceptibilidad, 164, 165, 167, 170–172, 178, 179, 264, 267–269, 272, 275, 317
- Sylvester (criterio de), 185

- Taylor (series de), 10, 24, 42, 103, 242, 251, 308
- Temperatura, 42, 43, 51, 126, 290
- Temperatura (absoluta), 46
- Temperatura (entre dos cuerpos), 293
- Temperatura del sistema, 261
- Temporalmente homogéneo/a, 184, 187, 197
- Tendencia al equilibrio, 305
- Tensión, 53
- Teoría cinética, 122, 269
- Teoría perturbativa singular, 239, 282
- Teorema abeliano, 248, 251
- Teorema central del límite, 19, 155
- Teorema H, 122
- Teorema tauberiano, 237, 248, 252, 257
- Termodinámica, 290
- Terwiel (cumulantes de), 27, 37, 108, 239
- Tiempo (**va** dependiente del), 59, 65
- Tiempo continuo, 195, 197, 239, 255, 274, 280
- Tiempo de correlación, 306, 307
- Tiempo de escape, 221
- Tiempo de espera, 242, 251, 254
- Tiempo de residencia, 281
- Tiempo de vuelo, 281
- Tiempo discreto, 183, 254, 255, 274
- Tiempo medio de primer pasaje, 223
- Tiempos aleatorios, 221, 241, 254
- Tiempos cortos, 123, 195, 206, 207, 234, 307
- Tiempos del primer pasaje, 221, 229, 244
- Tiempos largos, 148, 155, 203, 207, 208, 235, 237, 238, 241, 243, 248, 251, 257, 304, 307
- Toroidal (ver red), 15
- Torques (estocásticos), 96
- Trabajo, 171
- Trabajo mínimo, 47, 52, 53
- Trabajo mecánico, 292
- Trabajo reversible, 52
- Trampas dinámicas, 256
- Transferencia de energía, 292
- Transferencia de materia, 290, 292
- Transformación, 65, 137, 284
- Transformación de semejanza, 197
- Transformación de variables, 21, 76
- Transformación lineal, 15, 216
- Transformación multidimensional, 32
- Transiciones asimétricas, 230, 302
- Transiciones desordenadas, 262
- Transiciones simétricas, 230, 302
- Transitorio, 281
- Transporte, 183, 203, 227, 261, 267, 272
- Transporte cuántico, 267
- Transporte difusivo, 183, 190
- Transporte estocástico, 283
- Transporte lineal, 262
- Traslación temporal, 70, 72
- Trayectoria reflejada, 218
- Trayectorias, 59, 67
- Traza, 310, 316, 320
- Turbulencia, 252
- Umbral, 238
- Única (solución), 206
- Unicidad, 135
- Uniformemente (distribuida), 23
- Valor de expectación, 286, 309
- Valor medio, 5, 60, 63, 107, 172, 263, 319
- Valor medio (sobre el desorden), 213, 214, 228, 285, 303, 304
- Valor medio condicionado, 37
- Valor medio de la función de Green, 206, 214, 228, 233, 262
- Valor medio en ensemble, 310
- Valor medio térmico, 318
- Valor principal (integral), 167, 179
- Variables canónicas, 263
- Variables de estado, 138, 142, 145, 162, 164, 169
- Variables dinámicas, 289, 311
- Variables estocásticas, 137
- Variables extensivas, 41
- Variables independientes, 46
- Variables intensivas, 42
- Variables macroscópicas, 116
- Variables mecánicas, 49, 52
- Variables ocultas, 101, 134
- Variables termodinámicas, 289–291
- Variación, 133, 263
- Variación de entropía, 41, 43, 121, 125, 131
- Variación estadística, 316

- Variación temporal, 141, 311
- Variancia, 8, 17, 18, 29, 32, 36, 47, 73, 75, 209
- Variancia del desplazamiento, 237, 241, 242, 247, 248, 270, 271, 274
- Vector aleatorio, 205
- Vector de onda, 269
- Vector potencial, 144
- Velocidad, 52, 91, 130, 132, 172, 267
- Velocidad aleatoria, 250
- Velocidad angular, 96
- Velocidad cuadrática media, 134
- Velocidad finita, 243, 307
- Venn (diagramas de), 4
- Ventana, 66
- Ventana (función), 220
- Voltaje, 128
- Volumen, 42
- Volumen constante, 47
- Von Neumann, 312, 314
- Von Neumann (operador de), 315
- Vuelos de Lévy, 95, 193
- Wannier (estados de), 266, 267
- Weierstrass (función de), 13, 192, 193
- Weierstrass K., 191
- Wiener (proceso de), 73, 75, 79–81, 85, 89, 92, 99, 102, 112, 114, 201, 275, 327
- Wiener (realizaciones de), 101, 192
- Wiener-Kinchin (teorema de), 86, 162, 176

